

DISE DEFENDIDA POR Ernandes Marcos  
da Silveira Rizzo E APROVADA PELA  
COMISSÃO JULGADORA EM 23/02/99.

RRR

ORIENTADOR

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA**

**Desenvolvimento de um Modelo  
Computacional para a Análise de Fenômenos  
Simultâneos de Solidificação e de  
Deformação Plástica de Ligas Metálicas**

**Autor: Ernandes Marcos da Silveira Rizzo  
Orientador: Rezende Gomes dos Santos**

02/99

BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA  
UNICAMP

UNIDADE BAC/FEM  
N.º CHAMADA:

V. 37951  
Ex. 229/99  
R \$ 11,00  
DATA 17/06/99  
N.º CPD

CM.00.124520-1

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE MATERIAIS

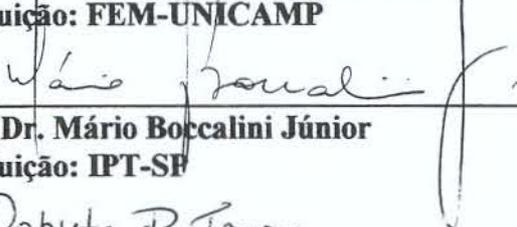
TESE DE DOUTORADO

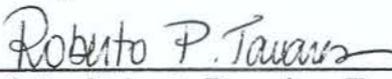
**Desenvolvimento de um Modelo  
Computacional para a Análise de Fenômenos  
Simultâneos de Solidificação e de Deformação  
Plástica de Ligas Metálicas**

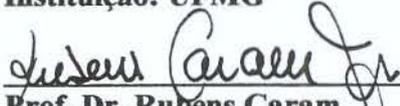
Autor **Ernandes Marcos da Silveira Rizzo**

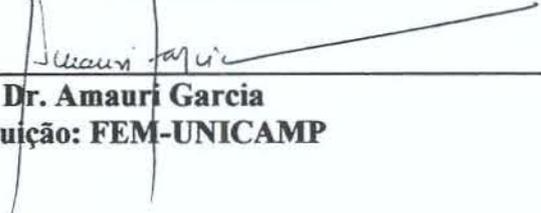
Orientador: **Rezende Gomes dos Santos**

  
\_\_\_\_\_  
**Prof. Dr. Rezende Gomes dos Santos, Presidente**  
**Instituição: FEM-UNICAMP**

  
\_\_\_\_\_  
**Prof. Dr. Mário Boccalini Júnior**  
**Instituição: IPT-SP**

  
\_\_\_\_\_  
**Prof. Dr. Roberto Parreiras Tavares**  
**Instituição: UFMG**

  
\_\_\_\_\_  
**Prof. Dr. Rubens Caram**  
**Instituição: FEM-UNICAMP**

  
\_\_\_\_\_  
**Prof. Dr. Amauri Garcia**  
**Instituição: FEM-UNICAMP**

Campinas, 23 de fevereiro de 1999



## **Dedicatória:**

Dedico este trabalho à minha querida esposa Cristina *et al.* .



## Agradecimentos

Gostaria de agradecer às pessoas e instituições que possibilitaram de uma maneira ou de outra a realização deste trabalho:

Ao Centro Federal de Educação Tecnológica do Espírito Santo, pela liberação concedida para a realização do Curso de Doutorado na UNICAMP.

À CAPES pela concessão da bolsa de estudos no Brasil e no exterior. Ao CNPq pela concessão da bolsa de estudo no país.

À Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo - FAPESP (projeto 1997/2036-9), à Companhia Siderúrgica de Tubarão - CST e à FINEP através do programa RECOPE, pela liberação de verbas para a compra de materiais e equipamentos.

Ao professor Rezende Gomes dos Santos pela orientação, apoio e dedicação durante todo o período de execução deste trabalho..

Ao Professor Christoph Beckermann da The University of Iowa pela co-orientação do trabalho e pela acolhida como pesquisador visitante no Laboratório de Solidificação do Department of Mechanical Engineering da The University of Iowa.

Aos pesquisadores Richard Hardin e Venkatesh Ragavendra do Department of Mechanical Engineering da The University of Iowa pela colaboração durante o período de estada como pesquisador visitante nesta instituição.

Ao professor Paulo Roberto Mei pela oportunidade de participação no projeto de pesquisa Estudo do Processo de Lingotamento Contínuo de Placas Finas.

Aos colegas, funcionários e professores do Departamento de Engenharia de Materiais pela agradável convivência e colaboração durante o período de realização do Curso de Doutorado.



## Índice

<b>1 - Introdução</b>	1
1.1 - Evolução Tecnológica na Fabricação de Produtos Planos	1
1.2 - Características do Processo de Lingotamento Contínuo de Placas Finas (PLCPF)	4
1.3 - Variações do Processo de Lingotamento Contínuo de Placas Finas	11
1.4 - Justificativas e Objetivos do Trabalho	14
<b>2 - Modelagem Matemática da Solidificação/Deformação Plástica de Ligas</b>	17
2.1 - Modelagem da Solidificação de Ligas Metálicas	17
2.2 - Macrosegregação	24
2.3 - Análise dos Efeitos dos Estados de Tensões e Deformações na Macrosegregação de Ligas Metálicas	32
<b>3 - Proposta de um Modelo Matemático para Análise de Solidificação/Deformação Plástica de Ligas</b>	41
3.1 - Introdução e Objetivos	41
3.2 - Transformação de Coordenadas para a Equação da Conservação da Energia - Caso Unidimensional e Considerando Apenas Condução	42
3.3 - O Método dos Volumes Ponderados	45
3.4 - A Equação de Conservação de Massa	52
3.5 - Equação de Conservação de Momento Linear	53
3.5.1 - Equacionamento geral	53
3.5.2 - Equações Constitutivas	62
3.5.3 - Equações Constitutivas para Fase Líquida	62
3.5.4 - Equações Constitutivas para Fase Sólida	64
3.5.5 - Equação de Conservação de Momento para a Fase Líquida	68
3.5.6 - Equação de Conservação de Momento para a Fase Sólida	77
3.6 - Equação de Conservação da Energia	81
3.7 - Equação de Conservação de Espécies	87



<b>4 - Materiais e Métodos</b>	90
4.1 - Informações sobre o sistema SCN-Acetona	90
4.2 - Determinação da Composição das Ligas de SCN-Acetona	91
4.3 - Construção do Aparato Experimental para a Realização de Experimentos com Compostos Orgânicos	92
4.4 - Metodologia Empregada na Elaboração, Vazamento e Solidificação das Ligas	95
<b>5 - Implementação Numérica dos Modelos Desenvolvidos</b>	97
5.1 - Introdução	97
5.2 - Modelo Unidimensional	98
5.3 - Modelo Bidimensional	103
5.3.1 - Considerações Iniciais	103
5.3.2 - Equação da Pressão em Coordenadas Cartesianas	109
5.3.3 - Aplicação da Transformação de Coordenadas	111
5.3.4 - Transformação de Coordenadas Analítica	114
5.4 - Considerações Assumidas	128
5.5 - Algoritmo de Solução para o Caso Bidimensional	131
<b>6 - Apresentação e Análise dos Resultados</b>	138
6.1 - Dados Relativos aos Experimentos Realizados	138
6.2 - Resultados para o Caso Unidimensional	152
6.3 - Resultados para o Caso Bidimensional	158
6.4 - Aplicação do Programa Computacional Desenvolvido na Simulação do Efeito de Deformação do Domínio para um Aço Multicomponente	179
<b>7 - Conclusões e Sugestões para Próximos Trabalhos</b>	213
7.1 - Conclusões	213
7.2 - Sugestões para Próximos Trabalhos	215
<b>Apêndices</b>	
A - Propriedades Termofísicas e Parâmetros Relativos às Simulações Realizadas para o Aço AISI 1008	217
B - Projeto e Construção de um Simulador de Lingotamento Contínuo de Placas Finas	219
C - Modeling of Mushy Zone Deformation at Macroscopic Scale (Determinação das Propriedades Mecânicas de uma Zona Pastosa na Escala Macroscópica).	224



D - Averaging of Constitutive Equation for an Elastic Solid (Determinação das Propriedades Mecânicas de uma Zona Pastosa a Partir dos Parâmetros Microscópicos).	241
<b>8 - Referências Bibliográficas</b>	<b>246</b>



## Resumo

RIZZO, Ernandes Marcos da Silveira, *Desenvolvimento de um Modelo Computacional para a Análise de Fenômenos Simultâneos de Solidificação e de Deformação Plástica de Ligas Metálicas*, Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 1999. 260p. Tese (Doutorado)

Em determinados processos, como por exemplo no lingotamento contínuo de placas finas de aço, lingotamento de tiras finas (duplo-rola) e forjamento semi-sólido, faz-se uso da aplicação da deformação plástica da peça com o núcleo da mesma parcialmente no estado líquido. Este processo geralmente acarreta variações na composição química e na microestrutura ao longo do produto a ser obtido. Neste trabalho, propõe-se dois modelos matemáticos que permitem analisar a movimentação das fases sólida e líquida antes, durante e após a aplicação da deformação plástica. Os modelos também possibilitam a determinação da variação da temperatura, da evolução da fração de sólido e da variação da composição no líquido e no sólido durante o processo de solidificação/deformação. São implementados dois tipos de modelos: i) Um modelo simplificado, considerando apenas a condução. Este modelo foi desenvolvido considerando a aplicação do método do contínuo; ii) Um modelo bidimensional que considera simultaneamente os fenômenos de convecção e de difusão. Neste modelo, é dada ênfase na incorporação de fenômenos ocorrendo em escala microscópica no modelo macroscópico de transporte de determinadas variáveis no sistema. As equações macroscópicas de conservação são introduzidas através do método de volumes ponderados. Os resultados numéricos são comparados com resultados experimentais obtidos pelo autor utilizando-se um dispositivo especialmente construído que permite a realização da solidificação controlada de um composto orgânico (SCN e acetona) de comportamento de solidificação similar às ligas metálicas. A comparação dos resultados numéricos com os resultados experimentais permitiu validar o modelo desenvolvido. A seguir o programa computacional desenvolvido é aplicado no estudo da solidificação/deformação plástica de um aço multicomponente.

*Palavras Chaves:* Solidificação, simulação, deformação, método de volumes ponderados, processos *near net shape*.



## Abstract

RIZZO, Ernandes Marcos da Silveira, *An Experimental and Numerical Study of Mushy Zone Deformation During Solidification of Metallic Alloys*, Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 1999. 260 p. Dissertação (Doutorado)

The deformation of the partially solidified strand during near net shape continuous casting of thin slabs is only one example of a technologically important process where a mushy zone is mechanically altered in order to achieve improved grain structures and homogeneity. However, the phenomena occurring during plastic deformation of a solidifying mush are poorly understood, have not been observed directly, and have not been modeled in detail. An experimental setup has been designed for performing controlled solidification experiments. The test material chosen is the transparent SCN-acetone alloy, which not only closely approximates the solidification behavior of metallic alloys, but also has similar mechanical properties as metals near the melting point. During the experiments, we have visualized and/or measured the convection patterns of the liquid, the local displacement and deformation rate of the mushy zone solid, temperature profiles using a set of thermocouples, and liquid compositions by withdrawing small samples. Results are presented for a range of experimental conditions. A mathematical model is presented that predicts the temperature and solid fraction profiles, liquid concentration evolution, and solid phase displacement during the deformation of a solidifying mush. Two mathematical models are developed. One uses continuum method and solves only the energy conservation equation for a one-dimensional situation. The second mathematical model takes in account conduction and convection and applies the volume averaging method, the enthalpy technique, and a coordinate transformation to avoid a changing mesh in a numerical solution. This model is derived considering a two-dimensional case. The numerical results are found to closely match the experimental measurements. The two-dimensional model developed is applied to study the process of solidification/plastic deformation of multicomponent steel.

Key words: Solidification, deformation, volume averaging method, modeling and near net shape.

1999-52/625



## Lista de Figuras

1.1 - Exemplos de esquemas de redução de espessura da placa fina no lingotamento com deformação durante a solidificação (a) e (b) e <i>pivot mould</i> (c) utilizado na simulação deste processo.	10
1.2 - Esquema básico da processo CSP.	12
1.3 - Perfil de temperatura numa unidade do tipo CSP.	13
1.4 - Desenho esquemático do processo ISP da usina de Arvedi em Cremona/Itália.	14
2.1 - Representação esquemática da interdependência entre os diversos fenômenos relacionados com a solidificação de ligas metálicas.	21
2.2 - Morfologia da interface sólido/líquido na escala das interfaces.	26
2.3 - Representação esquemática na escala macroscópica do desenvolvimento das várias zonas típicas da estrutura de uma peça fundida.	28
2.4 - Representação esquemática de macrossegregações típicas em lingotes de aço.	30
2.5 - Representação esquemática de defeitos internos típicos de produtos semi-acabados obtidos por lingotamento contínuo.	32
2.6 - Desenho esquemático do processo de lingotamento contínuo.	33
2.7 - Região do esboço com <i>bulging</i> .	35
2.8 - Resultados numéricos do campo de fluxo de líquido residual numa zona pastosa obtida por Miyazawa e Schwerdtfeger-1981.	35
2.9 - Representação esquemática da divisão do esboço de acordo com a resistência mecânica de cada região.	37
2.10 - Representação esquemática das 4 zonas que descrevem o comportamento mecânico do esboço.	39
2.11 - Representação esquemática do processo de forjamento contínuo	40
3.1 - (a) escala do sistema ou macroscópica (contínuo) (b) volume elementar representativo na escala microscópica (c) sólido contínuo em escala microscópica.	46



3.2 - Representação esquemática de determinadas curvas tensão-deformação de alguns materiais sólidos e líquidos.	62
4.1 - Diagrama de fases do sistema SCN-Acetona.	90
4.2 - a) Desenho esquemático em corte da seção transversal do dispositivo construído para a realização dos experimentos; apenas uma parte dos termopares utilizados são apresentados. b) representação esquemática da deformação da zona 'pastosa'.	93
4.3 - Apresenta uma representação esquemática do aparato experimental utilizado para a realização dos experimentos com compostos orgânicos.	94
4.4 - Posições dos termopares e a correspondente numeração dos mesmos.	95
5.1 - Representação esquemática dos padrões de deformação considerados: a) uniforme e homogêneo, b) não-uniforme e homogêneo, c) uniforme e heterogêneo e d) não-uniforme e heterogêneo.	100
5.2 - Representação esquemática do planos físico e transformado (2D).	111
5.3 - Representação esquemática do domínio simulado. O sistema de coordenadas X,Y é fixo e o sistema x,y se desloca junto com a translação da fase sólida, ou seja, de acordo com a movimentação do domínio; (a) configuração relativa a um tempo anterior à aplicação da deformação do domínio; (b) perfis de concentração no sólido e no líquido na escala microscópica; (c) configuração relativa a um tempo posterior à aplicação da deformação do domínio; (d) um volume elementar representativo (VER) típico.	116
6.1 - Representação esquemática dos domínios utilizados para as simulações numéricas dos casos unidimensional e bidimensional.	140
6.2 - Relação entre a composição do líquido antes da deformação e o tempo de início de aplicação da deformação (TID) para as posições 12-90 e 36-90 mm para os experimentos listados na Tabela 1.	144
6.3 - Perfis de temperatura para todos os termopares utilizados no experimento SA44. As posições dos termopares estão apresentadas na Figura 4.4.	146
6.4 - Perfis de temperatura experimentais para os termopares utilizados como condição de contorno e para aqueles utilizados para aferir o modelo numérico (posições a 12 mm e a 36 mm a partir da coquilha de cobre refrigerada) no experimento SA44.	147



6.5 – Apresentação de todos os dados de temperatura registrados pelo sistema computacional de aquisição de dados – SA50.	148
6.6 – Apresentação de dados de temperatura registrados pelo sistema computacional de aquisição de dados para um plano perpendicular à coquilha de cobre refrigerada - SA50.	149
6.7 – Resultados experimentais de fração de sólido, temperatura e composição do líquido ao longo da seção do esboço.	151
6.8 – Evolução da deformação da malha (sólido) para os 4 modelos propostos.	154
6.9 – Comparação dos perfis de temperatura numéricos e experimentais para os termopares utilizados como condição de contorno e para aqueles utilizados para aferir o modelo numérico (posições a 12 mm e a 36 mm a partir da coquilha de cobre refrigerada).	155
6.10 – Comparação dos perfis de temperatura numéricos e experimentais para os termopares utilizados como condição de contorno e para aqueles utilizados para aferir o modelo numérico (posições a 12 mm e a 36 mm a partir da coquilha de cobre refrigerada). Ampliação dos dados.	156
6.11 – Comparação dos resultados numéricos experimentais de fração de sólido, temperatura e composição do líquido ao longo da seção do esboço antes e depois da aplicação da deformação.	157
6.12 – Exemplos das configurações das malhas utilizadas para determinados intervalos de tempo: (a) do início da simulação até o início da aplicação da deformação; (b) e (c) durante a aplicação da deformação; (d) do final da deformação até o final da simulação numérica.	160
6.13 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 200 s.	161
6.14 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo = 200 s.	162
6.15 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 5700 s.	163
6.16 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo = 5700 s.	164
6.17 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 15700 s.	165



6.18 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo = 15700 s.	166
6.19 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 20246 s.	167
6.20 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo = 20246 s.	168
6.21 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 20260 s.	169
6.22 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo = 20260 s.	170
6.23 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 20288 s.	171
6.24 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo = 20288 s.	172
6.25 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 20301 s.	173
6.26 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo = 20301 s.	174
6.27 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 25700 s com a aplicação de deformação.	175
6.28 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo = 25700 s com a aplicação de deformação.	176
6.29 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 25700 s sem a aplicação de deformação.	177
6.30 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo = 25700 s sem a aplicação de deformação.	178
6.31 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 3 s – $h = 1000 \text{ W/m}^2\text{K}$ .	182
6.32 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 3 s – $h = 1000 \text{ W/m}^2\text{K}$ .	183



6.33 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 3 s – h = 1000 W/m <sup>2</sup> K.	184
6.34 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 55 s – h = 1000 W/m <sup>2</sup> K.	185
6.35 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 55 s – h = 1000 W/m <sup>2</sup> K.	186
6.36 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 55 s – h = 1000 W/m <sup>2</sup> K.	187
6.37 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 65 s – h = 1000 W/m <sup>2</sup> K.	188
6.38 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 65 s – h = 1000 W/m <sup>2</sup> K..	189
6.39 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 65 s – h = 1000 W/m <sup>2</sup> K.	190
6.40 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 115 s – h = 1000 W/m <sup>2</sup> K, com deformação.	191
6.41 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 115 s – h = 1000, W/m <sup>2</sup> K. com deformação.	192
6.42 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 115 s – h = 1000 W/m <sup>2</sup> K, com deformação.	193
6.43 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 115 s – h = 1000 w/m <sup>2</sup> K – sem deformação.	194
6.44 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (solido + líquido) para o tempo = 115 s – h = 1000 w/m <sup>2</sup> K, sem deformação.	195
6.45 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 115 s – h = 1000 w/m <sup>2</sup> K, sem deformação.	196
6.46 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 55 s – h = 150 W/m <sup>2</sup> K.	197
6.47 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 55 s – h = 150 W/m <sup>2</sup> K.	198
6.48 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 55 s – h = 150 W/m <sup>2</sup> K.	199



6.49 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 240 s – h = 150 W/m <sup>2</sup> K.	200
6.50 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 240 s – h = 150 W/m <sup>2</sup> K..	201
6.51 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 240 s – h = 150 W/m <sup>2</sup> K.	202
6.52 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 250 s – h = 150 W/m <sup>2</sup> K, com deformação.	203
6.53 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 250 s – h = 150, W/m <sup>2</sup> K. com deformação.	204
6.54 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 250 s – h = 150 W/m <sup>2</sup> K, com deformação.	205
6.55 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 6000 s – h = 150 W/m <sup>2</sup> K, com deformação.	206
6.56 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 6000 s – h = 150, W/m <sup>2</sup> K. com deformação.	207
6.57 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 6000 s – h = 150 W/m <sup>2</sup> K, com deformação.	208
6.58 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 6000 s – h = 150 w/m <sup>2</sup> K – sem deformação.	209
6.59 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (solido + líquido) para o tempo = 6000 s – h = 150 w/m <sup>2</sup> K, sem deformação.	210
6.60 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 6000 s – h = 150 w/m <sup>2</sup> K, sem deformação.	211
B.1 – Desenho esquemático do equipamento de simulação do lingotamento contínuo de placas finas.	220
B.2 – Vista superior do simulador de lingotamento contínuo de placas finas.	221
B.3 – Dimensões básicas do simulador de lingotamento contínuo de placas finas.	221
B.4 - Simulador de lingotamento contínuo de placas finas.	223
C1 – Experiment proposed by Martin et al.-1997 to identified the material constants $A(\phi^s)$ , $B(\phi^s)$ and $c(\phi^s)$ .	238
C2 - Equipment built by Martin et al.-1997 to perform the experiments.	239



## Lista de Tabelas

1.1 - Cronologia simplificada do desenvolvimento da industria siderúrgica	3
1.2 - Relação de unidades de lingotamento contínuo e de laminação de placas finas existentes ou previstas	7
4.1 - Propriedades termofísicas do sistema SCN-Acetona	96
6.1 – Dados relativos a parte dos experimentos realizados com composição próxima 11,5 % de acetona	142 e 143



## Nomenclatura

Símbolo      Significado

### *Letras Latinas*

$A_0$	elemento infinitesimal de superfície no domínio macroscópico ou área do elemento representativo de área
$A_{kj}$	área da interface entre as fase $k$ e $j$ dentro de um volume $V_0$
$A_M$	área da superfície que delimita o domínio macroscópico de interesse
$C_k$	concentração de espécies na fase $k$
$\bar{C}_{ki}$	concentração média de espécies na interface da fase $k$
$da$	elemento infinitesimal de superfície no domínio microscópico
$D_m$	difusividade efetiva macroscópica de espécies
$dV, \delta V_k$	elemento infinitesimal de volume no domínio microscópico
$f_k$	fração de massa da fase $k$
$f_k^\alpha$	fração de massa de um constituinte $\alpha$ na fase $k$
$f_m^\alpha$	a concentração da mistura de uma determinada espécie $\alpha$ :
$g_r$	Aceleração devido a gravidade
$G$	fluxo de massa
$h_m$	coeficiente médio de transferência de massa por convecção
$k$	uma determinada fase
$k_m$	condutividade térmica da mistura
$l$	comprimento característico do VER
$\ell_k^j$	comprimento de difusão de soluto
$L$	comprimento característico do sistema (escala macroscópica)
$L_B$	distância entre dois rolos ( <i>roll pitch</i> )
$n$	número de cristais por unidade de volume ou número total de espécies na liga
$\bar{P}_{ki}$	pressão média interfacial



$\langle P_k \rangle^k$	pressão média intrínseca
$Q_k^\Gamma$	transferência de calor interfacial devido a mudança de fase
$\mathbf{r}$	vetor posição de um ponto no VER com respeito a um sistema de referência fixo
$\mathbf{R}_k$	coeficiente de resistência
$S_t$	área total da seção transversal perpendicular à direção de movimentação no processo de lingotamento contínuo
$S_1$	área da seção transversal correspondente à fase líquida perpendicular a direção de movimentação no processo de lingotamento contínuo
$S_2$	área da seção transversal correspondente à zona pastosa líquida perpendicular a direção de movimentação no processo de lingotamento contínuo
$V_0$	elemento infinitesimal de volume na escala microscópica (correspondente ao volume elementar representativo)
$V_k$	volume ocupado pela fase $k$
$V_t$	volume ocupado por todo o corpo (escala macroscópica)
$V_M$	volume do domínio de interesse na escala macroscópica
$t$	tempo
$T^c$	temperatura de coesão
$\mathbf{u}_m$	velocidade da mistura ou velocidade do sistema
$v'$	velocidade relativa
$\bar{w}_{ns}$	velocidade média da interface
$\mathbf{x}$	vetor posição do centroide do VER com respeito a um sistema de referência fixo
$X_k$	função de distribuição de fase
$z'$	distância a partir do rolo superior

### ***Letras Gregas***

$\alpha$	uma determinada espécie ou coeficiente de expansão térmica
$\beta$	contração de solidificação
$\delta_d$	valor de flexão de uma superfície



$\delta_{d\max}$	valor máximo de <i>bulging</i> (abaulamento) no ponto correspondente à distância média entre dois rolos
$\varepsilon_s^c$	fração de sólido de coesão
$\phi_k$	fração volumétrica da fase $k$
$\phi_k^\alpha$	fração volumétrica de um constituinte $\alpha$ na fase $k$
$\kappa_p^*$	coeficiente efetivo de partição
$\lambda_1$	espaçamento interdendrítico primário
$\lambda_2$	espaçamento interdendrítico secundário
$\mu_s^m$	potencial químico de um componente $m$ na fase $k$
$\rho_k^\alpha$	a massa específica do constituinte (espécie) $\alpha$ na fase $k$
$\bar{\rho}_k$	a massa específica parcial da fase $k$
$\rho_m$	a massa específica da mistura
$\langle \sigma_k \rangle$	tensor macroscópico de tensão de Cauchy para a fase $k$
$\sigma_k$	tensor microscópico de tensão de Cauchy para a fase $k$
$\tau_k$	tensão de cisalhamento
$\xi$	vetor posição de um ponto em relação ao ponto $\mathbf{x}$
$\Psi_k$	uma determinada variável da fase $k$
$\langle \Psi_k \rangle$	Valor ponderado pelo volume de uma determinada variável da fase $k$
$\langle \Psi_k \rangle^k$	Valor ponderado pelo volume intrínseco de uma determinada variável da fase $k$
$\hat{\Psi}_k$	componentes <i>fluctuating</i>
$\varepsilon$	taxa de variação de temperatura ( $\partial T / \partial t$ )
$\Gamma_k$	a transferência interfacial devido a mudança de fase ou taxa de mudança de fase por unidade de volume
$\Lambda_k$	coeficiente de difusão genérico

### **Superescritos**

$l$	líquido
$s$	sólido
$k$	uma determinada fase



### ***Subscritos***

<i>l</i>	líquido
<i>s</i>	sólido
<i>k</i>	uma determinada fase

### ***Abreviações***

VER	volume elementar representativo
AER	área elementar representativa

### ***Siglas***

DEMA	Departamento de Engenharia de Materiais
CST	Companhia Siderúrgica de Tubarão



## CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

### 1.1 – A Evolução Tecnológica na Fabricação de Produtos Planos

A indústria siderúrgica vem sofrendo uma série de transformações tecnológicas na direção da obtenção de produtos com um maior nível de qualidade a um menor custo, associado com processos com um baixo consumo de energia e um mínimo de poluição ambiental. Um das mais importantes tendências nesta área é o desenvolvimento de processos para obtenção de produtos de aço fundido na forma e dimensões próximas as do produto acabado. Estes processos são conhecidos na literatura técnica como *near-net-shape casting*.

O lingotamento de produtos planos convencional produz placas de 850 a 2300 mm de largura e 150 a 300 mm de espessura. Estas placas servem de matéria prima para a produção de tiras laminadas a quente com espessuras de 1,5 a 25 mm. De acordo com O'Connor e Dantzig-1994, a quantidade de energia necessária para reduzir a placa de sua espessura inicial até 50 mm representa um fração significativa do custo total de produção e portanto, justifica o desenvolvimento de processos para a obtenção de seções com menor espessura.

Para ser e permanecer competitiva é imperativo para a siderurgia a contínua redução do custo de produção e a melhoria da qualidade dos produtos. Döring et al.-1990 afirmam que diretamente relacionado com o custo de produção estão o aumento da capacidade de produção e a eliminação de determinadas etapas do processo, assim como a economia de mão de obra, avanços estes obtidos graças ao desenvolvimento científico e tecnológico. Os mesmos autores postulam que depois do processo de aciaria LD, a introdução da tecnologia de lingotamento contínuo de placas grossas nos anos 50 foi um dos maiores sucessos no campo da metalurgia visando alcançar o objetivo citado. Chatterjee-1995 analisando o desenvolvimento do processo de lingotamento contínuo afirma que nos anos 50 e 60 a motivação para o desenvolvimento era a criação de meios para o fornecimento de grandes

quantidades de aço com alta qualidade. Isto foi traduzido na gênese do estilo japonês de siderúrgicas “mega-integradas”. Estas grandes fábricas com seu grande volume de investimento de capital e de flexibilidade limitada, estão se tornando inadequadas em vários países desenvolvidos, apesar de permanecerem atrativas em situações onde existe uma grande demanda por um alto volume de produção (países como China, Coréia e Índia).

Nos anos 70, a crise de energia forçou a uma dramática melhoria na eficiência térmica das unidades industriais, tornando-se assim, o fator motivador de novos desenvolvimentos tecnológicos e ampliando a aplicação do lingotamento contínuo. Ainda nos anos 70 a expansão e, conseqüentemente, o surgimento de uma oferta maior do que a demanda na siderurgia no mundo, acirrou a competitividade, tornando o preço um importante fator a ser considerado, de forma que a construção de plantas integradas tornou-se economicamente inviável para a produção de uma série de tipos de aços. Tal fato propiciou o rápido desenvolvimento de mini-usinas nos estados Unidos, Itália e, até mesmo em países em desenvolvimento como a Índia. Estas mini-usinas baseadas no uso de sucata eram mais baratas de construir do que usinas integradas (possivelmente um quarto do custo ou menos), necessitando do emprego de menor mão de obra e apresentando uma maior flexibilidade.

A partir do início dos anos 80 e mais ainda nos anos 90, os aspectos ambientais adquiriram uma maior importância. Considera-se que, pelo menos nos países desenvolvidos, a necessidade de atender os requisitos de proteção ambiental contribui de 20 a 30% do custo total de capital de novas plantas siderúrgicas.

A evolução do desenvolvimento tecnológico na indústria siderúrgica, proposta por Chatterjee-1995, é apresentada de maneira simplificada na Tabela 1.1.

De acordo ainda com Chatterjee-1995, a luz dos desenvolvimentos citados acima, a indústria siderúrgica está sendo forçada a uma transformação visando atender as novas exigências. Para responder a este desafio, uma usina siderúrgica ideal para meados dos anos 90 e além, virtualmente em qualquer país, deveria atentar para os seguintes aspectos:

- não ser poluente, ser energeticamente eficiente e, idealmente, ser uma recicladora de materiais;

- exigir um baixo custo de capital mas, ao mesmo tempo, empregar as tecnologias e processos de controle considerados como o estado da arte de uma maneira eficiente;
- permitir flexibilidade no processo de produção;
- garantir uma alta produtividade dos funcionários;
- estar localizada próximo dos clientes; e
- possuir a capacidade de fornecer rapidamente novas linhas de produtos quando for necessário.

Fator	anos 60	anos 70	anos 80	anos 90
Forças exteriores	-métodos de produção em massa	-crise do petróleo	-disputa de mercado	-competição -meio ambiente global
Demandas exigidas da siderurgia	-estabilidade no suprimento de aço de boa qualidade	-aumento de produtividade -processos termicamente eficientes	-qualidade assegurada	-controle de efluentes -aços de baixo peso e boa resistência
Desenvolvimentos na siderurgia	-convertedor LD -vazamento pela base no lingotamento convencional	-refino na panela	-pre-tratamento do metal líquido -sopro combinado no LD -lingotamento contínuo	-near-net-shaping casting -surgimento de novas tecnologias para obtenção de ferro gusa e de aço

Tabela 1.1 - Cronologia simplificada do desenvolvimento da indústria siderúrgica (Chatterjee-1995).

Com relação às mini-usinas siderúrgicas, o último desenvolvimento é a entrada deste tipo de empresa no mercado de produtos planos. Uma das razões deste desenvolvimento é a limitada capacidade de crescimento para a linha de produtos tradicionais destas siderúrgicas tais como barras e perfis. Além disso, o desenvolvimento de máquinas de lingotamento contínuo de placas finas torna possível o surgimento de linhas de produção de chapas em pequenas plantas com reduzido investimento de capital. O aumento de valor agregado das tiras através do revestimento com plástico, galvanização, grãos orientados, etc., deverá ser definitivamente aplicados aos produtos planos.

Observa-se ainda que as máquinas de lingotamento contínuo de placas finas produzem placas de 50 a 60 mm de espessura, as quais podem ser laminadas em seqüência em laminadores de tiras a quente de tamanho reduzido, desde que a espessura da placa não requer o emprego de cadeiras de desbaste, apenas as cadeiras de acabamento. Chatterjee-1995 postula que além da construção de novas mini-usinas, o mercado apresenta a possibilidade de algumas usinas integradas incorporarem uma máquina de lingotamento de placas finas junto ao convertedor LD, existindo algumas empresas estudando esta possibilidade, entre as quais podem ser citadas Hoogovens, Iscor, Pohang, Geneva Steel, Acme Steel, Armco, e US Steel. Em função do exposto acima, Wünnenberg-1995 afirma que o processo de lingotamento contínuo de placas finas é a solução mais aceita dentre os processos *near-net-shape casting*.

## 1.2 - Características do Processo de Lingotamento Contínuo de Placas Finas (PLCPF)

Greis-1990 afirma ainda que uma das vantagens da tecnologia do lingotamento contínuo de placas finas é a possibilidade de acoplar o lingotamento contínuo e a laminação, processos que até então eram separados, em uma única unidade. Com a integração desta unidade com uma aciaria elétrica, pode-se reduzir tanto o investimento de capital como o custo operacional, resultando em uma alta produtividade e em menores tempos de execução dos pedidos. O mesmo autor observa que a produção mínima necessária para a implantação de uma linha de tiras a quente convencional moderna é de 3 a 4 milhões de t/ano é reduzida para de 500.000 a 1 milhão de t/ano. É possível a implantação de uma linha de produção de tiras a quente com menor investimento de capital, na ordem de 200 a 400 milhões de dólares. Por exemplo, a altura necessária para uma unidade de lingotamento de placas finas é de 4 a 5 vezes menor do que para as máquinas de lingotamento convencional, visto que a placa fina solidifica mais rapidamente e pode ser curvada com um raio de apenas 2 a 3 m comparado com 10 a 12 m necessários para o lingotamento contínuo convencional.

Em um recente artigo sobre as principais tendências tecnológicas apresentadas na feira METEC 94 (uma exibição internacional de tecnologia que se realiza na cidade de Düsseldorf a cada 5 anos) Greis-1994 apresenta uma tabela (Tabela 1.2) com cerca de 20 empresas que já operam ou fizeram a encomenda de máquinas de lingotamento contínuo,

1996 uma produção acima de 10 milhões de toneladas de tiras a quente e de chapas através deste processo.

A produtividade deste tipo de planta é o principal argumento utilizado para sua economia. Atualmente, a mão de obra necessária para a produção de 1t de tiras a quente tem sido colocada como de 1,5 a 0,35 homem/hora numa planta com lingotamento de placas finas, consideravelmente menor do que de 3 a 6 homem/hora para o lingotamento contínuo convencional.

No momento, todas as companhias que construíram e operam unidades de lingotamento contínuo de placas finas, estão procurando expandir os atuais limites do processo. Dentre os desenvolvimentos tecnológicos propostos podem ser citados: a aplicação automática e ao máximo possível da fusão homogênea do pó fluxante, ajustes para a obtenção de um fluxo suave e uniforme a partir do injetor submerso, extensão da vida deste injetor e a eliminação da descamação na superfície das placas.

De acordo ainda com Greis-1994, qual a extensão e com que velocidade as mini-siderúrgicas para produtos planos vão opor-se ao mercado das siderúrgicas integradas, irá depender provavelmente do desenvolvimento em 5 áreas, o qual no momento não pode ser previsto:

- em quanto tempo será possível para as aciarias elétricas e para as plantas com lingotamento contínuo de placas finas, produzir todos os tipos atuais de aços com a qualidade exigida pelo mercado, particularmente os aços para folhas laminadas a frio com a necessária qualidade de superfície;
- quanto tempo levará para que seja possível o crescimento da velocidade de lingotamento acima dos atuais 3 a 5 m/min permitindo um aumento de produção;
- de que maneira as usinas siderúrgicas integradas simplificarão suas estruturas adotando a organização de companhias privadas de porte médio;
- com que velocidade será desenvolvido o lingotamento contínuo de tiras; e
- de que maneira as etapas anteriores e posteriores do processo de produção poderão ser adaptados para a capacidade e custo de produção de uma unidade de lingotamento contínuo de placas finas.

Apesar da experiência acumulada com a construção e operação de máquinas de lingotamento contínuo convencional fornecer os fundamentos para o projeto da próxima geração de placas finas (20 a 70 mm de espessura), tiras (5 a 20 mm de espessura) e tiras finas (espessura menor do que 5 mm), uma série de problemas devem ser resolvidos para tornar estes processos competitivos com lingotamento contínuo convencional.

O'Connor e Dantizg-1994 afirmam que nos novos processos de lingotamento existe uma maior área superficial por unidade de volume devido às seções mais finas, exigindo desta forma que a qualidade da superfície seja cuidadosamente controlada e monitorada. A velocidade deve ser aumentada de 1 a 3 m/min do lingotamento convencional para cerca de 10 a 40 m/min para os produtos com menores espessuras para compensar a menor área de seção transversal. O aumento da velocidade de lingotamento leva a uma casca solidificada mais fina, aumentando conseqüentemente o risco de *breakouts*. Isto requer que os novos processos utilizem controles mais rígidos e práticas operacionais melhor definidas. O aumento da velocidade de lingotamento provoca também um menor tempo de vida do molde.

Birat e Steffen-1991 atestam que a tecnologia do lingotamento contínuo de placas finas foi originalmente proposta na Alemanha pelos fabricantes de equipamentos de lingotamento contínuo (SMS, MDH, Thyssen, Krupp), sendo também desenvolvida por fabricantes austríacos (Voest-Alpine) e italianos (Danieli).

Döring et al.-1990 analisa o acoplamento dos processos de lingotamento contínuo e da laminação de placas finas. Segundo estes autores, o principal objetivo desta tecnologia é o de alimentar a linha de laminação de tiras a quente com placas finas passando por fornos de reaquecimento e homogeneização sem a necessidade de resfriamento da placa. Desta forma, é possível a economia de etapas do processo e evita-se a perda de energia quando do resfriamento das placas.

<b>País</b> Empresa, localização	<b>Fornecedor- Processo</b>	<b>Ano do Pedido</b>	<b>Número de trens de laminação</b>	<b>Número de cadeiras de laminação</b>	<b>Espessura da placa solidificada (mm)</b>	<b>Espessura após redução (mm)</b>	<b>Largura (mm)</b>	<b>Espessura da tira a quente (mm)</b>	<b>Capacidade projetada (t/ano)</b>
<b>Canada</b> Ipsco, Regina	MDH	1996	1	1 <sup>*2</sup>	150	-	1220-2440 max. 3050	2,3-1,9 max. 38	910.000
<b>China</b> Baostel, Ningbo <sup>*3</sup>	VAI-Conroll	-	-	-	-	-	-	-	1.500.000
<b>Alemanha</b> Thyssen Stahl, Ruhrort	SMS-CPR	1991	1	1	50-60	15-30	1200	5-25	Planta piloto
<b>Índia</b> Nippon Denro Ispat, Calcutta	SMS-CSP	1996	1	6	50	-	900-1560	1,6	1.200.000
<b>Itália</b> Arvedi, Cremona ABS/Danieli, Sabolarie Ilva, Terni	MDH-ISP Danieli SMS-CSP	1992 - 1992	1 1 <sup>*1</sup> 1 <sup>*1</sup>	6 - -	50 50-90 50	- 35-70 -	900-1560 800-2300 1000-1560	1,2-12,0 1,0-16,0 -	500.000 Planta piloto -
<b>Coréia do Sul</b> Hanbo Steel, Pusan	SMS-CSP	1995	1	5	75	-	800-1560	1,7 (1,5)	1.000.000
Posco Steel	MDH-ISP	1996	1	5	75	-	900-1350	1,2-12,7	1.000.000
<b>Malásia</b> Nusantara Steel <sup>*3</sup>	MDH-ISP	1996	1	-	-	-	-	-	-
<b>México</b> Hylsa, Monterrey	SMS-CSP	1994	1	6	50	-	790-1350	1,7 (1,2)	750.000
<b>Espanha</b> ACB, Bilbao	SMS-CSP	1996	1	6	53	-	790-1560	1,3-12,7	900.000

<b>Suécia</b>									
Avesta, Avesta	VAI	1988	1	1 <sup>*4</sup>	8-250	-	660-2100	-	-
<b>Taiwan</b>									
Yieh United	SMS-CSP	-	2	6	50	-	900-1550	1,95	1.500.000
<b>Turquia</b>									
Çukurova, Aliaga <sup>*3</sup>	MDH-ISP	-	1	-	-	-	-	-	-
<b>Estados Unidos</b>									
Acme Steel, Riverdale	SMS-CSP	1996	1	7	-	-	900-1560	1,25	900.000
Armco, Mansfield	VAI-Conroll	1995	1	6 <sup>*5</sup>	75-100	-	635-1285	1,7-12,7	770.000
Gallatin Steel, Warsaw	SMS-CSP	1995	1	5	50	-	1000-1560	2,1	1.000.000
Geneva, Provo	SMS-CSP	1993	1 <sup>*6</sup>	3+6 <sup>*7</sup>	150-250	-	max.3200	max.25	-
					50	-	max.1880	1,5-12,7	
Nucor, Crawfordsville	SMS-CSP	1989	1	5	40-50	-	900-1350	1,95-12,7	1.800.000
		1994						1,60-12,7	
Nucor, Hickman	SMS-CSP	1992	1	6	50	-	1295-1560	1,95-12,7	2.000.000
		1994	1					1,50-12,7	
Steel Dynamics, Butler	SMS-CSP	1996	1	6	50	-	990-1560	1,20-12,7	1.200.000
Worldclass Steel <sup>*3</sup> , Pittsburgh	Tippins-TSP	1996	1	2	125	-	-	-	1.000.000
*1-Apenas a máquina de lingotamento contínuo; *2-Laminador Steckel para tiras a quente e placas; *3-Cara de intenção; *4-Existe um trem de 4 cadeiras para laminação de tiras a quente e de chapas; *5-uma linha de acabamento de um laminador de tiras a quente já existente; *6-Placas convencionais e finas; *7-Existe um laminador combinado de chapas e tiras a quente.									

Tabela 1.2 - Relação de unidades de lingotamento contínuo e de laminação de placas finas existentes ou previstas (Greis-1994).

Um requisito deste processo em relação a tecnologia de placas grossas é o fato de que a qualidade do produto e a produtividade deve permanecer a mesma ou ser melhorada. Para isto, a velocidade de lingotamento deve ser aumentada na proporção da redução de espessura da placa e, considerando a laminação sem resfriamento da placa, as propriedades de superfície e interna da placa fina devem ser quase 100% livre de defeitos. Para tal, é necessário, fato que também é destacado por Kothe et al.-1990, o uso de modernas tecnologia de metalurgia secundária, controle de qualidade dinâmico do processo, desenvolvimento técnico das usinas, assim como novos tipos de pós fluxantes.

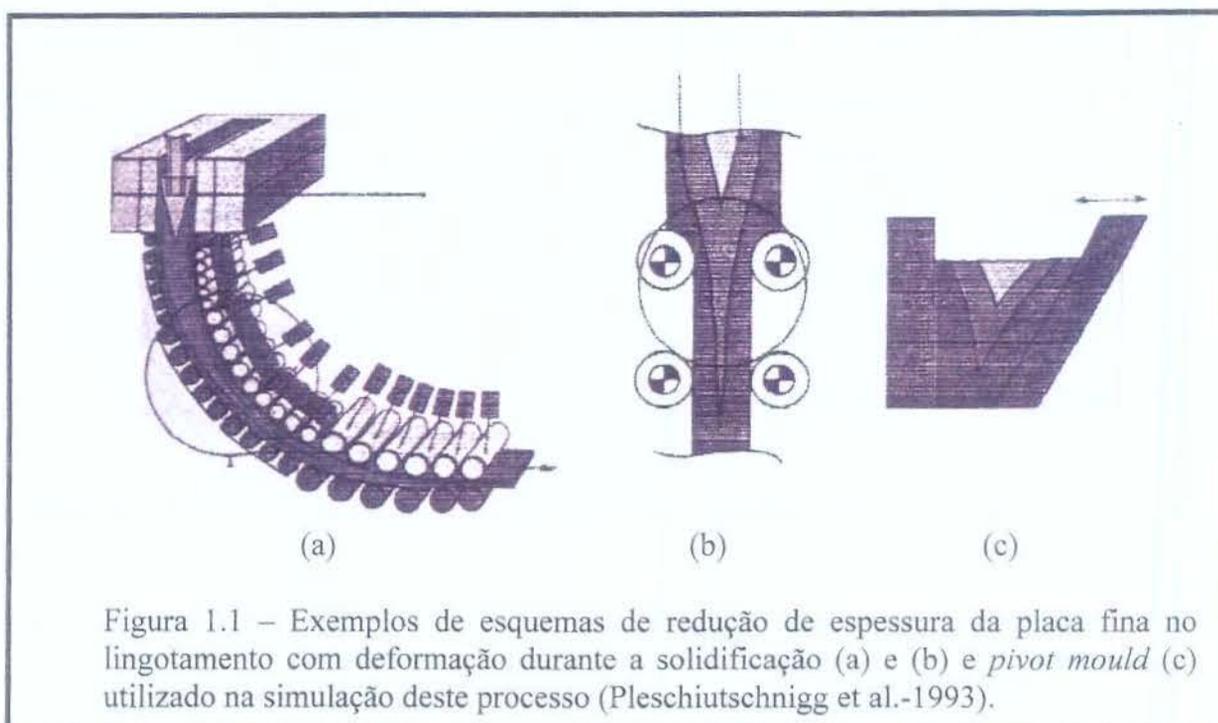
Döring et al.-1990 resumem as vantagens do lingotamento contínuo de placas finas em:

- um menor custo de capital da máquina de lingotamento contínuo (menor altura e comprimento da máquina e conseqüentemente, menor espaço requerido);
- um menor custo energético (não é necessário o resfriamento da placa fina);
- não é necessária a proteção e estoque das placas finas;
- um menor investimento para a construção do laminador que utilizará com matéria prima as placas finas (não é necessário o trem de desbaste);
- a estrutura obtida é mais refinada e uniforme; e
- obtém-se uma melhor qualidade interna na placa fina (não existe a presença de trincas interiores, e uma menor tendência para a segregação transversal).

Diversas companhias internacionais construtoras de plantas siderúrgicas estão intensivamente envolvidas com o lingotamento contínuo de placas finas. As diferenças essenciais entre as várias concepções oferecidas para as unidades de lingotamento contínuo de placas finas consistem em:

- formas e dimensões dos moldes;
- forma do injetor (válvula) submerso;
- tipo e quantidade de deformação submetida a camada solidificada na região que ainda apresenta um núcleo líquido;
- localização e extensão de uma zona de redução de espessura *on-line*.

A Figura 1.1 apresenta diversos esquemas de redução de espessura da casca superficial.



Em relação a qualidade de superfície e a qualidade metalúrgica, Gottardi et al.-1992 acrescentam que, em função do menor grau de redução posterior aplicado na produção de chapas, a presença de trincas internas e de porosidade central seriam muito prejudiciais às propriedades finais do produto. Os mesmos autores afirmam que a qualidade de superfície, considerada muito boa, é caracterizada por:

- ausência de trincas longitudinais e transversais;
- nenhum defeito de quinas;
- marcas de oscilação pouco profundas;
- nenhuma incrustação de escória do molde; e
- mínimo de adesão de carepa.

Estas propriedades são suficientes para permitir a laminação direta sem a necessidade da etapa de condicionamento. As análises micrográficas mostram que as placas apresentam excelentes qualidades internas, tais como:

- ausência de trincas internas e sub-superficiais;
- boa sanidade na região central;
- a zona coquilhada apresenta espessura homogênea ao longo do perímetro da placa;
- a estrutura solidificada é caracterizada por uma extensa zona equiaxial; e

- o tamanho dos grãos austeníticos está na faixa de 7 a 8 ASTM na superfície e de 4 a 5 ASTM no centro (sem a aplicação da redução na saída do molde).

Essadiqi et al.-1995 apresenta um trabalho no qual procurou estudar a influência da laminação direta após o lingotamento contínuo e da laminação após o resfriamento e reaquecimento das placas finas. Segundo estes autores, apesar das vantagens econômicas da laminação direta após o lingotamento das placas finas, a que se considerar as desvantagens metalúrgicas (observadas nas experiências realizadas) tais como:

- a perda do refinamento dos grãos durante o resfriamento e reaquecimento (no aço empregado a precipitação de TiN durante o resfriamento inibia o crescimento dos grãos na etapa de reaquecimento);
- a menor espessura inicial da placa fina dificulta a etapa de refino dos grãos através da aplicação de redução durante a laminação.

Pleschiutschnigg et al.-1993 apresentam o *pivot mould* utilizado para simular a laminação com o núcleo líquido (Figura 1.1c) o qual apresentou bons resultados. Segundo estes mesmos autores, de um modo geral o lingotamento/laminação durante a solidificação elimina a macrosegregação e, adicionalmente, promove um alto refinamento dos grãos devido ao efeito da deformação da região pastosa próxima aos cilindros e devido à menor espessura do fundido e ao menor tempo de solidificação. Estes efeitos, os quais foram objeto de vários estudos desde o início de processo de lingotamento contínuo através da agitação eletromagnética da placa em processo de solidificação com, até o momento, apenas um sucesso limitado, são as principais razões para o fato do processo ISP (processo que será detalhado no próximo item) permitir a produção de chapas grossas com espessura de 30 a 15 mm imediatamente após a máquina de lingotamento contínuo.

### **1.3 - Variações do Processo de Lingotamento Contínuo de Placas Finas**

Serão apresentadas a seguir algumas das soluções fornecidas pelos fabricantes de equipamentos siderúrgicos para a combinação de lingotamento contínuo e laminação de placas finas.

Birat e Steffen-1991 apresentam o esquema proposto pela empresa SMS (Schloemann-Siemag) conhecido como CSP (Compact Strip Production), no qual são empregados, tanto quanto possível, os elementos mecânicos do lingotamento contínuo clássico. A máquina de lingotamento contínuo é combinada com um forno de encharcamento e 4 ou 5 cadeiras laminadoras de acabamento, dependendo da espessura final da tira a quente. Uma implementação especial é o molde expandido e na forma de funil para acomodar o injetor submerso na região do menisco. Nilles-1994 apresenta um desenho esquemático da primeira planta CSP na usina da Nucor em Crawfordsville/EUA (Figura 1.2).

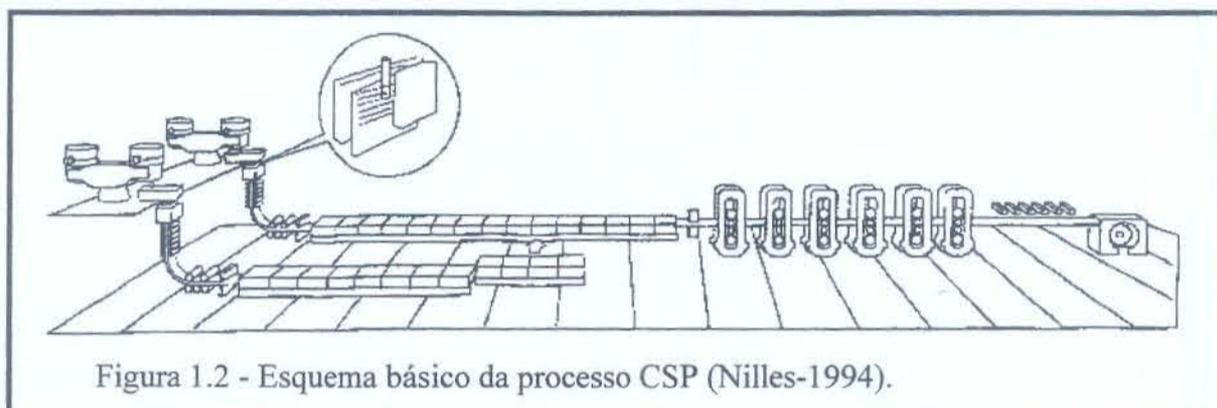


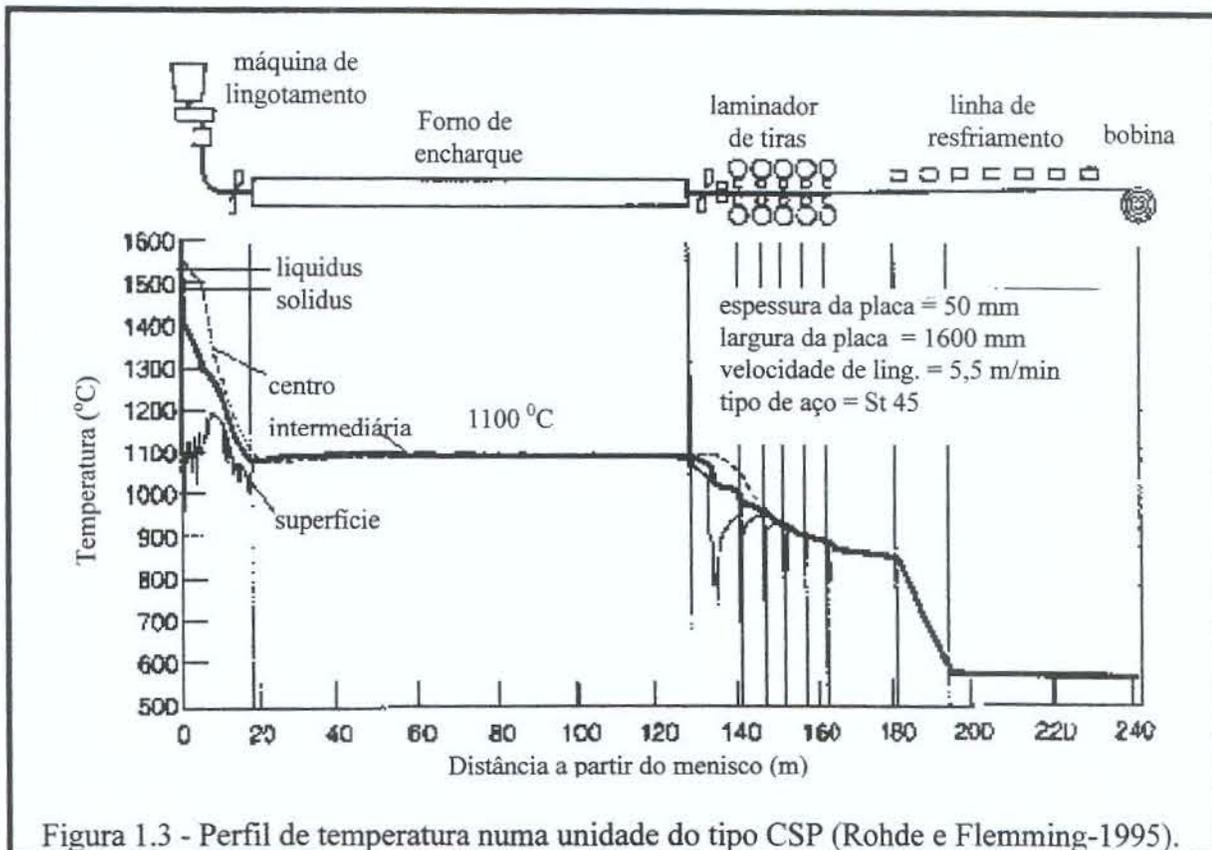
Figura 1.2 - Esquema básico do processo CSP (Nilles-1994).

Na Figura 1.3 é mostrado um esquema, apresentado por Rohde e Flemming-1995, da evolução de temperaturas durante o processo CSP. Observa-se nesta figura que o caminho desde o metal líquido até a bobina acabada inclui várias etapas, as quais devem estar sob um rígido controle de variáveis de processo tais como:

- processo de vazamento na máquina de lingotamento para produzir a placa fina;
- a temperatura de equalização no laminador central ou no forno de encharcamento para se obter uma temperatura uniforme na placa;
- processo de laminação no trem de laminação para se obter as dimensões finais necessárias;
- resfriamento nas mesas de rolos de saída para se obter as propriedades metalúrgicas desejadas; e
- processo de resfriamento das bobinas para assegurar o transporte imediato do produto.

Um outro processo, conhecido por ISP (Inline Strip Production), foi desenvolvido pela empresa MDH (Mannesmann Demag Hüttenchnik) e construído para Arvedi Spa em

Cremona/Itália, o qual, segundo Nilles-1994, difere do processo CSP pela redução de espessura da placa com uma casca solidificada (mas com o núcleo do esboço ainda no estado líquido) de 60 para 40 mm ainda na unidade correspondente à máquina de lingotamento contínuo e com uma redução adicional para 20 mm, já no estado sólido, na parte horizontal da unidade. Após 3 cadeiras de laminação, existe incorporado a planta um sistema de aquecimento por indução (Figura 1.4) para elevar a temperatura da placa fundida até a temperatura de laminação antes de passar para um forno de aquecimento à gás para a bobina, o qual mantém a temperatura desta.



O processo denominado Conroll da empresa Voest-Alpine (Schwaha et al.-1993; Brimacombe e Samarasekera-1994) produz placas com espessura de 70 a 80 mm utilizando um molde com paredes paralelas. O esboço não é submetido a redução de espessura na máquina de lingotamento contínuo, mas é conectado a uma linha de laminação através de um forno de reaquecimento possibilitando a realização da laminação direta.

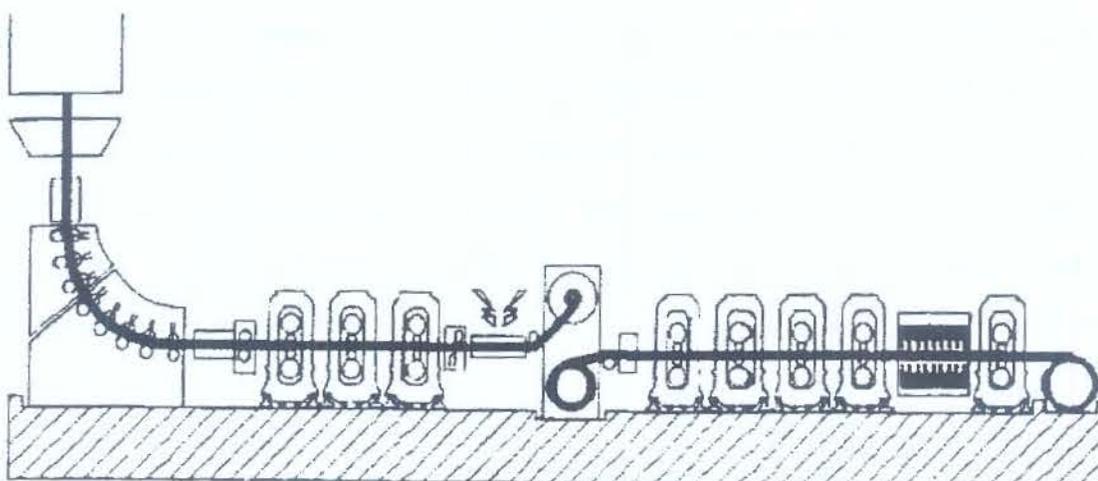


Figura 1.4 - Desenho esquemático do processo ISP da usina de Arvedi em Cremona/Itália (Nilles-1994).

#### 1.4 - Justificativas e Objetivos do Trabalho

Uma das opções apresentadas nos últimos anos para a redução da severidade da macrosegregação no lingotamento contínuo de aços é a aplicação da redução de espessura do esboço com o núcleo do mesmo ainda no estado líquido. Entretanto, tal operação parece, em primeira análise, contraproducente visto que, como será detalhado no desenvolvimento deste trabalho, a aplicação de determinados estados de tensões e deformações, leva a um aumento do nível da macrosegregação na parte central dos produtos de lingotamento contínuo.

Uma extensa revisão da literatura pertinente a este assunto, embora fornecesse algumas pistas e análises parciais, não obteve sucesso na tentativa de se encontrar modelos matemáticos ou resultados experimentais detalhados, que permitissem entender, quantificar e analisar os diversos fenômenos que estão ocorrendo quando se estuda processos caracterizados pela realização simultânea de solidificação e de deformação plástica do esboço.

A partir das considerações acerca da importância e das possibilidades do processo de lingotamento contínuo de placas finas, observando-se ainda o poder de análise obtido com a utilização da modelagem e simulação física e numérica dos fenômenos relacionados com a solidificação de ligas metálicas, associada ao controle do processo, tem-se como principais objetivo deste trabalho:

- A elaboração de um modelo matemático, incluindo o teste e a aferição do mesmo, para computar o transporte de massa, momento, calor e espécies durante a solidificação/deformação plástica de ligas metálicas.

Para que seja atingido o objetivo listado acima, este estudo foi desenvolvido obedecendo as seguintes etapas:

- Construção de um dispositivo que permite a realização da solidificação controlada de um composto orgânico (SCN e acetona) de comportamento de solidificação similar às ligas metálicas. Tal dispositivo possibilita a aplicação da deformação plástica, a visualização do padrão de convecção no metal líquido, a medição da deformação da fase sólida, o monitoramento das temperaturas por um conjunto de termopares acoplado a um sistema computacional de aquisição de dados e a retirada de amostras para a análise da composição do líquido em várias etapas de um experimento.
- Realização dos experimentos, utilizando-se o dispositivo construído, empregando-se ligas com diferentes teores de acetona, variando-se a quantidade e a velocidade de deformação.
- Elaboração de modelos matemáticos que permitam analisar a movimentação das fases sólida e líquida antes, durante e após a aplicação da deformação plástica. Os modelos também possibilitam a determinação da variação da temperatura, da evolução da fração de sólido e da variação da composição no líquido e no sólido durante o processo de solidificação/deformação. Como estratégia no desenvolvimento dos modelos, optou-se pela implementação de dois tipos de modelos:
  - i) Um modelo simplificado, considerando apenas a condução, para teste inicial do modelo matemático de transformação de coordenadas proposto para análise de solidificação/deformação plástica. Este modelo foi desenvolvido considerando a aplicação do método do contínuo.
  - ii) Um modelo que considera simultaneamente os fenômenos de convecção e de difusão. Neste modelo, é dada ênfase na incorporação de fenômenos ocorrendo em escala microscópica no modelo macroscópico de transporte de

- ii) Um modelo que considera simultaneamente os fenômenos de convecção e de difusão. Neste modelo, é dada ênfase na incorporação de fenômenos ocorrendo em escala microscópica no modelo macroscópico de transporte de determinadas variáveis no sistema. As equações macroscópicas de conservação serão introduzidas através do método de volumes ponderados.
- Implementação computacional dos modelos matemáticos desenvolvidos para casos unidimensional e bidimensional.
  - Comparação dos resultados numéricos com os resultados experimentais para comprovar e aferir o modelo desenvolvido.
  - Aplicação do código desenvolvido para simular a solidificação/deformação de um aço multicomponente.

## CAPÍTULO 2

### MODELAGEM MATEMÁTICA DA SOLIDIFICAÇÃO/DEFORMAÇÃO PLÁSTICA DE LIGAS

#### 2.1 – Modelagem da Solidificação de Ligas Metálicas

O aumento contínuo do nível de qualidade exigido dos produtos fundidos, induziu o surgimento de um grande número de pesquisas dos diversos fenômenos relacionados com a fabricação de peças por fundição ou de produtos semi-acabados por lingotamento. Assim, atualmente, a obtenção de peças fundidas ou de produtos lingotados, baseia-se na aplicação cada vez maior de conhecimentos científicos e tecnológicos, aliados a técnicas computacionais no sentido de: conhecer, qualificar, quantificar e controlar os diversos fenômenos físicos e metalúrgicos inerentes ao processo de solidificação. Uma comprovação da importância deste campo de estudo é a realização de uma série de conferências científicas específicas nesta área (Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes I a VIII; Micro/Macro Scale Phenomena in Solidification; Transport Phenomena in Solidification; Materials Processing in Computer Age II), além de um grande número de artigos em publicações cobrindo várias áreas do conhecimento, pois, trata-se de um campo de estudo multidisciplinar.

Um exemplo deste progresso é o considerável crescimento da utilização de modelos matemáticos na análise, controle e otimização de processos de fabricação por fundição ou lingotamento contínuo já implantados ou em implantação. O potencial destes modelos para produzir ganhos em eficiência nos processos é o fator motivador deste aumento. Além disto, os modelos matemáticos de processos complexos são freqüentemente aplicados para isolar e identificar os efeitos de alterações em determinadas variáveis no produto final (Dantzig-1988; Jain-1994). Em boa parte dos casos, não é possível implementar tais alterações experimentalmente, por dificuldades impostas pelo processo em si ou devido ao tempo e o

custo necessários para realizar toda a série de experimentos. Nestes casos o pesquisador pode utilizar o modelo matemático para simular os efeitos de mudanças em determinadas variáveis de processo nas características do produto.

A modelagem de processos de solidificação surgiu a partir da associação da engenharia de processos com os mais tradicionais campos científicos tais como: termodinâmica, mecânica dos fluidos, transferência de calor, mecânica dos sólidos, métodos matemáticos e computacionais e metalurgia. Desta forma desenvolveu-se uma metodologia de análise que começa com a tentativa de se determinar, a partir de princípios básicos, quais os fenômenos físicos que ocorrem durante o processo de fabricação que envolvam solidificação, cujo entendimento permite prever quais são as conseqüências da variação de determinados parâmetros na qualidade do produto.

✦ A modelagem da solidificação de produtos fundidos apresenta um certo grau de complexidade, pois, processos que envolvem mudança de fase são inerentemente muito complexos para serem analisados já que as equações de conservação de energia, de momento, da continuidade e de espécies, junto com as condições de contorno nas interfaces devem ser resolvidas simultaneamente. Além do mais, devido a natureza transiente dos fenômenos envolvidos, a localização das interfaces móveis no metal, devem ser consideradas no modelo (Lesoult-1991).

Apesar do grande número de estudos desenvolvidos na área da modelagem dos processos de solidificação para o desenvolvimento tecnológico, a conjugação de todos estes modelos num só pacote computacional ainda não é possível, sendo que os pacotes computacionais (*softwares*) atualmente disponíveis, além do alto custo, fazem uso de uma série de aproximações para se obter determinados parâmetros do processo em estudo, muito embora possam ser bastante úteis no estudo de determinadas etapas de um processo.

A aplicação de tais pacotes na simulação do fluxo de calor num sistema metal e molde que descreva um processo real de solidificação, pode apresentar algumas dificuldades, entre as quais podem ser destacadas:

- a descrição geométrica da peça e a correspondente aplicação do modelo em duas e três dimensões;
- o tratamento adequado da evolução do calor latente de fusão durante a solidificação;

- a disponibilidade de dados precisos de propriedades termofísicas, principalmente a sua variação com a temperatura (inclusive para temperaturas elevadas), para os materiais que constituem a peça fundida e o molde;
- a consideração das resistências térmicas nas interfaces metal/molde e molde/ambiente;
- a consideração do fluxo de fluido e de fase sólida na zona pastosa e no próprio líquido;
- a correlação entre fenômenos ocorrendo em diferentes escalas simultaneamente.

De uma maneira geral, pode-se considerar que a análise do fenômeno da solidificação dos metais apresenta fundamentalmente dois aspectos: i) um aspecto metalúrgico ligado à composição química do metal; ii) um aspecto térmico relativo à história térmica anterior do metal, aos modos pelo qual o calor é transferido e à distribuição de temperaturas no interior da peça a cada instante do processo. A interação entre estes dois aspectos determinará as características da microestrutura do metal solidificado e conseqüentemente suas propriedades.

A estrutura dos produtos fundidos aparece e se desenvolve em diferentes escalas dimensionais durante a solidificação (Viskanta-1992): na escala do sistema ou do produto, na escala do grão, na escala das interfaces e na escala atômica. Parâmetros tais como: tipo de grãos, macrossegregações e macro-microrechupes, dependem principalmente do tipo de processo de fundição, da geometria do produto fundido e das condições gerais de preenchimento e resfriamento. O grau de refinamento da microestrutura numa determinada região (tamanho médio dos grãos) é governado pelas condições locais de resfriamento e pelos processos de inoculação empregados. Espaçamentos interdendríticos, microssegregações, porosidade devido a gases, dependem das condições térmicas e químicas prevalentes nas regiões de análise.

Apesar de ser usual a referência a uma única escala dimensional quando do estudo de um determinado parâmetro estrutural, é obvio que um dado fenômeno que resulta numa determinada característica, pode ocorrer em diferentes escalas. Por exemplo, o espaçamento interdendrítico e a fração sólida local (relacionados com a microssegregação) determinam a permeabilidade do emaranhado de dendritas na zona pastosa. Esta micro-característica influencia o desenvolvimento do fluxo macroscópico de metal líquido na zona pastosa, o qual atua nas características finais de macrossegregação e/ou porosidade de contração. Desta

forma, um dos maiores desafios na modelagem dos problemas relativos a solidificação é a manipulação das interações entre diversos fenômenos físicos que ocorrem em diferentes níveis, desde a escala atômica, passando pela escala das interfaces e pela escala do grão até a escala do sistema.

Simplificando a análise, um modelo completo para simulação da solidificação de peças fundidas de formas complexas deveria incluir (Upadhye e Paul-1992) tanto macro-modelos para descrever o fluxo de calor do metal para o molde, fluxo de fluido do metal líquido durante o preenchimento do molde, distribuição de tensões durante a solidificação da peça, quanto micro-modelos para avaliar a liberação de calor latente durante a solidificação, o fluxo de fluido na zona pastosa e a formação de microestruturas (Stefanescu et al.-1989; Stefanescu et al.-1990). Além do mais, as interações entre o metal e o molde devem ser consideradas antes e após a solidificação. Basicamente um modelo matemático para descrever a solidificação de ligas, lida com uma ou mais das seguintes equações:

- equação de conservação de energia;
- equação de conservação da massa;
- equação de conservação do momento;
- equação de conservação espécie.

A Figura 2.1 apresenta uma visão esquemática da interdependência entre os diversos fenômenos relacionados com a solidificação de ligas metálicas.

As equações utilizadas para descrever um determinado sistema sofrendo uma mudança de fase devem possuir os seguintes atributos (Voller-1991):

- serem consistentes com uma análise multifásica do problema relativa à solidificação de ligas metálicas;
- apresentarem relativa facilidade para permitirem uma implementação computacional.

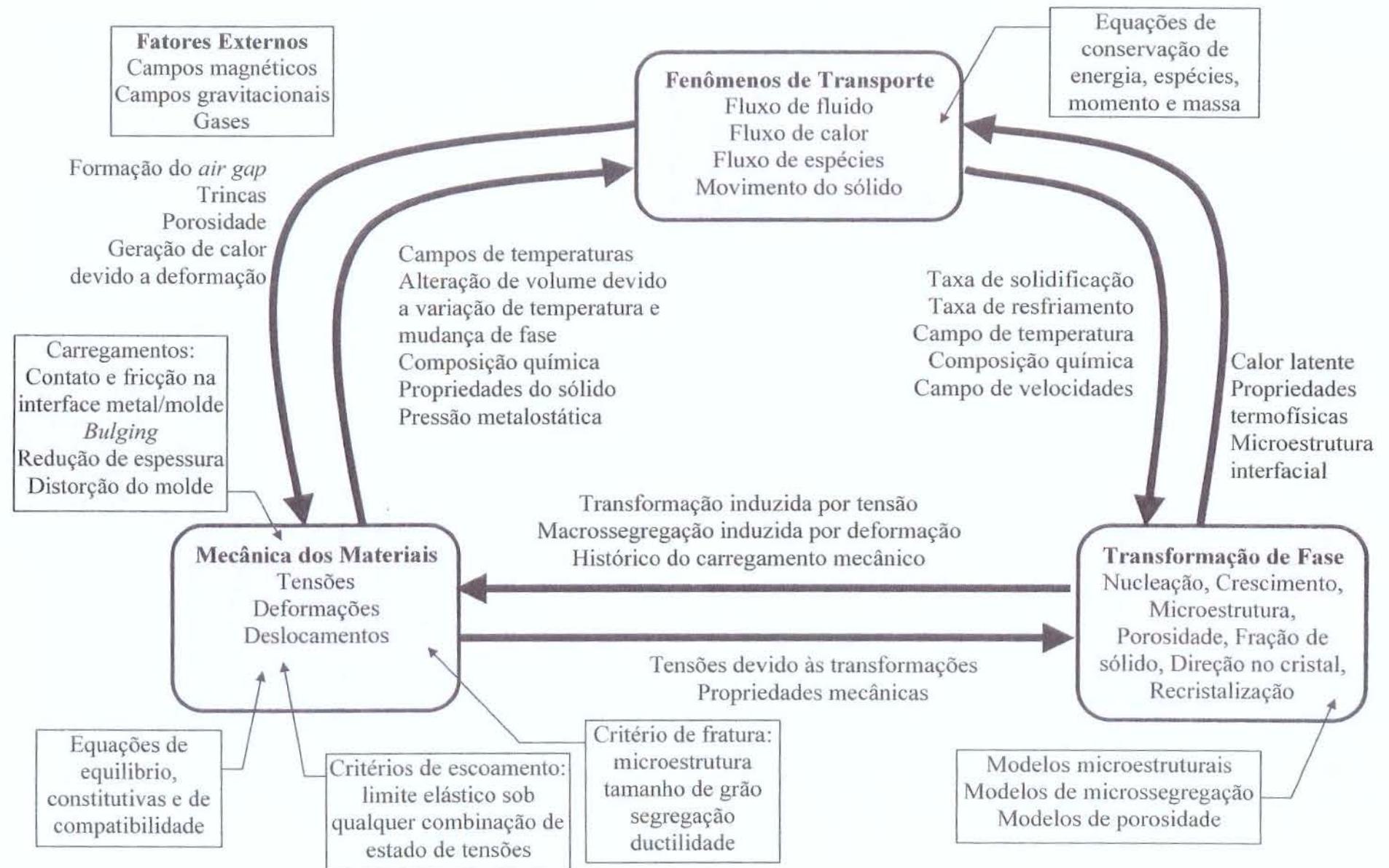


Figura 2.1 – Representação esquemática da interdependência entre os diversos fenômenos relacionados com a solidificação de ligas metálicas.

Muitos métodos numéricos já foram propostos para se resolver o problema estabelecido acima. Voller-1991, Samarskii *et al.*-1988 e Viskanta-1988 agruparam estes métodos de uma maneira geral em: método de malha (domínio ou frente) fixa e método de malha móvel.

Pode-se dividir as técnicas de malha móvel em 3 grupos: mudança de coordenadas, malhas deformáveis e malhas adaptativas (Samarskii *et al.*-1988). No caso de mudança de coordenadas, a interface sólido/líquido é fixada com um sistema de transformações de coordenadas apropriado. Por exemplo, com  $X = \frac{x}{s}(t)$  a interface está sempre estacionária em  $X = 1$ . Tais métodos de transformação introduzem complicações desde que a posição da frente não é especificada em princípio, mas ao contrário faz parte da solução do problema. Entretanto, para aqueles problemas onde a posição da frente de solidificação é conhecida *a priori*, pode-se mostrar que a técnica de transformação oferece vantagens significativas.

No método de discretização por malhas deformáveis, após a resolução das equações diferenciais para um dado passo no tempo, a localização da interface sólido/líquido é computada e uma nova malha é gerada. Realiza-se então os cálculos no próximo passo de tempo já com nova distribuição de nós.

Na discretização por malhas adaptativas, segundo Jucá-1993, ocorre uma modificação dinâmica da malha com a evolução da solução das equações diferenciais, sendo que a redistribuição dos nós da malha sobre o domínio físico é direcionada pela física do problema, resultante da evolução de sua solução. O princípio fundamental deste método é dispor de uma malha cujos pontos se movem, enquanto a solução do problema físico evolui, concentrando-os em regiões de maiores gradientes da solução, à medida que estas regiões são identificadas.

Nos métodos de malha fixa não existe necessidade da localização da interface durante os cálculos. Como principais exemplos deste grupo temos os conhecidos (Samarskii *et al.*-1988; Kumar e Namburu-1990) método da temperatura, onde a temperatura é tomada como a variável dependente, e o método da entalpia, sendo a entalpia e a temperatura as variáveis em questão

No método da temperatura (conhecido ainda como método do calor específico equivalente ou ainda método da capacidade térmica equivalente) as equações de conservação da energia são escritas separadamente para as fases líquida e sólida e acopladas na interface sólido/líquido. O calor latente é considerado através da substituição deste por um calor específico equivalente para todo o intervalo de solidificação<sup>1</sup>.

O método da entalpia, conhecido ainda como formulação fraca, tem como principal vantagem o fato de não ser necessário um tratamento explícito da condição da interface sólido/líquido (Voller-1990; Voller e Prakash-1987; Griffith e Nassersharif-1990). Isto é conseguido por meio da reformulação das equações da conservação da energia através da introdução de um termo apropriado de fonte de calor, de modo que uma equação diferencial simples é resolvida, através da consideração de uma malha fixa, para todo o domínio discretizado do metal (sólido e líquido). Desta forma é possível a utilização, mediante simples modificações, dos pacotes numéricos de transferência de calor existentes (Swaminathan e Voller-1992) e podem ser estendidos para a solução de problemas multidimensionais.

Um dos maiores problemas na utilização do método da entalpia é a determinação da entalpia total em cada célula da malha discretizada. A entalpia de uma célula sob mudança de fase depende da evolução de fração sólida nesta célula. Quando a malha discretizada é suficientemente refinada de modo que dois ou mais nós façam parte da região em mudança de fase em todo o tempo, resulta em bons resultados. Por outro lado, no caso de uma discretização grosseira ou quando o intervalo de solidificação é estreito, a solução pelo método da entalpia pode produzir um certo número de falsos patamares de solidificação.

Considerando os métodos chamados de malha fixa existem, na literatura técnica corrente, duas metodologias para a derivação das equações de conservação (Voller-1991):

- método dos volumes ponderados
- método do contínuo

---

<sup>1</sup>no caso de metais puros ou ligas de composição eutética, é necessária a consideração de um intervalo artificial de solidificação.

Considere o transporte de uma determinada quantidade escalar  $\Psi_k$  associada a uma fase  $k$  em uma mistura multifásica. Para um volume de controle arbitrário  $V$  com uma superfície  $A$ , o qual é maior do que um dado elemento da fase mas é menor do que a dimensão característica do domínio em análise, a conservação de  $\Psi_k$  pode ser expressa, na forma diferencial para cada fase (Bennon e Incropera-1987, Voller e Brent-1989, Ni et al.-1991, Bear e Bachmat-1984, Wang e Beckermann-1995), como o balanço entre a acumulação, o fluxo líquido para fora por advecção e por difusão e a geração no interior do volume de controle da variável  $\Psi_k$ , que pode ser expresso na forma da equação dada a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi_k \rho_k \Psi_k) + \nabla \cdot (\phi_k \rho_k \mathbf{V}_k \Psi_k) = -\nabla \cdot (\phi_k \mathbf{J}_k) + S_k \quad (2.1)$$

onde:

$\mathbf{J}_k$  = vetor do fluxo superficial (representa o fluxo total, convectivo e difusivo) e é dado por:

$$\mathbf{J}_k = \rho_k \mathbf{v}_k \Psi_k$$

$S_k$  = termo relativo a fonte (incluindo a produção ou aniquilação) de  $\Psi_k$  por unidade volume.

O primeiro termo é o termo dependente, o segundo é o termo relativo ao transporte convectivo, o terceiro está relacionado com o transporte difusivo e o último termo é termo fonte. Esta equação se apresenta na forma padrão disponível em muitos dos códigos computacionais mais divulgados para solucionar problemas que envolvam convecção e difusão (Krane e Incropera-1995), nos quais certas variáveis podem ser artificialmente designadas como sendo termos fonte.

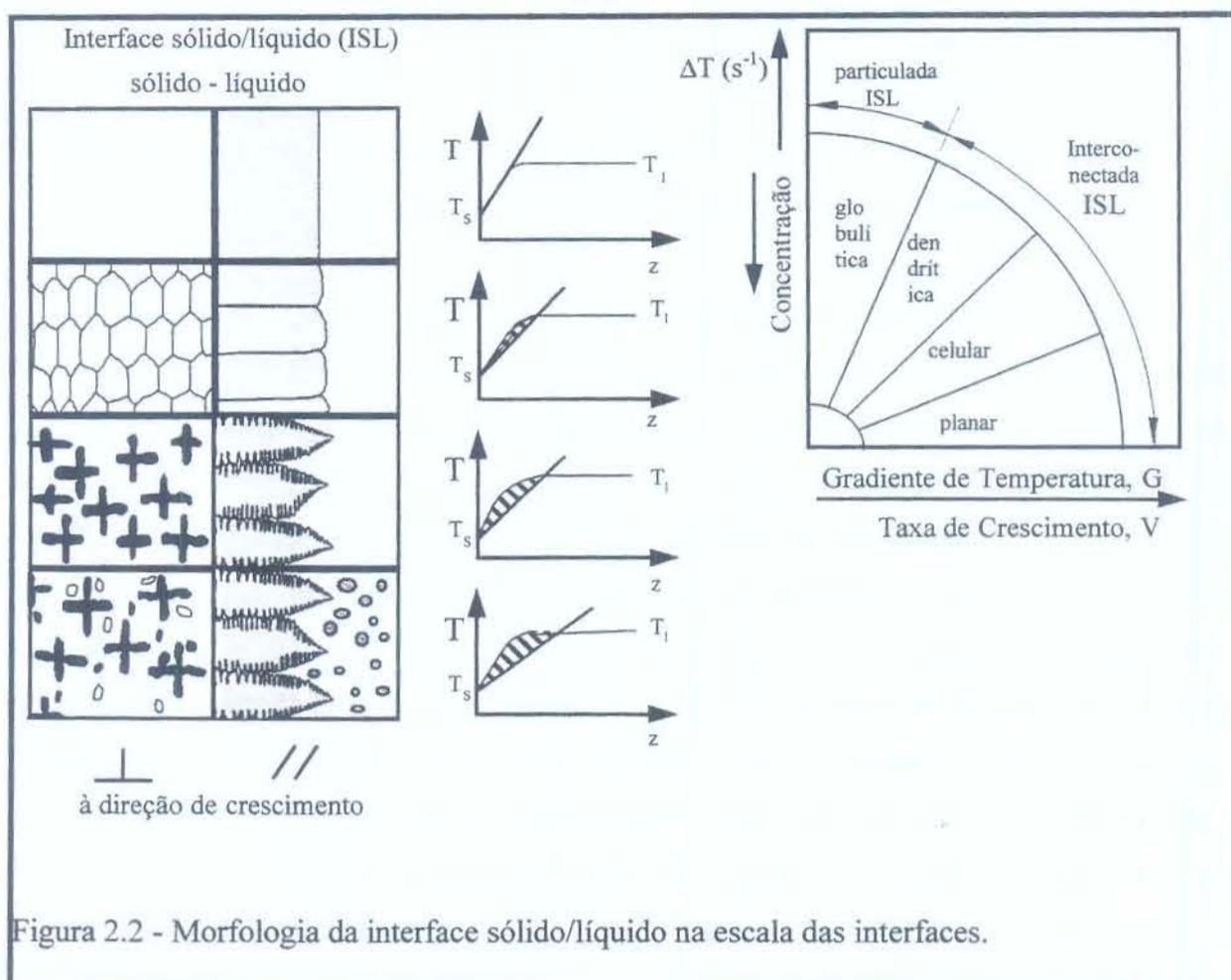
## 2.2 - Macrossegregação

Uma análise da estrutura de uma liga metálica apresenta basicamente dois tipos de heterogeneidades:

- i) heterogeneidades físicas, isto é, diferenças no tamanho e na morfologia dos grãos, presença de poros e inclusões;
- ii) heterogeneidades químicas, conhecidas como segregações, consistindo na variação da composição em relação à composição nominal, tanto positiva como negativa.

Segundo Beckermann e Viskanta-1993 devido aos baixos valores de difusividade de massa em relação a difusividade térmica das ligas metálicas, a solidificação em uma escala microscópica e portanto, a formação de microestruturas é fundamentalmente controlada pelo gradiente de concentração de espécies (soluto) em cada lado da interface sólido/líquido. Sempre existirá um gradiente de concentração no líquido através do qual o soluto rejeitado durante a solidificação é removido. Consequentemente, a concentração na interface deve ser maior (para um coeficiente de partição de soluto menor do que 1) do que a concentração no líquido mais afastado da interface. A diferença de temperatura entre a interface e algum ponto no interior do metal líquido, devido à variação de concentração de soluto, é normalmente chamada de super-resfriamento constitucional. O termo super-resfriamento surgiu da prática de se converter as diferenças em concentrações em diferenças de temperaturas empregando-se a linha *liquidus* do diagrama de fases. Desta forma, o metal está super-resfriado, isto é, encontra-se em um estado metaestável, se a temperatura real em um ponto no líquido é menor do que a temperatura *liquidus* correspondente à concentração do líquido naquele ponto. A diferença entre a temperatura na interface e em algum ponto no interior do metal líquido é chamada de super-resfriamento térmico. A Figura 2.2 apresenta uma representação esquemática das interfaces de crescimento em função do super-resfriamento.

Serão discutidos a seguir os fenômenos de fluxo de fluido na zona pastosa e no metal líquido assim como o movimento da fase sólida presentes durante a etapa de preenchimento e solidificação, os quais afetam decisivamente estrutura formada nas peças fundidas, principalmente no que diz respeito a presença de microsegregação e de macrosegregação.



Considerando a síntese apresentada por Beckermann e Viskanta-1993 e Ni e Incropera-1995, na escala macroscópica, o desenvolvimento das várias zonas típicas da estrutura de uma peça fundida, pode ser descrito esquematicamente como (Figura 2.3):

- Os primeiros núcleos surgem devido a nucleação heterogênea que ocorre tipicamente nas paredes do molde. Grãos equiaxiais crescem rapidamente e coalescem formando a zona equiaxial mais externa.
- A seguir, apenas os cristais que sobrevivem (aqueles que permanecem unidos à interface em crescimento) crescem paralelamente, mas em sentido oposto, à direção de extração de calor. O processo de crescimento é do tipo competitivo, ou seja, os grãos que apresentam uma orientação de crescimento paralela à direção de extração de calor crescem preferencialmente, resultando na formação de uma estrutura colunar na zona pastosa.
- Quando o super-aquecimento na fase líquida é dissipado, o metal líquido a frente das pontas das dendritas colunares trona-se super-resfriado, permitindo o crescimento de cristais equiaxiais. A origem dos cristais equiaxiais não está completamente esclarecida. Entretanto, vários autores citam o desprendimento de

braços dendríticos devido à convecção como a causa principal (Steube e Hellawell-1993, Hansen *et al.*-1996). Uma outra teoria considera que os cristais equiaxiais simplesmente crescem a partir de núcleos que estavam flutuando no metal líquido no início do processo (Ohno-1987). O fluxo na zona pastosa pode transportar fragmentos de dendritas para regiões super-resfriadas do metal líquido, onde eles podem crescer para formar cristais equiaxiais móveis, ou para regiões com temperaturas relativamente mais altas, onde eles podem ser refundidos e transformados em pequenos núcleos (embriões).

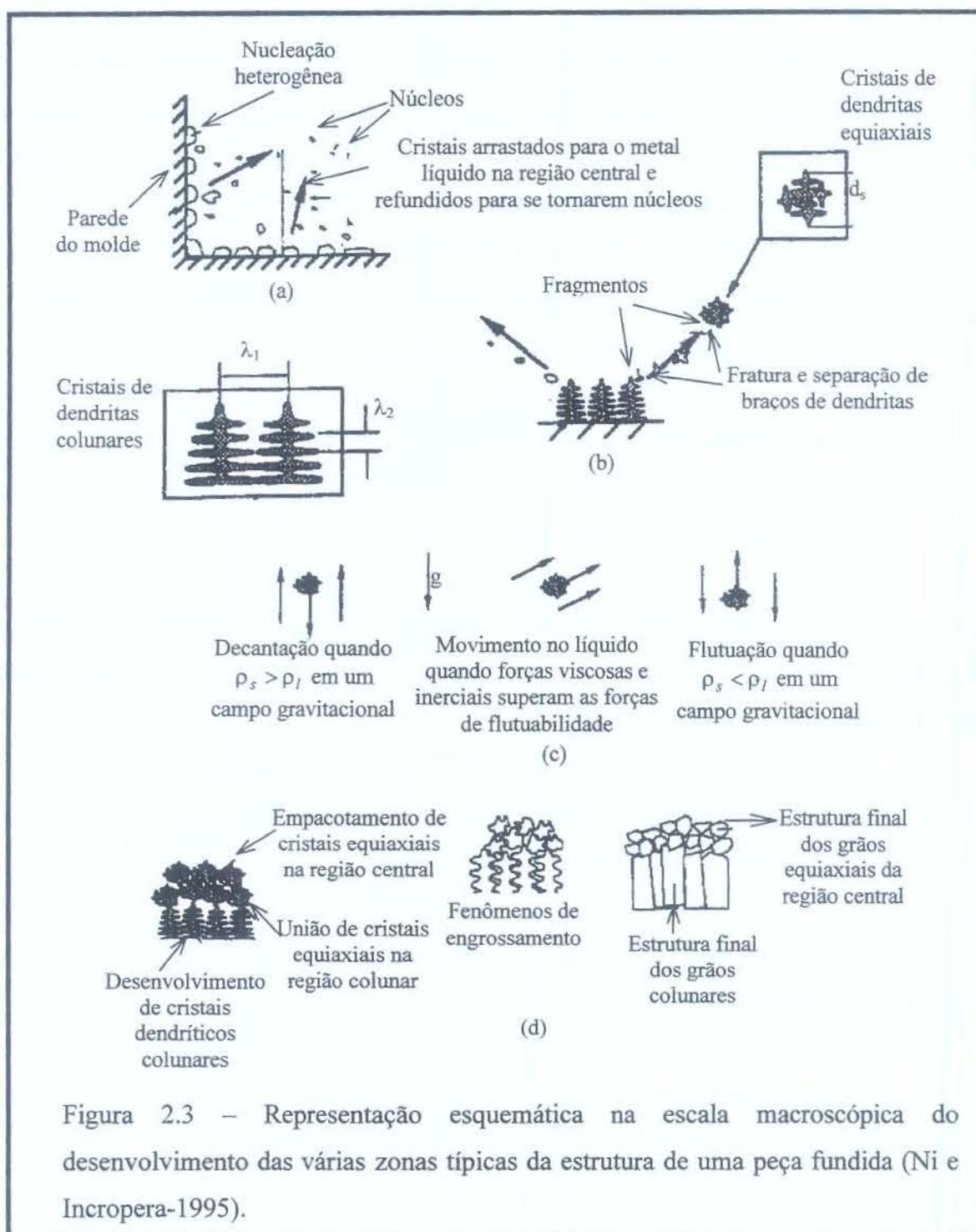
- d – Cristais equiaxiais já desenvolvidos também podem decantar, considerando um campo gravitacional, sendo acumulados nas pontas das dendritas, interrompendo assim o crescimento (avanço) das dendritas colunares, iniciando a transição colunar/equiaxial (Ni e Incropera- 1995A).

Todos os materiais metálicos contém elementos solúveis ou impurezas que devem ser redistribuídos durante a etapa de solidificação. As segregações surgem devido, fundamentalmente, aos seguintes motivos:

- a diferença de solubilidade do soluto nas fases sólida e líquida;
- a reduzida capacidade de difusão de soluto na fase sólida em comparação com a fase líquida para a maioria das ligas.

Diversos fenômenos participam na determinação do tipo de segregação formada (Lesoult e Sella-1988):

- a morfologia da interface sólido/líquido (planar, celular, dendrítica);
- o tamanho da zona pastosa;
- o movimento do líquido e dos cristais livres na zona pastosa;
- o movimento do líquido interdendrítico.



Quando o campo de variação de composição química é de curto alcance, ou seja, relativo à distâncias no máximo iguais ao tamanho de grão tem-se microsegregação (na escala da microestrutura). Quando o perfil de segregação se estende da superfície ao centro da peça, ou seja, a longo alcance, tem-se a macrosegregação (na escala da macroestrutura). Lesoult e Combeau-1995 por sua vez consideram três escalas dimensionais para classificar as segregações: microsegregação, mesossegregação e macrosegregação.

Quando se trata de um metal com um pequeno grau de impurezas, a redistribuição ocorre a partir da interface sólido/líquido, sendo que para o caso de ligas esta redistribuição termina na isoterma *solidus*. Em ambos os casos a forma de redistribuição de solutos e impurezas é fundamental para a qualidade da estrutura bruta de fundição, pois, a ocorrência de segregações geralmente compromete as propriedades mecânicas e químicas dos materiais, tais como:

- a variação de propriedades físicas e químicas ao longo do sólido em função da não homogeneidade de composição química;
- a precipitação de uma segunda fase em não equilíbrio e portanto, frágil;
- a redução da ductilidade e da resistência a tração devido a porosidades.

Por exemplo, segundo Masaoka *et al.*-1989 a macrossegregação central na direção da espessura de placas de aço obtidas por lingotamento contínuo, pode em alguns casos causar trincas em tubulações de aço para o transporte de gás devido ao ataque pelo hidrogênio ou impedir a soldagem de chapas de aço para estruturas *offshore*. Kojima *et al.*-1995 observam que as concentrações de S e P são altas nas regiões de macrossegregação central. Por esta razão, o centro de tarugos de aço apresenta um aumento da fragilidade, uma diminuição de ductilidade e a redução de outras propriedades mecânicas. De acordo com Sivesson *et al.*-1993, a macrossegregação presente na parte central de placas de aço obtidas por lingotamento contínuo é considerada como geradora de microestruturas martensíticas e/ou bainíticas durante o processo de resfriamento após a laminação, impedindo assim a homogeneidade de folhas e chapas de aço.

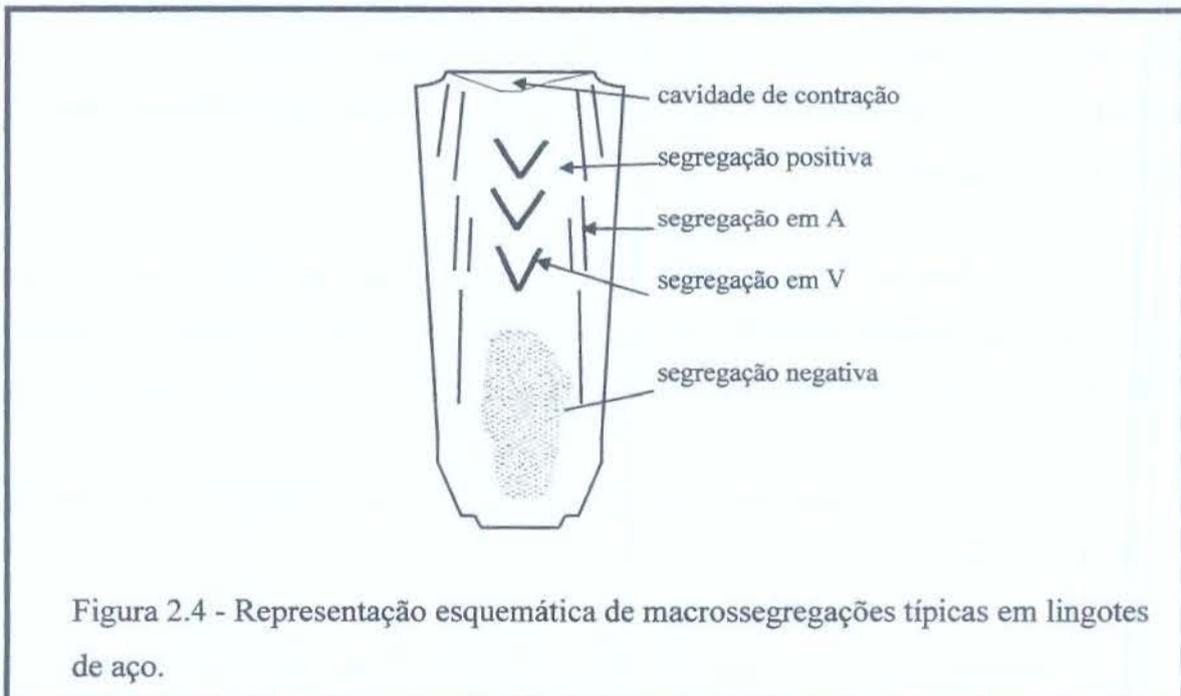
Assim, deve-se procurar minimizar a ocorrência de segregações durante a solidificação de materiais metálicos, de modo que se evite gastos adicionais com tratamentos térmicos posteriores para a diminuição das heterogeneidades de composição química.

A Figura 2.4 apresenta uma representação esquemática de macrossegregações típicas em lingotes de aço.

A formação de macrossegregações durante a solidificação de ligas metálicas é causada pelo movimento macroscópico da fase líquida e/ou da fase sólida. Considerando os processos de fundição e de lingotamento contínuo, a literatura técnica considera como forças motrizes

para o aparecimento de macrosegregações os seguintes fatores (Beckermann e Viskanta-1993, Prescott e Incropera-1994, Miyazawa e Schwerdtfeger-1981, El-Bealy-1995):

- a variação da densidade devido às transformações de fase durante a solidificação e o resfriamento;
- a variação da densidade devido às variações de temperatura e composição numa fase (convecção natural);
- a ação do campo gravitacional numa região que apresenta um gradiente de (fluxo devido força de flutuabilidade);
- forças de arraste devido a convecção no metal líquido ou devido ao movimento da fase sólida;
- forças externas tais como devido a campos magnéticos, forças centrífugas e a agitação do metal (convecção forçada);
- tensão/deformação do sólido devido a contração e/ou expansão durante a solidificação e resfriamento, pressão metalostática, *bulging* entre os rolos e flexão dos rolos;
- fluxo residual de líquido devido ao processo de preenchimento do molde;
- o surgimento de gradientes de tensão superficial na superfície livre devido a gradientes de temperatura e/ou (fluxo termo-difusivo-capilar).



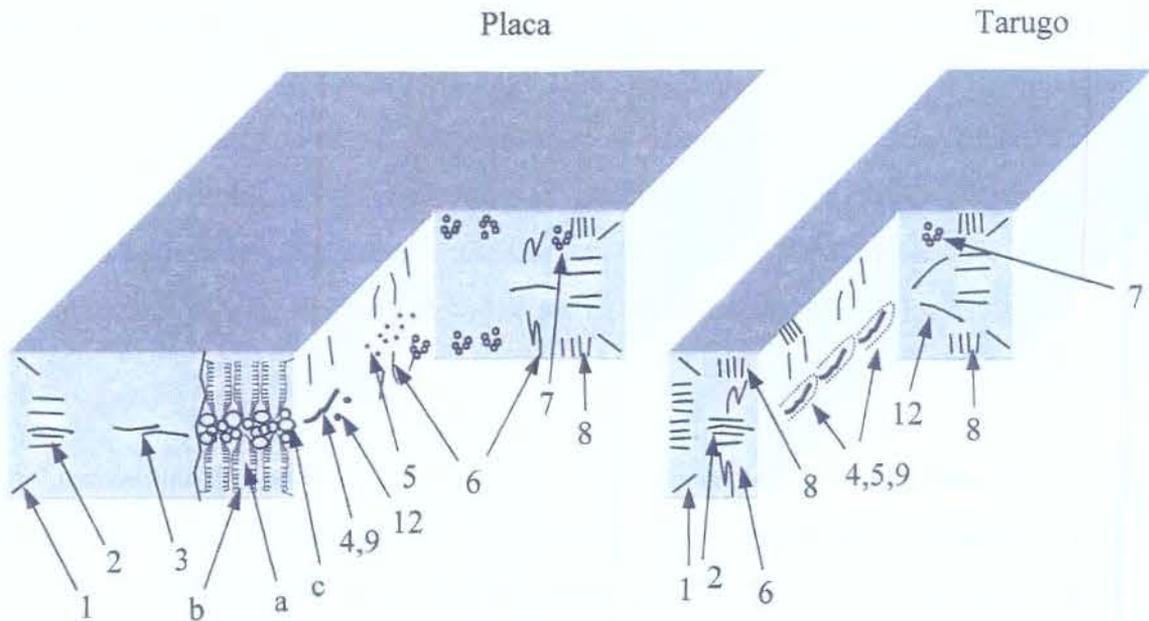
Na ausência de forças externas, os fluxos devido a flutuabilidade (*buoyancy*) são geralmente dominantes (pelo menos nas condições gravitacionais da terra). Entretanto, não é fácil quantificar e controlar tais fluxos. Nas ligas metálicas, a alteração da densidade pode ser devido tanto à temperatura quanto à concentração, de modo que a convecção devido à flutuabilidade é geralmente denominada de convecção termo-soluto ou convecção duplo-difusiva. Dependendo da orientação em relação a gravidade, as forças de flutuabilidade devido às variações térmicas e devido às variações de concentração de soluto, podem se opor ou podem se somar uma a outra.

O movimento da fase sólida, tipicamente na forma de cristais equiaxiais, pode causar particularmente uma severa macrossegregação. Ao mesmo tempo, este movimento é fundamental na formação de zonas de estrutura equiaxial, na distribuição de grãos nas regiões equiaxiais e na transição entre as zonas colunar e equiaxial. Os cristais podem ser transportados para uma região do metal líquido com diferenças de temperatura e/ou composição e podem ser parcialmente refundidos.

De acordo com Beckermann e Viskanta-1993 além dos fatores relacionados acima, a convecção devido ao fluxo de metal líquido invalida vários dos mais conhecidos modelos microscópicos de evolução de fração de sólido e de microssegregação. A convecção não apenas modifica o perfil microscópico de distribuição de soluto, mas também causa um fluxo líquido de soluto para fora ou para dentro de um elemento de volume.

Considerando o caso particular do lingotamento contínuo de produtos semi-acabados, a Figura 2.5 (Irving-1993) apresenta os principais tipos de defeitos internos característicos deste processo.

Segundo Lait e Brimacombe-1982, dependendo das dimensões do produto (tarugos ou placas) a macrossegregação central pode ser mais influenciada por fatores metalúrgicos (tarugos) ou mais influenciada por fatores mecânicos (placas).



- |  |                           |
|--|---------------------------|
| 1 – trincas internas nas quinas        | 9 – cavidade de contração |
| 2 – trincas laterais na semi-espessura | 10 – trincas diagonais    |
| 3 – trincas na região central          | 11 – <i>pinholes</i>      |
| 4 – macrossegregação na região central | 12 – mesossegregação      |
| 5 – porosidade                         | a – zona colunar          |
| 6 – trincas na semi-espessura          | b – zona coquilhada       |
| 7 – inclusões não-metálicas            | c – zona equiaxial        |
| 8 – fendas sub-superficiais            |                           |

Figura 2.5 – Representação esquemática de defeitos internos típicos de produtos semi-acabados obtidos por lingotamento contínuo (Irving-1993).

### 2.3 – Análise dos Efeitos dos Estados de Tensões e Deformações na Macrossegregação de Ligas Metálicas

Para ilustrar as discussões que se seguirão, a Figura 2.6, proposta inicialmente por Thomas-1995, apresenta um desenho esquemático do processo de lingotamento contínuo.

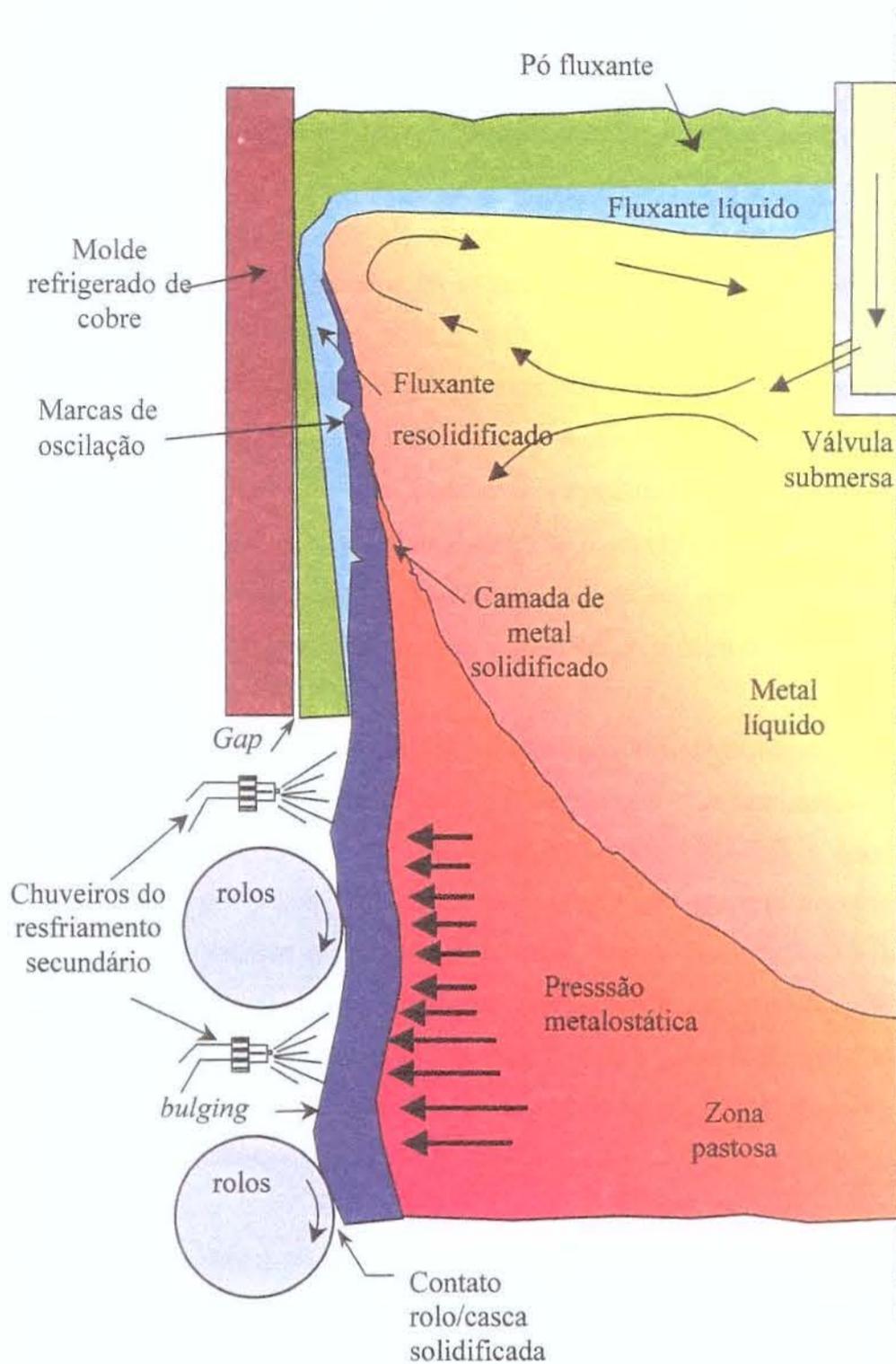


Figura 2.6 - Desenho esquemático do processo de lingotamento contínuo - não está em escala (Thomas-1995).

Uma análise dos modelos previamente utilizados para o estudo da formação de macrosegregação induzida por deformação, particularmente a macrosegregação central, demonstra a variedade de propostas apresentadas pelos pesquisadores para explicar o

fenômeno. Tais propostas podem ser criticamente analisadas considerando-se os princípios físicos e as simplificações assumidas pelos autores quando da derivação das equações correspondentes para explicar e quantificar o defeito de macrossegregação central.

Os primeiros estudos a respeito da macrossegregação central no lingotamento contínuo, enfatizavam que a contração de solidificação era a causa do problema Raihle e Fredriksson-1994, Moore-1980, Lait e Brimacombe-1982 e Irving-1993 apresentaram o mecanismo chamado de ‘mini-lingote’ (*mini-ingot*) para explicar a formação dos defeitos de macrossegregação e porosidade centrais. De acordo com estes autores, a formação de pontes entre frentes de solidificação crescendo em direções opostas no centro do esboço, praticamente isolam um poço de metal líquido. Parte do metal líquido enriquecido com soluto é dragado (sugado) das regiões interdendríticas para alimentar a contração associada com a solidificação do líquido remanescente no poço de metal líquido.

Considerando o mecanismo de ‘mini-lingote’, Moore-1980 afirma que o aumento do super-aquecimento, o decréscimo das dimensões da seção do esboço, o aumento da teor de carbono e da velocidade de lingotamento, contribuem para aumentar a extensão da zona colunar no lingotamento contínuo de aços. Disto resulta um aumento da macrossegregação axial e da porosidade central. Entretanto, simulações numéricas realizadas por Janssen *et al.*-1994, baseadas no modelo proposto por Flemings e Nereo-1967 resultaram em uma macrossegregação negativa na região central do esboço. Baseado nestes resultados Janssen *et al.*-1994 concluíram que a contração de solidificação e a variação da densidade do líquido não são causas importantes para a formação de macrossegregação central.

Miyazawa e Schwerdtfeger-1981 consideraram o efeito do movimento da fase sólida devido ao *bulging* de uma placa de aço no cálculo da macrossegregação usando uma teoria simples de flexão entre um par de rolos (Figura 2.7). Para levar em conta a compressão das dendritas na região central do esboço, os autores propuseram uma simples equação linear, considerando a velocidade da fase sólida como uma função da fração volumétrica de sólido. Os resultados apresentados pelos autores mostraram, segundo a análise dos mesmos, uma boa concordância qualitativa com resultados práticos. O pico de concentração no centro do esboço foi atribuído ao fluxo de metal líquido enriquecido de soluto em direção às regiões inferiores e ligeiramente voltado para o centro, no momento que a casca de sólido está movimentando no sentido dos rolos, na região que precede ao ponto de máximo *bulging* (Figura 2.8). A

segregação negativa existente próxima ao centro da placa ocorreu devido ao movimento do metal líquido no sentido da casca solidificada no momento que esta mesma casca está se movendo no sentido do centro da placa, após o ponto de máximo *bulging* (Figura 2.8).

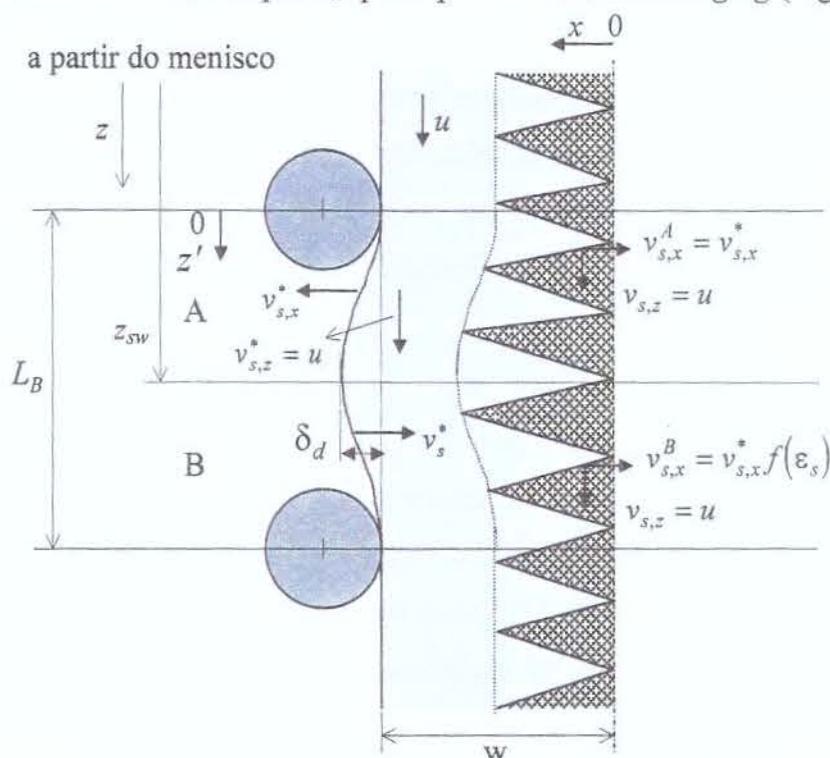


Figura 2.7 – Região do esboço com *bulging* (Miyazawa e Schwerdtfeger-1981)

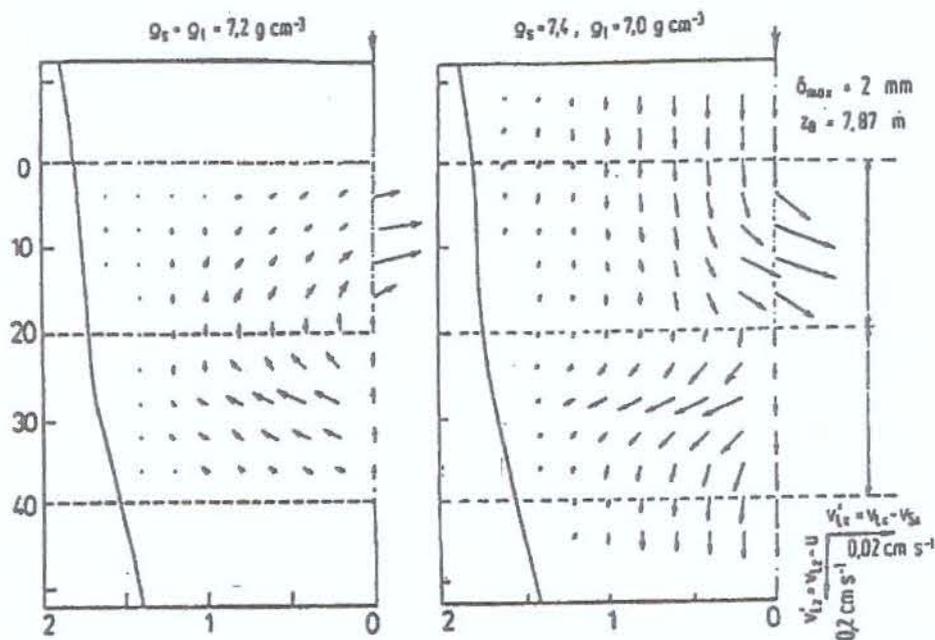


Figura 2.8 – Resultados numéricos do campo de fluxo de líquido residual numa zona pastosa obtida por Miyazawa e Schwerdtfeger-1981.

Engstrom et al.-1983, Tsuchida et al.-1984 e Raihle et al.-1993 Raihle et al.-1993 Raihle et al.-1994 estudaram a formação de macrossegregação central para o caso do

lingotamento contínuo de tarugos de aço. Nesta situação, os efeitos do *bulging* mecânico são menos pronunciados devido a menor massa dos tarugos em relação às placas. Entretanto, os efeitos da contração térmica também devem ser incluídos porque a relação entre a área de superfície e o volume é muito maior do que no caso de lingotamento contínuo de placas. Os autores consideraram que no momento que as isotermas *liquidus* se encontram no centro do esboço, a contração térmica da já solidificada casca externa pode produzir uma redução de volume na parte central do esboço que pode ser preenchida com líquido (fluxo de cima para baixo) e causar a macrossegregação central.

Para analisar este fenômeno, os autores correlacionaram a formação da macrossegregação central como uma função da relação entre a taxa de resfriamento na superfície e no centro do esboço. Quando as isotermas *liquidus* se encontram no centro do esboço, esta relação torna-se muito alta, porque o calor latente de solidificação decresce com o intervalo de solidificação, resultando no decréscimo da taxa de resfriamento no centro, e ao mesmo tempo a temperatura na superfície muda ligeiramente. Os autores citados acima apresentaram resultados que mostraram uma redução da macrossegregação através da aplicação de um resfriamento intensivo do esboço na região correspondente ao término da solidificação.

Lesoult e colaboradores (Lesoult *et al.*-1988; Lesoult *et al.*-1990) seguidos por Janssen *et al.*-1994 assumiram que as deformações, em particular as deformações internas, eram as principais causas da macrossegregação central. Para modelar tensões e deformações, os autores propuseram dividir a zona pastosa em partes, considerando uma fração de sólido de coesão (Figura 2.9).

Para a região limitada pela isoterma *solidus* (zona II), os autores assumiram a presença de tensões térmicas e a variação de volume era devido apenas a contração térmica de solidificação. A parte restante da zona pastosa (zona III) foi considerada como comportando-se como um líquido, sendo que um volume elementar não se deforma nesta região. Apenas tensões elásticas foram consideradas na região externa (zona I) e todas as outras deformações foram desprezadas. Na região central (zona IV), o volume podia variar para acomodar as deformações relativas a zona pastosa.

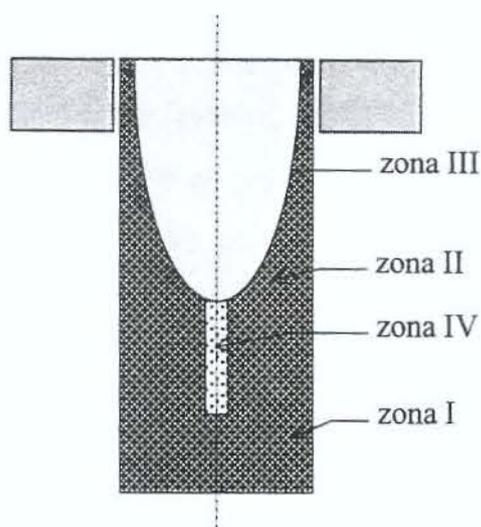


Figura 2.9 – Representação esquemática da divisão do esboço de acordo com a resistência mecânica de cada região (Lesoult *et al.*-1990).

Baseado na idéia original de Engstrom *et al.*-1983, os autores concluíram que a causa mais importante macrossegregação central era a própria mudança de volume e não o fluxo de fluido induzido pela deformação. Em outras palavras, o fluxo interdendrítico é desprezível quando comparado com o efeitos da variação de volume. Os autores também sugeriram que o modo mais efetivo de reduzir a macrossegregação central seria a aplicação de um resfriamento intensivo nos últimos estágios da solidificação do centro do tarugo. Destaca-se que no modelo matemático apresentado, as equações de conservação são resolvidas independentemente.

A deformação volumétrica devido à contração térmica foi determinada considerando a variação da densidade do sólido com a temperatura (expansão térmica). Para derivar as equações de conservação, a massa do sólido no domínio e o volume do domínio foram considerados como duas variáveis independentes por Lesoult e colaboradores (Lesoult *et al.*-1988, Lesoult *et al.*-1990). Na formulação prévia proposta por Flemings, a fração volumétrica de sólido era considerada como a única variável independente. Segundo os autores, os resultados apresentados concordavam qualitativamente com resultados experimentais para o caso de lingotamento contínuo de tarugos.

O modelo proposto por Ohnaka e Shimazu-1990 foi desenvolvido de modo similar àquele apresentado por Miyazawa e Schwerdtfeger-1981, mas com uma equação diferente para levar em conta a compressão das dendritas colunares na região central. Os autores

também concluíram que a macrossegregação positiva era causada principalmente pela variação de volume no centro do esboço. Eles resolveram um sistema de equações combinando métodos analíticos com métodos numéricos. Apesar destes autores não detalharem os métodos e materiais utilizados, os resultados parecem estar concordando com resultados experimentais

Numa série de artigos publicados, El-Bealy e Fredriksson-1991, El-Bealy-1995A, El-Bealy-1995B e El-Bealy et al.-1995 apresentaram um modelo matemático unidimensional para estudar a formação de trincas e de macrossegregação no lingotamento contínuo de aço. Os estudos desenvolvidos pelos autores consideravam três modelos básicos: um modelo térmico, um modelo de solidificação e um modelo de deformações. A metodologia empregada por El-Bealy e Fredriksson-1994 e El-Bealy et al.-1993 para analisar a formação de macrossegregação relacionada com tensões e deformações no lingotamento contínuo de placas e tarugos de aço é a mais detalhada na revisão da literatura realizada. Entretanto, estes autores não estudaram a macrossegregação central, mas sim a macrossegregação próxima a superfície dos produtos. O princípio fundamental utilizado foi considerar que para um elemento de volume, acima da temperatura de coesão, era possível haver mudança no seu volume na zona pastosa, através da mudança da área da superfície perpendicular à direção de crescimento devido a tensão interdendrítica. O modelo termo-mecânico, assumido com um modelo termo-visco-elástico, foi acoplado com um modelo de macrossegregação através da relação:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \frac{\partial A}{\partial t} / A.$$

El-Bealy e Fredriksson-1992 e El-Bealy e Fredriksson-1993 consideraram que a deformação na direção perpendicular às dendritas afeta a área de líquido interdendrítico (Figura 2.10). No caso de deformação por tração a área  $A$ , expande, o que promove a sucção de líquido enriquecido com soluto das regiões mais aquecidas para as regiões mais próximas da casca de metal já solidificado, podendo gerar uma macrossegregação positiva próxima à superfície. Os autores não apresentaram uma explanação clara e convincente sobre a relação entre a extensão da zona pastosa e a macrossegregação resultante. Uma possível explicação seria que quanto maior a largura da zona pastosa, maior o momento de flexão resultante, o que por sua vez promove um aumento na deformação por compressão.

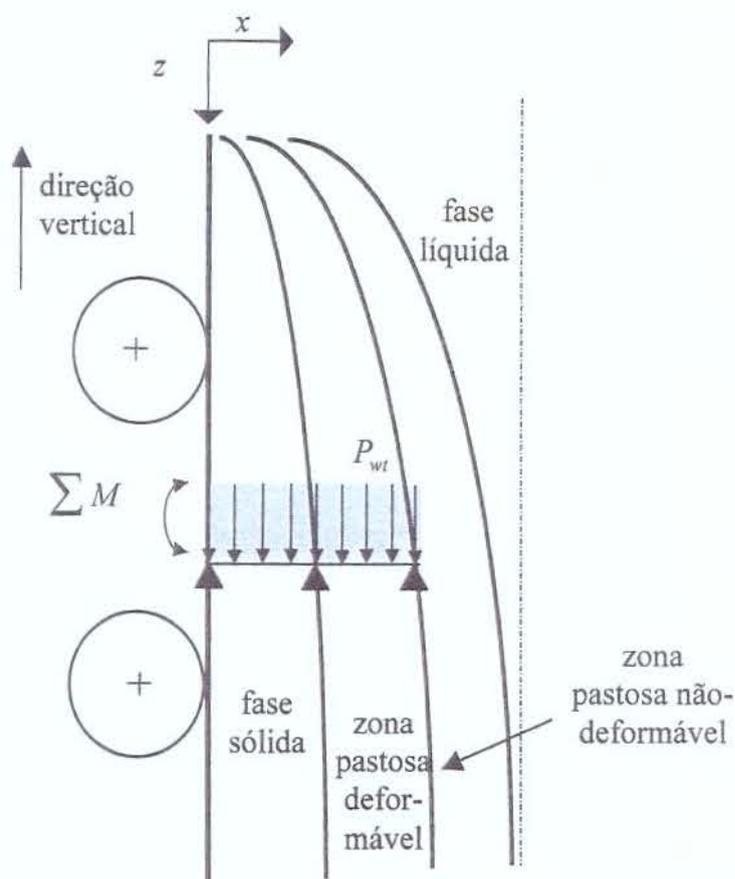


Figura 2.10 – Representação esquemática das 4 zonas que descrevem o comportamento mecânico do esboço (El-Bealy e Fredriksson-1992).

As análises da relação entre macrossegregação e os campos de tensão/deformação apresentadas por pesquisadores envolvidos diretamente com o desenvolvimento de processos nas plantas siderúrgicas, são muito mais simplificadas do que as metodologias apresentadas acima. Dentre os autores revisados incluem-se: Kojima et al.-1995, Saeki et al.-1984, Miyazawa e Ohashi-1986, Hattori et al.-1989, Ogibayashi et al.-1990, Ogibayashi et al.-1991, Sugimaru et al.-1993, Isobe et al.-1995, Ogibayashi et al.-1995, Masaoka et al.-1989, Jacobsson et al.-1992, Sakaki et al.-1995, Suzuki et al.-1992, Oh et al.-1995, Itakura et al.-1994, Tsuchida et al.-1984, Haida et al.-1984, Cristallini et al.-1994, Chiang-1989, Chiang-1994, Chiang-1995. Pode-se considerar que os autores basearam suas técnicas no estudo do movimento do líquido devido a deformação. O objetivo básico era calcular a redução de espessura necessária para que a velocidade relativa do líquido em relação ao sólido seja igual a zero. Entretanto, os principais parâmetros são baseados em dados empíricos, servindo apenas para análise e controle nos equipamentos nos quais foram levantados. Observa-se ainda que a fração de sólido calculada relativa ao centro do esboço nos estágios finais da

solidificação, é utilizada frequentemente como variável de controle do processo. A morfologia das dendritas foi considerada como um fator importante por diversos autores, sendo que a presença de uma estrutura equiaxial foi por vezes considerada como uma influência negativa ou como favorável, dependendo do autor. Um dos processos analisados foi o processo de forjamento contínuo (Bada et al.-1995, Kawaberi et al.-1995, Nabeshima et al.-1995, Shiomi et al.-1998), proposto por companhias siderúrgicas japonesas. A Figura 2.11 apresenta um desenho esquemático deste processo. Para uma análise mais detalhada dos diversos modelo, recomenda-se a consulta da referência Rizzo-1997.

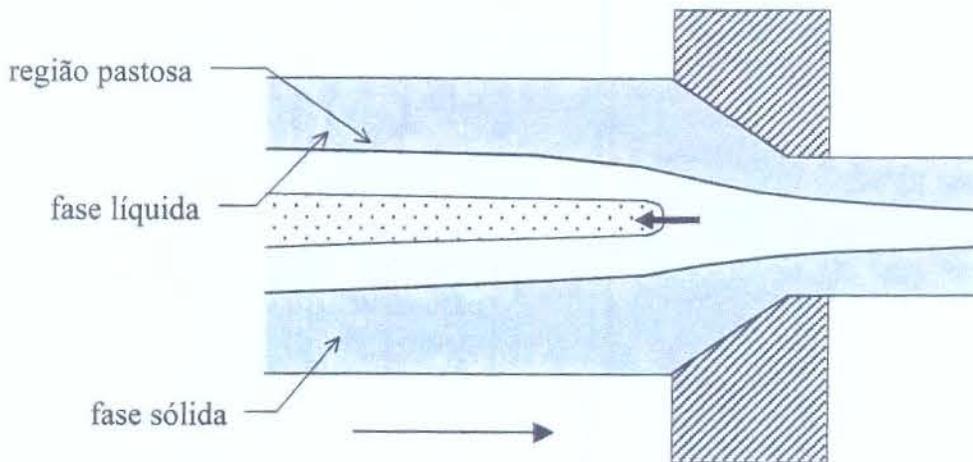


Figura 2.11 – Representação esquemática do processo de forjamento contínuo.

## CAPÍTULO 3

### PROPOSTA DE UM MODELO MATEMÁTICO PARA ANÁLISE DE SOLIDIFICAÇÃO/DEFORMAÇÃO PLÁSTICA DE LIGAS

#### 3.1 – Introdução e Objetivos

Neste capítulo serão apresentadas duas metodologias para simular a solidificação de ligas sob condições de aplicação de deformação plástica. Em primeiro lugar, considera-se um caso unidimensional onde apenas o fenômeno de condução de calor se faz presente. A seguir, será apresentado e aplicado o método de volumes ponderados no desenvolvimento de um modelo matemático. Na segunda metodologia, considera-se o caso bidimensional onde estão presentes simultaneamente os fenômenos de convecção e de difusão. Neste último modelo, é dada ênfase na incorporação de fenômenos ocorrendo em escala microscópica no modelo macroscópico de transporte de determinadas variáveis no sistema. As equações de conservação utilizadas para computar o transporte de massa, momento, calor e espécies são discretizadas considerando a aplicação do método de diferenças finitas, para o primeiro modelo, e de volumes finitos, para o segundo modelo.

Para o estudo da influência da aplicação da deformação plástica durante a solidificação, torna-se necessário a realização de uma transformação de coordenadas para a equação 2.1 apresentada anteriormente, pois, as dimensões do domínio estão variando e o mesmo está movimentando-se. Devido a complexidade e ao alto grau de não-linearidade dos fenômenos em estudo, optou-se pela realização em etapas da elaboração do modelo e da implementação computacional do mesmo. Tal metodologia apresenta a vantagem de um maior controle sobre o método numérico, facilitando a observação do efeito da alteração de determinadas variáveis na resposta dos casos simulados, sem nos envolvermos em um labirinto de complicações numéricas, que poderiam esconder e acomodar erros na resolução dos problemas, dificultando assim o acompanhamento passo a passo do fluxo do programa, distanciando-nos do objeto real em análise.

Desta forma, a transformação do sistema de coordenadas e a introdução dos padrões de deformação sugeridos para testar o modelo, serão realizados em primeiro lugar para o caso unidimensional e sem levar em conta os fenômenos de convecção.

### 3.2 - Transformação de Coordenadas para a Equação da Conservação da Energia – Caso Unidimensional e Considerando Apenas Condução

Considerando-se neste trabalho a utilização do método da entalpia, a equação 2.1 pode ser simplificada, no caso da conservação da energia e unidimensional, para a equação de condução de calor, escrita como:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (3.1)$$

onde

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \rho(T)c(T) \frac{\partial T}{\partial t} - \rho(T)L_f \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (3.2)$$

Considerando-se a realização de uma transformação de coordenadas para a equação apresentada acima, a equação da energia no caso unidimensional para um sistema de coordenadas transformado do tipo estruturado e ortogonal pode ser escrita como (Shyy et al.-1996; Maliska-1995)

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{H}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} (U'H) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \alpha_{11} J k \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) \quad (3.3)$$

Na equação acima,  $J$  representa o jacobiano,  $t$ ,  $\tau$ ,  $x$  e  $\xi$  referem-se respectivamente ao tempo no sistema de coordenadas físico, ao tempo no sistema de coordenadas transformado, às dimensões no sistema de coordenadas físico e às dimensões no sistema de coordenadas transformado. Os termos,  $\alpha_{11} = \frac{a}{J^2}$ ,  $a = \xi_x^2$ , são pertinentes à transformação de coordenadas. O termo  $U'$  representa a componente contravariante do vetor velocidade. Para um caso bidimensional do tipo condutivo-convectivo, o valor de  $U'$  seria dado por.

$$U' = uy_\eta - vx_\eta - y_\eta x_\tau + x_\eta y_\tau \quad (3.4)$$

Considerando-se que neste capítulo trata-se de um problema unidimensional e não inclui-se o fenômeno de convecção, a equação 3.4 resume-se a

$$U' = -x_\tau \quad (3.5)$$

onde  $x_\tau$  refere-se a velocidade de deslocamento da malha e pode ser calculado, para uma dada posição  $i$  e um determinado tempo  $l$ , por

$$(x_\tau)_i = \frac{(x)_i^l - (x)_i^{l-1}}{\Delta t} \quad (3.6)$$

Substituindo-se os termos dados acima na equação 3.3 obtém-se,

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{H}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} (-x_\tau H) = k \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \frac{a}{J} \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) \quad (3.7)$$

Considerando a aplicação de uma transformação de coordenadas analítica:

$$\tau = t \quad (3.8)$$

$$\xi = xA(t) \quad (3.9)$$

onde  $A(t)$  é uma função que descreve a variação das dimensões do domínio

$$a = (\xi_x)^2 = [A(t)]^2 \quad (3.10)$$

O inverso da transformação é dado por

$$x = \frac{\xi}{A(t)} \quad (3.11)$$

e as métricas da transformação são definidas como

$$\xi_x = \frac{\partial \xi}{\partial x} = A(t) \quad (3.12)$$

$$\xi_t = \frac{\partial \xi}{\partial t} = -\xi_x x_t = -A(t)x_t \quad (3.13)$$

O jacobiano da transformação é dado por

$$J = \det[\xi_x] = A(t) \quad (3.14)$$

Substituindo as equações 3.8 a 3.14 na equação 3.7 leva a seguinte forma da equação da energia

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{H}{A(t)} \right) = k \frac{\partial}{\partial \xi} \left( A(t) \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} (x_t H) \quad (3.15)$$

Aplicando a derivação parcial para os termos na equação acima

$$\begin{aligned} \frac{\frac{\partial H}{\partial \tau} A(t) - \frac{\partial A(t)}{\partial \tau} H}{[A(t)]^2} &= k A(t) \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} + k \frac{\partial A(t)}{\partial \xi} \frac{\partial T}{\partial \xi} + H \frac{\partial x_t}{\partial \xi} + x_t \frac{\partial H}{\partial \xi} \\ \frac{\partial H}{\partial \tau} A(t) - \frac{\partial A(t)}{\partial \tau} H - k [A(t)]^3 \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} - k [A(t)]^2 \frac{\partial A(t)}{\partial \xi} \frac{\partial T}{\partial \xi} \\ - H [A(t)]^2 \frac{\partial x_t}{\partial \xi} - x_t [A(t)]^2 \frac{\partial H}{\partial \xi} &= 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

O termo  $\frac{\partial x_t}{\partial \xi}$  é igual a zero porque a malha é fixa relativa ao sistema de coordenadas transformado para o caso unidimensional transiente  $(\xi, \tau)$ . Se a função  $A(t)$  não for escrita em termos de  $\xi$ , pode-se considerar que  $\frac{\partial A(t)}{\partial \xi}$  também é igual a zero.

A equação 3.16 pode ser reescrita como

$$\frac{\partial H}{\partial \tau} A(t) - \frac{\partial A(t)}{\partial \tau} H - k[A(t)]^3 \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} - x_\tau [A(t)]^2 \frac{\partial H}{\partial \xi} = 0 \quad (3.17)$$

### 3.3 – O Método dos Volumes Ponderados

Seguindo a metodologia apresentada por Hassanizadeh e Gray-1990, o desenvolvimento do método dos volumes ponderados inicia-se com uma descrição microscópica. As leis de conservação são introduzidas na escala microscópica. São assumidas certas considerações a respeito do comportamento das fases e interfaces e assim, as equações constitutivas são introduzidas na escala microscópica (por exemplo, fluido Newtoniano, difusão segundo a lei de Fick, etc.). As equações de campo resultantes são então integradas para se obter as equações de campo macroscópicas. Frequentemente, para facilitar o processo de integração e assim se obter os resultados desejados, uma série de considerações e simplificações são realizadas no processo de ‘macroscopização’. Tais simplificações são normalmente relacionadas com a distribuição temporal ou espacial de determinadas propriedades, a magnitude de determinados termos e a existência de certas relações entre as várias propriedades.

A principal vantagem do processo de macroscopização é o fato de as informações disponíveis na escala microscópica serem transferidas para a escala macroscópica. As interfaces e suas propriedades termodinâmicas são consideradas explicitamente e a microestrutura é modelada de forma mais apropriada (Hassanizadeh e Gray-1990). A desvantagem desta metodologia está no tipo de restrições impostas, especialmente aquelas que justificam a não consideração de determinados termos microscópicos e macroscópicos, podem limitar seriamente a generalização dos resultados e a oportunidade de explorar sistematicamente os fundamentos de fenômenos complexos. Além disto, a construção de uma completa teoria termodinâmica na escala macroscópica, torna-se de tratamento impossível.

Nos estudos relacionados com meios porosos (Bennon e Incropera-1987, Bear e Bachmat-1984, Ganesan e Porier-1990, Wang e Beckermann-1993), o mesmo é definido como uma porção do espaço que consiste de uma fase sólida e de espaços vazios. Estes espaços vazios são interconectados e são ocupados por uma ou mais fases de fluido, as quais

podem se deslocar através do material. No caso de processo envolvendo fenômenos de solidificação, uma zona pastosa é composta de duas fases ou mais fases, nos estados sólido e líquido, interpenetrantes. A Figura 3.1 mostra a representação esquemática de um sistema heterogêneo em várias escalas dimensionais.

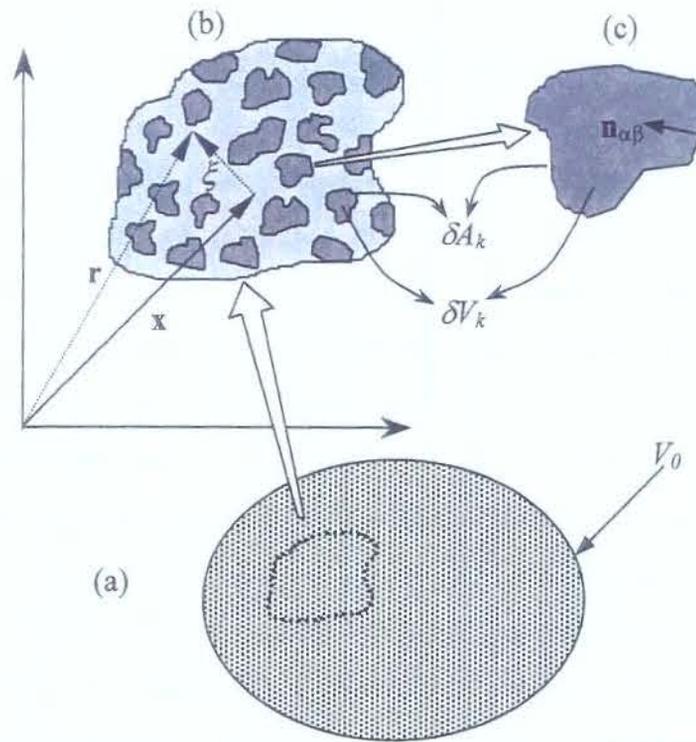


Figure 3.1 – (a) escala do sistema ou macroscópica (contínuo) (b) volume elementar representativo na escala microscópica (c) sólido contínuo em escala microscópica.

Na escala dos vazios (escala microscópica), as variáveis de fluxo (velocidade, pressão, etc.) são claramente irregulares (Nield e Bejan-1992). Entretanto, nos experimentos típicos, as variáveis de interesse são medidas sobre áreas que compreendem vários vazios. Neste caso, tem-se uma média no espaço (escala macroscópica) das variáveis, as quais mudam de uma maneira regular com respeito ao tempo e ao espaço, sendo assim passíveis de um tratamento teórico.

No emprego das metodologias de modelagem utilizadas normalmente em estudos de turbulência e de fluxo de fluidos multifásicos, como por exemplo na modelagem de fluxo de fluido através de meios porosos, o modo padrão de se derivar as leis que governam as variáveis macroscópicas consiste em iniciar a dedução com as equações padrões obedecidas pelo fluido e a seguir obter as equações macroscópica através da integração sobre elementos de volume que compreendem vários vazios.

Na metodologia de integração espacial, uma variável macroscópica é definida de modo apropriado sobre um volume elementar representativo (VER) suficientemente grande. Tal operação resulta no valor desta variável no centróide do VER. Baseado no mesmo princípio, é possível definir a correspondente área elementar representativa (AER).

A seleção do tamanho do VER para um dado domínio do meio poroso, deve ser baseada nos seguintes parâmetros (Bear e Bachmat-1984):

- o valor resultante da operação de integração deve ser independente do tamanho e da forma do VER;
- o valor da variável após integração deve ser contínuo e diferenciável no tempo e no espaço tantas vezes quanto seja necessário;
- considerando  $l$  como o comprimento característico do volume  $V$  e:

$$d \ll l \ll L$$

onde  $d$  é o comprimento característico do sólido e  $L$  é o comprimento característico macroscópico do domínio do meio.

Geralmente, o elemento de volume é menor do que o necessário para resolver as equações de fluxo, mas grande o bastante para conter os componentes distintos de sólido e líquido.

Segundo Bear e Bachmat-1984, o valor das variáveis de estado associadas a um ponto  $\mathbf{x}$  em um contínuo, ou no nível macroscópico de descrição, são integrações realizadas sobre um VER ou AER, centrada em  $\mathbf{x}$ . O meio poroso é um sistema multifásico onde as fases são denotadas por  $k = 1, 2, 3, \dots, N$ . No tempo  $t$ , cada fase ocupa um volume  $V_k$  no volume  $V_0$  com uma fração volumétrica  $\phi_k$ :

$$V_0 = \sum_{k=1}^N V_k \quad \phi_k = \frac{V_k(\mathbf{x}, t)}{V_0} \quad \sum_{k=1}^N \phi_k = 1$$

$$V_k = \sum \delta V_k \quad A_k = \sum_{j, j \neq k} \delta A_{kj}$$

o vetor de posição  $\mathbf{x}$  refere-se ao centróide de  $V_k$ .

Pode-se definir uma função de distribuição de  $X_k$  como:

$$\begin{aligned} X_k &= X_k(\mathbf{r}, t) \quad X_k = 1 \text{ quando } \mathbf{r} \text{ está no interior de } V_k \\ X_k &= 0 \text{ quando } \mathbf{r} \text{ está fora de } V_k \end{aligned}$$

Assim, obtém-se:

$$\begin{aligned} V_k(x) &= \int_V X_k(\mathbf{x} + \mathbf{r}) dV(\xi) = \int_V dV_k(\xi) \\ &= \int_{V_k} dV_k(\xi) \equiv \int_{V_k} dV_k(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (3.18)$$

onde  $\xi = \mathbf{r} - \mathbf{x}$  é o vetor posição de um ponto com respeito ao ponto  $\mathbf{x}$ .

No modelo de volumes ponderados, cada fase é descrita microscopicamente com as variáveis usuais (Ganesan e Porier-1990), as quais são contínuas na fase mas são descontínuas sobre o espaço total. Na escala microscópica, as equações de conservação normalmente utilizadas, junto com as condições de interface apropriadas, descrevem o estado de um sistema. A solução destas equações na escala microscópica não é viável por causa do alto grau de complexidade da geometria das interfaces entre as fases numa zona pastosa no caso de solidificação de ligas metálicas. Assim, a escala na qual o sistema é descrito é alterada pela macroscopização (integração) das equações microscópicas sobre um dado VER. Isto resulta numa série de equações macroscópicas que podem ser utilizadas para resolver problemas práticos.

Considera-se que não existe nenhuma descontinuidade de superfície no corpo. Esta consideração será denominada, como proposto por Hassanizadeh e Gray-1979, a condição de lisura (*smoothness*). No caso de heterogeneidades macroscópicas, a mesma metodologia de integração, da escala microscópica para a escala macroscópica pode ser aplicada para integrar de um nível macroscópica para um nível megascópico. Neste caso, tem-se uma integração de segunda ordem (Bear e Bachmat-1991).

Qualquer quantidade microscópica  $\Psi$  (que pode ser entalpia, velocidade, etc.), possui um valor macroscópico, isto é, seu valor ponderado pelo volume, numa fase  $k$ , e é definido como o valor ponderado no volume para a fase, fornecido pela equação (Bear e Bachmat-1991, Hassanizadeh-1987, Hassanizadeh e Gray-1979, , Gray e O'Neill-1976, Whitaker-1986, Drew-1983, Bear e Pinder-1978):

$$\langle \Psi_k \rangle(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \Psi_k(\mathbf{r}, t) X_k(\mathbf{r}, t) dv \quad (3.19)$$

e  $\langle \Psi_k \rangle$  é conhecido (Nield e Bejan-1992) como o operador de integração ou ponderação de fase de uma determinada quantidade  $\Psi_k$ .

Define-se ainda a variável valor ponderado volumétrico e intrínseco para uma fase (Bear e Bachmat-1991) como:

$$\langle \Psi_k \rangle^k(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{V_{0k}(\mathbf{x}, t)} \int_{V_{0k}(\mathbf{x}, t)} \Psi_k(\mathbf{r}, t) X_k(\mathbf{r}, t) dv \quad (3.20)$$

$$\frac{1}{V_{0k}(\mathbf{x}, t)} \int_{V_{0k}(\mathbf{x}, t)} \Psi_k(\mathbf{r}, t) dv_k$$

Observa-se que:

$$\langle \Psi_k \rangle^k(\mathbf{x}, t) = \frac{\langle \Psi_k \rangle}{\phi_k} \quad (3.21)$$

$$\langle \Psi_k \rangle(\mathbf{x}, t) = \phi_k \langle \Psi_k \rangle^k(\mathbf{x}, t) \quad (3.22)$$

$$\phi_k = \frac{V_{0k}}{V_0} \quad (3.23)$$

O valor ponderado para a área (Bear e Bachmat-1991, Hassanizadeh e Gray-1979):

$$\tilde{\Psi}_k(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{A_0} \int_{A_{0k}(\mathbf{x}, t)} \mathbf{f}_k(\mathbf{r}, t) da \quad (3.24)$$

e o valor ponderado intrínseco para a área (Bear e Bachmat-1991)

$$\tilde{\Psi}_k^k(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{A_{0k}^k} \int_{A_{0k}^k(\mathbf{x})} \mathbf{f}_k(\mathbf{r}, t) da \quad (3.25)$$

$$\tilde{\Psi}_k = \theta_k^A \tilde{\Psi}_k^k \quad (3.26)$$

onde  $\theta_k^A$  é a fração de área (Bear e Bachmat-1991).

O valor ponderado para a massa (Hassanizadeh e Gray-1979, Bear e Bachmat-1991, Drew-1983) como:

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}_k(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{\langle \rho_k \rangle(\mathbf{x}, t) V_0} \int_{V_0} \rho_k(\mathbf{r}, t) \Psi_k(\mathbf{r}, t) X_k(\mathbf{r}, t) dv \\ &= \frac{1}{\langle \rho \rangle^k(\mathbf{x}, t) V_{0k}} \int_{V_{0k}} \rho_k(\mathbf{r}, t) \Psi_k(\mathbf{r}, t) X_k(\mathbf{r}, t) dv_k \end{aligned} \quad (3.27)$$

onde  $\langle \rho \rangle^k$  = densidade de massa intrínseca para uma fase  $k$  (Bear e Bachmat-1991)

e os componentes flutuantes (*fluctuating components*) são definidos como:

$$\hat{\Psi}_k = (\Psi_k - \langle \Psi_k \rangle^k) X_k \quad (3.28)$$

Define-se também (Nield e Bejan-1992):

- valor ponderado do produto de duas variáveis (Beckermann e Viskanta-1993, Nield e Bejan-1992)  $\Psi_k$  e  $\chi_k$ :

$$\langle \Psi_k \chi_k \rangle^k = \langle \Psi_k \rangle^k \langle \chi_k \rangle^k + \langle \hat{\Psi}_k \hat{\chi}_k \rangle^k \quad (3.29)$$

$$\langle \Psi_k \chi_k \rangle = \phi_k \langle \Psi_k \rangle^k \langle \chi_k \rangle^k + \langle \hat{\Psi}_k \hat{\chi}_k \rangle \quad (3.30)$$

- o teorema de transporte:

$$\frac{1}{V_0} \int_{V_0} \frac{\partial (\Psi_k)}{\partial t} X_k dV = \frac{1}{V_0} \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_0} (\rho_k \mathbf{v}_k) X_k dV - \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{w}_k) \cdot \mathbf{n}^{kj} dA \quad (3.31a)$$

$$\left\langle \frac{\partial \Psi_k}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle}{\partial t} - \frac{1}{V_0} \int_{A_k} \Psi_k \mathbf{w}_k \cdot \mathbf{n}_k dA \quad (3.31b)$$

$\mathbf{w}_k$  = vetor velocidade da interface

$\mathbf{n}_k$  = vetor unitário normal a interface e dirigido para fora desta

- O teorema da ponderação:

$$\langle \nabla \Psi_k \rangle = \nabla \langle \Psi_k \rangle + \frac{1}{V_0} \int_{A_k} \Psi_k \mathbf{n}_k dA \quad \text{ou} \quad \langle \nabla \Psi_k \rangle = \phi_k \nabla \langle \Psi_k \rangle + \frac{1}{V_0} \int_{A_k} \hat{\Psi}_k \mathbf{n}_k dA \quad (3.32)$$

$$A_k = \sum_{j, j \neq k} A_{kj} \quad j = \text{outras fases} \quad (3.33)$$

Devido ao processo de ponderação, surgem integrais sobre as áreas interfaciais nas equações para levar em conta as interações da fase  $k$  com outras fases (Ni e Beckermann-1991). Infelizmente, os termos interfaciais ou de interação entre as fases assim como os fluxos dispersivos vão requerer novos modelos, porque as variáveis microscópicas nas quais estes são baseados não são conhecidas a partir da solução das equações macroscópicas. Determinadas informações podem ser perdidas no processo de ponderação (macroscopização). A modelagem dos referidos termos para um sistema em solidificação, requer a postulação de relações constitutivas e uma análise formal do sistema em questão.

A aplicação das equações apresentadas acima para as equações de conservação microscópicas ('exatas') para uma fase  $k$  (integração das equações microscópicas), resulta nas equações macroscópicas de conservação de massa, energia, espécie e momento, para cada fase sobre um volume  $V_k$ , e nas equações em um conjunto de equações macroscópicas relativas às propriedades interfaciais (Hassanzadeh e Gray-1990).

Nas equações que serão apresentadas a seguir, por simplicidade, não são incluídos (Ni e Beckermann-1991):

- dissipação de calor viscoso (*viscous heat dissipation*);
- trabalho de compressão;
- fontes de energia volumétricas;
- fontes de espécies.

A princípio, tais considerações podem parecer apropriadas para a maioria dos problemas de solidificação na prática. Entretanto, algumas destas simplificações podem ser retiradas se tal se tornar necessário para determinados problemas

Considera-se também que a correlação entre os componentes flutuantes  $\rho_k$  e  $\Psi_k$ , isto é,  $\langle \hat{\rho}_k \hat{\Psi}_k \rangle$ , é igual a zero. A única fonte interfacial que é assumida estar presente é a fonte de momento interfacial devido a tensão superficial  $M_i$  (Ni e Beckermann-1991).

Em problemas de convecção natural (Bejan-1993), a distribuição de velocidade e de temperatura devem ser determinadas simultaneamente (a distribuição de temperatura influencia o efeito da flutuabilidade que direciona o fluxo, que por sua vez afeta a distribuição de temperatura), utilizando o princípio de conservação de massa, as equações de momento e a primeira lei da termodinâmica.

As equações apresentadas acima serão aplicadas a seguir para a ‘macroscopização’ das equações de conservação de massa, momento, energia e espécies.

### 3.4 – A Equação de Conservação de Massa

A equação microscópica de conservação de massa para uma dada fase é:

$$\frac{\partial(\rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{v}_k) = 0 \quad (3.34)$$

A respectiva equação macroscópica é:

$$\frac{\partial(\phi_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle) = \Gamma_k \quad (3.35)$$

Na derivação da equação 3.35, considerou-se que a densidade microscópica é constante (Hassanizadeh e Gray-1979), o que implica que  $\langle \rho_k \rangle^k = \rho_k$  e  $\langle \rho_k \rangle = \phi_k \rho_k$ .

A equação macroscópica da mistura (para  $\langle \mathbf{v}_s \rangle^s \neq 0$ ) é:

$$\frac{\partial(\phi_l \rho_l)}{\partial t} + \frac{\partial(\phi_s \rho_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l) + \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) = 0 \quad (3.36)$$

$$\sum_k \Gamma_k = 0 ; (\Gamma_s = \Gamma_l = \Gamma) \quad (3.37)$$

### 3.5 - Equação de Conservação de Momento Linear

#### 3.5.1 – Equacionamento geral

Considera-se em primeiro lugar uma determinada fase  $k$  como um material multi-componente, composto de  $N$  espécies diferentes. Assumindo que as espécies são compostas de fases que são misturadas no nível molecular (atômico) de forma que as mesmas podem ser consideradas como um contínuo (ainda na escala microscópica) de  $N$  espécies miscíveis. A conservação do momento linear para uma dada espécie  $\alpha$  ( $\alpha = 1$  a  $N$ ) na escala microscópica, assumida como um contínuo na escala microscópica, toma a forma da equação diferencial apresentada a seguir (Bear e Bachmat-1991, Hassanizadeh e Gray-1979, Hassanizadeh-1987, Drew-1983, Ishii-1990):

$$\frac{\partial(\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha \mathbf{v}_\alpha) + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_\alpha + \rho_\alpha \mathbf{b}_\alpha + \rho_\alpha (\mathfrak{g}_\alpha \mathbf{v}_\alpha + \varphi_\alpha) \quad (3.38)$$

(a)                      (b)                      (c)                      (d)                      (e)

onde:

(a) = taxa de acumulação de momento,

(b) = taxa de momento ganho por advecção<sup>1</sup>,

(c) = taxa de momento ganho por transferência de momento difusivo,

(d) = taxa de momento fornecido externamente por forças de corpo,

(e) = fornecimento de momento por geração interna do mesmo,

$\sigma_\alpha$  = tensor microscópico parcial de tensão de Cauchy (ou simplesmente tensor de tensão) para as espécies  $\alpha$  exteriores a um diafragma, para as espécies  $\alpha$  interiores ao diafragma, através da superfície do diafragma (Hassanizadeh-1987), isto é, o tensor que representa o fluxo difusivo de momento carregados pelas moléculas da fase,

$\mathbf{b}_\alpha$  = forças de corpo por unidade de volume (gravitacional, elétricas, magnéticas, etc)

$\mathbf{v}_\alpha$  = velocidade média ponderada pela massa das moléculas da espécie  $\alpha$  (Hassanizadeh-1987, Bear e Bachmat-1991), isto é, o campo de velocidades do material presente no ponto espacial  $\mathbf{r}$  onde esta equação é válida (Hassanizadeh e Gray-1979).

$\vartheta_\alpha$  = taxa de produção líquida de massa da espécie  $\alpha$  como resultado de reações químicas (homogêneas) com outras espécies e também com processos de produção/decaimento (Hassanizadeh-1987, A685);

$\varphi_\alpha$  = forças de corpo internas exercidas sobre a espécie  $\alpha$  por todas as outras espécies coexistindo com  $\alpha$  no mesmo diafragma (força difusiva) (Atkin-1976);

Na derivação da equação acima, foi considerado que todas as espécies são microscopicamente não-polares, de forma que todos os tensores parciais de tensão são simétricos (Hassanizadeh-1987). Se considerarmos que não existe nenhuma reação química entre as espécies, não haverá nenhuma ação e contra-reação e assim, não ocorrerá produção líquida ou decaimento das correspondentes propriedades da fase  $k$ , satisfazendo a seguinte restrição (Atkin-1976):

$$\sum_{\alpha=1}^N \rho_\alpha (\vartheta_\alpha \mathbf{v}_\alpha + \varphi_\alpha) = 0 \quad (3.39)$$

<sup>1</sup> A advecção é o transporte de calor através do movimento macroscópico do fluido. A associação da advecção com a transferência de calor pelo movimento randômico das moléculas é denominado de convecção.

Desta forma, o momento é conservado para um contínuo. isto é, para uma  $k$ , na escala microscópica e, se a gravidade for a única força de corpo, a equação 3.38 pode ser escrita como (Ganesan e Porier-1990):

$$\frac{\partial (\rho_k \mathbf{v}_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_k + \mathbf{g} \rho_k \nabla_z = 0 \quad (3.40)$$

onde  $\mathbf{g}$  denota a aceleração da gravidade e  $\nabla_z$  denota o vetor unitário na direção vertical (Bear e Bachmat-1991).

Se considerarmos a condição de salto (*jump*) na interface, (Ishii-1990, Drew-1983 , tem-se na escala microscópica:

$$\sum_{k=l,s} [\rho_k \mathbf{v}_k (\mathbf{w}_k - \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{n}^k - \boldsymbol{\sigma}_k \cdot \mathbf{n}^k] = \sigma^* \kappa \mathbf{n} \quad (3.41)$$

onde:

$\sigma^*$  = tensão superficial

$\kappa$  = curvatura média da interface

Multiplicando a equação 3.41 pela função de distribuição de fase  $X_k$  e integrando sobre o volume elementar representativo (VER) e dividindo o resultado pelo volume  $V_0$ , isto é, ponderando sobre  $V_0$ :

$$\frac{1}{V_0} \int_{V_0} \frac{\partial (\rho_k \mathbf{v}_k)}{\partial t} X_k d\mathbf{v} + \frac{1}{V_0} \int_{V_0} [\nabla \cdot (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k)] X_k d\mathbf{v} - \frac{1}{V_0} \int_{V_0} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_k) X_k d\mathbf{v} - \frac{1}{V_0} \int_{V_0} (\rho_k \mathbf{g} \nabla_z) X_k d\mathbf{v} = 0 \quad (3.42)$$

Aplicando o teorema de transporte para o primeiro termo do lado esquerdo da equação 3.42,

$$\frac{1}{V_0} \int_{V_0} \frac{\partial (\rho_k \mathbf{v}_k)}{\partial t} X_k d\mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{V_0} \int_{V_0} (\rho_k \mathbf{v}_k) X_k d\mathbf{v} \right) - \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{w}_k) \cdot \mathbf{n}^{kj} da \quad (3.43)$$

Considerando:

$$\tilde{\mathbf{v}}_k = \frac{1}{\langle \rho_k \rangle} \frac{1}{V_0} \int (\rho_k \mathbf{v}_k) X_k d\mathbf{v} \quad (3.44)$$

$$\frac{\langle \rho_k \rangle}{\langle \rho_k \rangle} \frac{1}{V_0} \int (\rho_k \mathbf{v}_k) X_k d\mathbf{v} = \langle \rho_k \rangle \tilde{\mathbf{v}}_k \quad (3.45)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \int (\rho_k \mathbf{v}_k) X_k d\mathbf{v} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\langle \rho_k \rangle}{\langle \rho_k \rangle} \int (\rho_k \mathbf{v}_k) X_k d\mathbf{v} \right) = \langle \rho_k \rangle \tilde{\mathbf{v}}_k \quad (3.46)$$

Assim a equação 3.43 pode ser escrita como:

$$\frac{1}{V_0} \int \frac{\partial (\rho_k \mathbf{v}_k)}{\partial t} X_k d\mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho_k \rangle \tilde{\mathbf{v}}_k) - \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{w}_k) \cdot \mathbf{n}^{kj} da \quad (3.47)$$

Aplicando o teorema da divergência de Gauss, ou simplesmente teorema de Gauss (Bear e Bachmat-1991, Hassanizadeh e Gray-1979) para o segundo termo do lado esquerdo da equação 3.42:

$$\frac{1}{V_0} \int \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) X_k d\mathbf{v} = \frac{1}{A_0} \int (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) \cdot X_k \mathbf{n} da + \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{n}^{kj} da \quad (3.48)$$

Considerando que (Hassanizadeh e Gray-1979):

$$\frac{1}{A_0} \int (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) X_k \cdot \mathbf{n} da = \frac{1}{V_0} \nabla \cdot \int (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) X_k d\mathbf{v} = \frac{1}{V_0} \int \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) X_k d\mathbf{v} \quad (3.49)$$

Assim, a equação 3.49 pode ser escrita como (Bear e Bachmat-1991):

$$\frac{1}{V_0} \int \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) X_k d\mathbf{v} = \frac{1}{V_0} \nabla \cdot \int (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) X_k d\mathbf{v} + \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{n}^{kj} da \quad (3.50)$$

Considerando o desvio (*deviation*) para uma variável microscópica  $f$  no ponto  $\mathbf{r}$  a partir do seu valor ponderado pela massa para a fase  $k$  no ponto  $\mathbf{x}$  (Hassanizadeh e Gray-1979, Bear e Bachmat-1991, Ni e Beckermann-1991), ou seja, a ponderação do produto:

$$\hat{\psi}_k = (\psi_k - \langle \psi_k \rangle^k) X_k \quad (3.51)$$

$$\hat{f}_k(x, \xi, t) = f_k(x, \xi, t) - \bar{f}_k(x, \xi, t) \quad (3.52)$$

Aplicando ao primeiro termo do lado direito da equação 3.50:

$$\frac{1}{V_0} \nabla \cdot \int_{V_0} (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) X_k dv = \frac{1}{V_0} \nabla \cdot \int_{V_0} (\rho_k \hat{\mathbf{v}}_k \hat{\mathbf{v}}_k) X_k dv + \frac{1}{V_0} \nabla \cdot \int_{V_0} (\rho_k \tilde{\mathbf{v}}_k \tilde{\mathbf{v}}_k) X_k dv \quad (3.53)$$

e empregando o princípio da equação 3.49:

$$\frac{1}{V_0} \nabla \cdot \int_{V_0} (\rho_k \hat{\mathbf{v}}_k \hat{\mathbf{v}}_k) X_k dv = \frac{1}{A_0} \int_{A_0} (\rho_k \hat{\mathbf{v}}_k \hat{\mathbf{v}}_k) X_k \cdot \mathbf{n} da \quad (3.54)$$

e observando que  $\tilde{\psi}_k$  é constante com o volume ponderado,

$$\frac{1}{V_0} \nabla \cdot \int_{V_0} (\rho_k \tilde{\mathbf{v}}_k \tilde{\mathbf{v}}_k) X_k dv = \frac{1}{V_0} \nabla \cdot \left( \tilde{\mathbf{v}}_k \tilde{\mathbf{v}}_k \int_{V_0} \rho_k X_k dv \right) \quad (3.55)$$

com:

$$\langle \rho_k \rangle = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \rho_k X_k dv \quad (3.56)$$

Assim, a equação 3.50 torna-se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V_0} \nabla \cdot \int_{V_0} (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) X_k dv &= \frac{1}{A_0} \int_{A_0} (\rho_k \tilde{\mathbf{v}}_k \tilde{\mathbf{v}}_k) X_k \cdot \mathbf{n} da + \frac{1}{V_0} \nabla \cdot \left( \tilde{\mathbf{v}}_k \tilde{\mathbf{v}}_k \int_{V_0} \rho_k X_k dv \right) + \\ &\frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{n}^{kj} da \end{aligned} \quad (3.57)$$

Aplicando novamente o teorema da divergência de Gauss (Bear e Bachmat-1991, Hassanizadeh e Gray-1979) para o terceiro termo do lado esquerdo da equação 3.42 :

$$-\frac{1}{V_0} \int_{V_0} (\nabla \cdot \sigma_k) X_k dv = -\frac{1}{A_0} \int_{A_0} \sigma_k \cdot \mathbf{n} X_k da - \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} \sigma_k \cdot \mathbf{n}^{kj} da \quad (3.58)$$

onde a seguinte relação foi aplicada (Hassanizadeh e Gray-1979):

$$\frac{1}{V_0} \int_{V_0} \nabla \cdot (\sigma_k X_k) dv = \nabla \cdot \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \sigma_k X_k dv = \frac{1}{A_0} \int_{A_0} \sigma_k \cdot X_k \mathbf{n} da \quad (3.59)$$

Substituindo as equações 3.47, 3.57 e 3.58 na equação 3.42 (Hassanizadeh e Gray-1979, Bear e Bachmat-1991, Bear e Pinder-1978):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho_k \rangle \tilde{\mathbf{v}}_k) - \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{w}_k) \cdot \mathbf{n}^{kj} da + \frac{1}{A_0} \int_{A_0} (\rho_k \hat{\mathbf{v}}_k \hat{\mathbf{v}}_k) \cdot \mathbf{n} X_k da + \frac{1}{V_0} \nabla \cdot \left( \tilde{\mathbf{v}}_k \tilde{\mathbf{v}}_k \int_{V_0} \rho_k X_k dv \right) \\ + \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} (\rho_k \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{n}^{kj} da - \frac{1}{A_0} \int_{A_0} \sigma_k \cdot \mathbf{n} X_k da - \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} \sigma_k \cdot \mathbf{n}^{kj} da + \frac{1}{V_0} \int_{V_0} (\rho_k g \nabla z) X_k dv = 0 \end{aligned} \quad (3.60a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho_k \rangle \tilde{\mathbf{v}}_k) + \frac{1}{V_0} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}_k \tilde{\mathbf{v}}_k \int_{V_0} \rho_k X_k dv - \frac{1}{A_0} \int_{A_0} \sigma_k \cdot \mathbf{n} X_k da + \frac{1}{A_0} \int_{A_0} (\rho_k \hat{\mathbf{v}}_k \hat{\mathbf{v}}_k) \cdot \mathbf{n} X_k da + \frac{1}{V_0} \int_{V_0} (g \nabla z) X_k dv \\ - \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} \rho_k \mathbf{v}_k (\mathbf{w}_k - \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{n}^{kj} da - \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} \sigma_k \cdot \mathbf{n}^{kj} da = 0 \end{aligned} \quad (3.60b)$$

utilizando a relação  $\langle \rho_k \rangle = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \rho_k X_k dv$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho_k \rangle \tilde{\mathbf{v}}_k) + \nabla \cdot \langle \rho_k \rangle \tilde{\mathbf{v}}_k \tilde{\mathbf{v}}_k - \frac{1}{A_0} \int_{A_0} \sigma_k \cdot \mathbf{n} X_k da + \frac{1}{A_0} \int_{A_0} (\rho_k \hat{\mathbf{v}}_k \hat{\mathbf{v}}_k) \cdot \mathbf{n} X_k da + \frac{1}{V_0} \int_{V_0} (\rho_k g \nabla z) X_k dv \\ \text{(a) \quad (b) \quad (c) \quad (d) \quad (e)} \\ - \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} \rho_k \mathbf{v}_k (\mathbf{w}_k - \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{n}^{kj} da - \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} \sigma_k \cdot \mathbf{n}^{kj} da = 0 \\ \text{(f) \quad (g)} \end{aligned} \quad (3.61a)$$

ou

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho_k \rangle \tilde{v}_k &+ \nabla \cdot \langle \rho_k \rangle \tilde{v}_k \tilde{v}_k - \nabla \cdot \langle \sigma_k \rangle + \nabla \cdot \langle \rho_k \hat{v}_k \hat{v}_k \rangle + \langle \rho_k g \nabla z_k \rangle \\ &\quad \text{(a)} \quad \text{(b)} \quad \text{(c)} \quad \text{(d)} \quad \text{(e)} \\ - \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} \rho_k \mathbf{v}_k (\mathbf{w}_k - \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{n}^{kj} da &- \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} \sigma_k \cdot \mathbf{n}^{kj} da = 0 \\ &\quad \text{(f)} \quad \text{(g)} \end{aligned} \tag{3.61b}$$

onde (Bear e Bachmat-1991),

- (a) taxa de aumento de  $\langle \rho_k \rangle \tilde{v}_k$  no meio poroso;
- (b) fluxo macroscópico líquido de  $\langle \rho_k \rangle \tilde{v}_k$  por advecção;
- (c) fluxo líquido de  $\langle \rho_k \rangle \tilde{v}_k$  por difusão – (c) e (d) são fluxos macroscopicamente não convectivos da propriedade  $\langle \rho_k \rangle \tilde{v}_k$  ou  $\tilde{v}_k$ ) (Hassanizadeh e Gray-1979);
- (d) o fluxo de  $\langle \rho_k \rangle \tilde{v}_k$  em excesso da advecção média de  $\langle \rho_k \rangle \tilde{v}_k$  pela fase (fluxo dispersivo);
- (e) quantidade de  $\langle \rho_k \rangle \tilde{v}_k$  gerado por fontes de  $\langle \rho_k \rangle \tilde{v}_k$  dentro de  $V_{0k}$  por unidade de volume do meio poroso e por unidade de tempo;
- (f) quantidade de  $\langle \rho_k \rangle \tilde{v}_k$  entrando na fase através da interface superficial  $A_{jk}$  da fase no volume  $V_0$ ,  $V_{0k}$  por unidade de volume do meio poroso e por unidade de tempo, por advecção com respeito a (possivelmente se móvel) superfície  $A_{jk}$  (Bear e Bachmat-1991) - transporte entre fases assim como mudança de estado – leva em conta a troca total das propriedades  $\langle \rho_k \rangle \tilde{v}_k$  ou  $\tilde{v}_k$  entre as fases  $k$  e  $j$  (Hassanizadeh e Gray-1979);
- (g) quantidade de  $\langle \rho_k \rangle \tilde{v}_k$  na fase através da interface superficial de  $A_{jk}$   $A_{jk}$  da fase no volume  $V_0$ , por unidade de volume do meio poroso e por unidade de tempo, por difusão com respeito a (possivelmente se móvel) superfície  $A_{jk}$  (troca de  $\langle \rho_k \rangle \tilde{v}_k$  ou  $\tilde{v}_k$  entre as fases  $k$  e  $j$  através de interação mecânica (Hassanizadeh e Gray-1979).

Se compararmos as equações de balanço macroscópicas 3.61 com as respectivas equações microscópicas 3.40, nota-se que os termos adicionais (d) (f) (g) foram introduzidos como resultado do processo de macroscopização. Observa-se ainda:

- se as interfaces  $kj$  forem a superfície do material, significa que não existe nenhum fluxo de massa através das mesma, portanto,  $(\mathbf{w}_k - \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{n}^{kj}$  é identicamente igual a zero (Hassanizadeh e Gray-1979, Bear e Pinder-1978) porque na superfície do material  $\mathbf{w}_k = \mathbf{v}_k$ ;

- Drew-1983, Hassanizadeh e Gray-1990, Hassanizadeh e Gray-1979, Hassanizadeh e Gray-1980 e Murad e Cushman-1996 apresentaram as equações de conservação macroscopizadas com a variável  $\mathbf{v}_k$  como uma ponderação em relação à massa. Entretanto, Bear e Bachmat-1990 e Bear e Pinder-1978, e Beckermann e Viskanta-1993 apresentam as equações de conservação macroscopizadas com a variável  $\mathbf{v}_k$  como uma ponderação em relação ao volume. Ishii-1990 não especificou o tipo de ponderação assumida. Se a densidade microscópica é constante (Hassanizadeh e Gray-1979), implica que  $\tilde{\psi}_k = \langle \psi_k \rangle$ ;  $\langle \rho_k \rangle^k = \rho_k$  e  $\langle \rho_k \rangle = \phi_k \rho_k$ .

Se assumirmos que os fluxos dispersivos que aparecem na equação 3.60 são muito menores do que os respectivos fluxos advectivos (Bear e Bachmat-1991), isto é,

$$\frac{1}{A_0} \int_{A_0} (\rho_k \hat{\mathbf{v}}_k \hat{\mathbf{v}}_k) \cdot \mathbf{n} X_k da \ll \frac{1}{V_0} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}_k \tilde{\mathbf{v}}_k \int_{V_0} \rho_k X_k dv \quad (3.62)$$

pode-se assumir que os fluxos dispersivos são iguais a zero (Beckermann e Viskanta-1993). Neste caso a equação 3.61 pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho_k \rangle \tilde{\mathbf{v}}_k) + \nabla \cdot \langle \rho_k \rangle \tilde{\mathbf{v}}_k \tilde{\mathbf{v}}_k - \nabla \cdot \langle \sigma_k \rangle + \langle \rho_k g \nabla z \rangle \\ & - \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} \rho_k \mathbf{v}_k (\mathbf{w}_k - \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{n}^{kj} da - \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} \sigma_k \cdot \mathbf{n}^{kj} da = 0 \end{aligned} \quad (3.63)$$

Naqueles casos onde o sistema pode ser considerado como um meio poroso e aplicando-se o método de volumes ponderados, a análise inicia-se escrevendo-se as equações de momento macroscópicas para cada fase e assumindo-se que a densidade é constante no interior do volume de controle de integração (escala microscópica), obtém-se:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho_k \tilde{\mathbf{v}}_k \rangle) + \nabla \cdot \langle \rho_k \tilde{\mathbf{v}}_k \tilde{\mathbf{v}}_k \rangle - \nabla \cdot \langle \sigma_k \rangle + \langle \rho_k g \nabla z \rangle \\ & - \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} \rho_k \mathbf{v}_k (\mathbf{w}_k - \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{n}^{kj} da - \frac{1}{V_0} \sum_{k \neq j} \int_{A_{kj}} \sigma_k \cdot \mathbf{n}^{kj} da = 0 \end{aligned} \quad (3.64)$$

que pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k) + \nabla \cdot (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k) - \nabla \cdot \langle \sigma_k \rangle + \langle g \rho_k \nabla z \rangle + \phi_k \langle \mathbf{b}_k \rangle^k \\ & - \frac{1}{V_0} \int_{A_k} \rho_k \mathbf{v}_k (\mathbf{w}_k - \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{n}^k da - \frac{1}{V_0} \int_{A_k} \sigma_k \cdot \mathbf{n}^k da = 0 \end{aligned} \quad (3.65)$$

ou somando para as diversas fases presentes:

$$\begin{aligned} & \sum_k \frac{\partial}{\partial t} (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k) + \sum_k \nabla \cdot (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k) - \sum_k \nabla \cdot \langle \sigma_k \rangle + \sum_k \phi_k \langle \mathbf{b}_k \rangle^k \\ & - \sum_k \frac{1}{V_0} \int_{A_{kj}} \rho_k \mathbf{v}_k (\mathbf{w}_k - \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{n}^{kj} da - \frac{1}{V_0} \int_{A_{kj}} \sigma_k \cdot \mathbf{n}^{kj} da = 0 \end{aligned} \quad (3.66)$$

Para um meio poroso Bear e Bachmat-1990 sugeriram a seguinte equação para uma única fase de fluido que ocupa totalmente os espaços vazios de um meio poroso e uma única fase sólida (Martin et al.-1996, Hassanizadeh e Gray-1979),

$$\sum_k \nabla \cdot \langle \sigma_k \rangle = \nabla \cdot \sum_k \langle \sigma_k \rangle = \nabla \cdot (\langle \sigma_s \rangle + \langle \sigma_l \rangle) \quad (3.67)$$

Assim, de acordo com Bear e Pinder-1978, (nota-se que os vetores normais são tais que  $\mathbf{n}^{sl} = -\mathbf{n}^{ls}$ )

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k) + \nabla \cdot (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k) - \nabla \cdot \langle \sigma_k \rangle + \phi_k \langle \mathbf{b}_k \rangle^k \\ & - \frac{1}{V_0} \int_{A_k} \rho_k \mathbf{v}_k (\mathbf{w}_k - \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{n}^k da - \frac{1}{V_0} \int_{A_k} \sigma_k \cdot \mathbf{n}^k da = 0 \end{aligned} \quad (3.68)$$

Para resolver as incógnitas nas equações acima, torna-se necessário o emprego equações constitutivas nas escalas microscópicas (para as integrais) e macroscópicas.

### 3.5.2 - Equações Constitutivas

As equações constitutivas relacionam tensões com deformações, ou seja, a resposta do material quando submetido a esforços (Thomas-1993). Na Figura 3.2 estão representados determinados comportamentos (respostas-deformações) de alguns materiais sólidos e líquidos quando submetidos a determinadas solicitações (tensões).



Figuras 3.2 – Representação esquemática de determinadas curvas tensão-deformação de alguns materiais sólidos e líquidos.

### 3.5.3 - Equações Constitutivas para Fase Líquida

A determinação da equação constitutiva apropriada para correlacionar tensão com deformação durante a solidificação e resfriamento de ligas depende em primeiro lugar do tipo de fase presente em uma determinada posição e tempo. Geralmente assume-se que para o caso da liga no estado líquido (100% de líquido) as ligas metálicas comportam-se como um líquido Newtoniano (Dahle e Arnberg-1996), ou seja, as tensões são proporcionais às taxas de deformação para um fluido compressível com viscosidade linear,  $\sigma_{ij}$  é dado por

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\mu\dot{\epsilon}_{ij} + \lambda\dot{\epsilon}_{kk}\delta_{ij} \quad (3.69)$$

onde  $\mu$  é a viscosidade dinâmica primária e  $\lambda$  a viscosidade dinâmica secundária.

Na equação acima, a taxa de deformação é composta da taxa de deformação linear ( $\dot{\varepsilon}_{ij}$ ) e da taxa de deformação volumétrica ( $\dot{\varepsilon}_{kk}$ ). O termo  $\varepsilon_{ij}$  é definido por (Bear e Bachmat-1990, Versteeg e Malalasekera-1995), sendo o fluido considerado isotrópico:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial w_i}{\partial x_j} + \frac{\partial w_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.70)$$

se for adotado o tensor de deformação infinitesimal Euleriano, ou

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial w_i}{\partial X_j} + \frac{\partial w_j}{\partial X_i} \right) \quad (3.71)$$

se for adotado o tensor de deformação infinitesimal Lagrangiano, onde  $\mathbf{w}$  é o vetor de deslocamento e para uma pequena deformação

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial w_x}{\partial X} = \frac{\partial w_x}{\partial x} \quad (3.72)$$

A deformação volumétrica, ou cúbica ou ainda dilatação volumétrica, é dada por:

$$\varepsilon = \varepsilon_{ii} + \varepsilon_{jj} + \varepsilon_{kk} = \frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial w_y}{\partial y} + \frac{\partial w_z}{\partial z} = \nabla \cdot \mathbf{w} \quad (3.73)$$

A taxa de deformação é dada por:

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.74)$$

A velocidade é dada por:

$$\mathbf{v} = \left. \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \right|_{X=const} \quad \dot{\varepsilon} = \nabla \cdot (\dot{\mathbf{w}}) = \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (3.75)$$

No caso do emprego do método dos volumes ponderados,  $v_i$  e  $v_j$  deveriam ser substituídos por  $v_i^m$  e  $v_j^m$  onde  $v^m$  é velocidade ponderada pela massa (Bear e Bachmat-1990)

$$v^m = \frac{1}{m} \sum_{\alpha=1}^N v_{\alpha} m_{\alpha} \quad (3.76)$$

onde:  $m$  = massa       $\alpha$  = constituinte.

A taxa de deformação volumétrica ou taxa de deformação incremental de volume ou ainda dilatação ( $\dot{\epsilon}_{kk}$  ou  $div \mathbf{v}$ ) é dada por (Bear e Pinder-1978, Versteeg e Malalasekera-1995):

$$div \mathbf{v} = \frac{\partial v_i}{\partial x} + \frac{\partial v_j}{\partial y} + \frac{\partial v_k}{\partial z} \quad (3.77)$$

Para um fluido incompressível:

$$div \mathbf{v} = \dot{\epsilon}_{kk} = 0 \quad (3.78)$$

sendo que para o valor de  $\lambda$ , o coeficiente de viscosidade secundário, é irrelevante. Note-se que para esta equação ser válida. É necessário apenas que  $\rho$  permaneça constante para um elemento do fluido que se move ao longo do fluxo, isto é, que  $D\rho/Dt$  deve ser igual a zero

$$\left( \frac{D\rho}{Dt} = -\rho(\nabla \cdot \mathbf{v}) \right)$$

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\mu\dot{\epsilon}_{ij} \quad (3.79)$$

Para ligas metálicas, a viscosidade decresce com o aumento da temperatura (Dahle e Arnberg-1996).

### 3.5.4 - Equações Constitutivas para Fase Sólida

Deformações diferenciais ou incrementos de deformação são utilizados em estudos de plasticidade desde que as deformação são maiores (quando comparada com deformações elásticas) e podem variar apreciavelmente de ponto para ponto em um material sendo deformado e os eixos dos elementos de volume podem rotacionar, resultando que os eixos de tensão e de deformação podem não coincidir.

A teoria de fluxo ou teoria de incrementos será aplicada no restante deste trabalho.

Quando um material está fluindo de modo não-elástico, a parte não elástica da deformação é definida pela regra ou lei do fluxo (*flow rule* ou *flow law*), a qual descreve o 'caminho' da deformação plástica e pode ser escrita como

$$d\varepsilon_{ij} = \frac{\partial g(\sigma_{ij})}{\partial \sigma_{ij}} d\Lambda \quad \text{or} \quad \dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{\partial g(\sigma_{ij})}{\partial \sigma_{ij}} \dot{\Lambda} \quad (3.80)$$

onde  $g(\sigma_{ij})$  é o potencial plástico ou de fluxo (para um meio contínuo homogêneo e isotrópico) e determina a direção da deformação plástica.  $d\Lambda$  é o multiplicador plástico - instantâneo, positivo e variável, é a quantidade da taxa de fluxo plástico, cujo valor é determinado para satisfazer a condição de consistência plástica -  $f(\sigma_{ij}) = 0$  - onde  $f$  é a função de escoamento (a tensão de escoamento deve permanecer na superfície de escoamento).

Se considerarmos que a direção de fluxo é a mesma no vetor normal à superfície de escoamento, isto é, a regra de fluxo associada:

$$\frac{\partial g}{\partial \sigma_{ij}} = \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \quad \text{or} \quad \frac{\partial g}{\partial \sigma_{ij}} = \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} = 0 \quad (3.81)$$

Considerando a condição de Levy-Mises (o material é considerado como rígido-visco-plástico) que os incrementos de deformação plástica são proporcionais a tensão de desvio (*deviatoric stress*)  $\sigma_{ij}^d$ , a regra de fluxo torna-se (Kobayashi e Altan-1989)

$$\frac{d\varepsilon_{ij}^{(p)}}{\sigma_{ij}^d} = d\Lambda \quad \text{ou} \quad \frac{\dot{\varepsilon}_{ij}^{(p)}}{\sigma_{ij}^d} = \dot{\Lambda} \quad (3.82)$$

desde que

$$\frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} = \sigma_{ij}^d \quad (3.83)$$

Considerando que a deformação plástica é independente da pressão e que o efeito o Bauschinger não está presente, o critério de Von Mises pode ser aplicado. O limite de escoamento (que determina o nível de tensão no qual a deformação plástica é iniciada) para um corpo carregado em várias direções, representa uma função dos diversos componentes individuais, que pode ser interpretada como uma tensão efetiva ou equivalente  $\bar{\sigma}$ . O critério de escoamento de Von Mises é dado por

$$f(\sigma_{ij}) = J_2 = \frac{1}{2} \sigma_{ij}^d \sigma_{ij}^d \quad (3.84)$$

A tensão efetiva pode ser escrita como

$$\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{3}{2}} (\sigma_{ij}^d \sigma_{ij}^d)^{1/2} \quad (3.85)$$

considerando a hipótese de que o grau de encruamento é uma função do trabalho plástico e assumindo um encruamento isotrópico.

Outra hipótese considerada para a relação deformação/encruamento relaciona  $\bar{\sigma}$  a uma determinada medida da deformação plástica total. A variável  $d\bar{\varepsilon}$ , conhecida como taxa de deformação plástica infinitesimal equivalente ou efetiva é definida de acordo com:

$$dW_p = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} = \bar{\sigma} d\bar{\varepsilon} \quad (3.86)$$

com a taxa de deformação equivalente ou efetiva,  $\dot{\bar{\varepsilon}}^P$ , dada por

$$\dot{\bar{\varepsilon}}^P = \sqrt{\frac{2}{3}} [\dot{\varepsilon}_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}]^{1/2} \quad (3.87)$$

$$\sqrt{K_2} = \frac{3}{2\sqrt{3}} \dot{\bar{\epsilon}}^p \quad (3.88)$$

De acordo com Kobayashi e Altan-1989, com a medição de  $\bar{\sigma}$  e  $d\bar{\epsilon}$  (e portanto, de  $\dot{\bar{\epsilon}}^p$ ) o fator de proporcionalidade  $\dot{\Lambda}$  na equação de Levy-Mises pode ser expresso por

$$\dot{\Lambda} = \frac{3}{2} \frac{\dot{\bar{\epsilon}}}{\bar{\sigma}} \quad (3.89)$$

Substituindo a equação acima na equação de Levy-Mises e considerando o material incompressível  $\dot{\bar{\epsilon}}^p = \dot{\bar{\epsilon}}$ , a tensão de desvio pode ser dada

$$\sigma_{ij}^d = \frac{\dot{\epsilon}_{ij}^{(p)}}{\dot{\Lambda}} = \frac{\dot{\epsilon}_{ij}^{(p)}}{\frac{3}{2} \frac{\dot{\bar{\epsilon}}}{\bar{\sigma}}} = \frac{2}{3} \dot{\epsilon}_{ij}^{(p)} \frac{\bar{\sigma}}{\dot{\bar{\epsilon}}} \quad (3.90)$$

Se o material é assumido como rígido-visco-plástico e a equação constitutiva do material (lei de encruamento) é considerada do tipo *power law*

$$\bar{\sigma} = C \dot{\bar{\epsilon}}^n \quad (3.91)$$

e substituindo na equação precedente

$$\sigma_{ij}^d = \frac{2}{3} \dot{\epsilon}_{ij}^{(p)} \frac{C \dot{\bar{\epsilon}}^n}{\dot{\bar{\epsilon}}} = \frac{2}{3} \dot{\epsilon}_{ij}^{(p)} C \dot{\bar{\epsilon}}^{(n-1)} \quad (3.92)$$

Substituindo a equação da taxa de deformação efetiva:

$$\sigma_{ij}^d = \frac{2}{3} \dot{\epsilon}_{ij}^{(p)} \frac{C \dot{\bar{\epsilon}}^n}{\dot{\bar{\epsilon}}} = \frac{2}{3} \dot{\epsilon}_{ij}^{(p)} C \dot{\bar{\epsilon}}^{n-1} = \frac{2}{3} \dot{\epsilon}_{ij}^{(p)} C \left\{ \sqrt{\frac{2}{3}} [\dot{\epsilon}_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}]^{1/2} \right\}^{(n-1)} \quad (3.93)$$

Considerando que a equação de compatibilidade é

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.94)$$

Substituindo a equação na equação anterior, obtém-se finalmente:

$$\sigma_{ij}^d = \frac{2}{3} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] C \left\{ \sqrt{\frac{2}{3}} \left[ \sum \frac{1}{4} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}^{(n-1)}$$

$$\sigma_{ij}^d = \frac{2}{3} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] C \left[ \sqrt{\frac{2}{3}} \sum \frac{1}{4} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)^2 \right]^{(n-1)/2}. \quad (3.95)$$

Para o caso bidimensional (2-D) e na direção  $x$

$$\sigma_{ij}^d = \frac{2}{3} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] C \left\{ \sqrt{\frac{2}{3}} \left[ \frac{1}{4} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{4} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{4} \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \frac{1}{4} \left( \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right] \right\}^{(n-1)/2}$$

$$\sigma_{ij}^d = \frac{2}{3} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] C \left\{ \sqrt{\frac{2}{3}} \left[ \frac{1}{4} \left( 2 \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{4} \left( 2 \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right] \right\}^{(n-1)/2}$$

$$\sigma_{ij}^d = \frac{2}{3} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] C \left\{ \sqrt{\frac{2}{3}} \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right] \right\}^{(n-1)/2} \quad (3.96)$$

### 3.5.5 – A Equação de Conservação de Momento para a Fase Líquida

Considerando um fluido incompressível e com viscosidade linear (Newtoniano),  $\sigma_{ij}$  na escala microscópica é dado por:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\mu\dot{\epsilon}_{ij} \quad (3.97a)$$

ou

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.97b)$$

Na escala macroscópica tem-se (Beckermann e Viskanta-1993)

$$\nabla \cdot \langle \sigma_k \rangle = \nabla \cdot \left\langle \left[ -p_k \delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial (v_k)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial (v_k)_j}{\partial x_i} \right) \right] \right\rangle = \nabla \cdot \left\{ \langle -p_k \delta_{ij} \rangle + \left\langle \mu \left( \frac{\partial (v_k)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial (v_k)_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle \right\} \quad (3.98)$$

Se considerarmos (Nield e Bejan-1992, Beckermann e Viskanta-1993)

$$\langle \Psi_k \Phi_k \rangle = \langle \Phi_k \rangle^k \langle \Psi_k \rangle + \langle \hat{\Psi}_k \hat{\Phi}_k \rangle = \phi_k \langle \Phi_k \rangle^k \langle \Psi_k \rangle^k + \langle \hat{\Psi}_k \hat{\Phi}_k \rangle \quad (3.99)$$

$$\nabla \cdot \langle \sigma_k \rangle = \nabla \cdot \left\{ \langle -p_k \delta_{ij} \rangle + \langle \mu_k \rangle^k \left\langle \left( \frac{\partial (v_k)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial (v_k)_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle + \left\langle \hat{\mu}_k \left( \frac{\partial (v_k)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial (v_k)_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle \right\} \quad (3.100)$$

Se  $\mu_k$  for considerado constante no volume integrado, podendo variar globalmente (Gray e O'Neill-1976), tem-se (Beckermann e Viskanta-1993),

$$\langle \mu_k \rangle^k = \mu_k^* \quad (3.101)$$

A viscosidade efetiva do líquido  $\mu_l^*$  é freqüentemente tomada como igual a viscosidade macroscópica do líquido, ou seja, a viscosidade medida. Entretanto, é por demais conhecida na literatura relativa a meios porosos que  $\mu_l^*$  depende da morfologia da estrutura do sólido. Isto pode ser visualizado através da consideração do caso extremo de uma rede de dendritas formando pequenos bolsões preenchidos com líquido. Nenhuma tensão de cisalhamento pode ser transferida por este líquido numa escala microscópica, de forma que

$\mu_i^*$  deve desaparecer. Uma especificação precisa de  $\mu_i^*$  é também importante próxima da interface com a zona pastosa (isto é, para  $\phi_l \rightarrow 1$ ), onde o gradiente de velocidade deve ser maior. Devido a ausência de uma teoria geral ou de medições experimentais para o caso de dendritas colunares, não nos resta muita escolha se não assumirmos que  $\mu_i^* = \mu_l$ .

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \langle \sigma_k \rangle &= \nabla \cdot \left\{ \left\langle -p_k \delta_{ij} \right\rangle + \mu_k^* \left\langle \frac{\partial (v_k)_i}{\partial x_j} \right\rangle + \mu_k^* \left\langle \frac{\partial (v_k)_j}{\partial x_i} \right\rangle + \left\langle \hat{\mu}_k \left( \frac{\partial (v_k)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial (v_k)_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle \right\} \\ \nabla \cdot \langle \sigma_k \rangle &= \nabla \cdot \left\{ \left\langle -p \delta_{ij} \right\rangle + \mu_k^* \frac{\partial \langle (v_k)_i \rangle}{\partial x_j} + \mu_k^* \frac{\partial \langle (v_k)_j \rangle}{\partial x_i} + \mu_k^* \frac{1}{V} \int_{A_k} (v_k)_i \mathbf{n}^k dA \right. \\ &\quad \left. + \mu_k^* \frac{1}{V} \int_{A_k} (v_k)_j \mathbf{n}^k dA + \left\langle \hat{\mu}_k \left( \frac{\partial (v_k)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial (v_k)_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle \right\} \end{aligned} \quad (3.102)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \int_{A_k} (v_k)_j \mathbf{n}^k dA &= \left( \frac{1}{V} \int_{A_k} (v_k)_j dA \right) \left( \frac{1}{V} \int_{A_k} \mathbf{n}^k dA \right) = -(\bar{v}_{ki})_j \nabla \phi_k \\ \frac{1}{V} \int_{A_k} (v_k)_i \mathbf{n}^k dA &= -(\bar{v}_{ki})_i \nabla \phi_k \end{aligned} \quad (3.103)$$

Assim

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \langle \sigma_k \rangle &= \nabla \cdot \left\{ \left\langle \phi_k \langle -p_k \rangle^k \delta_{ij} + \mu_k^* \frac{\partial (\phi_k \langle v_k \rangle^k)_i}{\partial x_j} + \mu_k^* \frac{\partial (\phi_k \langle v_k \rangle^k)_j}{\partial x_i} - \mu_k^* (\bar{v}_{ki})_i \nabla \phi_k \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \mu_k^* (\bar{v}_{ki})_j \nabla \phi_k + \left\langle \hat{\mu}_k \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle \right\} \end{aligned} \quad (3.104)$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \langle \sigma_k \rangle = & -\frac{\partial(\phi_k \langle p_k \rangle^k \delta_{ij})}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_k^* \frac{\partial(\phi_k \langle v_k \rangle^k)_i}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_k^* \frac{\partial(\phi_k \langle v_k \rangle^k)_j}{\partial x_i} \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_k^* (\bar{v}_{ki})_i \frac{\partial \phi_k}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_k^* (\bar{v}_{kj})_j \frac{\partial \phi_k}{\partial x_j} \right] + \left\langle \mu_k^* \left( \frac{\partial (v_k)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial (v_k)_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle \end{aligned} \quad (3.105)$$

Aplicando a regra da cadeia para o segundo e terceiro termo do lado direito da equação

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \langle \sigma_k \rangle = & -\frac{\partial(\phi_k \langle p_k \rangle^k \delta_{ij})}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_k^* \phi_k \frac{\partial(\langle v_k \rangle^k)_i}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_k^* (\langle v_k \rangle^k)_i \frac{\partial \phi_k}{\partial x_j} \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_k^* \phi_k \frac{\partial(\langle v_k \rangle^k)_j}{\partial x_i} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_k^* (\langle v_k \rangle^k)_j \frac{\partial \phi_k}{\partial x_i} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_k^* (\bar{v}_{ki})_i \frac{\partial \phi_k}{\partial x_j} \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_k^* (\bar{v}_{kj})_j \frac{\partial \phi_k}{\partial x_j} \right] + \left\langle \mu_k^* \left( \frac{\partial (v_k)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial (v_k)_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle \end{aligned} \quad (3.106)$$

Pode-se escolher a velocidade ponderada no volume (ou velocidade superficial  $\langle v_k \rangle = \phi_k \langle v_k \rangle^k$  ou a velocidade intrínseca ponderada no volume (ou velocidade do poro)  $\langle v_k \rangle^k$  como variável dependente. Neste trabalho, velocidade do poro é considerada como a variável dependente.

Observa-se ainda que (Ishii-1990)

$$\sum (M_k) + M_i = 0 \quad (3.107)$$

$$M_k = M_k^\Gamma + M_k^\tau \quad (3.108)$$

Considerando agora a seguinte integral para a equação de momento

$$\frac{1}{V_0} \int_{A_i} \sigma_i \cdot \mathbf{n}' da = M_i^r \quad \text{ou} \quad \nabla \cdot \frac{1}{V_0} \int_{A_k} \sigma_k X_k dV \quad (3.109)$$

$$M_i^r = \frac{1}{V_0} \int_{A_i} \left[ -p\delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] \cdot \mathbf{n}' da \quad (3.110)$$

$$M_i^r = -\frac{1}{V_0} \int_{A_i} p\delta_{ij} \cdot \mathbf{n}' da + \frac{1}{V_0} \int_{A_i} \mu \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \cdot \mathbf{n}' da = \bar{p}_i \nabla \phi_i + M_i^d \quad (3.111)$$

- o primeiro termo é a força de fluabilidade devido a pressão interfacial ponderada (Ni e Beckermann-1991);

- o segundo termo contém a força dissipativa interfacial devido ao arraste viscoso ou de forma (*viscous* e *form drag*) e a distribuição de pressão não balanceada originada devido ao efeito aceleração da massa (Ni e Beckermann-1991, Ishii-1990);

$$M_s^r + M_l^r + M_s^d + M_l^d + \bar{p}_{s_i} \nabla \phi_s + \bar{p}_{l_i} \nabla \phi_l = \tau \bar{\zeta} \quad (3.112a)$$

$$M_s^r + M_l^r + M_s^d + M_l^d = 0 \quad (3.112b)$$

A diferença entre a pressão interfacial nas fases líquido e sólida é devido a tensão superficial (Ni e Beckermann-1991), isto é,

$$(\bar{p}_{s_i} - \bar{p}_{l_i}) = \tau \bar{\zeta} \quad (3.113)$$

Considerando que (Ni e Beckermann-1991, Beckermann e Viskanta-1993)

$$\sum (\bar{p}_i \nabla \phi_i) - M_i = 0 \quad (3.114)$$

$$M_i = \frac{1}{V} \int_A \sigma \zeta \mathbf{n}' dA = -\sigma \bar{\zeta} \nabla \phi_i \quad (3.116)$$

Se o equilíbrio de pressão microscópica instantânea para a fase líquida for assumida

$$\langle p_l \rangle^l = \bar{p}_l, \quad (3.117)$$

tem-se que,

$$\nabla(\phi_k \langle p_k \rangle^k) = \phi_k \nabla(\langle p_k \rangle^k) \quad (3.118)$$

e aplicando na equação 3.106 obtém-se agora

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \langle \sigma_k \rangle = & -\phi_k \frac{\partial(\langle p_k \rangle^k \delta_{ij})}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_k^* \phi_k \frac{\partial(\langle v_k \rangle^k)_i}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_k^* (\langle v_k \rangle^k)_i \frac{\partial \phi_k}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_k^* \phi_k \frac{\partial(\langle v_k \rangle^k)_j}{\partial x_i} \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_k^* (\langle v_k \rangle^k)_j \frac{\partial \phi_k}{\partial x_i} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_k^* (\bar{v}_{ki})_i \frac{\partial \phi_k}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_k^* (\bar{v}_{ki})_j \frac{\partial \phi_k}{\partial x_i} \right] + \left\langle \mu_k^* \left( \frac{\partial(v_k)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial(v_k)_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle \end{aligned} \quad (3.119)$$

$$\frac{1}{V_0} \int_{A_i} \mu \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \cdot \mathbf{n}^l da = M_i^d \quad (3.120)$$

e ainda (Beckermann e Viskanta-1993, Ni e Beckermann-1991)

$$M_i^d = \left( \frac{A_k}{V_0} \right) \mathbf{R}_k [\bar{v}_i - \langle v_l \rangle^l] \quad (3.121)$$

onde  $\mathbf{R}_k$  é o coeficiente de resistência ou permeabilidade. A relação linear entre o arraste interfacial e a velocidade – válida apenas para fluxo plástico (*creeping flow*) – (Beckermann e Viskanta-1993).

$$\frac{A_l}{V_0} \mathbf{R}_l = -\phi_l^2 \mu_l \mathbf{K}^{(2)^{-1}} \quad (3.122)$$

$$M_i^d = -\phi_l^2 \mu_l \mathbf{K}^{(2)^{-1}} (\bar{v}_i - \langle v_l \rangle^l) \quad (3.123)$$

onde  $\mathbf{K}^{(2)}$  é o tensor de permeabilidade simétrico. Considerando a morfologia característica das dendritas e sendo  $\varphi$  o ângulo entre os braços primários e eixo  $x$ , tem-se.

$$\mathbf{K}^{(2)^{-1}} = \begin{bmatrix} \frac{\cos^2 \varphi}{K_{\xi\xi}} + \frac{\sin^2 \varphi}{K_{\eta\eta}} & \sin \varphi \cos \varphi \left( \frac{1}{K_{\xi\xi}} - \frac{1}{K_{\eta\eta}} \right) \\ \sin \varphi \cos \varphi \left( \frac{1}{K_{\xi\xi}} - \frac{1}{K_{\eta\eta}} \right) & \frac{\sin^2 \varphi}{K_{\xi\xi}} + \frac{\cos^2 \varphi}{K_{\eta\eta}} \end{bmatrix} \quad (3.124)$$

A integral restante na equação de conservação de momento é

$$\frac{1}{V_0} \int_{A_k} \rho_k \mathbf{v}_k (\mathbf{w}_k - \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{n}^{kj} da = M_k^\Gamma \quad (3.125)$$

Tomando como base a teoria para a integração, os termos podem ser modelados como o produto das concentrações das áreas interfaciais,  $\left( \frac{A_k}{V_0} \right)$ , e do fluxo médio nas interfaces (Beckermann e Viskanta-1993, Ishii-1990, Schneider e Beckermann-1992):

$$M_k^\Gamma = \bar{v}_{ki} \frac{A_k}{V_0} \rho_k \bar{w}_{nk} = \bar{v}_{ki} \Gamma_k \quad (3.126)$$

$$M_k^\Gamma = \bar{v}_{ki} \frac{A_l}{V_0} \rho_l \bar{w}_{nl} = \bar{v}_{li} \Gamma_l = 0 \quad \Gamma_l = \frac{\partial}{\partial t} (\phi_l \rho_l) \quad (3.127)$$

e considerando que (Schneider e Beckermann-1992)

$$\Gamma_l = \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_l \rho_l) + \frac{\partial (\phi_l \rho_l) v_l \langle' \rangle_l}{\partial x_j} \right] = -\Gamma_s, \quad (3.128)$$

obtem-se então,

$$M_l^\Gamma = \bar{v}_{li} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_l \rho_l) + \frac{\partial (\phi_l \rho_l) v_l \langle' \rangle_l}{\partial x_j} \right] \quad (3.129)$$

Considerando agora o termo remanescente na equação de conservação momento

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^i). \quad (3.130)$$

Aplicando a regra da cadeia para esta equação

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^i) = \langle \mathbf{v}_i \rangle^i \frac{\partial}{\partial t}(\phi_i \rho_i) + \phi_i \rho_i \frac{\partial}{\partial t}(\langle \mathbf{v}_i \rangle^i). \quad (3.131)$$

Considerando a equação de conservação de massa para a mistura:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi_i \rho_i) + \nabla \cdot (\phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^i) = -\frac{\partial}{\partial t}(\phi_s \rho_s) - \left\{ \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \right\}^{**}. \quad (3.132)$$

Multiplicando a equação acima por  $\langle \mathbf{v}_i \rangle^i$  e rearranjando

$$\langle \mathbf{v}_i \rangle^i \frac{\partial}{\partial t}(\phi_i \rho_i) = -\langle \mathbf{v}_i \rangle^i \frac{\partial}{\partial t}(\phi_s \rho_s) - \langle \mathbf{v}_i \rangle^i \nabla \cdot (\phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^i) - \left\{ \langle \mathbf{v}_i \rangle^i \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \right\}^{**}. \quad (3.133)$$

Combinando as equações acima:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^i) &= -\left\{ \langle \mathbf{v}_i \rangle^i \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \right\}^{**} - \langle \mathbf{v}_i \rangle^i \nabla \cdot (\phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^i) \\ &\quad - \langle \mathbf{v}_i \rangle^i \frac{\partial}{\partial t}(\phi_s \rho_s) + \phi_i \rho_i \frac{\partial}{\partial t}(\langle \mathbf{v}_i \rangle^i) \end{aligned} \quad (3.134)$$

O último termo no lado esquerdo da equação de momento

$$\nabla \cdot (\phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^i \langle \mathbf{v}_i \rangle^i) = \phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^i \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_i \rangle^i) + \langle \mathbf{v}_i \rangle^i \nabla \cdot (\phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^i). \quad (3.135)$$

Introduzindo as equações 3.120, 3.123, 3.124, 3.129, 3.134 e 3.135 na equação de momento (3.68) para a fase líquida, e se a única força externa atuando no sistema é devido à gravidade, a força de corpo pode ser expressa como  $\phi_k \langle \mathbf{b}_k \rangle^k = \phi_k \rho_k \mathbf{g}$ , e desprezando os termos dispersivos, obtém-se,

$$\begin{aligned}
& - \left\{ \langle v_i \rangle' \frac{\partial(\phi_s \rho_s \langle v_s \rangle^s)}{\partial x_j} \right\}'' - \langle v_i \rangle' \frac{\partial(\phi_i \rho_i \langle v_i \rangle^i)}{\partial x_j} - \langle v_i \rangle'_i \frac{\partial(\phi_s \rho_s)}{\partial t} + \phi_i \rho_i \frac{\partial \langle v_i \rangle^i}{\partial t} \\
& + \phi_i \rho_i \langle v_i \rangle' \frac{\partial \langle v_i \rangle^i}{\partial x_j} + \langle v_i \rangle' \frac{\partial(\phi_i \rho_i \langle v_i \rangle^i)}{\partial x_j} = \\
& - \phi_i \frac{\partial \langle p_i \rangle^i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_i^* \phi_i \frac{\partial \langle v_i \rangle^i}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_i^* \langle v_i \rangle^i \frac{\partial \phi_i}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_i^* \phi_i \frac{\partial \langle v_i \rangle^i}{\partial x_i} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_i^* \langle v_i \rangle^i \frac{\partial \phi_i}{\partial x_i} \right] \\
& + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_i^* (\bar{v}_i)_i \frac{\partial \phi_i}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_i^* \frac{\partial \phi_i}{\partial x_j} (\bar{v}_i)_j \right] \\
& + \phi_i \rho_i \mathbf{g} \\
& + \bar{v}_i \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_i \rho_i) + \frac{\partial(\phi_i \rho_i \langle v_i \rangle^i)}{\partial x_j} \right] \\
& - \phi_i^2 \mu_i^* \mathbf{K}^{(2)^{-1}} (\bar{v}_i - \langle v_i \rangle^i)
\end{aligned} \tag{3.136}$$

ou

$$\begin{aligned}
& - \left\{ \langle v_i \rangle' \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle v_s \rangle^s}{\partial x_j} + \langle v_i \rangle' \langle v_s \rangle^s \frac{\partial(\phi_s \rho_s)}{\partial x_j} \right\}'' + \phi_i \rho_i \frac{\partial \langle v_i \rangle^i}{\partial t} + \phi_i \rho_i \langle v_i \rangle' \frac{\partial \langle v_i \rangle^i}{\partial x_j} = \\
& - \phi_i \frac{\partial \langle p_i \rangle^i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_i^* \phi_i \frac{\partial \langle v_i \rangle^i}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_i^* \langle v_i \rangle^i \frac{\partial \phi_i}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_i^* \phi_i \frac{\partial \langle v_i \rangle^i}{\partial x_i} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_i^* \langle v_i \rangle^i \frac{\partial \phi_i}{\partial x_i} \right] \\
& + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_i^* (\bar{v}_i)_i \frac{\partial \phi_i}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_i^* \frac{\partial \phi_i}{\partial x_j} (\bar{v}_i)_j \right] + \phi_i \rho_i \mathbf{g} + \bar{v}_i \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_i \rho_i) + \frac{\partial(\phi_i \rho_i \langle v_i \rangle^i)}{\partial x_j} \right] \\
& + \langle v_i \rangle'_i \frac{\partial(\phi_s \rho_s)}{\partial t} - \phi_i^2 \mu_i^* \mathbf{K}^{(2)^{-1}} (\bar{v}_i - \langle v_i \rangle^i)
\end{aligned} \tag{3.137}$$

Para a direção  $x$  e no caso bidimensional (2-D)

$$k = l; \quad i = x; \quad j = x, y; \quad \langle v_k \rangle^k_x = \langle u_i \rangle^i; \quad \langle v_k \rangle^k_y = \langle v_i \rangle^i,$$

$$\begin{aligned}
& - \left\{ \phi_s \rho_s \langle v_i \rangle' \frac{\partial \langle u_s \rangle^s}{\partial x} + \phi_s \rho_s \langle v_i \rangle' \frac{\partial \langle u_s \rangle^s}{\partial y} + \langle v_i \rangle' \langle u_s \rangle^s \frac{\partial (\phi_s \rho_s)}{\partial x} + \langle v_i \rangle' \langle u_s \rangle^s \frac{\partial (\phi_s \rho_s)}{\partial y} \right\}^{**} \\
& + \phi_i \rho_i \frac{\partial \langle u_i \rangle^i}{\partial t} + \phi_i \rho_i \langle v_i \rangle' \frac{\partial \langle u_i \rangle^i}{\partial y} + \phi_i \rho_i \langle v_i \rangle' \frac{\partial \langle u_i \rangle^i}{\partial x} = \\
& - \phi_i \frac{\partial \langle p_i \rangle^i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_i^* \phi_i \frac{\partial \langle u_i \rangle^i}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu_i^* \phi_i \frac{\partial \langle u_i \rangle^i}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_i^* \langle u_i \rangle^i \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu_i^* \langle u_i \rangle^i \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \right] \\
& + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_i^* \phi_i \frac{\partial \langle u_i \rangle^i}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu_i^* \phi_i \frac{\partial \langle v_i \rangle^i}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_i^* \langle u_i \rangle^i \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu_i^* \langle v_i \rangle^i \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \right] \\
& + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_i^* \bar{u}_{ii} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu_i^* \bar{u}_{ii} \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_i^* \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \bar{v}_{ii} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu_i^* \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \bar{v}_{ii} \right] + \phi_i \rho_i \mathbf{g} \\
& + (\bar{u}_{ii}) \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_i \rho_i) + \phi_i \rho_i \frac{\partial \langle u_i \rangle^i}{\partial x} + \phi_i \rho_i \frac{\partial \langle u_i \rangle^i}{\partial y} + \langle u_i \rangle^i \frac{\partial (\phi_i \rho_i)}{\partial x} + \langle u_i \rangle^i \frac{\partial (\phi_i \rho_i)}{\partial y} \right] + \langle u_i \rangle^i \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s) \right] \\
& - \phi_i^2 \mu_i \left[ \left( \frac{\cos^2 \varphi}{K_{\xi\xi}} + \frac{\sin^2 \varphi}{K_{\eta\eta}} \right) (\bar{u}_{ii} - \langle u_i \rangle^i) + \sin \varphi \cos \varphi \left( \frac{1}{K_{\xi\xi}} - \frac{1}{K_{\eta\eta}} \right) (\bar{v}_{ii} - \langle v_i \rangle^i) \right]
\end{aligned}
\tag{3.138}$$

### 3.5.6 - A Equação de Conservação de Momento para a Fase Sólida

Para a deformação plástica da fase sólida e para a fase sólida considerada visco-plástica,  $\sigma_{ij}$  na escala microscópica tem-se:

$$\sigma_{ij}^d = \frac{2}{3} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] C \left[ \sqrt{\frac{2}{3}} \sum \frac{1}{4} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)^2 \right]^{\left( \frac{n-1}{2} \right)}
\tag{3.139}$$

Ao invés de utilizarmos a equação macroscópica através da integração da equação acima a partir da escala microscópica, a equação macroscópica será considerada diretamente na escala macroscópica<sup>2</sup>, sem levar em consideração a geometria do meio poroso. Os coeficientes macroscópicos  $C^*$  e  $n^*$  devem ser determinados<sup>3</sup> experimentalmente (Bear e Bachmat-1990).

<sup>2</sup> O apêndice D apresenta a metodologia de macroscopização para o caso de um meio poroso sofrendo deformação elástica.

<sup>3</sup> O apêndice C apresenta uma revisão sobre equações constitutivas na escala macroscópica para a zona pastosa.

$$\langle \sigma_{ij}^d \rangle = \frac{2}{3} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] C^* \left[ \sqrt{\frac{2}{3}} \sum \frac{1}{4} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)^2 \right]^{\left( \frac{n^*-1}{2} \right)} \quad (3.140)$$

No emprego das equações acima para representar o comportamento visco-plástico no nível macroscópico, o termos interfaciais devido ao processo de integração (macroscopização) foram desprezados na comparação com os termos remanescentes.

$$\nabla \cdot \langle \sigma_{ij}^d \rangle = \nabla \cdot \left\{ \frac{2}{3} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] C^* \left[ \sqrt{\frac{2}{3}} \sum \frac{1}{4} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)^2 \right]^{\left( \frac{n^*-1}{2} \right)} \right\}$$

$$\nabla \cdot \langle \langle \sigma_s \rangle \rangle = \nabla \cdot \left\{ \frac{2}{3} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial (v_s)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial (v_s)_j}{\partial x_i} \right) \right] C^* \left[ \sqrt{\frac{2}{3}} \sum \frac{1}{4} \left( \frac{\partial (v_s)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial (v_s)_j}{\partial x_i} \right)^2 \right]^{\left( \frac{n^*-1}{2} \right)} \right\} \quad (3.141)$$

Considerando agora o último termo no lado esquerdo da equação macroscópica de momento,

$$\frac{1}{V_0} \int_{A_s} \sigma_s \cdot \mathbf{n}^s da = M_s^r \quad (3.142)$$

$$M_s^r = \bar{p}_{si} \nabla \phi_s + M_s^d \quad (3.143)$$

$$M_s^d = -M_l^d \quad (3.144)$$

$$M_s^d = - \left( -\phi_l^2 \mathbf{K}^{(2)-1} \right) \left( \bar{\mathbf{v}}_{li} - \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \right) \quad (3.145)$$

Considerando o quinto termo no lado esquerdo da equação macroscópica de momento,

$$\frac{1}{V_0} \int_{A_s} \rho_s \mathbf{v}_s (\mathbf{w}_s - \mathbf{v}_s) \cdot \mathbf{n}^{sj} da = M_s^\Gamma \quad M_s^\Gamma = -M_l^\Gamma = -\bar{v}_{li} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_l \rho_l) + \frac{\partial (\phi_l \rho_l \langle v_l \rangle^l)}{\partial x_j} \right] \quad (3.146)$$

Considerando então os termos restantes na equação macroscópica de momento,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s). \quad (3.147)$$

Aplicando a regra da cadeia para esta equação

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) = \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s) + \phi_s \rho_s \frac{\partial}{\partial t} (\langle \mathbf{v}_s \rangle^s). \quad (3.148)$$

Considerando a equação da conservação da massa para a mistura:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi_l \rho_l) + \nabla \cdot (\phi_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l) = -\frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s) - \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s). \quad (3.149)$$

Multiplicando a equação acima por  $\langle \mathbf{v}_s \rangle^s$  e rearranjando

$$\langle \mathbf{v}_s \rangle^s \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s) = -\langle \mathbf{v}_s \rangle^s \frac{\partial}{\partial t} (\phi_l \rho_l) - \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \nabla \cdot (\phi_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l) - \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s). \quad (3.150)$$

Combinando as equações acima:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) = -\langle \mathbf{v}_s \rangle^s \nabla \cdot (\phi_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l) - \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) - \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \frac{\partial}{\partial t} (\phi_l \rho_l) + \phi_s \rho_s \frac{\partial}{\partial t} (\langle \mathbf{v}_s \rangle^s). \quad (3.151)$$

O último termo no lado esquerdo da equação macroscópica de momento,

$$\nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) = \phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_s \rangle^s) + \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s). \quad (3.152)$$

Substituindo 3.141, 3.145, 3.146, 3.151, 3.152, na equação macroscópica de momento (3.68) para a fase sólida e se a única força externa atuante no sistema for devido a gravidade, de modo que a força de corpo possa ser expressa como  $\phi_s \langle \mathbf{b}_s \rangle^s = \phi_s \rho_s \mathbf{g}$ , e desprezando os termos dispersivos, obtém-se,

$$\begin{aligned}
& - \left\{ \langle v_s \rangle^s \frac{\partial(\phi_i \rho_i \langle v_i \rangle^i)}{\partial x_j} \right\}^{**} - \langle v_s \rangle^s \frac{\partial(\phi_s \rho_s \langle v_s \rangle^s)}{\partial x_j} - \langle v_s \rangle^s \frac{\partial}{\partial t}(\phi_i \rho_i) + \phi_s \rho_s \frac{\partial}{\partial t} \langle v_s \rangle^s \\
& + \phi_s \rho_s \langle v_s \rangle^s \frac{\partial \langle v_s \rangle^s}{\partial x_j} + \langle v_s \rangle^s \frac{\partial(\phi_s \rho_s \langle v_s \rangle^s)}{\partial x_j} = \\
& + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \frac{2}{3} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial(v_s)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial(v_s)_j}{\partial x_i} \right) \right] C^* \left[ \sqrt{\frac{2}{3}} \sum \frac{1}{4} \left( \frac{\partial(v_s)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial(v_s)_j}{\partial x_i} \right)^2 \right]^{\left( \frac{n^*-1}{2} \right)} \right\} \\
& + \phi_s \rho_s \mathbf{g} \\
& - \bar{v}_i \left[ \frac{\partial}{\partial t}(\phi_i \rho_i) + \frac{\partial(\phi_i \rho_i \langle v_i \rangle^i)}{\partial x_j} \right] \\
& - \left[ -\phi_i^2 \mu_i^* \mathbf{K}^{(2)*} (\bar{v}_i - \langle v_i \rangle^i) \right]
\end{aligned} \tag{3.153}$$

ou

$$\begin{aligned}
& - \left\{ \langle v_s \rangle^s \phi_i \rho_i \frac{\partial \langle v_i \rangle^i}{\partial x_j} + \langle v_s \rangle^s \langle v_i \rangle^i \frac{\partial(\phi_i \rho_i)}{\partial x_j} \right\}^{**} - \langle v_s \rangle^s \frac{\partial}{\partial t}(\phi_i \rho_i) + \phi_s \rho_s \frac{\partial}{\partial t} \langle v_s \rangle^s \\
& + \phi_s \rho_s \langle v_s \rangle^s \frac{\partial \langle v_s \rangle^s}{\partial x_j} = \\
& + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \frac{2}{3} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial(v_s)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial(v_s)_j}{\partial x_i} \right) \right] C^* \left[ \sqrt{\frac{2}{3}} \sum \frac{1}{4} \left( \frac{\partial(v_s)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial(v_s)_j}{\partial x_i} \right)^2 \right]^{\left( \frac{n^*-1}{2} \right)} \right\} \\
& + \phi_s \rho_s \mathbf{g} \\
& - \bar{v}_i \left[ \frac{\partial}{\partial t}(\phi_i \rho_i) + \frac{\partial(\phi_i \rho_i \langle v_i \rangle^i)}{\partial x_j} \right] \\
& - \left[ -\phi_i^2 \mu_i^* \mathbf{K}^{(2)*} (\bar{v}_i - \langle v_i \rangle^i) \right]
\end{aligned} \tag{3.154}$$

Para a direção  $x$  (2-D) ( $k = s$ ;  $i = x$ ;  $j = x, y$ ;  $\langle v_k \rangle^k_x = \langle u_s \rangle^s$ ;  $\langle v_k \rangle^k_y = \langle v_s \rangle^s$ )

$$\begin{aligned}
& -\phi_l \rho_l \langle v_s \rangle^s \frac{\partial \langle u_l \rangle^l}{\partial x} + \phi_l \rho_l \langle v_s \rangle^s \frac{\partial \langle u_l \rangle^l}{\partial y} + \langle v_s \rangle^s \langle u_l \rangle^l \frac{\partial (\phi_l \rho_l)}{\partial x} + \langle v_s \rangle^s \langle u_l \rangle^l \frac{\partial (\phi_l \rho_l)}{\partial y} \\
& + \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle u_s \rangle^s}{\partial t} + \phi_l \rho_l \langle v_s \rangle^s \frac{\partial \langle u_s \rangle^s}{\partial y} + \phi_l \rho_l \langle v_s \rangle^s \frac{\partial \langle u_s \rangle^s}{\partial x} = +\phi_s \rho_s \mathbf{g} + \langle u_s \rangle^s \frac{\partial (\phi_l \rho_l)}{\partial t} + \\
& -(\bar{u}_i) \left[ \frac{\partial (\phi_l \rho_l)}{\partial t} + \phi_l \rho_l \frac{\partial \langle u_l \rangle^l}{\partial x} + \phi_l \rho_l \frac{\partial \langle u_l \rangle^l}{\partial y} + \langle u_l \rangle^l \frac{\partial (\phi_l \rho_l)}{\partial x} + \langle u_l \rangle^l \frac{\partial (\phi_l \rho_l)}{\partial y} \right] \\
& + \phi_l^2 \mu_l \left[ \left( \frac{\cos^2 \varphi}{K_{\xi\xi}} + \frac{\sin^2 \varphi}{K_{\eta\eta}} \right) (\bar{u}_i - \langle u_l \rangle^l) + \sin \varphi \cos \varphi \left( \frac{1}{K_{\xi\xi}} - \frac{1}{K_{\eta\eta}} \right) (\bar{v}_i - \langle v_l \rangle^l) \right] \\
& + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{2}{3} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] C \left[ \sqrt{\frac{2}{3}} \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right] \right]^{\left(\frac{n-1}{2}\right)} \right\} \\
& + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{2}{3} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] C \left[ \sqrt{\frac{2}{3}} \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right] \right]^{\left(\frac{n-1}{2}\right)} \right\}
\end{aligned} \tag{3.155}$$

### 3.6 – Equação de Conservação da Energia

A equação **microscópica** para a conservação da energia para uma dada fase é:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_k h_k) + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{v}_k h_k) = -\nabla \cdot (-\mathbf{k}_k \nabla T_k) \tag{3.156}$$

A respectiva equação **macroscópica** é:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi_k \rho_k \langle h_k \rangle^k) + \nabla \cdot (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \langle h_k \rangle^k) = \nabla \cdot (\mathbf{k}_k \nabla \langle T_k \rangle + \langle \mathbf{q}'_k \rangle) + Q_k^r + Q_k^d \tag{3.157}$$

A equação macroscópica da mistura é: (desprezando os fluxos dispersivos  $\langle \mathbf{q}'_k \rangle$ , e eliminando os termos interfaciais através de balanços nas interfaces)

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} [\phi_l \rho_l \langle h_l \rangle^l + \phi_s \rho_s \langle h_s \rangle^s] + \nabla \cdot [\phi_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \langle h_l \rangle^l + \phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \langle h_s \rangle^s] = \\
& \nabla \cdot [(\phi_l k_l \nabla \langle T_l \rangle^l) + (\phi_s k_s \nabla \langle T_s \rangle^s)]
\end{aligned} \tag{3.158}$$

$$\begin{aligned}
& \phi_i \rho_i \frac{\partial}{\partial t} (\langle h_i \rangle^l) + \phi_s \rho_s \frac{\partial}{\partial t} (\langle h_s \rangle^s) + \langle h_i \rangle^l \frac{\partial}{\partial t} (\phi_i \rho_i) + \langle h_s \rangle^s \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s) + \\
& \phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^l \nabla \cdot \langle h_i \rangle^l + \phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \nabla \cdot \langle h_s \rangle^s + \langle h_i \rangle^l \nabla \cdot [\phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^l] + \\
& \langle h_s \rangle^s \nabla \cdot [\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s] = \nabla \cdot \left[ (\phi_i k_i \nabla \langle T_i \rangle^l) + (\phi_s k_s \nabla \langle T_s \rangle^s) \right]
\end{aligned} \tag{3.159}$$

Se a variável entalpia for expressa como uma função da temperatura e da concentração macroscópicas da fase:

$$d\langle h_k \rangle^k = \frac{\partial \langle h_k \rangle^k}{\partial \langle T_k \rangle^k} \Big|_{\langle C_k \rangle^k} d\langle T_k \rangle^k + \frac{\partial \langle h_k \rangle^k}{\partial \langle C_k \rangle^k} \Big|_{\langle T_k \rangle^k} d\langle C_k \rangle^k \tag{3.160}$$

$$\frac{\partial \langle h_k \rangle^k}{\partial t} = \frac{\partial \langle h_k \rangle^k}{\partial \langle T_k \rangle^k} \Big|_{\langle C_k \rangle^k} \frac{\partial \langle T_k \rangle^k}{\partial t} + \frac{\partial \langle h_k \rangle^k}{\partial \langle C_k \rangle^k} \Big|_{\langle T_k \rangle^k} \frac{\partial \langle C_k \rangle^k}{\partial t} \tag{3.161}$$

$$\frac{\partial \langle h_k \rangle^k}{\partial x} = \frac{\partial \langle h_k \rangle^k}{\partial \langle T_k \rangle^k} \Big|_{\langle C_k \rangle^k} \frac{\partial \langle T_k \rangle^k}{\partial x} + \frac{\partial \langle h_k \rangle^k}{\partial \langle C_k \rangle^k} \Big|_{\langle T_k \rangle^k} \frac{\partial \langle C_k \rangle^k}{\partial x} \tag{3.162}$$

$$\frac{\partial \langle T_k \rangle^k}{\partial x} = \nabla \langle T_k \rangle^k \tag{3.163}$$

Combinando as equações acima e substituindo na equação de conservação de energia da mistura e considerando:

$$\langle T_i \rangle^l = \langle T_\alpha \rangle^\alpha = \langle T_\gamma \rangle^\gamma = T. \tag{3.164}$$

Tem-se então (Schneider e Beckermann-1992)

$$\begin{aligned}
& \langle h_i \rangle^l \frac{\partial}{\partial t} (\phi_i \rho_i) + \langle h_s \rangle^s \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s) \\
& \left[ \phi_i \rho_i \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial T} \Big|_{\langle C_i \rangle^l} + \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \Big|_{\langle C_s \rangle^s} \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \phi_i \rho_i \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial \langle C_i \rangle^l} \Big|_{T_i} \frac{\partial \langle C_i \rangle^l}{\partial t} + \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial \langle C_s \rangle^s} \Big|_{T_s} \frac{\partial \langle C_s \rangle^s}{\partial t} \\
& + \phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^l \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial T} \Big|_{\langle C_i \rangle^l} \cdot \nabla T + \phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^l \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial \langle C_i \rangle^l} \Big|_{T_i} \cdot \nabla \langle C_i \rangle^l \\
& + \phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \Big|_{\langle C_s \rangle^s} \cdot \nabla T + \phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial \langle C_s \rangle^s} \Big|_{T_s} \cdot \nabla \langle C_s \rangle^s \\
& + \langle h_i \rangle^l \nabla \cdot (\phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^l) + \langle h_s \rangle^s \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) = \\
& \nabla \cdot [(\phi_i k_i + \phi_s k_s) \nabla T]
\end{aligned} \tag{3.165}$$

Para desenvolver ainda mais a equação acima, considera-se os seguintes termos:

$$\phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^l \cdot \nabla \langle C_i \rangle^l = ? \quad \phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \cdot \nabla \langle C_s \rangle^s = ?$$

Levando-se em consideração as equações macroscópicas de conservação de espécies, as quais serão detalhadas em um item posterior, tem-se que:

$$\begin{aligned}
\phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^l \cdot \nabla \langle C_i \rangle^l &= -\phi_i \rho_i \frac{\partial \langle C_i \rangle^l}{\partial t} + [\nabla \cdot (\phi_i \rho_i \mathbf{D}_i^* \nabla \langle C_i \rangle^l)] + (\langle C_i \rangle^l - \bar{C}_{si}) \frac{\partial (\phi_s \rho_s)}{\partial t} \\
&- (\bar{C}_{si}) \Gamma_{si} - \tilde{D}_s (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) + (\langle C_i \rangle^l - \bar{C}_{si}) \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s)
\end{aligned} \tag{3.166}$$

$$\begin{aligned}
\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \cdot \nabla \langle C_s \rangle^s &= -\phi_s \rho_s \frac{\partial \langle C_s \rangle^s}{\partial t} + (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) \left[ \frac{\partial (\phi_s \rho_s)}{\partial t} \right] \\
&+ \tilde{D}_s (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) + (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s)
\end{aligned} \tag{3.167}$$

Substituindo na equação macroscópica de conservação de energia da mistura

$$\begin{aligned}
& \langle h_i \rangle^l \frac{\partial}{\partial t} (\phi_i \rho_i) + \langle h_s \rangle^s \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s) \\
& \left[ \phi_i \rho_i \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial T} \Big|_{\langle C_i \rangle^l} + \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \Big|_{\langle C_s \rangle^s} \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \phi_i \rho_i \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial \langle C_i \rangle^l} \Big|_{T_i} \frac{\partial \langle C_i \rangle^l}{\partial t} + \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial \langle C_s \rangle^s} \Big|_{T_s} \frac{\partial \langle C_s \rangle^s}{\partial t} + \\
& \phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^l \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial T} \Big|_{\langle C_i \rangle^l} \cdot \nabla T + \phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \Big|_{\langle C_s \rangle^s} \cdot \nabla T + \\
& \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial \langle C_i \rangle^l} \Big|_{T_i} \left\{ -\phi_i \rho_i \frac{\partial \langle C_i \rangle^l}{\partial t} + [\nabla \cdot (\phi_i \rho_i D_i^* \nabla \langle C_i \rangle^l)] \right. \\
& \left. + (\langle C_i \rangle^l - \bar{C}_{si}) \frac{\partial (\phi_s \rho_s)}{\partial t} - (\bar{C}_{si}) \Gamma_{si} - \tilde{D}_s (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) + (\langle C_i \rangle^l - \bar{C}_{si}) \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \right\} \\
& + \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial \langle C_s \rangle^s} \Big|_{T_s} \left\{ -\phi_s \rho_s \frac{\partial \langle C_s \rangle^s}{\partial t} + (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s) \right] \right. \\
& \left. + \tilde{D}_s (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) + (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \right\} \\
& + \langle h_i \rangle^l \nabla \cdot (\phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^l) + \langle h_s \rangle^s \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) = \\
& \nabla \cdot [(\phi_i k_i + \phi_s k_s) \nabla T]
\end{aligned} \tag{3.168}$$

ou

$$\begin{aligned}
& \left[ \phi_i \rho_i \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial T} \Big|_{\langle C_i \rangle^l} + \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \Big|_{\langle C_s \rangle^s} \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \phi_i \rho_i \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial \langle C_i \rangle^l} \Big|_{T_i} \frac{\partial \langle C_i \rangle^l}{\partial t} + \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial \langle C_s \rangle^s} \Big|_{T_s} \frac{\partial \langle C_s \rangle^s}{\partial t} + \\
& \phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^l \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial T} \Big|_{\langle C_i \rangle^l} \cdot \nabla T + \phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \Big|_{\langle C_s \rangle^s} \cdot \nabla T \\
& + \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial \langle C_i \rangle^l} \Big|_{T_i} \left\{ -\phi_i \rho_i \frac{\partial \langle C_i \rangle^l}{\partial t} + [\nabla \cdot (\phi_i \rho_i D_i^* \nabla \langle C_i \rangle^l)] \right. \\
& \left. + (\langle C_i \rangle^l - \bar{C}_{si}) \frac{\partial (\phi_s \rho_s)}{\partial t} - \tilde{D}_s (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) + (\langle C_i \rangle^l - \bar{C}_{si}) \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \right\} \\
& + \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial \langle C_s \rangle^s} \Big|_{T_s} \left\{ -\phi_s \rho_s \frac{\partial \langle C_s \rangle^s}{\partial t} + (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s) \right] \right. \\
& \left. + \tilde{D}_s (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) + (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \right\} \\
& + \langle h_i \rangle^l \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_i \rho_i) + \nabla \cdot (\phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^l) \right] + \langle h_s \rangle^s \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s) + \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \right] = \\
& \nabla \cdot [(\phi_i k_i + \phi_s k_s) \nabla T]
\end{aligned} \tag{3.169}$$

Considerando agora (Schneider e Beckermann-1992):

$$\frac{\bar{C}_{si}}{\langle C_i \rangle^l} = \kappa_s \left( \langle C_i \rangle^l \right) \quad (3.170)$$

Observe-se que trata-se de uma função e não de uma multiplicação.

A escala de tempo na qual ocorrerá a difusão macroscópica de espécies na fase líquida é muito maior do que a escala de tempo envolvida na condução de calor e mudança de fase (Schneider e Beckermann-1992). Portanto, parece ser razoável assumir que na equação de conservação da energia:

$$\frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial \langle C_i \rangle^l} \bigg|_{T_i} \nabla \cdot (\phi_l \rho_l D_i^* \nabla \langle C_i \rangle^l) \approx 0 \quad (3.171)$$

$$\nabla \cdot \left\{ \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial \langle C_i \rangle^l} \bigg|_{T_i} \phi_l \rho_l D_i^* \nabla \langle C_i \rangle^l \right\} \approx 0 \quad (3.172)$$

Assim

$$\begin{aligned} & \left[ \phi_l \rho_l \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial T} \bigg|_{\langle C_i \rangle^l} + \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \bigg|_{\langle C_s \rangle^s} \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \phi_l \rho_l \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial \langle C_i \rangle^l} \bigg|_{T_i} \frac{\partial \langle C_i \rangle^l}{\partial t} + \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial \langle C_s \rangle^s} \bigg|_{T_s} \frac{\partial \langle C_s \rangle^s}{\partial t} \\ & + \phi_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial T} \bigg|_{\langle C_i \rangle^l} \cdot \nabla T + \phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \bigg|_{\langle C_s \rangle^s} \cdot \nabla T \\ & + \frac{\partial \langle h_i \rangle^l}{\partial \langle C_i \rangle^l} \bigg|_{T_i} \left\{ -\phi_l \rho_l \frac{\partial \langle C_i \rangle^l}{\partial t} - \tilde{D}_s (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) + \langle C_i \rangle^l (1 - \kappa) \left[ \frac{\partial (\phi_s \rho_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \right] \right\} \\ & + \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial \langle C_s \rangle^s} \bigg|_{T_s} \left\{ -\phi_s \rho_s \frac{\partial \langle C_s \rangle^s}{\partial t} + (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) \left[ \frac{\partial (\phi_s \rho_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \right] + \tilde{D}_s (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) \right\} \\ & + \langle h_i \rangle^l \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_l \rho_l) + \nabla \cdot (\phi_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l) \right] + \langle h_s \rangle^s \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s) + \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \right] = \\ & \nabla \cdot [(\phi_l k_l + \phi_s k_s) \nabla T] \end{aligned} \quad (3.173)$$

Em determinadas situações, pode-se simplificar a equação acima considerando que a entalpia é função apenas da temperatura:

$$d\langle h_k \rangle^k = \frac{\partial \langle h_k \rangle^k}{\partial \langle T_k \rangle^k} \Big|_{\langle C_k \rangle^k} d\langle T_k \rangle^k \quad (3.174)$$

Assim

$$\begin{aligned} & \left[ \phi_i \rho_i \frac{\partial \langle h_i \rangle^i}{\partial T} \Big|_{\langle C_i \rangle^i} + \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \Big|_{\langle C_s \rangle^s} \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^i \frac{\partial \langle h_i \rangle^i}{\partial T} \Big|_{\langle C_i \rangle^i} \cdot \nabla T + \\ & \phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \Big|_{\langle C_s \rangle^s} \cdot \nabla T + \langle h_i \rangle^i \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_i \rho_i) + \nabla \cdot (\phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^i) \right] + \\ & \langle h_s \rangle^s \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s) + \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \right] = \nabla \cdot [(\phi_i k_i + \phi_s k_s) \nabla T] \end{aligned} \quad (3.175)$$

Introduzindo a equação macroscópica de conservação da massa para a mistura:

$$\nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) + \nabla \cdot (\phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^i) = - \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s + \phi_i \rho_i) \quad (3.176)$$

então

$$\begin{aligned} & \left[ \phi_i \rho_i \frac{\partial \langle h_i \rangle^i}{\partial T} \Big|_{\langle C_i \rangle^i} \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^i \frac{\partial \langle h_i \rangle^i}{\partial T} \Big|_{\langle C_i \rangle^i} \cdot \nabla T + \left\{ \phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \Big|_{\langle C_s \rangle^s} \cdot \nabla T \right\}'' = \\ & \nabla \cdot [(\phi_i k_i + \phi_s k_s) \nabla T] - \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \Big|_{\langle C_s \rangle^s} \frac{\partial T}{\partial t} + (\langle h_i \rangle^i - \langle h_s \rangle^s) \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s) + \nabla \cdot (\phi_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \right] \end{aligned} \quad (3.177)$$

Se for o caso de  $\langle \mathbf{v}_s \rangle^s = 0$  então

$$\begin{aligned} & \left[ \phi_i \rho_i \frac{\partial \langle h_i \rangle^i}{\partial T} \Big|_{\langle C_i \rangle^i} + \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \Big|_{\langle C_s \rangle^s} \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \phi_i \rho_i \langle \mathbf{v}_i \rangle^i \frac{\partial \langle h_i \rangle^i}{\partial T} \Big|_{\langle C_i \rangle^i} \cdot \nabla T \\ & - (\langle h_i \rangle^i - \langle h_s \rangle^s) \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s) \right] = \nabla \cdot [(\phi_i k_i + \phi_s k_s) \nabla T] \end{aligned} \quad (3.178)$$

### 3.7 – Equação de Conservação de Espécies

A equação microscópica de conservação para as espécies ( $\alpha$ ) para uma dada fase ( $k$ ) é:

$$\frac{\partial(\rho_k C_k^\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k C_k^\alpha \mathbf{V}_k) + \nabla \cdot (-\rho_k D_k \nabla C_k^\alpha) = 0 \quad (3.179)$$

A respectiva equação macroscópica para uma dada fase é:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\varepsilon_k \rho_k \langle C_k^\alpha \rangle^k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_k \rho_k \langle C_k^\alpha \rangle^k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k) = & -\nabla \cdot (-\varepsilon_k \mathbf{D}_k^{*\alpha} \cdot \rho_k \langle \nabla C_k^\alpha \rangle^k + \langle \rho_k \hat{C}_k^\alpha \hat{\mathbf{v}}_k \rangle) \\ - \bar{C}_{kj}^\alpha \Gamma_{kj} - \frac{A_k}{V_0} \rho_k \frac{D_k^\alpha}{\ell_{kj}^j} (\bar{C}_k^\alpha - \langle C_k^\alpha \rangle^k) \end{aligned} \quad (3.180)$$

Considerando a fase líquida, a equação macroscópica é (Schneider e Beckermann-1992):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_l \rho_l \langle C_l^m \rangle^l) + \nabla \cdot [\varepsilon_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \langle C_l^m \rangle^l] = -\nabla \cdot \langle \mathbf{j}_l \rangle + J_l^\Gamma + J_l^J \quad (3.181)$$

Expandindo as derivadas da equação acima e considerando os balanços nas interfaces, a equação de conservação de espécies na fase líquida pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \varepsilon_l \rho_l \frac{\partial}{\partial t} (\langle C_l^m \rangle^l) + \langle C_l^m \rangle^l \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_l \rho_l) + \varepsilon_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \cdot \nabla \langle C_l^m \rangle^l + \\ \langle C_l^m \rangle^l \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l) = -\nabla \cdot \langle \mathbf{j}_l \rangle - J_s^\Gamma - J_s^J \end{aligned} \quad (3.182)$$

Considerando agora a equação macroscópica de conservação de massa para o caso de  $\langle \mathbf{v}_s \rangle^s \neq 0$ ):

$$\frac{\partial(\varepsilon_l \rho_l)}{\partial t} + \frac{\partial(\varepsilon_s \rho_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) = 0$$

ou

$$\nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l) = -\frac{\partial(\varepsilon_l \rho_l)}{\partial t} - \frac{\partial(\varepsilon_s \rho_s)}{\partial t} - \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \quad (3.183)$$

e substituindo obtém-se

$$\begin{aligned} & \varepsilon_l \rho_l \frac{\partial}{\partial t} (\langle C_l^m \rangle^l) + \langle C_l^m \rangle^l \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_l \rho_l) + \varepsilon_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \cdot \nabla \langle C_l^m \rangle^l \\ & + \langle C_l^m \rangle^l \left[ -\frac{\partial(\varepsilon_l \rho_l)}{\partial t} - \frac{\partial(\varepsilon_s \rho_s)}{\partial t} - \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \right] = -\nabla \cdot \langle \mathbf{j}_l \rangle - J_s^\Gamma - J_s^J \\ & \varepsilon_l \rho_l \frac{\partial}{\partial t} (\langle C_l^m \rangle^l) + \varepsilon_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \cdot \nabla \langle C_l^m \rangle^l - \langle C_l^m \rangle^l \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) = \\ & -\nabla \cdot \langle \mathbf{j}_l \rangle + \langle C_l^m \rangle^l \frac{\partial(\varepsilon_s \rho_s)}{\partial t} - J_s^\Gamma - J_s^J \end{aligned} \quad (3.184)$$

A transferência de espécies nas interfaces devido a mudança de fase foi modelada por Ni and Beckermann-1991 como:

$$J_s^\Gamma = (\bar{C}_{si}) \Gamma_{sl} \quad (3.185)$$

A transferência de espécies nas interfaces devido a convecção e/ou difusão foi também modelada por Ni and Beckermann-1991 como:

$$J_s^J = \tilde{D}_s (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) \quad (3.186)$$

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{j}_l \rangle = -\nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \mathbf{D}_l^* \nabla \langle C_l \rangle^l) \quad (3.187)$$

Assim

$$\begin{aligned} & \varepsilon_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \cdot \nabla \langle C_l \rangle^l = -\varepsilon_l \rho_l \frac{\partial \langle C_l \rangle^l}{\partial t} + \left[ \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \mathbf{D}_l^* \nabla \langle C_l \rangle^l) \right] \\ & + \langle C_l \rangle^l \frac{\partial(\varepsilon_s \rho_s)}{\partial t} - (\bar{C}_{si}) \Gamma_{sl} - \tilde{D}_s (\bar{C}_{si} - \langle C_s \rangle^s) + \langle C_l \rangle^l \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \end{aligned} \quad (3.188)$$

A partir da equação de conservação da massa (Schneider e Beckermann-1992)

$$\Gamma_{sl} = \frac{\partial(\varepsilon_s \rho_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \quad (3.189)$$

reescrevendo a equação acima

$$\begin{aligned} \varepsilon_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \cdot \nabla \langle C_l \rangle^l &= -\varepsilon_l \rho_l \frac{\partial \langle C_l \rangle^l}{\partial t} + \left[ \nabla \cdot (\varepsilon_l \rho_l \mathbf{D}_l^* \nabla \langle C_l \rangle^l) \right] \\ &+ (\langle C_l \rangle^l - \bar{C}_{sl}) \frac{\partial(\varepsilon_s \rho_s)}{\partial t} - \tilde{D}_s (\bar{C}_{sl} - \langle C_s \rangle^s) + (\langle C_l \rangle^l - \bar{C}_{sl}) \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \end{aligned} \quad (3.190)$$

Para a fase sólida (já na forma expandida) e considerando

$$\mathbf{J}_l^\Gamma + \mathbf{J}_l^J = \mathbf{J}_s^\Gamma + \mathbf{J}_s^J \quad (3.191)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_s \rho_s \frac{\partial}{\partial t} (\langle C_s^m \rangle^s) + \langle C_s^m \rangle^s \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s) + \varepsilon_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \cdot \nabla \langle C_s^m \rangle^s + \\ \langle C_s^m \rangle^s \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) = -\nabla \cdot \langle \mathbf{j}_s \rangle + J_s^\Gamma + J_s^J \end{aligned} \quad (3.192)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \cdot \nabla \langle C_s \rangle^s = -\langle C_s \rangle^s \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) - \varepsilon_s \rho_s \frac{\partial}{\partial t} (\langle C_s \rangle^s) - \langle C_s \rangle^s \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s) \\ + \left[ \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \mathbf{D}_s^* \nabla \langle C_s \rangle^s) \right] + (\bar{C}_{sl}) \left[ \frac{\partial(\varepsilon_s \rho_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \right] + \tilde{D}_s (\bar{C}_{sl} - \langle C_s \rangle^s) \end{aligned} \quad (3.193)$$

$\mathbf{D}_s^* = 0$  (Schneider e Beckermann-1992) se todos os fluxos macroscópicos de espécies no sólido são considerados pequenos.

$$\begin{aligned} \varepsilon_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \cdot \nabla \langle C_s \rangle^s = -\varepsilon_s \rho_s \frac{\partial}{\partial t} (\langle C_s \rangle^s) + (\bar{C}_{sl} - \langle C_s \rangle^s) \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_s \rho_s) \right] \\ + \tilde{D}_s (\bar{C}_{sl} - \langle C_s \rangle^s) + (\bar{C}_{sl} - \langle C_s \rangle^s) \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \end{aligned} \quad (3.194)$$



## CAPÍTULO 4 – MATERIAIS E MÉTODOS

### 4.1 – Informações sobre o sistema SCN-Acetona

Succinonitrila (SCN) é um material orgânico transparente que é utilizado por apresentar características de solidificação análogas às dos metais (Glicksmann et al.-1976). A substância Succinonitrila quando exposta ao ambiente por um determinado período de tempo começa a se degradar tendendo a perder a sua transparência. Por este motivo, o material foi utilizado com um grau de pureza de 99,9%. Foram realizados vários experimentos utilizando-se a liga SCN-Acetona com diferentes teores de Acetona. A Figura 4.1 apresenta o diagrama de fases da liga SCN-Acetona.

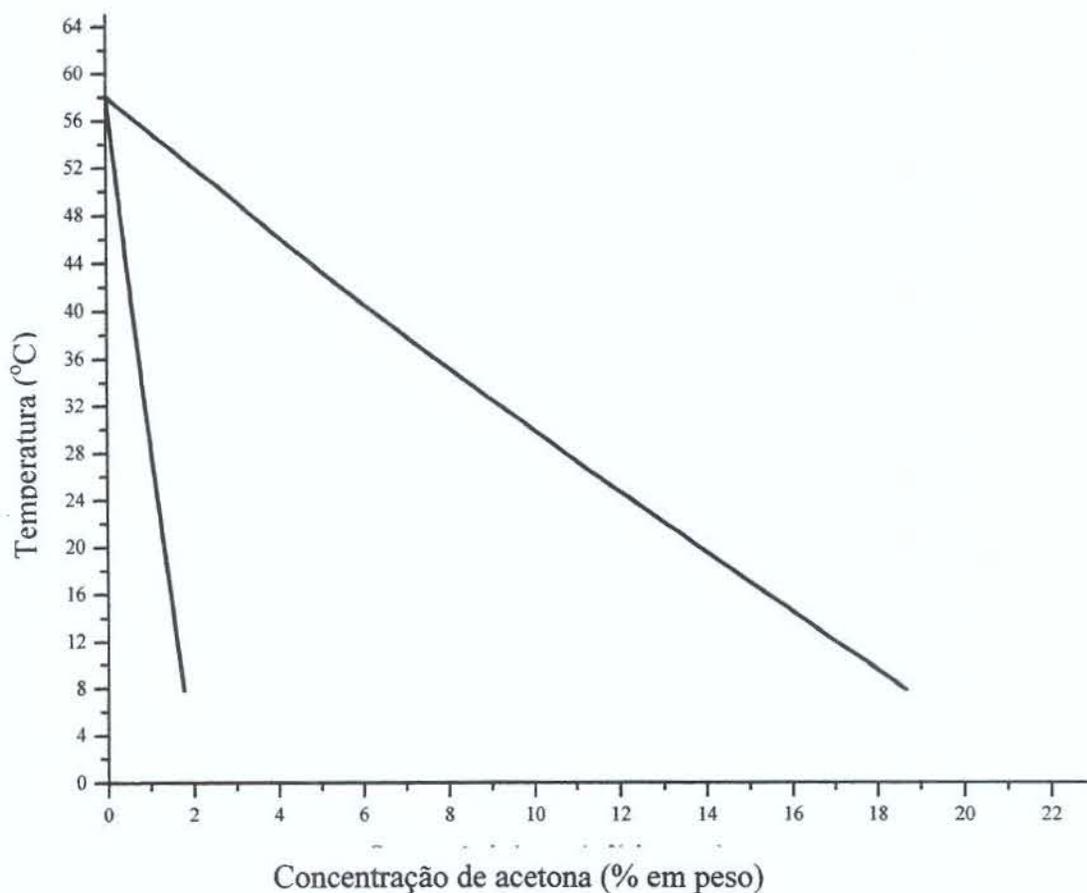


Figura 4.1 – Diagrama de fases do sistema SCN-Acetona.

#### 4.2 – Determinação da Composição das Ligas de SCN-Acetona

O grau de pureza das amostras de succinonitrila para a realização dos experimentos foi determinado obedecendo o seguinte procedimento. A temperatura *liquidus* das amostras era obtida através da colocação de cerca de 1,5 ml da substância numa tubo de ensaio. Este tubo, devidamente selado, era parcialmente mergulhado num trocador de calor de precisão, o qual possibilitava a elevação ou a redução da temperatura da amostra com 0,1 °C de precisão. Através da observação visual e agitação da amostra, associava-se a fusão do último fragmento de sólido ou o aparecimento do primeiro fragmento de sólido com a temperatura *liquidus* da amostra em teste. Este procedimento era repetido pelo menos 3 vezes sem grandes alterações nos valores de temperatura *liquidus* obtidos. A seguir, utilizava-se a equação termodinâmica conhecida como lei de Raoult para o cálculo da pureza da substância:

$$\ln x_i = \frac{h_{if}(T_f - T_{f,o})}{RT_{f,o}T_f}$$

$x_i$  = grau de pureza da amostra expressa em termos de porcentagem molar

$T_{f,o}$  = temperatura de fusão do SCN puro

$h_{if}$  = entalpia de fusão

$T_f$  = temperatura *liquidus* medida determinada experimentalmente

$R$  = constante dos gases

Como um exemplo do cálculo, suponhamos os seguintes dados:

$T_f$  = 330.7 K (temperatura *liquidus* medida experimentalmente)

$T_{f,o}$  = 331.083 K (ponto de fusão do SCN puro)

$h_{if}$  = 3702.8 KJ/kmol (entalpia de fusão)

$R$  = 8.314 KJ/kmolK (constante molar dos gases)

Considerando os dados acima, o grau de pureza, em moles por cento, seria 99,84%.

### 4.3 - Construção do Aparato Experimental Para a Realização de Experimentos com Compostos Orgânicos

A Figura 4.2a mostra uma representação esquemática em corte do aparato experimental construído para a realização de experimentos com compostos orgânicos. O dispositivo apresentado permite a realização de experimentos com a solidificação direcional combinada ou não com a aplicação de deformação através da movimentação da parede vertical do lado esquerdo.

O simulador é constituído de um molde no qual uma das paredes verticais corresponde a uma coquilha de cobre refrigerada com circulação de água internamente, paredes laterais de plástico transparente (plexiglass). A base e a parede oposta ao molde de cobre são fabricadas a partir de resina fenólica. Com a utilização de materiais de baixa condutividade térmica (plexiglass e resina fenólica) em relação ao cobre, é possível a obtenção de crescimento de uma estrutura colunar a partir do molde de cobre e evita-se a solidificação sobre as paredes de plástico transparente, possibilitando a visualização do desenvolvimento da solidificação no interior do molde. Utiliza-se uma câmara de vídeo para a gravação dos padrões de convecção, 36 termopares do tipo T para o registro da evolução de temperaturas, um sistema de aquisição de dados computadorizado e um sistema de seringas para coleta de líquido para análise de composição química. O simulador ainda permite que desloque-se a parede de cobre de modo a simular os efeitos da aplicação de deformação no grau e na distribuição da macrossegregação.

O equipamento projetado e construído permite assim a visualização e o registro das imagens do padrão de convecção no metal líquido, a medição da deformação da fase sólida, o monitoramento das temperaturas por um conjunto de termopares acoplado a um sistema computacional de aquisição de dados e a retirada de amostras para a análise da composição do líquido em várias etapas de um experimento. Os termopares são distribuídos em vários pontos dentro da célula de teste e nas paredes da mesma de forma tal que as condições de solidificação assumidas, solidificação direcional, possam ser conferidas. Emprega-se ainda um conjunto de pequenas esferas de plástico sustentadas por fios de tecido. Este conjunto possibilita obter informações sobre a deformação da fase sólida através da análise do deslocamento das esferas durante a movimentação da parede esquerda da célula de teste.

A Figura 4.2b apresenta um esquema da deformação da zona pastosa. Nesta figura observar-se os sistemas de coordenadas utilizado para descrever o deslocamento da parede móvel ( $X,Y$ ) e da fase sólida relativa a esta mesma parede ( $x,y$ ). O conjunto de esferas de plástico é fixado na parede móvel assim como o conjunto de termopares, com exceção daqueles termopares posicionados na parede fixa

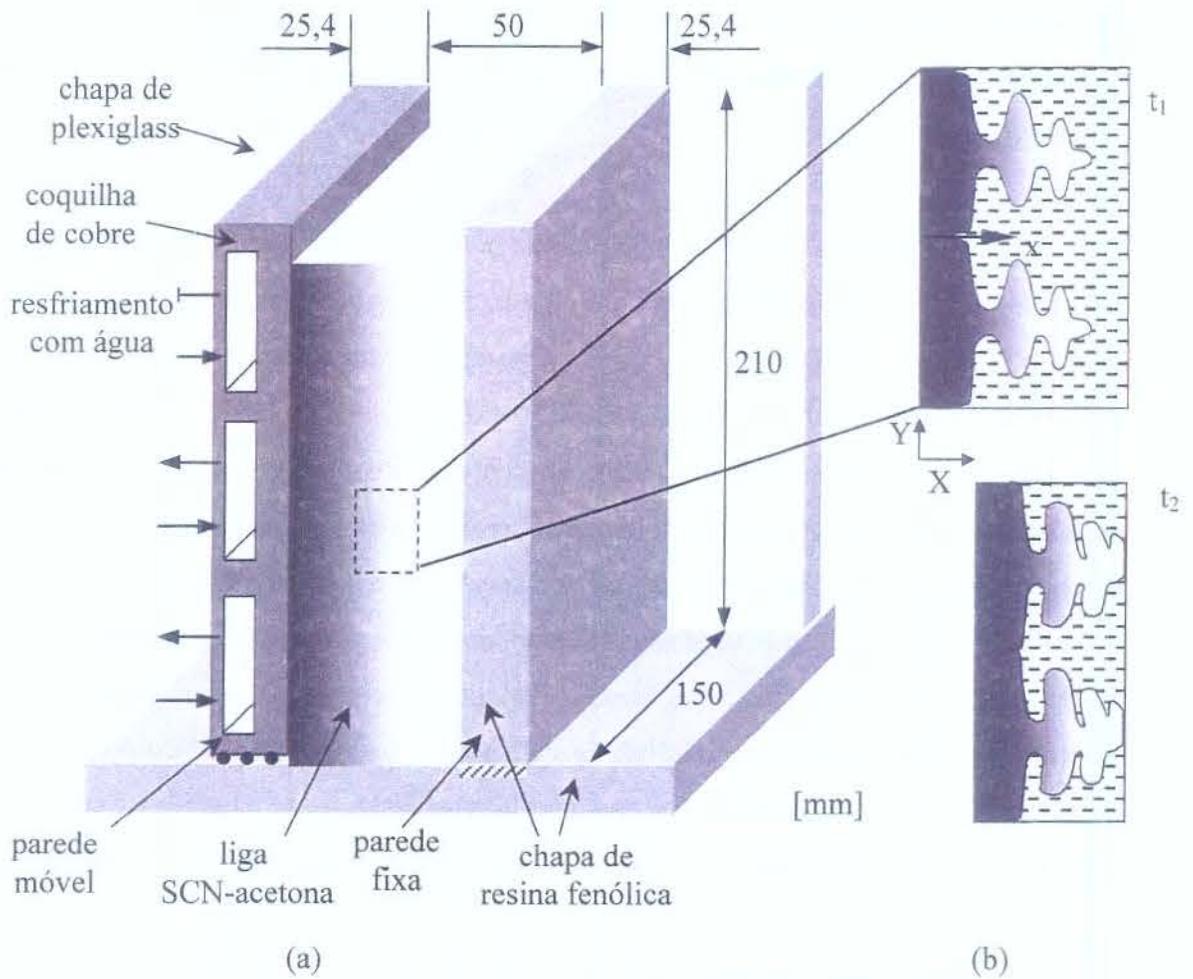
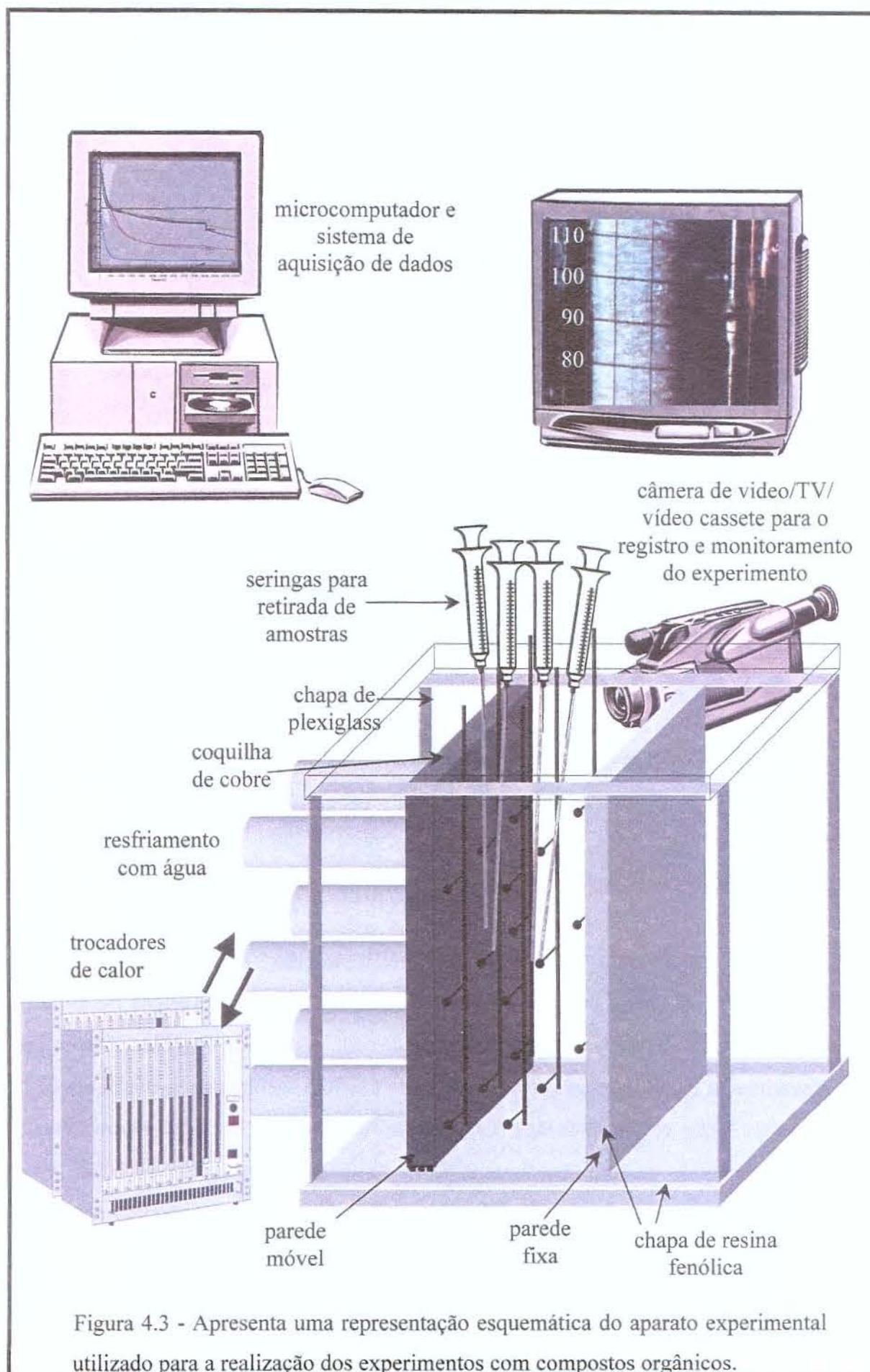


Figura 4.2 – a) Desenho esquemático em corte da seção transversal do dispositivo construído para a realização dos experimentos; apenas uma parte dos termopares utilizados são apresentados. b) representação esquemática da deformação da zona 'pastosa'.

A Figura 4.3 apresenta uma representação esquemática do aparato experimental utilizado para a realização dos experimentos com compostos orgânicos. A Figura 4.4 apresenta as posições e a numeração correspondente dos termopares utilizados.



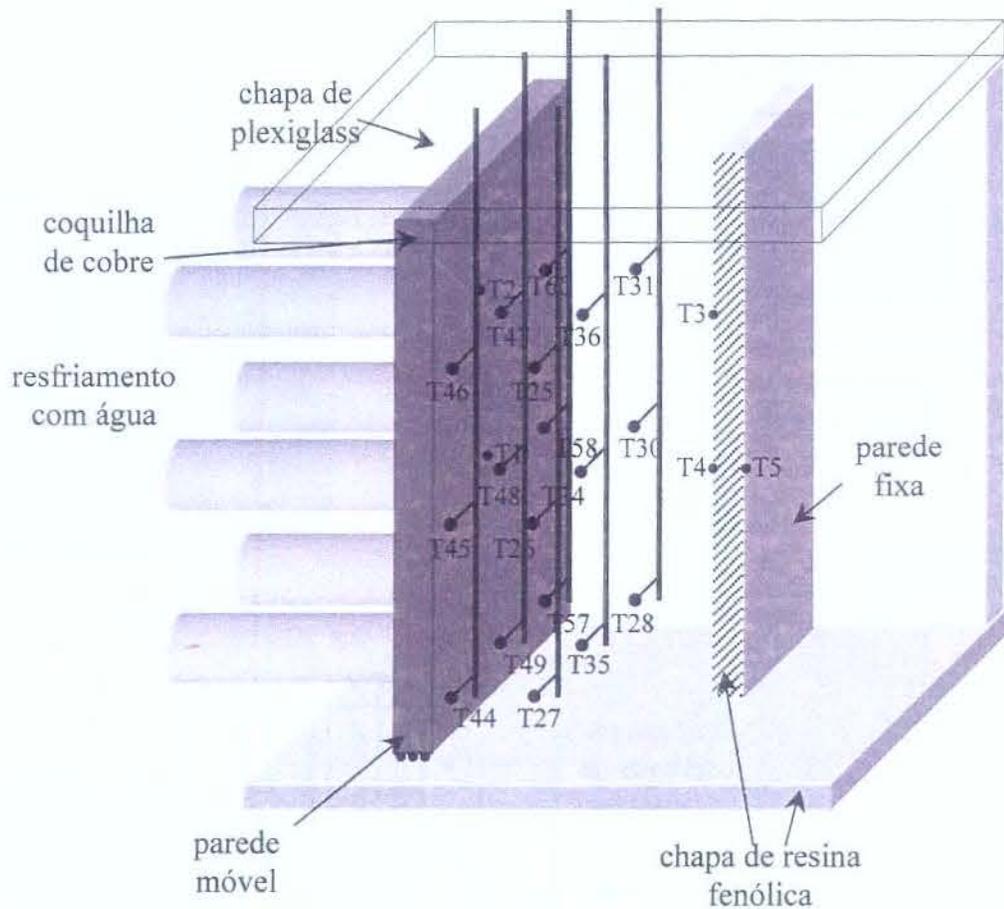


Figura 4.4 – Posições dos termopares e a correspondente numeração dos mesmos.

#### 4.4 - Metodologia Empregada na Elaboração, Vazamento e Solidificação das Ligas

A metodologia empregada na realização dos experimentos constituía-se do aquecimento da célula de teste, já preenchida com a liga SCN-Acetona no estado pastoso, fazendo-se circular água a uma temperatura de 55°C através da coquilha. Nota-se que para o experimento escolhido para apresentação neste trabalho, a composição inicial era de 11.3% de acetona, o que corresponde uma temperatura *liquidus* é de 26,1 °C e com uma fração de inicial de sólido de aproximadamente 0,176 à temperatura ambiente de 20°C. Após todo o material passar para o estado líquido, com um certo grau de super-aquecimento e com uma distribuição aproximadamente uniforme de temperatura, a etapa de resfriamento era iniciada e se estendia até que a fração de sólido pretendida para o início da aplicação da deformação fosse atingida.

As principais propriedades termofísicas (Trivedi-1984, Lee e Brown-1993, Kurz e Fisher-1992, Carey-1992) do sistema SCN-Acetona e para a composição com 11.3 % de Acetona são fornecidas na Tabela 4.1.

Tabela 4.1 - Propriedades termofísicas do sistema SCN-Acetona

Propriedade	Unidade	Estado líquido	Estado sólido
Coefficiente de difusão	m <sup>2</sup> /s	1,27 x 10 <sup>-9</sup>	-
Calor latente de fusão	J/kg	52.140,0	
Calor específico	KJ/kgK	2,0	1,96
Condutividade térmica	W/mK	0,217	0,225
Massa específica	g/cm <sup>3</sup>	0,958	0,1016
Coefficiente de partição no equilíbrio	-	0,1	



## CAPÍTULO 5 – IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA DOS MODELOS DESENVOLVIDOS

### 5.1 – Introdução

A aplicação dos modelos matemáticos apresentados anteriormente às equações de conservação de massa para a mistura, conservação de energia para a mistura, conservação de espécies para a fase líquida, conservação de espécies para a fase sólida, conservação de momento para a fase líquida e conservação de momento para a fase sólida, juntamente com os coeficientes das equações constitutivas que descrevam a deformação plástica da fase sólida quando submetida a uma solitação mecânica (comportamento sob tensão), permitiriam a simulação dos efeitos da deformação visco-plástica da fase sólida na distribuição de espécies (em escalas micro e macroscópicas), distribuição de temperatura e de velocidades das fases, para uma liga multicomponente em processo de solidificação e após a completa solidificação, para situações de fluxo de calor em regime transiente ou não, levando-se em conta os efeitos de condução e convecção termo-soluto e de diversos modos de redistribuição de espécies em escala microscópica (modelos de microsegregação).

A princípio, o modelo matemático desenvolvido permite simular o efeito da deformação plástica da zona pastosa. Entretanto, para a aplicação deste modelo, torna-se necessário o conhecimento do comportamento mecânico de uma zona pastosa na qual a fração de sólido varia ao longo da seção. Contudo, considerando-se a extensão da revisão da literatura realizada, não se dispõe de dados a este respeito. Além disto, existe uma série de complicações numéricas que demandarão tempo para serem resolvidas quando da implementação da resolução simultânea das equações de conservação de momento para as fases sólida e líquida. Por estas razões, optou-se neste trabalho pela implementação inicial de um modelo matemático mais simplificado, que entretanto, possibilita o estudo de diversos fenômenos inerentes ao problema em discussão.

Como um exemplo da implementação das equações desenvolvidas anteriormente, considera-se o caso da fase sólida estar aderida à parede do molde e que a mesma (fase sólida) comporta-se como se fosse rígida. Todavia, admite-se que seja possível o movimento por translação desta fase. Devido ao processo de translação, as equações devem passar por uma etapa de transformação de coordenadas, de modo a possibilitar a consideração de que  $\langle v_s \rangle^s = 0$ , simplificando o modelo numérico a ser implementado.

Deve-se salientar ainda que a transformação de coordenadas permite a inclusão da variação de forma do domínio e a dinâmica de deformação do mesmo na resolução das equações de conservação apresentadas anteriormente.

## 5.2 - Modelo Unidimensional

A função  $A(t)$  na equação 3.17 está relacionada com o padrão de deformação assumido para a fase sólida. A Figura 5.1 apresenta 4 casos para a deformação da malha no caso unidimensional de acordo com o padrão de deformação assumido para a fase sólida. Considera-se que uma deformação é do tipo uniforme se a malha estiver deformando ao longo de toda a sua extensão. Uma deformação não-uniforme restringe-se a apenas parte da malha. A deformação é do tipo homogênea se a parte da malha que esta deformando o faz com o mesmo grau de deformação para todas as malhas, do contrário a deformação é assumida como heterogênea. Considera-se que a velocidade de deformação da malha é constante durante o todo o período de aplicação da deformação.

Considerando o padrão de deformação uniforme e homogêneo, o mesmo pode ser descrito utilizando-se a seguinte equação para a função  $A(t)$ ,

$$A(t) = \frac{Sc}{Sc_{in}} = \left[ 1 - \frac{Sc_{in} - Sc_{fi}}{Sc_{in}} \left( \frac{t - t_{in}}{t_{fi} - t_{in}} \right) \right] \quad (5.1)$$

onde  $t_{in}$  e  $t_{fi}$  correspondem ao tempo de início e de fim da aplicação da deformação,  $Sc_{in}$  e  $Sc_{fi}$  são as larguras inicial e final do domínio e  $Sc$  é a largura do domínio (variável) durante a deformação. A velocidade de deslocamento da malha é dada por:

$$(x_{\tau})'_i = \frac{i}{n} \frac{(Sc^i - Sc^{i-1})}{\Delta t} \quad (5.2)$$

ou ainda

$$(x_{\tau})'_i = \frac{i}{n} \frac{[A(t)^i - A(t)^{i-1}] Sc_{in}}{\Delta t} \quad (5.3)$$

onde  $n$  e  $i$  referem-se ao número máximo de nós e a posição de um determinado nó respectivamente ( $i$  varia de 0 a  $n$ ).

Para o caso de deformação não-uniforme e homogênea (Figura 5.1b), as equações que governam o fenômeno são:

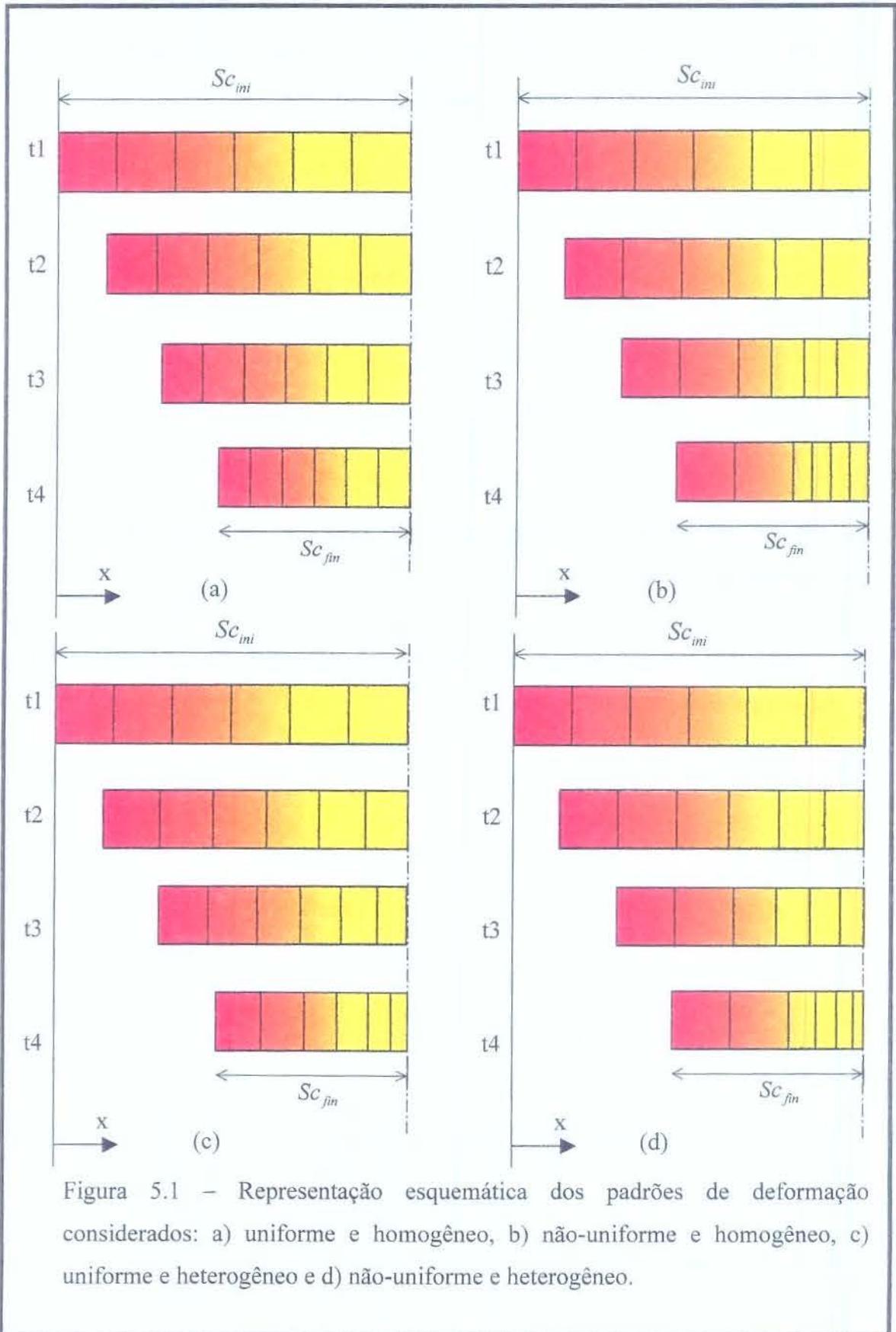
$$A(t) = 1 \quad \text{for } x \leq x_{nd} \quad (5.4)$$

$$A(t) = \left[ \frac{Sc_{in} - x_{nd}}{Sc_{in}} - \frac{Sc_{in} - Sc_{fi}}{Sc_{in}} \left( \frac{t - t_{in}}{t_{fi} - t_{in}} \right) \right] \quad \text{for } x > x_{nd} \quad (5.5)$$

$$(x_{\tau})'_i = 0 \quad \text{for } x \leq x_{nd} \quad (5.6)$$

$$(x_{\tau})'_i = \frac{i - i_{nd}}{n - i_{nd}} \frac{[A(t)^i - A(t)^{i-1}] Sc_{in}}{\Delta t} \quad \text{for } x > x_{nd} \quad (5.7)$$

onde  $x_{nd}$  correspondem a posição  $x$  além da qual a deformação acontece



As equações propostas para descrever o caso que obedece a um padrão de deformação uniforme e heterogêneo (Figura 5.1c) são escritas na forma de equações do tipo exponencial:

$$\xi = xA(t) = m_t L^{b_t} \quad (5.8)$$

$$L = x \frac{L_{\max}}{x_{\max,t}} \quad (5.9)$$

$$A(t) = m_t x^{b_t-1} \left( \frac{L_{\max}}{x_{\max,t}} \right)^{b_t} \quad (5.10)$$

$$\xi = xA(t) = m_t x^{b_t-1} \left( \frac{L_{\max}}{x_{\max,t}} \right)^{b_t} x \quad (5.11)$$

$$(x_\tau)_i^l = \frac{\left[ m_t \left( x \frac{L_{\max}}{x_{\max,t}} \right)^{b_t} \right]^l - \left[ m_t \left( x \frac{L_{\max}}{x_{\max,t}} \right)^{b_t} \right]^{l-1}}{\Delta t} \quad (5.12)$$

onde  $L$  é relativo a uma dada posição no domínio,  $m_t$  e  $b_t$  são os coeficientes da equação exponencial e variam com o tempo,  $L_{\max}$  é o número do nó relativo a posição  $x_{\max,t}$  de máxima largura do domínio para um dado tempo.

Para um padrão de deformação não-uniforme e heterogêneo (Figura 5.1d) o equacionamento proposto é apresentado a seguir:

$$\xi = xA(t) = m_t L^{b_t} \quad (5.13)$$

onde:

$$A(t) = 1 \quad \text{e} \quad (x_\tau)_i^l = 0 \quad \text{para } x \leq x_{nd} \quad (5.14)$$

$$L = (x - x_{nd}) \frac{(L_{\max} - L_{nd})}{(x_{\max,t} - x_{nd})} + L_{nd} \quad (5.15)$$

$$(x_\tau)_i^l = \frac{\left[ m_t \left( x \frac{L_{\max}}{x_{\max,t}} \right)^{b_t} \right]^l - \left[ m_t \left( x \frac{L_{\max}}{x_{\max,t}} \right)^{b_t} \right]^{l-1}}{\Delta t} \quad \text{para } x > x_{nd} \quad (5.16)$$

Apresenta-se agora a equação de conservação de energia na forma transformada para a situações propostas na Figura 5.1. Para o primeiro caso tem-se:

$$\frac{\partial A(t)}{\partial \tau} = - \frac{Sc_{in} - Sc_{fi}}{Sc_{in}(t_{fi} - t_{in})} \quad (5.17)$$

e substituindo as equações 5.1 e 5.17 na equação 3.17 resulta em

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial \tau} \left[ 1 - \frac{Sc_{in} - Sc_{fi}}{Sc_{in}(t_{fi} - t_{in})} (t - t_{in}) \right] + \frac{Sc_{in} - Sc_{fi}}{Sc_{in}(t_{fi} - t_{in})} H = k \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} \left[ 1 - \frac{Sc_{in} - Sc_{fi}}{Sc_{in}(t_{fi} - t_{in})} (t - t_{in}) \right]^3 \\ + x_\tau \frac{\partial H}{\partial \xi} \left[ 1 - \frac{Sc_{in} - Sc_{fi}}{Sc_{in}(t_{fi} - t_{in})} (t - t_{in}) \right]^2 \end{aligned} \quad (5.18)$$

Para o caso não-uniforme e homogêneo tem-se:

$$\text{para } x \leq x_{nd} \quad \frac{\partial A(t)}{\partial \tau} = 0; \quad (x_\tau)_i^l = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial H}{\partial \tau} = k \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} \quad (5.19)$$

$$\text{para } x > x_{nd} \quad \frac{\partial A(t)}{\partial \tau} = - \frac{Sc_{in} - Sc_{fi}}{Sc_{in}(t_{fi} - t_{in})} \quad \text{e}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial \tau} \left[ \frac{Sc_{in} - x_{nd}}{Sc_{in}} - \frac{Sc_{in} - Sc_{fi}}{Sc_{in}} \left( \frac{t - t_{in}}{t_{fi} - t_{in}} \right) \right] + \frac{Sc_{in} - Sc_{fi}}{Sc_{in}(t_{fi} - t_{in})} H = \\ k \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} \left[ \frac{Sc_{in} - x_{nd}}{Sc_{in}} - \frac{Sc_{in} - Sc_{fi}}{Sc_{in}} \left( \frac{t - t_{in}}{t_{fi} - t_{in}} \right) \right]^3 + x_\tau \frac{\partial H}{\partial \xi} \left[ \frac{Sc_{in} - x_{nd}}{Sc_{in}} - \frac{Sc_{in} - Sc_{fi}}{Sc_{in}} \left( \frac{t - t_{in}}{t_{fi} - t_{in}} \right) \right]^2 \end{aligned} \quad (5.20)$$

Para os casos uniforme e heterogêneo e não-uniforme e heterogêneo  $x > x_{nd}$  e considerando que

$$L = i \frac{L_{\max}}{i_{\max}} \quad (5.21)$$

a equação 5.10 pode ser rescrita como

$$A(t) = \frac{m_t}{x} \left( i \frac{L_{\max}}{x_{\max,t}} \right)^{b_t} \quad (5.22)$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{1}{x^2} \left\{ i^{b_t} x \left( \frac{L_{\max}}{x_{\max,t}} \right)^{b_t} \left[ m'_t + b'_t m_t \ln i + b'_t m_t \ln \left( \frac{L_{\max}}{x_{\max,t}} \right) \right] \right\} \quad (5.23)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial \tau} \left[ \frac{m_t}{x} \left( i \frac{L_{\max}}{x_{\max,t}} \right)^{b_t} \right] &= k \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} \left[ \frac{m_t}{x} \left( i \frac{L_{\max}}{x_{\max,t}} \right)^{b_t} \right]^3 - x_\tau \frac{\partial H}{\partial \xi} \left[ \frac{m_t}{x} \left( i \frac{L_{\max}}{x_{\max,t}} \right)^{b_t} \right]^2 \\ &+ \frac{1}{x^2} \left\{ i^{b_t} x \left( \frac{L_{\max}}{x_{\max,t}} \right)^{b_t} \left[ m'_t + b'_t m_t \ln i + b'_t m_t \ln \left( \frac{L_{\max}}{x_{\max,t}} \right) \right] \right\} H \end{aligned} \quad (5.24)$$

### 5.3 - Modelo Bidimensional

#### 5.3.1 – Considerações Iniciais

As equações macroscópicas de conservação de massa, momento, energia e espécies são resolvidas simultaneamente. A equação geral, sem a transformação de coordenadas, para uma determinada fase  $k$  pode ser escrita como:

$$\phi_k \rho_k \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle^k}{\partial t} + \phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \cdot \nabla \langle \Psi_k \rangle^k = \nabla \cdot (\Lambda_k \nabla \langle \Psi_k \rangle^k) + S \quad (5.25)$$

onde  $\langle \Psi_k \rangle^k$  é uma variável dependente qualquer e  $\Lambda_k$  é o coeficiente de difusão genérico para a fase  $k$ .

Os termos  $\phi_k \rho_k$  e  $\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k$  no lado esquerdo da equação anterior podem ser artificialmente colocados dentro das suas correspondentes derivadas para resultar em:

$$\frac{\partial(\phi_k \rho_k \langle \Psi_k \rangle^k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \langle \Psi_k \rangle^k - \Lambda_k \nabla \langle \Psi_k \rangle^k) = \langle \Psi_k \rangle^k \left[ \frac{\partial(\phi_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k) \right] + S \quad (5.26)$$

onde foi considerado

$$\frac{\partial(\phi_k \rho_k \langle \Psi_k \rangle^k)}{\partial t} = \phi_k \rho_k \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle^k}{\partial t} + \langle \Psi_k \rangle^k \frac{\partial(\phi_k \rho_k)}{\partial t} \quad (5.27)$$

$$\nabla \cdot (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \langle \Psi_k \rangle^k) = \phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \nabla \cdot \langle \Psi_k \rangle^k + \langle \Psi_k \rangle^k \nabla \cdot (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k) \quad (5.28)$$

e agora escrevendo-se (Schneider e Beckermann-1992)

$$J = \phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \langle \Psi_k \rangle^k - \Lambda_k \nabla \langle \Psi_k \rangle^k \quad (5.29)$$

$$F = \phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \quad (5.30)$$

tem-se então

$$\frac{\partial(\phi_k \rho_k \langle \Psi_k \rangle^k)}{\partial t} + \nabla \cdot J = \langle \Psi_k \rangle^k \left[ \frac{\partial(\phi_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot F \right] + S \quad (5.31)$$

Esta equação pode ser integrada sobre o volume de controle empregando-se uma formulação totalmente implícita (Schneider e Beckermann-1992, Versteeg e Malalasekera-1995)

$$\int_{cv} \frac{\partial(\phi_k \rho_k \langle \Psi_k \rangle^k)}{\partial t} dV + \int_{cv} (\nabla \cdot \mathbf{J}) dV = \int_{cv} \langle \Psi_k \rangle^k \left[ \frac{\partial(\phi_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} \right] dV + \int_{cv} S dV \quad (5.32)$$

$$\int_{cv} \frac{\partial}{\partial t} \left[ \int_t^{\Delta t+t} (\phi_k \rho_k \langle \Psi_k \rangle^k) dt \right] dV + \int_{cv} (\nabla \cdot \mathbf{J}) dV = \int_t^{\Delta t+t} \langle \Psi_k \rangle^k \left[ \int_{cv} (\phi_k \rho_k) dV \right] dt + \int_{cv} \langle \Psi_k \rangle^k \nabla \cdot \mathbf{F} dV + \int_{cv} S dV \quad (5.33)$$

resultando, para o caso bidimensional, em:

$$\left[ (\phi_k \rho_k)_p \langle \Psi_k \rangle_p^k - \left( \overset{\circ}{\phi}_k \overset{\circ}{\rho}_k \right)_p \langle \Psi_k \rangle_p^k \right] \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + J_e - J_w + J_n - J_s = \langle \Psi_k \rangle_p^k \left\{ \left[ (\phi_k \rho_k)_p - \left( \overset{\circ}{\phi}_k \overset{\circ}{\rho}_k \right)_p \right] \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + \langle \Psi_k \rangle_p^k [F_e - F_w + F_n - F_s] \right\} + (S_C + S_P \langle \Psi_k \rangle_p^k) \Delta x \Delta y \quad (5.34)$$

Esta equação pode ser rearranjada (Schneider e Beckermann-1992)

$$\left( \langle \Psi_k \rangle_p^k - \left( \overset{\circ}{\Psi}_k \right)_p^k \right) \left( \overset{\circ}{\phi}_k \overset{\circ}{\rho}_k \right)_p \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + (J_e - F_e \langle \Psi_k \rangle_p^k) - (J_w - F_w \langle \Psi_k \rangle_p^k) + (J_n - F_n \langle \Psi_k \rangle_p^k) - (J_s - F_s \langle \Psi_k \rangle_p^k) = (S_C + S_P \langle \Psi_k \rangle_p^k) \Delta x \Delta y \quad (5.35)$$

Considerando a aplicação do esquema de diferenças centrais na integração de  $(\nabla \cdot \mathbf{J})$  e a média harmônica no cálculo do coeficiente de difusão nas posições  $e$  e  $w$  (lembrando que para a zona pastosa este coeficiente deve levar em conta ainda a relação  $\phi_s \Lambda_s + \phi_l \Lambda_l$ ).

$$\int \nabla \cdot \mathbf{J} = (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k)_e \left[ \frac{\langle \Psi_k \rangle_E^k - \langle \Psi_k \rangle_P^k}{2} \right] A_e - (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k)_w \left[ \frac{\langle \Psi_k \rangle_P^k - \langle \Psi_k \rangle_W^k}{2} \right] A_w - \frac{2(\Lambda_k)_E (\Lambda_k)_P}{(\Lambda_k)_E + (\Lambda_k)_P} \left[ \frac{\langle \Psi_k \rangle_E^k - \langle \Psi_k \rangle_P^k}{\delta x_{EP}} \right] A_e + \frac{2(\Lambda_k)_P (\Lambda_k)_W}{(\Lambda_k)_P + (\Lambda_k)_W} \left[ \frac{\langle \Psi_k \rangle_P^k - \langle \Psi_k \rangle_W^k}{\delta x_{PW}} \right] A_w \quad (5.36)$$

Considerando o esquema *power law* na integração de  $(\nabla \cdot \mathbf{J})$

$$\begin{aligned}
 \int \nabla \cdot \mathbf{J} &= (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k)_e \left[ \langle \Psi_k \rangle^k \right]_E A_e - (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k)_w \left[ \langle \Psi_k \rangle^k \right]_W A_w \\
 &+ (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k)_n \left[ \langle \Psi_k \rangle^k \right]_N A_n - (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k)_s \left[ \langle \Psi_k \rangle^k \right]_S A_s \\
 &- \left\{ \begin{aligned}
 &\frac{2(\Lambda_k)_E (\Lambda_k)_P}{(\Lambda_k)_E + (\Lambda_k)_P} (1 - 0,1Pe_e)^5 \left[ \frac{\langle \Psi_k \rangle^k_E - \langle \Psi_k \rangle^k_P}{\delta x_{EP}} \right] A_e + \\
 &\frac{2(\Lambda_k)_P (\Lambda_k)_W}{(\Lambda_k)_P + (\Lambda_k)_W} (1 - 0,1Pe_w)^5 \left[ \frac{\langle \Psi_k \rangle^k_P - \langle \Psi_k \rangle^k_W}{\delta x_{PW}} \right] A_w + \\
 &\frac{2(\Lambda_k)_N (\Lambda_k)_P}{(\Lambda_k)_N + (\Lambda_k)_P} (1 - 0,1Pe_n)^5 \left[ \frac{\langle \Psi_k \rangle^k_N - \langle \Psi_k \rangle^k_P}{\delta x_{NP}} \right] A_n + \\
 &\frac{2(\Lambda_k)_P (\Lambda_k)_S}{(\Lambda_k)_P + (\Lambda_k)_S} (1 - 0,1Pe_s)^5 \left[ \frac{\langle \Psi_k \rangle^k_P - \langle \Psi_k \rangle^k_S}{\delta x_{PS}} \right] A_s
 \end{aligned} \right\} \quad (5.37)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \int_{cv} \langle \Psi_k \rangle^k \nabla \cdot \mathbf{F} dV &= (F_e - F_w + F_n - F_s) \langle \Psi_k \rangle^k_P \\
 &= \left[ (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k)_e - (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k)_w \right] \langle \Psi_k \rangle^k_P + \left[ (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k)_n - (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k)_s \right] \langle \Psi_k \rangle^k_P \quad (5.38)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left[ \frac{2(\Lambda_k)_P(\Lambda_k)_W}{(\Lambda_k)_P + (\Lambda_k)_W} \frac{(1-0,1Pe_w)^5}{\delta x_{PW}} - \frac{2(\Lambda_k)_E(\Lambda_k)_P}{(\Lambda_k)_E + (\Lambda_k)_P} \frac{(1-0,1Pe_e)^5}{\delta x_{EP}} \right. \\
& \left. \frac{2(\Lambda_k)_P(\Lambda_k)_S}{(\Lambda_k)_P + (\Lambda_k)_S} \frac{(1-0,1Pe_s)^5}{\delta x_{PS}} - \frac{2(\Lambda_k)_N(\Lambda_k)_P}{(\Lambda_k)_N + (\Lambda_k)_P} \frac{(1-0,1Pe_n)^5}{\delta x_{NP}} \right] \Delta x \Delta y \langle \Psi_k \rangle_P^k \\
& + \left( \phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \right)_w - \left( \phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \right)_e + \left( \phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \right)_s - \left( \phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \right)_n + \frac{\left( \overset{\circ}{\phi}_k \overset{\circ}{\rho}_k \right)_P}{\Delta t} - S_P \\
& = - \left[ \frac{2(\Lambda_k)_E(\Lambda_k)_P}{(\Lambda_k)_E + (\Lambda_k)_P} \frac{(1-0,1Pe_e)^5}{\delta x_{EP}} + \left( \phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \right)_e \right] \Delta x \Delta y \langle \Psi_k \rangle_E^k \\
& + \left[ \frac{2(\Lambda_k)_P(\Lambda_k)_W}{(\Lambda_k)_P + (\Lambda_k)_W} \frac{(1-0,1Pe_w)^5}{\delta x_{PW}} + \left( \phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \right)_w \right] \Delta x \Delta y \langle \Psi_k \rangle_W^k \\
& - \left[ \frac{2(\Lambda_k)_N(\Lambda_k)_P}{(\Lambda_k)_N + (\Lambda_k)_P} \frac{(1-0,1Pe_n)^5}{\delta x_{NP}} + \left( \phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \right)_n \right] \Delta x \Delta y \langle \Psi_k \rangle_N^k \\
& + \left[ \frac{2(\Lambda_k)_P(\Lambda_k)_S}{(\Lambda_k)_P + (\Lambda_k)_S} \frac{(1-0,1Pe_s)^5}{\delta x_{PS}} + \left( \phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \right)_s \right] \Delta x \Delta y \langle \Psi_k \rangle_S^k \\
& + \left( \overset{\circ}{\phi}_k \overset{\circ}{\rho}_k \right)_P \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} \langle \Psi_k \rangle_P^k + S_C \Delta x \Delta y
\end{aligned} \tag{5.39}$$

A equação discretizada a ser resolvida pode ser colocada na forma:

$$a_P \langle \Psi_k \rangle_P^k = a_E \langle \Psi_k \rangle_E^k + a_W \langle \Psi_k \rangle_W^k + a_N \langle \Psi_k \rangle_N^k + a_S \langle \Psi_k \rangle_S^k + b \tag{5.40}$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + \overset{\circ}{a}_P - S_P \Delta x \Delta y \tag{5.41}$$

$$\overset{\circ}{a}_P = \frac{\left( \overset{\circ}{\phi}_k \overset{\circ}{\rho}_k \right)_P \Delta x \Delta y}{\Delta t} \tag{5.42}$$

$$b = \overset{\circ}{a}_P \langle \Psi_k \rangle_P^k + S_C \Delta x \Delta y \tag{5.43}$$

Como pode ser observado, os valores dos coeficientes  $a$  dependem do esquema de discretização utilizado.

As variáveis temperatura, concentração de um dado elemento (espécie), densidades, fração volumétrica, são conhecidas nos pontos centrais da malha. Portanto, estas variáveis são todas linearmente interpoladas para as faces do volume de controle quando da determinação dos coeficientes  $F$ 's. Por outro lado, os coeficientes de difusão  $\Lambda_k$  nas faces do volume de controle, os quais são necessários para a determinação dos coeficientes  $a$ 's, são todos avaliados utilizando média harmônica (Schneider e Beckermann-1992). Isto é feito de modo a prover resultados fisicamente coerentes para os casos de mudança brusca de propriedades que podem acontecer na zona pastosa.

Observa-se ainda que para a equação de conservação da energia, por exemplo, o termo fonte é:

$$S_{CE} = - \left[ \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \right]_{C_s(t)} \frac{\partial T}{\partial t} + (\langle h_l \rangle^l - \langle h_s \rangle^s) \frac{\partial}{\partial t} (\phi_s \rho_s) \quad (5.44)$$

A integração deste termo fonte resulta em:

$$(S_C + S_P \langle \Psi_k \rangle^k)_p \Delta x \Delta y \quad (5.45)$$

$$S_P = - \left[ \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \right]_{C_s(t)} \frac{1}{\Delta t} \quad (4.46)$$

$$S_C = \left[ \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \right]_p \frac{T_p^o}{\Delta t} \Delta x \Delta y - (\langle h_l \rangle^l - \langle h_s \rangle^s)_p \frac{[(\phi_s \rho_s)_p - (\phi_s \rho_s)_p^o]}{\Delta t} \Delta x \Delta y \quad (5.47)$$

O mesmo procedimento pode ser adotado na integração de outros termos fontes.

### 5.3.2 - Equação da Pressão em Coordenadas Cartesianas

A equação da continuidade (conservação de massa - equação macroscópica da mistura) para uma fase é dada por (para  $\langle \mathbf{v}_s \rangle^s = 0$ ):

$$\frac{\partial(\phi_l \rho_l)}{\partial t} + \frac{\partial(\phi_s \rho_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l) = 0, \quad (5.48)$$

ou na forma discretizada por

$$\begin{aligned} & (\phi_l \rho_l \langle u_k \rangle^k \Delta x \Delta y)_e - (\phi_l \rho_l \langle u_k \rangle^k \Delta x \Delta y)_w + (\phi_l \rho_l \langle v_k \rangle^k \Delta x \Delta y)_n - (\phi_l \rho_l \langle v_k \rangle^k \Delta x \Delta y)_s \\ & \left( \frac{\phi_l \rho_l}{\Delta t} \Delta x \Delta y \right)_p - \left( \frac{\phi_l \rho_l}{\Delta t} \Delta x \Delta y \right)_p^o = 0 \end{aligned} \quad (5.49)$$

Substituindo-se os termos relativos à velocidade (Maliska-1995)

$$(u_k)_w = (u_k^*)_w + d_w (P'_w - P'_p) \quad (5.50)$$

$$(v_k)_s = (v_k^*)_s + d_s (P'_s - P'_p) \quad , \quad (5.51)$$

obtem-se:

$$\begin{aligned} & \left[ \phi_l \rho_l \left( \langle u_k^* \rangle^k + d_e (P'_e - P'_p) \right) \Delta x \Delta y \right]_e - \left[ \phi_l \rho_l \left( \langle u_k^* \rangle^k + d_w (P'_w - P'_p) \right) \Delta x \Delta y \right]_w + \\ & \left[ \phi_l \rho_l \left( \langle v_k^* \rangle^k + d_n (P'_n - P'_p) \right) \Delta x \Delta y \right]_n - \left[ \phi_l \rho_l \left( \langle v_k^* \rangle^k + d_s (P'_s - P'_p) \right) \Delta x \Delta y \right]_s \quad (5.52) \\ & \left( \frac{\phi_l \rho_l}{\Delta t} \Delta x \Delta y \right)_p - \left( \frac{\phi_l \rho_l}{\Delta t} \Delta x \Delta y \right)_p^o = 0 \end{aligned}$$

ou ainda

$$\begin{aligned}
& [\phi_l \rho_l (d_e) \Delta x \Delta y]_e P'_E - [\phi_l \rho_l (d_w) \Delta x \Delta y]_w P'_W + [\phi_l \rho_l (d_n) \Delta x \Delta y]_n P'_N - [\phi_l \rho_l (d_s) \Delta x \Delta y]_s P'_S \\
& + \{ [\phi_l \rho_l (d_e) \Delta x \Delta y]_e - [\phi_l \rho_l (d_w) \Delta x \Delta y]_w + [\phi_l \rho_l (d_n) \Delta x \Delta y]_n - [\phi_l \rho_l (d_s) \Delta x \Delta y]_s \} P'_P \\
& + \left[ \phi_l \rho_l \langle u_k^* \rangle^k \Delta x \Delta y \right]_e - \left[ \phi_l \rho_l \langle u_k^* \rangle^k \Delta x \Delta y \right]_w + \left[ \phi_l \rho_l \langle v_k^* \rangle^k \Delta x \Delta y \right]_n - \left[ \phi_l \rho_l \langle v_k^* \rangle^k \Delta x \Delta y \right]_s + \\
& \left( \frac{\phi_l \rho_l}{\Delta t} \Delta x \Delta y \right)_P - \left( \frac{\phi_l \rho_l}{\Delta t} \Delta x \Delta y \right)_P^o = 0
\end{aligned} \tag{5.53}$$

$$a_{I,J} P'_{I,J} = a_{I-1,J} P'_{I-1,J} + a_{I+1,J} P'_{I+1,J} + a_{I,J-1} P'_{I,J-1} + a_{I,J+1} P'_{I,J+1} + b_{I,J} \tag{5.54}$$

Os coeficientes são dados por (Shyy et al.-1996, Maliska-1995)

$$a_{EP} = [\phi_l \rho_l (d_e) \Delta x \Delta y]_e \tag{5.55}$$

$$a_{WP} = [\phi_l \rho_l (d_w) \Delta x \Delta y]_w \tag{5.56}$$

$$a_{NP} = [\phi_l \rho_l (d_n) \Delta x \Delta y]_n \tag{5.57}$$

$$a_{SP} = [\phi_l \rho_l (d_s) \Delta x \Delta y]_s \tag{5.58}$$

$$a_{PP} = [\phi_l \rho_l (d_e) \Delta x \Delta y]_e - [\phi_l \rho_l (d_w) \Delta x \Delta y]_w + [\phi_l \rho_l (d_n) \Delta x \Delta y]_n - [\phi_l \rho_l (d_s) \Delta x \Delta y]_s \tag{5.59}$$

e o termo fonte por (Shyy et al.-1996, Maliska-1995)

$$\begin{aligned}
b_{I,J} = & \left[ \phi_l \rho_l \langle u_k^* \rangle^k \Delta x \Delta y \right]_e - \left[ \phi_l \rho_l \langle u_k^* \rangle^k \Delta x \Delta y \right]_w + \left[ \phi_l \rho_l \langle v_k^* \rangle^k \Delta x \Delta y \right]_n - \left[ \phi_l \rho_l \langle v_k^* \rangle^k \Delta x \Delta y \right]_s \\
& + \left( \frac{\phi_l \rho_l}{\Delta t} \Delta x \Delta y \right)_P - \left( \frac{\phi_l \rho_l}{\Delta t} \Delta x \Delta y \right)_P^o
\end{aligned} \tag{5.60}$$

Resolve-se também a equação de correção da pressão  $P'$  (Patankar-1980)

$$a_{I,J} P'_{I,J} = a_{I-1,J} P'_{I-1,J} + a_{I+1,J} P'_{I+1,J} + a_{I,J-1} P'_{I,J-1} + a_{I,J+1} P'_{I,J+1} + b'_{I,J} \tag{5.61}$$

### 5.3.3 – Aplicação da Transformação de Coordenadas

A Figura 5.2 apresenta uma representação esquemática dos planos físico e transformado para um caso bidimensional.

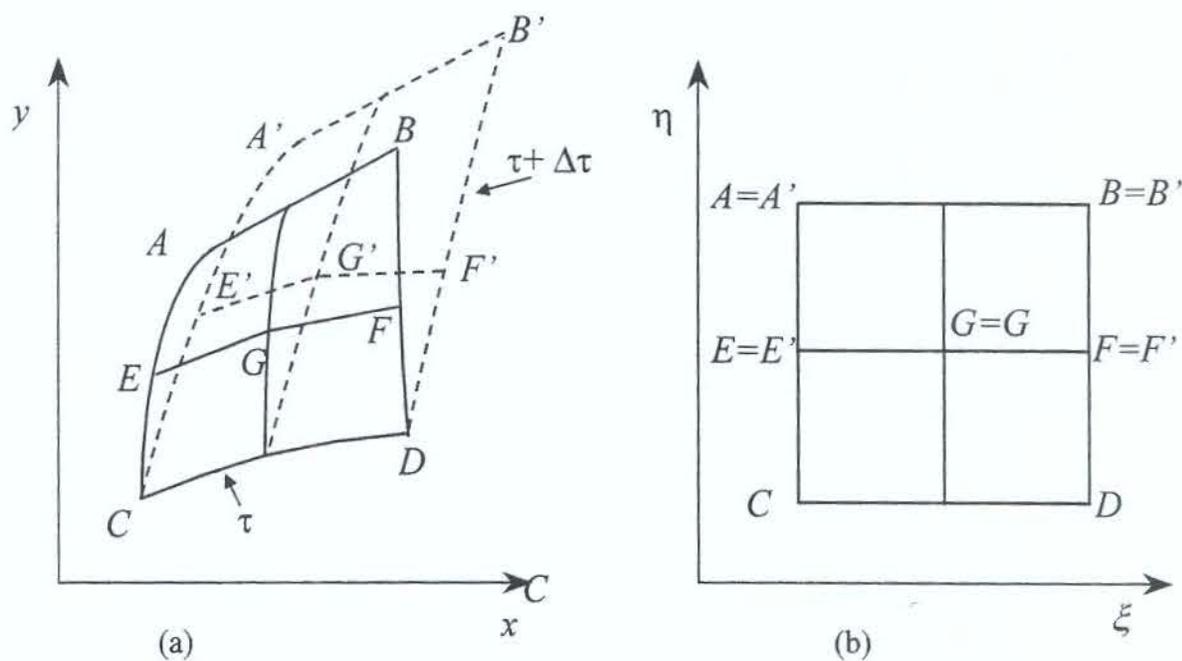


Figura 5.2 - Representação esquemática do planos físico (a) e transformado (b) - 2D.

Aplicando-se o mesmo princípio de transformação de coordenadas apresentado para o caso 1D:

$$\phi_k \rho_k \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle^k}{\partial t} + \phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \cdot \nabla \langle \Psi_k \rangle^k = \nabla \cdot (\Lambda_k \nabla \langle \Psi_k \rangle^k) + S \quad (5.62)$$

ou

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\phi_k \rho_k \langle \Psi_k \rangle^k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k \langle \Psi_k \rangle^k - \Lambda_k \nabla \langle \Psi_k \rangle^k) = \\ \langle \Psi_k \rangle^k \left[ \frac{\partial (\phi_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_k \rho_k \langle \mathbf{v}_k \rangle^k) \right] + S \end{aligned} \quad (5.63)$$

transforma-se em (Maliska-1995, Shyy *et al.*-1996):

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_k \rho_k \langle \Psi_k \rangle^k}{J} \right) + \\
& \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \phi_k \rho_k \langle U_k' \rangle^k \langle \Psi_k \rangle^k - (\Lambda_k) J \alpha_{11} \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle^k}{\partial \xi} - (\Lambda_k) J \alpha_{12} \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle^k}{\partial \eta} \right] + \\
& \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \phi_k \rho_k \langle V_k' \rangle^k \langle \Psi_k \rangle^k - (\Lambda_k) J \alpha_{21} \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle^k}{\partial \eta} - (\Lambda_k) J \alpha_{22} \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle^k}{\partial \xi} \right] \\
& = \langle \Psi_k \rangle^k \left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_k \rho_k}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} [\phi_k \rho_k \langle U_k' \rangle^k] + \frac{\partial}{\partial \eta} [\phi_k \rho_k \langle V_k' \rangle^k] \right\} + \bar{S}
\end{aligned} \tag{5.64}$$

onde  $\alpha_{ij}$  (componentes do tensor métrico) são definidos como: (Maliska-1995, Zeng e Faghri-1994)

$$\alpha_{11} = \frac{a}{J^2} \tag{5.65}$$

$$a = \xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2 \tag{5.66}$$

$$\alpha_{12} = \alpha_{21} = \frac{d}{J^2} \tag{5.67}$$

$$d = \xi_x \eta_x + \xi_y \eta_y + \xi_z \eta_z \tag{5.68}$$

$$\alpha_{22} = \frac{b}{J^2} \tag{5.69}$$

$$b = \eta_x^2 + \eta_y^2 + \eta_z^2 \tag{5.70}$$

$$\xi_x = J(y_\eta z_\gamma - y_\gamma z_\eta) \tag{5.71}$$

$$\xi_y = -J(x_\eta z_\gamma - x_\gamma z_\eta) \tag{5.72}$$

$$\eta_x = -J(y_\xi z_\gamma - y_\gamma z_\xi) \tag{5.73}$$

$$\eta_y = J(x_\xi z_\gamma - x_\gamma z_\xi) \tag{5.74}$$

$$x_\xi = \frac{1}{J}(\eta_y \gamma_z - \gamma_y \eta_z) \tag{5.75}$$

$$x_\eta = -\frac{1}{J}(\xi_y \gamma_z - \xi_z \gamma_y) \tag{5.76}$$

$$y_\xi = -\frac{1}{J}(\eta_x \gamma_z - \eta_z \gamma_x) \tag{5.77}$$

$$y_\eta = \frac{1}{J}(\xi_x \gamma_z - \gamma_x \xi_z) \tag{5.78}$$

$$\xi_t = \frac{\partial \xi}{\partial t} = -\xi_x x_\tau - \xi_y y_\tau \tag{5.79}$$

$$\eta_t = \frac{\partial \eta}{\partial t} = -\eta_x x_\tau - \eta_y y_\tau \tag{5.80}$$

As componentes contravariantes do vetor velocidade (Shyy et al.-1996; Maliska-1995, Zeng e Faghri-1994)  $\langle U_i' \rangle^l$  e  $\langle V_i' \rangle^l$  são definidas pelas seguintes equações:

$$\langle U_k' \rangle^k = \langle U_k \rangle^k - \langle U_k \rangle_M^k \quad (5.81)$$

$$\langle V_k' \rangle^k = \langle V_k \rangle^k - \langle V_k \rangle_M^k \quad (5.82)$$

onde  $\langle U_i \rangle_M^l$  and  $\langle V_i \rangle_M^l$  são as componentes contravariantes sem a normalização métrica do vetor da velocidade da malha nas direções  $x$  e  $y$  respectivamente com,

$$\langle U_i \rangle^l = \langle u_i \rangle^l y_\eta - \langle v_i \rangle^l x_\eta \quad (5.83)$$

$$\langle V_i \rangle^l = \langle v_i \rangle^l x_\xi - \langle u_i \rangle^l y_\xi \quad (5.84)$$

$$\langle U_i \rangle_M^l = y_\eta x_\tau - x_\eta y_\tau \quad (5.85)$$

$$\langle V_i \rangle_M^l = x_\xi y_\tau - y_\xi x_\tau \quad (5.86)$$

$$\langle U_i' \rangle^l = \langle u_i \rangle^l y_\eta - \langle v_i \rangle^l x_\eta - y_\eta x_\tau + x_\eta y_\tau \quad (5.87)$$

$$\langle V_i' \rangle^l = \langle v_i \rangle^l x_\xi - \langle u_i \rangle^l y_\xi - x_\xi y_\tau + y_\xi x_\tau \quad (5.88)$$

As variáveis  $x_\tau$  e  $y_\tau$  são as componentes Cartesianas do vetor velocidade da malha nas direções  $x$  e  $y$  respectivamente e são aproximadas através da diferenciação de primeira ordem no tempo dada por (Shyy et al.-1996):

$$(x_\tau)_i^y = \frac{(x)_i^y - (x)_i^{y-1}}{\Delta t} \quad (5.89)$$

$$(y_\tau)_j^t = \frac{(y)_j^t - (y)_j^{t-1}}{\Delta t} \quad (5.90)$$

Substituindo as equações acima na equação 5.64 chega-se a fórmula geral (Maliska-1995, Shyy *et al.*-1996),

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_k \rho_k \langle \Psi_k \rangle^k}{J} \right) + \\ & \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \phi_k \rho_k \left( \langle u_k \rangle^k y_\eta - \langle v_k \rangle^k x_\eta - y_\eta x_\tau + x_\eta y_\tau \right) \langle \Psi_k \rangle^k - (\Lambda_k) J \alpha_{11} \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle^k}{\partial \xi} - (\Lambda_k) J \alpha_{12} \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle^k}{\partial \eta} \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \phi_k \rho_k \left( \langle v_k \rangle^k x_\xi - \langle u_k \rangle^k y_\xi - x_\xi y_\tau + y_\xi x_\tau \right) \langle \Psi_k \rangle^k - (\Lambda_k) J \alpha_{21} \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle^k}{\partial \xi} - (\Lambda_k) J \alpha_{22} \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle^k}{\partial \eta} \right] \\ & = \langle \Psi_k \rangle^k \left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_k \rho_k}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \phi_k \rho_k \left( \langle u_k \rangle^k y_\eta - \langle v_k \rangle^k x_\eta - y_\eta x_\tau + x_\eta y_\tau \right) \right] + \right. \\ & \quad \left. \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \phi_k \rho_k \left( \langle v_k \rangle^k x_\xi - \langle u_k \rangle^k y_\xi - x_\xi y_\tau + y_\xi x_\tau \right) \right] \right\} + \tilde{S} \end{aligned} \quad (5.91)$$

### 5.3.4 – Transformação de Coordenadas Analítica

A Figura 5.3 apresenta uma representação esquemática do domínio, relativo aos experimentos descritos no Capítulo 4, em várias escalas dimensionais.

Se considerarmos a aplicação de uma transformação analítica ao caso apresentado na Figura 5.3, tem-se:

$$\tau = t \quad (5.92)$$

$$\xi = xA(t) \quad (5.93)$$

$$\eta = yB(t) \quad (5.94)$$

Nas equações acima, considerou-se a conservação de área do domínio (similar a conservação de massa para o caso de densidade constante ou quando se despreza o efeito da contração na alteração do volume do domínio):

$$x_{\max} y_{\max} = \xi_{\max} \eta_{\max} = \text{constant} = Sc_{ini} y_{ini \max} = C$$

onde  $Sc_{ini}$  é a largura inicial da célula de teste e  $y_{ini \max}$  é a altura inicial do domínio  $C$  é a área inicial do domínio.

$$y_{\max} = \frac{Sc_{ini} y_{ini \max}}{Sc_i} \quad \eta = y \frac{Sc_{ini}}{Sc_i} = y \frac{Sc_{ini}}{xA(t)}$$

Os termos relativos ao inverso das transformações são definidos como

$$x = \frac{\xi}{A(t)} \quad (5.95)$$

$$y = \frac{\eta}{B(t)} \quad (5.96)$$

e as métricas da transformação são definidas como:

$$\xi_x = J(y_\eta z_\gamma - y_\gamma z_\eta) = A(t)B(t) \left( \frac{1}{B(t)} \cdot 1 - 0 \cdot 1 \right) = A(t) \quad (5.97)$$

$$\xi_y = 0 \quad (5.98)$$

$$\eta_x = -J(y_\xi z_\gamma - y_\gamma z_\xi) = -1(0 \cdot 1 - 0 \cdot 1) = 0 \quad (5.99)$$

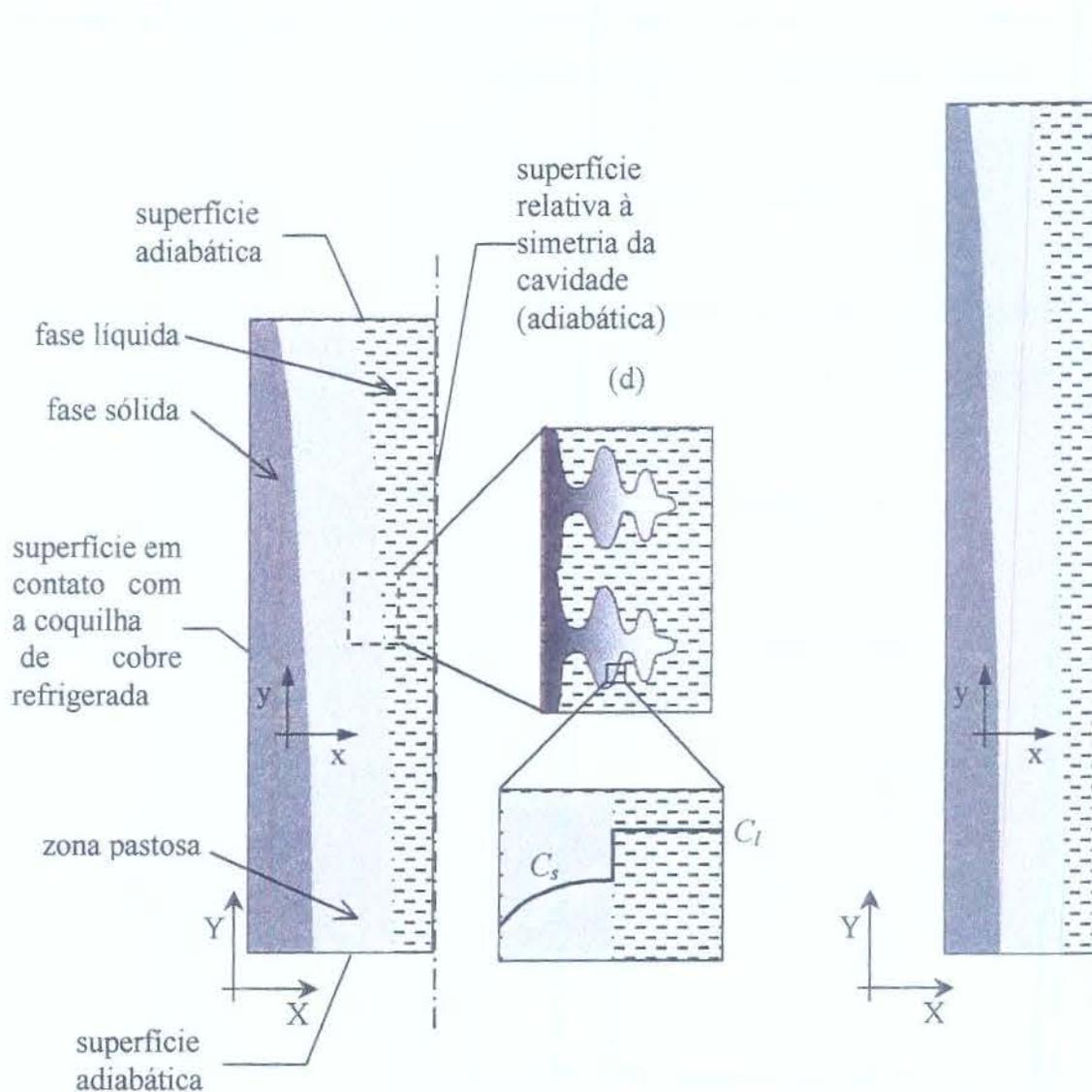


Figura 5.3 - Representação esquemática do domínio simulado. O sistema de coordenadas  $X, Y$  é fixo e o sistema  $x, y$  se desloca junto com a translação da fase sólida, ou seja, de acordo com a movimentação do domínio; (a) configuração relativa a um tempo anterior à aplicação da deformação do domínio; (b) perfis de concentração no sólido e no líquido na escala microscópica; (c) configuração relativa a um tempo posterior à aplicação da deformação do domínio; (d) um volume elementar representativo (VER) típico.

$$\eta_y = B(t) \quad (5.100)$$

$$\xi_t = \frac{\partial \xi}{\partial t} = -\xi_x x_\tau - \xi_y y_\tau = -A(t)x_\tau \quad (5.101)$$

$$\eta_t = \frac{\partial \eta}{\partial t} = -\eta_x x_\tau - \eta_y y_\tau = -y_\tau B(t) \quad (5.102)$$

As métricas do inverso da transformação são definidas como

$$x_\xi = \frac{1}{A(t)} \quad (5.103)$$

$$y_\xi = 0 \quad (5.104)$$

$$x_\eta = 0 \quad (5.105)$$

$$y_\eta = \frac{1}{B(t)} \quad (5.106)$$

O Jacobiano da transformação é dado por<sup>1</sup> (Maliska-1995, Shyy *et al.*-1996):

$$J = \det \begin{bmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{bmatrix} = \det \begin{bmatrix} x_\xi & x_\eta \\ y_\xi & y_\eta \end{bmatrix}^{-1} \quad (5.107)$$

$$J = A(t)B(t) \quad (5.108)$$

$$\alpha_{11} = \frac{1}{[B(t)]^2} \quad \alpha_{12} = \alpha_{21} = 0 \quad ; \quad \alpha_{22} = \frac{1}{[A(t)]^2} \quad (5.109)$$

Finalmente a equação transformada pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_k \rho_k \langle \Psi_k \rangle^k}{A(t)B(t)} \right) + \\
& \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle u_k \rangle^k}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \langle \Psi_k \rangle^k - (\Lambda_k) \frac{A(t)}{B(t)} \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle^k}{\partial \xi} \right] + \\
& \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle v_k \rangle^k}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \langle \Psi_k \rangle^k - (\Lambda_k) \frac{B(t)}{A(t)} \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle^k}{\partial \eta} \right] \\
& = \langle \Psi_k \rangle^k \left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_k \rho_k}{A(t)B(t)} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle u_k \rangle^k}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle v_k \rangle^k}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \right] \right\} + \widehat{S}
\end{aligned} \tag{5.110}$$

ou

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_k \rho_k \langle \Psi_k \rangle^k}{A(t)B(t)} \right) + \nabla \cdot \mathbf{Jt} = \langle \Psi_k \rangle^k \left[ \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_k \rho_k \langle \Psi_k \rangle^k}{A(t)B(t)} \right) + \nabla \cdot \mathbf{Ft} \right] + \widehat{S} \tag{5.111}$$

onde  $\widehat{S}$  é dado por:

$$\widehat{S} = \frac{S}{J} \tag{5.112}$$

Esta equação pode ser integrada sobre um volume de controle utilizando uma formulação totalmente implícita resultando (para o caso 2D)

$$\begin{aligned}
& \left[ (\phi_k \rho_k)_P \langle \Psi_k \rangle^k_P - \left( \overset{\circ}{\phi}_k \overset{\circ}{\rho}_k \right)_P \left( \overset{\circ}{\langle \Psi_k \rangle^k} \right)_P \right] \frac{\Delta \xi \Delta \eta}{[A(t)B(t)]_P \Delta \tau} + \mathbf{Jt}_e - \mathbf{Jt}_w + \mathbf{Jt}_n - \mathbf{Jt}_s = \\
& \langle \Psi_k \rangle^k_P \left\{ \left[ (\phi_k \rho_k)_P - \left( \overset{\circ}{\phi}_k \overset{\circ}{\rho}_k \right)_P \right] \frac{\Delta \xi \Delta \eta}{[A(t)B(t)]_P \Delta \tau} + \langle \Psi_k \rangle^k_P [\mathbf{Ft}_e - \mathbf{Ft}_w + \mathbf{Ft}_n - \mathbf{Ft}_s] \right\} \\
& + (S_C + S_P \langle \Psi_k \rangle^k_P) \Delta \xi \Delta \eta
\end{aligned} \tag{5.113}$$

<sup>1</sup> A definição apresentada por Shyy *et al.*-1996 é ligeiramente diferente pois, estes autores não consideram o inverso do determinante mas sim o próprio determinante. A equação final não é alterada pois, cada autor posiciona o Jacobiano de acordo com a definição assumida.

$$\int_{cv} \langle \Psi_k \rangle^k \nabla \cdot F dV = \left\{ \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle u_k \rangle^k}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \right]_e - \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle u_k \rangle^k}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \right]_w \right\} \langle \Psi_k \rangle^k_P +$$

$$\left\{ \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle v_k \rangle^k}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \right]_n - \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle v_k \rangle^k}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \right]_s \right\} \langle \Psi_k \rangle^k_P$$

(5.114)

$$\int \nabla \cdot Jt = (\phi_k \rho_k)_e \left( \frac{\langle u_k \rangle^k}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \left[ \langle \Psi_k \rangle^k \right]_E A_e - (\phi_k \rho_k)_w \left( \frac{\langle u_k \rangle^k}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \left[ \langle \Psi_k \rangle^k \right]_W A_w$$

$$+ (\phi_k \rho_k)_n \left( \frac{\langle v_k \rangle^k}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \left[ \langle \Psi_k \rangle^k \right]_N A_n - (\phi_k \rho_k)_s \left( \frac{\langle v_k \rangle^k}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \left[ \langle \Psi_k \rangle^k \right]_S A_s$$

$$- \left\{ \begin{aligned} & \frac{A(t)}{B(t)} \frac{2(\Lambda_k)_E (\Lambda_k)_P}{(\Lambda_k)_E + (\Lambda_k)_P} (1 - 0,1Pe_e)^5 \left[ \frac{\langle \Psi_k \rangle^k_E - \langle \Psi_k \rangle^k_P}{\delta x_{EP}} \right] A_e + \\ & \frac{A(t)}{B(t)} \frac{2(\Lambda_k)_P (\Lambda_k)_W}{(\Lambda_k)_P + (\Lambda_k)_W} (1 - 0,1Pe_w)^5 \left[ \frac{\langle \Psi_k \rangle^k_P - \langle \Psi_k \rangle^k_W}{\delta x_{PW}} \right] A_w \end{aligned} \right\}$$

$$- \left\{ \begin{aligned} & \frac{B(t)}{A(t)} \frac{2(\Lambda_k)_N (\Lambda_k)_P}{(\Lambda_k)_N + (\Lambda_k)_P} (1 - 0,1Pe_n)^5 \left[ \frac{\langle \Psi_k \rangle^k_N - \langle \Psi_k \rangle^k_P}{\delta x_{NP}} \right] A_n + \\ & \frac{B(t)}{A(t)} \frac{2(\Lambda_k)_P (\Lambda_k)_S}{(\Lambda_k)_P + (\Lambda_k)_S} (1 - 0,1Pe_s)^5 \left[ \frac{\langle \Psi_k \rangle^k_P - \langle \Psi_k \rangle^k_S}{\delta x_{PS}} \right] A_s \end{aligned} \right\}$$

(5.115)

assim

$$\begin{aligned}
& \left. \begin{aligned}
& \frac{A(t)}{B(t)} \frac{2(\Lambda_k)_P (\Lambda_k)_W}{(\Lambda_k)_P + (\Lambda_k)_W} \frac{(1-0,1Pe_w)^5}{\delta\xi_{PW}} - \frac{A(t)}{B(t)} \frac{2(\Lambda_k)_E (\Lambda_k)_P}{(\Lambda_k)_E + (\Lambda_k)_P} \frac{(1-0,1Pe_e)^5}{\delta\xi_{EP}} + \\
& \frac{B(t)}{A(t)} \frac{2(\Lambda_k)_P (\Lambda_k)_S}{(\Lambda_k)_P + (\Lambda_k)_S} \frac{(1-0,1Pe_s)^5}{\delta\eta_{PS}} - \frac{B(t)}{A(t)} \frac{2(\Lambda_k)_N (\Lambda_k)_P}{(\Lambda_k)_N + (\Lambda_k)_P} \frac{(1-0,1Pe_n)^5}{\delta\eta_{NP}} \\
& + \frac{\left(\overset{\circ}{\phi}_k \overset{\circ}{\rho}_k\right)_P}{[A(t)B(t)]_P \Delta\tau} - \widehat{S}_P - \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle u_k \rangle^k}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \right]_e + \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle u_k \rangle^k}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \right]_w \\
& - \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle v_k \rangle^k}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \right]_n + \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle v_k \rangle^k}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \right]_s
\end{aligned} \right\} \Delta\xi\Delta\eta \left( \langle \Psi_k \rangle^k \right)_P \\
& = - \left[ \frac{A(t)}{B(t)} \frac{2(\Lambda_k)_E (\Lambda_k)_P}{(\Lambda_k)_E + (\Lambda_k)_P} \frac{(1-0,1Pe_e)^5}{\delta\xi_{EP}} + \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle u_k \rangle^k}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \right]_e \right] \Delta\xi\Delta\eta \left( \langle \Psi_k \rangle^k \right)_E \\
& + \left[ \frac{A(t)}{B(t)} \frac{2(\Lambda_k)_P (\Lambda_k)_W}{(\Lambda_k)_P + (\Lambda_k)_W} \frac{(1-0,1Pe_w)^5}{\delta\xi_{PW}} + \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle u_k \rangle^k}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \right]_w \right] \Delta\xi\Delta\eta \left( \langle \Psi_k \rangle^k \right)_W \\
& - \left[ \frac{B(t)}{A(t)} \frac{2(\Lambda_k)_N (\Lambda_k)_P}{(\Lambda_k)_N + (\Lambda_k)_P} \frac{(1-0,1Pe_n)^5}{\delta\eta_{NP}} + \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle v_k \rangle^k}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \right]_n \right] \Delta\xi\Delta\eta \left( \langle \Psi_k \rangle^k \right)_N \\
& + \left[ \frac{B(t)}{A(t)} \frac{2(\Lambda_k)_P (\Lambda_k)_S}{(\Lambda_k)_P + (\Lambda_k)_S} \frac{(1-0,1Pe_s)^5}{\delta\eta_{PS}} + \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle v_k \rangle^k}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \right]_s \right] \Delta\xi\Delta\eta \left( \langle \Psi_k \rangle^k \right)_S \\
& + \left( \overset{\circ}{\phi}_k \overset{\circ}{\rho}_k \right)_P \frac{\Delta\xi\Delta\eta}{[A(t)B(t)]_P \Delta\tau} \left( \langle \Psi_k \rangle^k \right)_P + \widehat{S}_C \Delta\xi\Delta\eta
\end{aligned} \tag{5.116}$$

A equação discretizada a ser resolvida pode ser colocada na forma geral:

$$at_P \left( \langle \Psi_k \rangle^k \right)_P = at_E \left( \langle \Psi_k \rangle^k \right)_E + at_W \left( \langle \Psi_k \rangle^k \right)_W + at_N \left( \langle \Psi_k \rangle^k \right)_N + at_S \left( \langle \Psi_k \rangle^k \right)_S + bt \tag{5.117}$$

$$at_P = at_E + at_W + at_N + at_S + at_P - \widehat{S}_P \Delta\xi\Delta\eta$$

$$at_P = \frac{\left( \overset{\circ}{\phi}_k \overset{\circ}{\rho}_k \right)_P \Delta\xi\Delta\eta}{\Delta\tau}$$

$$bt = at_p \left( \langle \Psi_k \rangle^k \right)_p + \widehat{S}_c \Delta \xi \Delta \eta$$

Considerando a forma geral para as equações de conservação na forma transformada para o caso bidimensional convecção-difusão (equação 5.91), as equações de conservação para as variáveis momento, energia, espécies e massa são fornecidas a seguir.

Para a equação de conservação da energia para uma dada fase:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_k \rho_k \langle \Psi_k \rangle^k}{A(t)B(t)} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle u_k \rangle^k}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \langle \Psi_k \rangle^k - (\phi_k k_k) \frac{A(t)}{B(t)} \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle^k}{\partial \xi} \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle v_k \rangle^k}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \langle \Psi_k \rangle^k - (\phi_k k_k) \frac{B(t)}{A(t)} \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle^k}{\partial \eta} \right] \\ & = \langle \Psi_k \rangle^k \left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_k \rho_k}{A(t)B(t)} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle u_k \rangle^k}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle v_k \rangle^k}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \right] \right\} + \widehat{S}_E \end{aligned} \quad (5.118)$$

O termo fonte transformado é

$$\widehat{S}_E = \left\{ - \left[ \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \right]_{(c,s)'} \frac{\partial T}{\partial \tau} + (\langle h_t \rangle^t - \langle h_s \rangle^s) \frac{\partial}{\partial \tau} (\phi_s \rho_s) \right\} / [A(t)B(t)]$$

discretizado é

$$\widehat{S}_{CE} = \left\{ - \left[ \phi_s \rho_s \frac{\partial \langle h_s \rangle^s}{\partial T} \right]_{(c,s)'} \frac{\partial T}{\partial \tau} + (\langle h_t \rangle^t - \langle h_s \rangle^s) \frac{\partial}{\partial \tau} (\phi_s \rho_s) \right\} / [A(t)B(t)]_p$$

$$\widehat{S}_{PE} = \left( \phi_k \rho_k \right)_p \frac{1}{[A(t)B(t)]_p \Delta \tau}$$

$$at_{EE} = \frac{A(t)}{B(t)} \frac{2(\phi_s k_s + \phi_l k_l)_E (\phi_s k_s + \phi_l k_l)_P (1 - 0,1Pe_e)^5}{(\phi_s k_s + \phi_l k_l)_E + (\phi_s k_s + \phi_l k_l)_P \delta \xi_{EP}} + \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle u_k \rangle^k}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \right]$$

Para a equação de conservação de momento para a fase líquida para a direção  $x$  é:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_l \rho_l \langle u_l \rangle^l}{A(t)B(t)} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \phi_l \rho_l \left( \frac{\langle u_l \rangle^l}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \langle u_l \rangle^l - \mu_l^* \phi_l \frac{A(t)}{B(t)} \frac{\partial \langle u_l \rangle^l}{\partial \xi} \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \phi_l \rho_l \left( \frac{\langle v_l \rangle^l}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \langle u_l \rangle^l - \mu_l^* \phi_l \frac{B(t)}{A(t)} \frac{\partial \langle u_l \rangle^l}{\partial \eta} \right] \\ & = \langle u_l \rangle^l \left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_l \rho_l}{A(t)B(t)} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \phi_l \rho_l \left( \frac{\langle u_l \rangle^l}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \phi_l \rho_l \left( \frac{\langle v_l \rangle^l}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \right] \right\} + \bar{S}_{Mu} \end{aligned} \quad (5.119)$$

O termo fonte transformado é

$$\bar{S}_{Mu} = \frac{\left\{ \begin{aligned} & -\phi_l \frac{\partial \langle p_l \rangle^l}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \mu_l^* \phi_l \frac{\partial \langle u_l \rangle^l}{\partial \xi} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \mu_l^* \phi_l \frac{\partial \langle v_l \rangle^l}{\partial \xi} \right] + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ 2\mu_l^* \langle u_l \rangle^l \frac{\partial \langle \phi_l \rangle^l}{\partial \xi} \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \mu_l^* \langle u_l \rangle^l \frac{\partial \langle \phi_l \rangle^l}{\partial \eta} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \mu_l^* \langle v_l \rangle^l \frac{\partial \langle \phi_l \rangle^l}{\partial \xi} \right] + \phi_l \rho_l \mathbf{g} + \langle u_l \rangle^l \left[ \frac{\partial}{\partial \tau} (\phi_s \rho_s) \right] \\ & + \phi_l^2 \mu_l \left[ \left( \frac{\cos^2 \varphi}{K_{\xi\xi}} + \frac{\sin^2 \varphi}{K_{\eta\eta}} \right) (-\langle u_l \rangle^l) + \sin \varphi \cos \varphi \left( \frac{1}{K_{\xi\xi}} - \frac{1}{K_{\eta\eta}} \right) (-\langle v_l \rangle^l) \right] \end{aligned} \right\}}{[A(t)B(t)]}$$

discretizado é

$$\widehat{S}_{CMu} = \left[ \begin{aligned} & -(\phi_i)_w \frac{[(\langle p_i \rangle')_w - (\langle p_i \rangle')_p]}{\Delta \xi} + (\mu_i \phi_i)_p \frac{(\langle u_i \rangle')_e - (\langle u_i \rangle')_w}{\partial \xi \cdot \delta \xi_-} - (\mu_i \phi_i)_w \frac{(\langle u_i \rangle')_w - (\langle u_i \rangle')_{ww}}{\partial \xi \cdot \delta \xi_-} \\ & + (\mu_i \phi_i)_{nw} \frac{(\langle v_i \rangle')_n - (\langle v_i \rangle')_{nw}}{\delta \xi_- \cdot \Delta \eta} - (\mu_i \phi_i)_{sw} \frac{(\langle v_i \rangle')_s - (\langle v_i \rangle')_{sw}}{\delta \xi_- \cdot \Delta \eta} + 2(\mu_i \phi_i)_p \frac{(\langle \phi_i \rangle')_e - (\langle \phi_i \rangle')_w}{\partial \xi \cdot \delta \xi_-} \\ & - 2(\mu_i \phi_i)_w \frac{(\langle \phi_i \rangle')_w - (\langle \phi_i \rangle')_{ww}}{\partial \xi \cdot \delta \xi_-} + (\mu_i \phi_i)_{nw} \frac{(\langle \phi_i \rangle')_{nw} - (\langle \phi_i \rangle')_w}{\partial \eta_+ \cdot \delta \eta} \\ & - (\mu_i \phi_i)_{sw} \frac{(\langle \phi_i \rangle')_w - (\langle \phi_i \rangle')_{sw}}{\partial \eta_- \cdot \delta \eta} + (\mu_i \phi_i)_{nw} \frac{(\langle \phi_i \rangle')_n - (\langle \phi_i \rangle')_{nw}}{\delta \xi_- \cdot \Delta \eta} \\ & - (\mu_i \phi_i)_{sw} \frac{(\langle \phi_i \rangle')_s - (\langle \phi_i \rangle')_{sw}}{\delta \xi_- \cdot \Delta \eta} + \frac{(\langle u_i \rangle')_w}{\Delta \tau} (\phi_i \rho_i)_w \\ & - (\phi_i^2 \mu_i)_w \left[ \sin \varphi_w \cos \varphi_w \left( \frac{1}{(K_{\xi\xi})_w} - \frac{1}{(K_{\eta\eta})_w} \right) (\langle v_i \rangle')_w \right] \end{aligned} \right] \\ [A(t)B(t)]$$

$$\widehat{S}_{PMu} = \frac{[(\phi_i \mu_i)_w] \frac{1}{\Delta \tau} - (\phi_i^2 \mu_i)_w \left[ \frac{\cos^2 \varphi_w}{(K_{\xi\xi})_w} + \frac{\sin^2 \varphi_w}{(K_{\eta\eta})_w} \right]}{[A(t)B(t)]}$$

$$at_{EMu} = \frac{A(t)}{B(t)} \frac{2(\mu_i \phi_i)_E (\mu_i \phi_i)_P (1 - 0,1Pe_e)^5}{(\mu_i \phi_i)_E + (\mu_i \phi_i)_P \delta \xi_{EP}} + \left[ \phi_i \rho_i \left( \frac{\langle u_i \rangle'}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \right]_e$$

$$at_{WMu} = \frac{A(t)}{B(t)} \frac{2(\mu_i \phi_i)_W (\mu_i \phi_i)_P (1 - 0,1Pe_w)^5}{(\mu_i \phi_i)_W + (\mu_i \phi_i)_P \delta \xi_{WP}} + \left[ \phi_i \rho_i \left( \frac{\langle u_i \rangle'}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \right]_w$$

$$at_{NMu} = \frac{B(t)}{A(t)} \frac{2(\mu_i \phi_i)_N (\mu_i \phi_i)_P (1 - 0,1Pe_n)^5}{(\mu_i \phi_i)_N + (\mu_i \phi_i)_P \delta \eta_{NP}} + \left[ \phi_i \rho_i \left( \frac{\langle v_i \rangle'}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \right]_n$$

$$at_{SMu} = \frac{B(t)}{A(t)} \frac{2(\mu_i \phi_i)_S (\mu_i \phi_i)_P (1 - 0,1Pe_s)^5}{(\mu_i \phi_i)_S + (\mu_i \phi_i)_P \delta \eta_{SP}} + \left[ \phi_i \rho_i \left( \frac{\langle v_i \rangle'}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \right]_s$$

$$at_{PMu} = at_{EMu} + at_{WMu} + at_{NMu} + at_{SMu} + at_{PMu}^o - \widehat{S}_{PMu} \Delta \xi \Delta \eta$$

$$at_{PMu}^o = \frac{\left( \overset{o}{\phi_i} \overset{o}{\rho_i} \right)_P \Delta \xi \Delta \eta}{\Delta \tau}$$

$$bt_{Mu} = at_{PMu}^o \left( \langle u_i \rangle' \right)_P + \widehat{S}_{CMu} \Delta \xi \Delta \eta$$

Para a equação de conservação de momento para a fase líquida para a direção  $y$  é:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_i \rho_i \langle v_i \rangle'}{A(t)B(t)} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \phi_i \rho_i \left( \frac{\langle u_i \rangle'}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \langle v_i \rangle' - \mu_i^* \phi_i \frac{A(t)}{B(t)} \frac{\partial \langle v_i \rangle'}{\partial \xi} \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \phi_i \rho_i \left( \frac{\langle v_i \rangle'}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \langle v_i \rangle' - \mu_i^* \phi_i \frac{B(t)}{A(t)} \frac{\partial \langle v_i \rangle'}{\partial \eta} \right] \\ & = \langle v_i \rangle' \left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_i \rho_i}{A(t)B(t)} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \phi_i \rho_i \left( \frac{\langle u_i \rangle'}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \phi_i \rho_i \left( \frac{\langle v_i \rangle'}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \right] \right\} + \hat{S}_{Mv} \end{aligned} \quad (5.120)$$

$$\hat{S}_{CMv} = \frac{\left[ \begin{aligned} & -(\phi_i)_s \frac{[(\langle p_i \rangle')_s - (\langle p_i \rangle')_p]}{\Delta \eta} + (\mu_i^* \phi_i)_p \frac{(\langle u_i \rangle')_e - (\langle u_i \rangle')_w}{\partial \xi \cdot \delta \xi_-} - (\mu_i^* \phi_i)_w \frac{(\langle u_i \rangle')_w - (\langle u_i \rangle')_{ww}}{\partial \xi \cdot \delta \xi_-} \\ & + (\mu_i^* \phi_i)_{mw} \frac{(\langle v_i \rangle')_n - (\langle v_i \rangle')_{nw}}{\delta \xi_- \cdot \Delta \eta} - (\mu_i^* \phi_i)_{sw} \frac{(\langle v_i \rangle')_s - (\langle v_i \rangle')_{sw}}{\delta \xi_- \cdot \Delta \eta} + 2(\mu_i^* \langle u_i \rangle')_p \frac{(\langle \phi_i \rangle')_e - (\langle \phi_i \rangle')_w}{\partial \xi \cdot \delta \xi_-} \\ & - 2(\mu_i^* \langle u_i \rangle')_w \frac{(\langle \phi_i \rangle')_w - (\langle \phi_i \rangle')_{ww}}{\partial \xi \cdot \delta \xi_-} + (\mu_i^* \langle u_i \rangle')_{mw} \frac{(\langle \phi_i \rangle')_{nw} - (\langle \phi_i \rangle')_w}{\partial \eta_+ \cdot \delta \eta} \\ & - (\mu_i^* \langle u_i \rangle')_{sw} \frac{(\langle \phi_i \rangle')_w - (\langle \phi_i \rangle')_{sw}}{\partial \eta_- \cdot \delta \eta} + (\mu_i^* \langle v_i \rangle')_{mw} \frac{(\langle \phi_i \rangle')_n - (\langle \phi_i \rangle')_{nw}}{\delta \xi_- \cdot \Delta \eta} \\ & - (\mu_i^* \langle v_i \rangle')_{sw} \frac{(\langle \phi_i \rangle')_s - (\langle \phi_i \rangle')_{sw}}{\delta \xi_- \cdot \Delta \eta} + (\phi_i)_s [(\rho_i)_s - \rho_i^{\text{ref}}] \mathbf{g} + \frac{(\langle u_i \rangle')_w}{\Delta \tau} (\phi_s \rho_s)_w \\ & - (\phi_i^2 \mu_i)_w \left[ \sin \varphi_w \cos \varphi_w \left( \frac{1}{(K_{\xi\xi})_w} - \frac{1}{(K_{\eta\eta})_w} \right) (\langle v_i \rangle')_w \right] \end{aligned} \right]}{[A(t)B(t)]}$$

$$\hat{S}_{PMv} = \frac{[(\phi_i \mu_i)_s] \frac{1}{\Delta \tau} - (\phi_i^2 \mu_i)_s \left[ \frac{\cos^2 \varphi_s}{(K_{\xi\xi})_s} + \frac{\sin^2 \varphi_s}{(K_{\eta\eta})_s} \right]}{[A(t)B(t)]}$$

Para a equação de conservação de espécies para a fase líquida:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_i \rho_i \langle C_i \rangle'}{A(t)B(t)} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \phi_i \rho_i \left( \frac{\langle u_i \rangle'}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \langle C_i \rangle' - \phi_i \rho_i \mathbf{D}_i^* \frac{A(t)}{B(t)} \frac{\partial \langle C_i \rangle'}{\partial \xi} \right] + \\
& \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \phi_i \rho_i \left( \frac{\langle v_i \rangle'}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \langle C_i \rangle' - \phi_i \rho_i \mathbf{D}_i^* \frac{B(t)}{A(t)} \frac{\partial \langle C_i \rangle'}{\partial \eta} \right] = \\
& \langle C_i \rangle' \left[ \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_i \rho_i}{A(t)B(t)} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ \phi_i \rho_i \left( \frac{\langle u_i \rangle'}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \phi_i \rho_i \left( \frac{\langle v_i \rangle'}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \right] \right] + \hat{S}_{sl}
\end{aligned} \tag{5.121}$$

$$\hat{S}_{sl} = \frac{\langle C_i \rangle' (1 - \kappa_s) \frac{\partial}{\partial \tau} (\phi_s \rho_s) - \tilde{D}_s (\bar{C}_{sl} - \langle C_s \rangle^s)}{A(t)B(t)}$$

discretizado é

$$\hat{S}_{psl} = \frac{[1 - (\kappa_s)_p] \frac{(\phi_s \rho_s)_p - (\phi_s \rho_s)_p^o}{\Delta \tau}}{A(t)B(t)}$$

$$\hat{S}_{csl} = \frac{[1 - (\kappa_s)_p] \frac{(\phi_s \rho_s)_p - (\phi_s \rho_s)_p^o}{\Delta \tau} - \tilde{D}_s (\bar{C}_{sl} - \langle C_s \rangle^s)}{A(t)B(t)}$$

Para a obtenção da equação da pressão na forma transformada, considera-se em primeiro lugar a equação da continuidade na forma transformada (conservação de massa para a mistura) para uma fase (neste caso a fase líquida) é dada por (para  $\langle \mathbf{v}_s \rangle^s = 0$ ):

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_l \rho_l}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\phi_s \rho_s}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\phi_l \rho_l \langle U_l \rangle') + \frac{\partial}{\partial \xi} (\phi_l \rho_l \langle V_l \rangle') = 0 \tag{5.122}$$

ou na forma discretizada por

$$\begin{aligned}
& (\phi_l \rho_l \langle U_l \rangle^k \Delta \eta \Delta \xi)_e - (\phi_l \rho_l \langle U_l \rangle^k \Delta \eta \Delta \xi)_w + (\phi_l \rho_l \langle V_l \rangle^k \Delta \eta \Delta \xi)_n - (\phi_l \rho_l \langle V_l \rangle^k \Delta \eta \Delta \xi)_s \\
& \left( \frac{\phi_l \rho_l}{J \Delta \tau} \Delta \eta \Delta \xi \right)_p - \left( \frac{\phi_l \rho_l}{J \Delta \tau} \Delta \eta \Delta \xi \right)_p^o + \left( \frac{\phi_s \rho_s}{J \Delta \tau} \Delta \eta \Delta \xi \right)_p - \left( \frac{\phi_s \rho_s}{J \Delta \tau} \Delta \eta \Delta \xi \right)_p^o = 0
\end{aligned} \tag{5.123}$$

substituindo-se os termos relativos às velocidades

$$\langle\langle U'_k \rangle^k\rangle_{i,j} = \langle\langle U_k \rangle^k\rangle_{i,j}^* + d_{i,j} \alpha_{11} (P'_{i-1,j} - P'_{i,j}) \Delta \xi \quad (5.124)$$

$$\langle\langle V'_k \rangle^k\rangle_{i,j} = \langle\langle V_k \rangle^k\rangle_{i,j}^* + d_{i,j} \alpha_{22} (P'_{i,j-1} - P'_{i,j}) \Delta \eta \quad (5.125)$$

$$\text{onde } \alpha_{11} = \frac{a}{J^2} = \frac{\xi_x^2 + \xi_y^2}{J^2} = \frac{(Jy_\eta)^2 + (-Jx_\eta)^2}{J^2} = y_\eta^2 + x_\eta^2 \quad , \quad (5.126)$$

$$\langle\langle U_k \rangle^k\rangle_{i,j}^* = \left( \frac{\langle u_i \rangle^i}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right)_{i,j} \quad , \quad (5.127)$$

$$\langle\langle V_k \rangle^k\rangle_{i,j}^* = \left( \frac{\langle v_i \rangle^i}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right)_{i,j} \quad (5.128)$$

obtem-se:

$$\begin{aligned} & \left[ \phi_l \rho_l \left( \langle U_k^* \rangle^k + d_w \alpha_{11} (P'_E - P'_P) \Delta \xi \right) \Delta \eta \Delta \xi \right]_e - \left[ \phi_l \rho_l \left( \langle U_k^* \rangle^k + d_w \alpha_{11} (P'_P - P'_W) \Delta \xi \right) \Delta \eta \Delta \xi \right]_w + \\ & \left[ \phi_l \rho_l \left( \langle U_k^* \rangle^k + d_w \alpha_{22} (P'_N - P'_P) \Delta \eta \right) \Delta \eta \Delta \xi \right]_n - \left[ \phi_l \rho_l \left( \langle U_k^* \rangle^k + d_w \alpha_{22} (P'_P - P'_S) \Delta \eta \right) \Delta \eta \Delta \xi \right]_s + \\ & \left( \frac{\phi_l \rho_l}{\Delta \tau} \Delta \eta \Delta \xi \right)_p - \left( \frac{\phi_l \rho_l}{\Delta \tau} \Delta \eta \Delta \xi \right)_p^o = 0 \end{aligned} \quad (5.129)$$

ou

$$\begin{aligned}
& [\phi_i \rho_i (d_e \alpha_{11} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_e P'_E - [\phi_i \rho_i (d_w \alpha_{11} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_w P'_W + [\phi_i \rho_i (d_n \alpha_{ss} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_n P'_N \\
& - [\phi_i \rho_i (d_s \alpha_{ss} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_s P'_S + \left\{ [\phi_i \rho_i (d_e \alpha_{11} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_e - [\phi_i \rho_i (d_w \alpha_{11} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_w + \right. \\
& \left. [\phi_i \rho_i (d_n \alpha_{22} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_n - [\phi_i \rho_i (d_s \alpha_{22} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_s \right\} P'_P \\
& + [\phi_i \rho_i \langle U_k^* \rangle^k \Delta \eta \Delta \xi]_e - [\phi_i \rho_i \langle U_k^* \rangle^k \Delta \eta \Delta \xi]_w + [\phi_i \rho_i \langle U_k^* \rangle^k \Delta \eta \Delta \xi]_n - [\phi_i \rho_i \langle U_k^* \rangle^k \Delta \eta \Delta \xi]_s + \\
& \left( \frac{\phi_i \rho_i}{\Delta \tau} \Delta \eta \Delta \xi \right)_P - \left( \frac{\phi_i \rho_i}{\Delta \tau} \Delta \eta \Delta \xi \right)_P^o = 0
\end{aligned} \tag{5.130}$$

Agrupando os termos da equação, obtém-se

$$at_{I,J} P_{I,J} = at_{I-1,J} P_{I-1,J} + at_{I+1,J} P_{I+1,J} + at_{I,J-1} P_{I,J-1} + at_{I,J+1} P_{I,J+1} + bt_{I,J} \tag{5.131}$$

os coeficientes são dados por:

$$at_{EP} = [\phi_i \rho_i (d_e \alpha_{11} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_e \quad at_{WP} = [\phi_i \rho_i (d_w \alpha_{11} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_w$$

$$at_{NP} = [\phi_i \rho_i (d_n \alpha_{22} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_n \quad at_{SP} = [\phi_i \rho_i (d_s \alpha_{22} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_s$$

$$\begin{aligned}
at_{PP} = & [\phi_i \rho_i (d_e \alpha_{11} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_e - [\phi_i \rho_i (d_w \alpha_{11} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_w + [\phi_i \rho_i (d_n \alpha_{22} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_n \\
& - [\phi_i \rho_i (d_s \alpha_{22} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_s
\end{aligned}$$

ou

$$at_{EP} = [(A(t))^2 \phi_i \rho_i (d_e \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_e \quad at_{WP} = [(A(t))^2 \phi_i \rho_i (d_w \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_w$$

$$at_{NP} = [(B(t))^2 \phi_i \rho_i (d_n \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_n \quad at_{SP} = [(B(t))^2 \phi_i \rho_i (d_s \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_s$$

$$\begin{aligned}
at_{PP} = & [(A(t))^2 \phi_i \rho_i (d_e \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_e - [(A(t))^2 \phi_i \rho_i (d_w \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_w + [(B(t))^2 \phi_i \rho_i (d_n \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_n \\
& - [(B(t))^2 \phi_i \rho_i (d_s \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_s
\end{aligned}$$

o termo fonte por

$$\begin{aligned}
bt_p = & \left[ \phi_l \rho_l \left( \frac{\langle u_l \rangle^l}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \Delta \eta \Delta \xi \right]_e - \left[ \phi_l \rho_l \left( \frac{\langle u_l \rangle^l}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \Delta \eta \Delta \xi \right]_w + \\
& \left[ \phi_l \rho_l \left( \frac{\langle v_l \rangle^l}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \Delta \eta \Delta \xi \right]_n - \left[ \phi_l \rho_l \left( \frac{\langle v_l \rangle^l}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right) \Delta \eta \Delta \xi \right]_s + \\
& \left( \frac{\phi_l \rho_l}{A(t) B(t) \Delta \tau} \Delta \eta \Delta \xi \right)_p - \left( \frac{\phi_l \rho_l}{A(t) B(t) \Delta \tau} \Delta \eta \Delta \xi \right)_p^o
\end{aligned}$$

resolve-se também a equação de correção da pressão  $P'$ :

$$at_{I,J} P'_{I,J} = at_{I-1,J} P'_{I-1,J} + at_{I+1,J} P'_{I+1,J} + at_{I,J-1} P'_{I,J-1} + at_{I,J+1} P'_{I,J+1} + bt_{I,J} \quad (5.132)$$

#### 5.4 – Considerações Assumidas

Na dedução do modelo matemático e para a etapa de simulação numérica, foi necessário assumir determinadas simplificações e aproximações.

Para o modelo matemático:

- O modelo não considera a flutuação ou sedimentação de fase sólida na forma de cristais equiaxiais.
- A fase sólida cresce sob a forma de dendritas colunares.
- Considera-se que as dendritas crescem na direção oposta ao fluxo de calor, de modo que o ângulo entre os braços primários e o sistema de coordenadas pode ser determinado através do gradiente de temperatura.
- A fase sólida pode estar em movimento ( $v_s \neq 0$ ) e pode ocorrer uma deformação plástica ou visco-plástica.
- O superaquecimento do metal líquido é incluído nas simulações.
- A concentração de espécies na interface do volume de controle e a concentração de espécies integrada sobre o mesmo são iguais, uma vez que líquido no volume elementar representativo (VER) é considerado como estando bem misturado para todas as espécies ( $m$ ) de modo que:

$$\langle C_l^m \rangle^l = \bar{C}_{ls}^m \quad .$$

- Considera-se que a concentração média no sólido para o elemento  $m$  permanece constante durante uma possível refusão:  $\langle C_s^m \rangle^s = \text{constante}$ .

- Todas as fases compreendidas por um volume elementar representativo estão em equilíbrio térmico, ou seja,

$$\langle T_s \rangle^s = \langle T_l \rangle^l = T .$$

- As equações de conservação de energia e de espécies são acopladas através de equilíbrio termodinâmico na interface sólido/líquido, ou seja, através do diagrama de fases: :

$$T = f(C) \quad \text{e} \quad C_l = f(\kappa C_s) ;$$

- Para ligas multicomponentes, a temperatura e a concentração na interface sólido/líquido pode ser determinada utilizando os potenciais químicos:

$$\mu_s^m(T, C_{sl}^c, \dots, C_{sl}^n) = \mu_l^m(T, C_{ls}^c, \dots, C_{ls}^n)$$

onde

$n$  = número total de espécies na liga

$\mu_s^m$  = potencial de um componente  $m$  na fase  $k$ .

- A influência de cada espécie na temperatura *liquidus* é levada em conta e a mudança na temperatura *liquidus* com a concentração do líquido é considerada como sendo constante, mas diferente para cada elemento, de modo que para um líquido homogeneizado tem-se:

$$T = T_f + \sum \frac{\partial T_{ls}}{\partial C_{ls}^m} \Big|_{C_{ls}^r, r \neq m} \langle C_l^m \rangle \quad \kappa^m = \frac{\bar{C}_{sl}^m}{\langle C_l^m \rangle^l} .$$

- O valor do coeficiente de partição  $\kappa^m$  é considerado constante.
- Todos os gradientes macroscópicos de espécies que aparecem na equação de conservação de energia da mistura são desprezados.
- Os efeitos de difusão cruzada entre os elementos de liga são desprezados.
- A difusão microscópica de espécies na fase sólida é modelada considerando-se um modelo de lâmina 1D para o braço da dendrita e considerando uma distribuição parabólica de concentração para o sólido (Figura 5.3).
- As taxas de difusão de um elemento nas fases sólida e líquida dependem dos coeficientes de difusividade de massa na fase sólida e na fase líquida, os quais podem aqui serem considerados diferentes para cada elemento (ligas multicomponentes).

- As taxas de difusão de um elemento na fase sólida pode variar entre os casos limites, ou seja, desde rápida (completa difusão), comportamento descrito pela regra da alavanca, até lenta (nenhuma difusão), comportamento descrito pela equação de Scheil.
- Pode-se incluir uma taxa limitada de difusão de espécies na fase líquida em escala macroscópica.
- A gravidade é a única força de corpo presente.
- A tensão devido a viscosidade do líquido é considerada como proporcional a taxa de deformação.
- A tensão interfacial para o fluxo de líquido através das dendritas colunares (matriz porosa) é modelada empregando-se a permeabilidade da zona pastosa em analogia com a lei ou equação de Darcy.
- A permeabilidade paralela ( $K_{\xi\xi}$ ) e perpendicular ( $K_{\eta\eta}$ ) aos braços primários são diferentes.
- Os termos relativos à permeabilidade,  $K_{\xi\xi}$  e  $K_{\eta\eta}$ , são determinados em função do espaçamento entre os braços de dendritas e podem ser baseados em dados experimentais ou analíticos e podem variar conforme a fração de sólido.
- Pode-se assumir a presença de no máximo três fases:  $l$ ,  $\alpha_{sol}$  and  $\gamma_{sol}$   
ou  $l$ ,  $\alpha$  primário ou  $\gamma$ , eutético  $\alpha$ - $\gamma$ .

Para a implementação do modelo numérico:

- A fase sólida é submetida a uma translação rígida, ou seja, não está ocorrendo uma deformação plástica ou elástica da mesma, de modo que se aplicarmos uma transformação de coordenadas pode-se considerar  $\mathbf{v}_s = 0$ .
- Os coeficientes de difusividade de massa na fase sólida e na fase líquida variam de acordo com o elemento mas são considerados constante em relação à temperatura e concentração.
- Os valores de determinados coeficientes que aparecem nas equações macroscópicas de conservação, como por exemplo a difusividade de massa no líquido, a viscosidade do líquido, a condutividade térmica do sólido e do líquido, deveriam ser função da microestrutura local. Entretanto, devido a ausência de uma teoria geral ou de valores experimentais, os mesmos foram assumidos como iguais aos correspondentes valores microscópicos.
- A entalpia  $h$  para cada fase é considerada variando apenas com a temperatura.

- A massa específica no líquido e no sólido são considerados com iguais e constantes ( $\rho_l = \rho_s = \text{constante}$ ), exceto no termo relativo a fluatibilidade. Desta forma, o fluxo devido a contração de solidificação e os efeitos no fluxo devido a formação de porosidades são desprezados.
- As propriedades termofísicas, condutividade térmica e calor específico para as fases, são consideradas constantes, embora variem para o sólido e para o líquido.

### 5.5 – Algoritmo de Solução para o Caso Bidimensional

O Algoritmo de solução é baseado no método SIMPLER<sup>2</sup> proposto por Patankar (Patankar-1980, Maliska-1995, Versteeg e Malalasekera-1995).

O programa computacional implementado é baseado no código desenvolvido por Schneider e Beckermann (Schneider e Beckermann-1995, Schneider e Beckermann-1995, Schneider e Beckermann-1995, Böhmer et al.-1995, Schneider e Beckermann-1992)

No procedimento apresentado a seguir, mantém-se as velocidades  $u$  e  $v$  como variáveis independentes (e não as velocidades contravariantes).

1- Utilizando como entrada de dados a geometria física do problema, gerar a malha, ou seja, obter o novo sistema de coordenadas e calcular as métricas de transformação.

2- sendo o problema transiente, são conhecidos no instante  $t = 0$ , ou no instante de tempo  $n$ , os campos de  $\rho$ ,  $\phi_s$ ,  $u$ ,  $v$ ,  $T$ ,  $C_l$ ,  $C_s$  e  $P$ .

3- Estima-se os campos de  $\rho$ ,  $\phi_s$ ,  $u$ ,  $v$ ,  $T$ ,  $C_l$ ,  $C_s$  e  $P$  no instante  $t + \Delta t$  ou instante  $n + 1$ . Estes termos são denominados  $\rho^*$ ,  $\phi_s^*$ ,  $u_k^*$ ,  $v_k^*$ ,  $T_k^*$ ,  $C_l^*$ ,  $C_s^*$  e  $P^*$ . Logicamente  $\rho$ ,  $P$  e  $T$  devem satisfazer a equação de estado. ( $\rho$  é calculado pela equação de estado)

<sup>2</sup> O método apresentado por Maliska-1995 considera o método SIMPLEC e o método apresentado por Shyy et al.-1996 considera o método SIMPLE.

4- As equações de conservação da energia e de espécies na zona pastosa são acopladas através dos parâmetros do diagrama de fases, fornecendo um método para o cálculo da fração volumétrica de sólido. A temperatura *liquidus* é definida pela equação:

$$T = T_f + \sum_m \frac{\partial T}{\partial C_{ls}^m} \bigg|_{C_b^r} \langle C_l^m \rangle.$$

A equação acima é substituída na equação discretizada da conservação de energia, resultando em uma equação de forma não-linear para a fração de sólido, cuja solução é obtida utilizando-se o método iterativo de Newton-Raphson.

5- Calculam-se as pseudo-velocidades  $\hat{u}_k$  e  $\hat{v}_k$  através da substituição dos valores das velocidades nos nós vizinhos, empregando-se equações do tipo

$$(\hat{u}_k)_{i,j} = \frac{\sum a_{nb} (\dot{u}_k)_{nb} + b_{i,j}}{a_{i,j}}, \quad (\hat{v}_k)_{i,j} = \frac{\sum a_{nb} (\dot{v}_k)_{nb} + b_{i,j}}{a_{i,j}}.$$

Os coeficientes e os termos fontes para as equações acima envolvem as velocidades  $\langle U_k' \rangle^k$  e  $\langle V_k' \rangle^k$  ( $\langle U_k' \rangle^k = \langle u_l \rangle^l y_\eta - \langle v_l \rangle^l x_\eta - y_\eta x_\tau + x_\eta y_\tau$  e  $\langle V_k' \rangle^k = \langle v_l \rangle^l x_\xi - \langle u_l \rangle^l y_\xi - x_\xi y_\tau + y_\xi x_\tau$ ) e portanto, envolvem  $J$  e  $\alpha_{ij}$ , etc. Os coeficientes e os termos fontes para a equação de momento relativos às equações acima são dados por:

$$at_{EMu} = \frac{A(t)}{B(t)} \frac{2(\mu_k^* \phi_k)_E (\mu_k^* \phi_k)_P}{(\mu_k^* \phi_k)_E + (\mu_k^* \phi_k)_P} \frac{(1 - 0,1Pe_e)^5}{\delta \xi_{EP}} + \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle u_k^* \rangle^k}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \right]_e,$$

$$at_{PMu} = at_{EMu} + at_{WMu} + at_{NMu} + at_{SMu} + at_{PMu}^o - \hat{S}_{PMu} \Delta \xi \Delta \eta,$$

$$at_{PMu}^o = \frac{\left( \phi_k^o \rho_k^o \right)_P \Delta \xi \Delta \eta}{\Delta \tau},$$

$$bt_{Mu} = at_{PMu}^o \left( \langle u_k \rangle^k \right)_p + \widehat{S}_{CMu} \Delta \xi \Delta \eta \quad , \quad \text{com } \widehat{S}_{CMu} \text{ calculado considerando } \left( \langle u_k \rangle^k \right)^* \text{ e } \left( \langle v_k \rangle^k \right)^* .$$

6- Calculam-se os coeficientes e os termos fontes para a equação de pressão,

$$a_{I,J} P_{I,J} = a_{I-1,J} P_{I-1,J} + a_{I+1,J} P_{I+1,J} + a_{I,J-1} P_{I,J-1} + a_{I,J+1} P_{I,J+1} + b_{I,J} .$$

Os coeficientes e os termos fontes para a equação de pressão são dados por

$$at_{EP} = [\phi_l \rho_l (d_e \alpha_{11} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_e \quad , \quad at_{WP} = [\phi_l \rho_l (d_w \alpha_{11} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_w \quad ,$$

$$at_{NP} = [\phi_l \rho_l (d_n \alpha_{22} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_n \quad , \quad at_{SP} = [\phi_l \rho_l (d_s \alpha_{22} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_s \quad ,$$

$$at_{PP} = [\phi_l \rho_l (d_e \alpha_{11} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_e - [\phi_l \rho_l (d_w \alpha_{11} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_w + [\phi_l \rho_l (d_n \alpha_{22} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_n - [\phi_l \rho_l (d_s \alpha_{22} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_s \quad ,$$

$$bt_p = \left[ \phi_l \rho_l \left( \frac{\langle \hat{u}_l \rangle'}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right)_{i,j} \Delta \eta \Delta \xi \right]_e - \left[ \phi_l \rho_l \left( \frac{\langle \hat{u}_l \rangle'}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right)_{i+1,j} \Delta \eta \Delta \xi \right]_w \\ + \left[ \phi_l \rho_l \left( \frac{\langle \hat{v}_l \rangle'}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right)_{i,j+1} \Delta \eta \Delta \xi \right]_n - \left[ \phi_l \rho_l \left( \frac{\langle \hat{v}_l \rangle'}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right)_{i,j} \Delta \eta \Delta \xi \right]_s + \left( \frac{\phi_l \rho_l}{\Delta \tau} \Delta \eta \Delta \xi \right)_p - \left( \frac{\phi_l \rho_l}{\Delta \tau} \Delta \eta \Delta \xi \right)_p^o .$$

Resolve-se então esta equação obtendo-se o campo de pressão  $P$ . Este campo de pressão obtido é atribuído ao campo de pressões estimado  $P^*$ .

7- Calculam-se os coeficientes e os termos fontes para as equações de momento,

$$at_{PMu} \left( u_k^* \right)_{i,j} = at_{EMu} \left( u_k^* \right)_{i+1,j} + at_{WMu} \left( u_k^* \right)_{i-1,j} + at_{NMu} \left( u_k^* \right)_{i,j+1} + at_{SMu} \left( u_k^* \right)_{i,j-1} + at_{PMu}^o - \widehat{S}_{PMu} \Delta \xi \Delta \eta$$

$$at_{EMu} = [A(t)]^3 B(t) \frac{2(\mu_k^* \phi_k)_E (\mu_k^* \phi_k)_P (1 - 0,1Pe_e)^5}{(\mu_k^* \phi_k)_E + (\mu_k^* \phi_k)_P \delta \xi_{EP}} + \left[ \phi_k \rho_k \left( \frac{\langle u_k^* \rangle^k}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right) \right]_e$$

$$at_{PMu} = at_{EMu} + at_{WMu} + at_{NMu} + at_{SMu} + at_{PMu}^o - \hat{S}_{PMu} \Delta \xi \Delta \eta \quad ,$$

$$at_{PMu}^o = \frac{\left( \overset{o}{\phi}_k \overset{o}{\rho}_k \right)_P \Delta \xi \Delta \eta}{\Delta \tau} \quad ,$$

$$bt_{Mu} = at_{PMu}^o \left( \langle u_k^* \rangle^k \right)_P + \hat{S}_{CMu} \Delta \xi \Delta \eta \quad ,$$

$$\hat{S}_{CMu} = \frac{\left[ \begin{aligned} & -(\phi_l)_w \frac{[\langle p_l \rangle'_w - \langle p_l \rangle'_p]}{\Delta \xi} + (\mu_l^* \phi_l)_p \frac{\langle u_l \rangle'_e - \langle u_l \rangle'_w}{\partial \xi \cdot \delta \xi_-} - (\mu_l^* \phi_l)_w \frac{\langle u_l \rangle'_w - \langle u_l \rangle'_{ww}}{\partial \xi \cdot \delta \xi_-} \\ & + (\mu_l^* \phi_l)_{nw} \frac{\langle v_l \rangle'_n - \langle v_l \rangle'_{nw}}{\delta \xi_- \cdot \Delta \eta} - (\mu_l^* \phi_l)_{sw} \frac{\langle v_l \rangle'_s - \langle v_l \rangle'_{sw}}{\delta \xi_- \cdot \Delta \eta} + 2(\mu_l^* \langle u_l \rangle'_p) \frac{\langle \phi_l \rangle'_e - \langle \phi_l \rangle'_w}{\partial \xi \cdot \delta \xi_-} \\ & - 2(\mu_l^* \langle u_l \rangle'_w) \frac{\langle \phi_l \rangle'_w - \langle \phi_l \rangle'_{ww}}{\partial \xi \cdot \delta \xi_-} + (\mu_l^* \langle u_l \rangle'_{nw}) \frac{\langle \phi_l \rangle'_{nw} - \langle \phi_l \rangle'_w}{\partial \eta_+ \cdot \delta \eta} \\ & - (\mu_l^* \langle u_l \rangle'_{sw}) \frac{\langle \phi_l \rangle'_w - \langle \phi_l \rangle'_{sw}}{\partial \eta_- \cdot \delta \eta} + (\mu_l^* \langle v_l \rangle'_{nw}) \frac{\langle \phi_l \rangle'_n - \langle \phi_l \rangle'_{nw}}{\delta \xi_- \cdot \Delta \eta} \\ & - (\mu_l^* \langle v_l \rangle'_{sw}) \frac{\langle \phi_l \rangle'_s - \langle \phi_l \rangle'_{sw}}{\delta \xi_- \cdot \Delta \eta} + \frac{\langle u_l \rangle'_w}{\Delta \tau} (\phi_s \rho_s)_w \\ & - (\phi_l^2 \mu_l)_w \left[ \sin \varphi_w \cos \varphi_w \left( \frac{1}{(K_{\xi\xi})_w} - \frac{1}{(K_{\eta\eta})_w} \right) \langle v_l \rangle'_w \right] \end{aligned} \right]}{[A(t)B(t)]}$$

$$\hat{S}_{PMu} = \frac{\left[ (\phi_l \mu_l)_w^o \frac{1}{\Delta \tau} - (\phi_l^2 \mu_l)_w \left[ \frac{\cos^2 \varphi_w}{(K_{\xi\xi})_w} + \frac{\sin^2 \varphi_w}{(K_{\eta\eta})_w} \right] \right]}{[A(t)B(t)]} \quad .$$

Os coeficientes acima, envolvem as componentes contravariantes  $\langle U_k \rangle^k$  e  $\langle V_k \rangle^k$ . Estas são calculadas com  $u_k^*$  e  $v_k^*$  estimados inicialmente. O cálculo do termo fonte envolve o termo  $\frac{\partial P}{\partial x}$  que é avaliado com o campo de pressões estimado  $P^*$ . Resolvem-se as equações de conservação de momento. As soluções são os novos campos estimados de  $u_k^*$  e  $v_k^*$ .

Calculam-se  $\langle U_k \rangle^k$  e  $\langle V_k \rangle^k$  empregando-se as seguintes equações

$$\langle \langle U_k \rangle \rangle_{i,j}^k = \left[ (u_k^*)_{i,j} \text{new} - (x_\tau)_i \right] y_\eta - \left[ (v_k^*)_{i,j} \text{new} - (y_\tau)_j \right] x_\eta ,$$

$$\langle \langle V_k \rangle \rangle_{i,j}^k = \left[ (v_k^*)_{i,j} \text{new} - (y_\tau)_j \right] x_\xi - \left[ (u_k^*)_{i,j} \text{new} - (x_\tau)_i \right] y_\xi .$$

8- Calculam-se os coeficientes e os termos fontes para a pressão e resolve-se a equação de correção da pressão  $P'$ .

$$a_{I,J} P'_{I,J} = a_{I-1,J} P'_{I-1,J} + a_{I+1,J} P'_{I+1,J} + a_{I,J-1} P'_{I,J-1} + a_{I,J+1} P'_{I,J+1} + b'_{I,J} .$$

Os coeficientes e os termos fontes para a equação de correção de pressão são dados por

$$at_{EP} = [\phi_l \rho_l (d_e \alpha_{11} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_e , \quad at_{WP} = [\phi_l \rho_l (d_w \alpha_{11} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_w ,$$

$$at_{NP} = [\phi_l \rho_l (d_n \alpha_{22} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_n , \quad at_{SP} = [\phi_l \rho_l (d_s \alpha_{22} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_s ,$$

$$at_{PP} = [\phi_l \rho_l (d_e \alpha_{11} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_e - [\phi_l \rho_l (d_w \alpha_{11} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_w + [\phi_l \rho_l (d_n \alpha_{22} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_n - [\phi_l \rho_l (d_s \alpha_{22} \Delta \xi) \Delta \eta \Delta \xi]_s ,$$

$$bt_P = \left[ \phi_l \rho_l \left( \frac{\langle u_i^* \rangle^l \text{new}}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right)_{i,j} \Delta \eta \Delta \xi \right]_e - \left[ \phi_l \rho_l \left( \frac{\langle u_i^* \rangle^l}{B(t)} - \frac{x_\tau}{B(t)} \right)_{i+1,j} \Delta \eta \Delta \xi \right]_w + \left[ \phi_l \rho_l \left( \frac{\langle v_i^* \rangle^l}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right)_{i,j+1} \Delta \eta \Delta \xi \right]_n - \left[ \phi_l \rho_l \left( \frac{\langle v_i^* \rangle^l}{A(t)} - \frac{y_\tau}{A(t)} \right)_{i,j} \Delta \eta \Delta \xi \right]_s + \left( \frac{\phi_l \rho_l}{\Delta \tau} \Delta \eta \Delta \xi \right)_p - \left( \frac{\phi_l \rho_l}{\Delta \tau} \Delta \eta \Delta \xi \right)_p^o .$$

9a- Corrigir os campos de velocidades (cartesianas) obtendo-se  $u_k$  e  $v_k$  utilizando-se o campo de pressão  $P'$  (mas não corrigir o campo de pressões - diferente dos métodos SIMPLE e SIMPLEC) empregando-se as seguintes equações:

$$(u_k)_{i,j} = (u_k^*)_{i,j} + d_{i,j} \alpha_{11} (P'_{l-1,j} - P'_{l,j}) \Delta \xi \quad ,$$

$$(v_k)_{i,j} = (v_k^*)_{i,j} + d_{i,j} \alpha_{22} (P'_{l,j-1} - P'_{l,j}) \Delta \eta \quad ,$$

9b- Corrigir as componentes contravariantes do vetor velocidade  $\langle U_k \rangle^k$  e  $\langle V_k \rangle^k$  utilizando-se o campo de pressão  $P'$  e as seguintes equações de correção

$$\langle \langle U_k \rangle^k \rangle_{i,j} = \langle \langle U_k \rangle^k \rangle_{i,j}^* + d_{i,j} \alpha_{11} (P'_{l-1,j} - P'_{l,j}) \Delta \xi \quad ,$$

$$\langle \langle V_k \rangle^k \rangle_{i,j} = \langle \langle V_k \rangle^k \rangle_{i,j}^* + d_{i,j} \alpha_{22} (P'_{l,j-1} - P'_{l,j}) \Delta \eta \quad ,$$

$$\text{onde } \alpha_{11} = \frac{a}{J^2} = \frac{\xi_x^2 + \xi_y^2}{J^2} = \frac{(Jy_\eta)^2 + (-Jx_\eta)^2}{J^2} = y_\eta^2 + x_\eta^2 \quad .$$

\* observação: outra opção seria realizar primeiro o item 9b e depois corrigir as velocidades  $u_k$  e  $v_k$  utilizando-se as seguintes equações

$$(u_k)_{i,j} = \left[ \frac{\langle \langle U_k \rangle^k \rangle_{i,j}}{J} x_\xi + \frac{\langle \langle V_k \rangle^k \rangle_{i,j}}{J} x_\eta \right] + (x_\tau)_i \quad ,$$

$$(v_k)_{i,j} = \left[ \frac{\langle \langle V_k \rangle^k \rangle_{i,j}}{J} y_\eta + \frac{\langle \langle U_k \rangle^k \rangle_{i,j}}{J} y_\xi \right] + (y_\tau)_j \quad .$$

10- Resolver todas as outras equações de transporte para  $T$ ,  $\phi_s$ ,  $C_l$ ,  $C_s$  na forma transformada.

11- Retornar-se ao item 6 e itera-se até a convergência de temperatura, velocidades, fração volumétrica de sólido e concentração. Foi obtida, até aqui, a solução do problema em  $t = t + \Delta t$ .

12- Considera-se a solução em  $t = t + \Delta t$  como um campo inicial para o novo nível de tempo.

13- Os resultados são entregues então a um pós-processador para obter os gráficos e as visualizações necessárias.

Para resumir o que foi exposto acima, considerar-se-á aqui a resolução simultânea das seguintes equações macroscópicas de conservação:

- equação macroscópica de conservação de massa da mistura (equação 3.36 para  $\langle \mathbf{v}_s \rangle^s \neq 0$ );
- equações macroscópicas de conservação de momento para a fase líquida nas direções  $x$  e  $y$  (equação 3.137);
- equação macroscópica para a conservação da energia da mistura (equação 3.178) As fases sólida e líquida no VER estão em equilíbrio térmico de modo que  $\langle T_l \rangle^l = \langle T_s \rangle^s = T$ ;
- equação macroscópica de conservação de espécies para a fase líquida (equação 3.190 para  $\langle \mathbf{v}_s \rangle^s \neq 0$ );
- equação macroscópica de conservação de espécies para a fase sólida (equação 3.194 para  $\langle \mathbf{v}_s \rangle^s \neq 0$ ).



## CAPÍTULO 6 – APRESENTAÇÃO E ANÁLISE DOS RESULTADOS

### 6.1 – Dados Relativos aos Experimentos Realizados

Foram realizados cerca de 50 experimentos com a liga SCN-Acetona, variando-se o teor de acetona, o grau de deformação, a velocidade de deformação, o tempo relativo ao início de aplicação da deformação (indiretamente a fração de sólido), a espessura inicial do esboço, o método de extração das amostras para análise de composição (através da medição da temperatura *liquidus*), a temperatura da água nos trocadores de calor (tanto na etapa de aquecimento quanto na etapa de resfriamento) e o aquecimento das paredes laterais para garantir ao máximo a condição de contorno do tipo adiabática, onde a mesma se fazia necessária. Desta forma foi possível o ajuste de todo o aparato experimental utilizado e o aperfeiçoamento dos procedimentos utilizados na condução das experiências.

Não é o objetivo deste capítulo apresentar toda a série de experimentos realizados por ser por demais enfadonho e sem propósito. Optou-se pela apresentação de alguns experimentos típicos de determinadas séries que sejam representativos das principais variáveis testadas e que permitiriam, por simples comparação de resultados numérico e experimentais, a comprovação dos modelos matemáticos e suas correspondentes implementações numéricas desenvolvidos neste trabalho.

Consonante com a proposição exposta em capítulo anterior, serão apresentados a seguir dois grupos de resultados de acordo com a metodologia empregada para o desenvolvimento de um modelo matemático para simular a solidificação de ligas com a aplicação simultânea de deformação plástica. Em primeiro lugar, serão apresentados os resultados correspondentes a um domínio unidimensional. A seguir, serão apresentados os resultados correspondentes a um domínio bidimensional.

Observa-se que para a comparação dos resultados numéricos e experimentais para o modelos matemáticos propostos, foi utilizado o mesmo grupo de experimentos. Variou-se contudo, a forma e as dimensões do domínio para cada caso. A Figura 6.1 apresenta os dois domínios, antes da aplicação da deformação, utilizados para os caso unidimensional e bidimensional.

Para verificar a influência do intervalo de solidificação (espessura da zona pastosa), foram realizados experimentos com 3 composições da liga SCN-acetona, variando o teor objetivado de acetona 1%, 4,5% e 11,5% e ainda com SCN puro. Alguns parâmetros de processo foram testados durante a realização dos experimentos tais como: a quantidade de deformação, a presença ou não de fase líquida quando da aplicação da deformação, a velocidade de deformação empregada e o modo de extração das amostras para verificação da composição química. Os dados relativos à evolução dos perfis de temperatura foram monitorados e armazenados pelo sistema de aquisição de dados computadorizado. As composições em vários pontos antes e depois da deformação foram obtidas através de ensaios para determinação da temperatura *liquidus* da amostra e do uso do diagrama de fases da liga. O padrão de convecção no líquido foi registrado através da filmagem do experimento.

Apresenta-se os resultados de solidificação controlada para a liga de SCN-acetona com um teor inicial de acetona em torno de 11,0 % em peso pois, com este teor era possível a obtenção de uma extensa zona pastosa e era muito fácil evitar a formação de uma fase sólida sobre as paredes de plexiglass perpendiculares à coquilha de cobre, possibilitando o acompanhamento e filmagem do crescimento das dendritas colunares e da convecção no metal líquido. Isto era possível porque a temperatura de início de solidificação era um pouco acima da temperatura ambiente, conforme pode ser observado no diagrama de fases da Figura 4.1.

Apresenta-se na Tabela 6.1 os dados para determinados experimentos, selecionados em função de apresentarem uma composição inicial próxima da composição nominal objetivada, além do relativo sucesso na aquisição de dados e na obtenção das amostras para determinação da composição química.

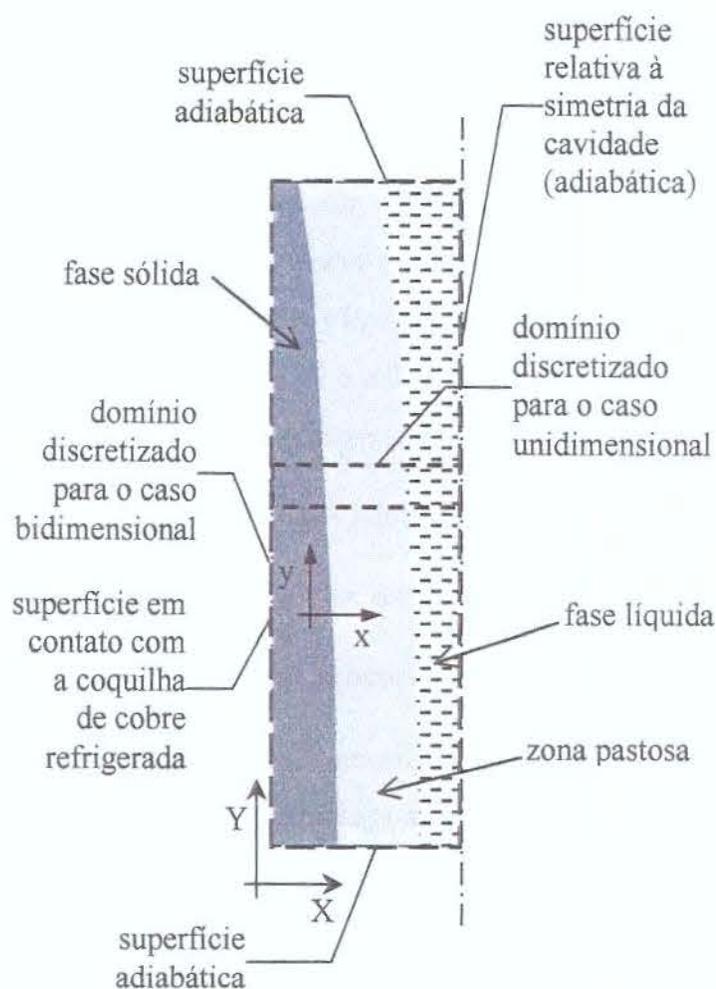


Figura 6.1 – Representação esquemática dos domínios utilizados para as simulações numéricas dos casos unidimensional e bidimensional.

Para permitir a comparação e análise de experimentos realizados sob diferentes condições, optou-se por parametrizar determinadas variáveis. Na Tabela 1 estão apresentadas as seguintes relações: i) a composição do líquido depois e antes da aplicação da deformação,  $\frac{CIAD}{CIAD}$ ; ii) a composição do líquido antes da aplicação da deformação e a composição inicial do líquido,  $\frac{CIAD}{CI_{mi}}$ ; iii) a composição do líquido depois da aplicação da deformação e a composição inicial do líquido,  $\frac{CIAD}{CI_{mi}}$ ; iv) a composição do líquido antes da aplicação da deformação e o tempo de início de aplicação da deformação,  $\frac{CIAD}{TID}$ .

Deve-se destacar que o perfil de distribuição da fração de sólido ao longo da seção do esboço (domínio) variava de um experimento para outro, fato este que deve ser considerado quando da avaliação dos resultados. A variação do teor de sólido entre os experimentos realizados num instante de tempo imediatamente antes da aplicação da deformação (AD), pode ser determinada pelo cálculo da composição do líquido ( $Cl$ ) num dado instante e numa dada posição. Estas informações estão apresentadas na Tabela 6.I nas colunas  $Cl$  AD para a posição 12 mm a partir da coquilha e 90 mm de altura a partir da base do domínio e  $Cl$  AD para a posição 36 mm a partir da coquilha e 90 mm de altura a partir da base do domínio. Na Figura 6.2 são apresentadas as relações entre  $\frac{ClAD}{TID}$  e TID para as posições 12-90 e 36-90 mm para os experimentos listados na Tabela 1. Observa-se que, como era de se esperar, o valor de  $\frac{ClAD}{TID}$  das amostras retiradas, diminui na medida que aumenta o tempo decorrido entre o início da etapa de resfriamento e a obtenção das amostras, sendo que no cálculo de  $ClAD$ , já foi considerado o teor inicial do líquido do experimento. Este comportamento está relacionado com o avanço das interfaces correspondentes a maiores valores de fração de sólido e, conseqüentemente, menores teores de acetona.

Considerando-se um teor objetivado de acetona de 11,0% e fixados os parâmetros do experimento, observou-se que após a realização de vários experimentos, os resultados experimentais obtidos para composições correspondentes a teores muito próximos de acetona, eram similares, demonstrando a reprodutibilidade da metodologia empregada. Desta forma, serão apresentado aqui apenas dois conjuntos de resultados típicos para determinados experimentos, os quais representam grupos distintos de testes.

Código do experimento	Composição inicial $Cl_{ini}$ (% em peso)	Aplicação de deformação	$Cl$ AD 12-90 mm (% em peso)	$Cl$ DD 12-90 mm (% em peso)	$Cl$ AD 36-90 mm (% em peso)	$Cl$ DD 36-90 mm (% em peso)	$\frac{C/DD}{C/AD}$ 12-90 mm	$\frac{C/DD}{C/AD}$ 36-90 mm	Tempo de deformação (s)	Quantidade de deformação
SA30	10,9	sim	16,69	15,65	**	13,86	0,93769	**	30	20% (10mm)
SA31	11,7	não	12,56	++	12,66	++	++	++	++	++
SA33	11,9	não	16,55	++	14,44	++	++	++	++	++
SA36	10,8	sim	14,74	13,5	12,73	11,70	0,91588	0,91909	30	20% (10mm)
SA37	11,4	sim	13,52	12,17	12,53	11,26	0,91864	0,89864	30	20% (10mm)
SA40	10,6	sim	17,1	17,4	14,4	13,6	0,96855	0,94444	35	20% (10mm)
SA43	10,9	sim	14,4	14,1	11,9	11,1	0,97917	0,93277	38	20% (10mm)
SA44	11,3	sim	14,3	13,3	12,26	11,2	0,93007	0,91354	55	20% (10mm)
SA50	10,9	sim	15,9	15,3	13,7	12,4	0,96226	0,90511	33	20% (10mm)
SA51	11,4	sim	17,1	17,7	14,3	13,9	1,03509	0,97202	136	10% (5mm)
SA52	10,7	sim	16,8	17,1	14,7	14,1	1,01786	0,95918	22	10% (5mm)
SA53	11,3	sim	15,5	15,2	13,4	12,6	0,98065	0,94030	87	20% (10mm)

AD – instante antes da aplicação da deformação; DD – instante depois da aplicação da deformação

\*\* - o valor não foi determinado experimentalmente; ++ - não existe valor neste caso

Tabela 6.1A – Dados relativos a parte dos experimentos realizados com composição próxima 11,5 % de acetona.

Código do experimento	Composição inicial $Cl_{ini}$ (% em peso)	$\frac{CIAD}{Cl_{ini}}$	$\frac{CIDD}{Cl_{ini}}$	$\frac{CIAD}{Cl_{ini}}$	$\frac{CIDD}{Cl_{ini}}$	Tempo de início da deformação (TID)	$\frac{CIAD}{TID}$	$\frac{CIAD}{TID}$
		12-90 mm	12-90 mm	36-90 mm	36-90 mm		12-90 mm	36-90 mm
SA30	10,9	1,53119	1,43578	**	1,27156	19058	8,75748E-4	**
SA31	11,7	1,07350	++	1,08205	++	++	++	++
SA33	11,9	1,39076	++	1,21344	++	++	++	++
SA36	10,8	1,36481	1,25	1,17870	1,08333	22551	6,5363E-4	5,6449E-4
SA37	11,4	1,18596	1,08947	1,09912	0,98772	19068	7,0904E-4	6,5712E-4
SA40	10,6	1,61321	1,64151	1,35849	1,28302	14806	1,1500E-3	9,7257E-4
SA43	10,9	1,3211	1,29358	1,09174	1,01835	24329	5,9188E-4	4,8912E-4
SA44	11,3	1,26549	1,17699	1,08496	0,99115	20246	7,0631E-4	6,0555E-4
SA50	10,9	1,45872	1,40367	1,25688	1,13761	13950	1,1400E-3	9,8207E-4
SA51	11,4	1,50000	1,55263	1,25439	1,2193	15740	1,0900E-3	9,0851E-4
SA52	10,7	1,57009	1,59813	1,37383	1,31776	14340	1,1700E-3	0,1030E-3
SA53	11,3	1,37168	1,34513	1,18584	1,11504	14360	1,0800E-3	9,3314E-4

Tabela 6.1B – Dados relativos a parte dos experimentos realizados com composição próxima 11,5 % de acetona.

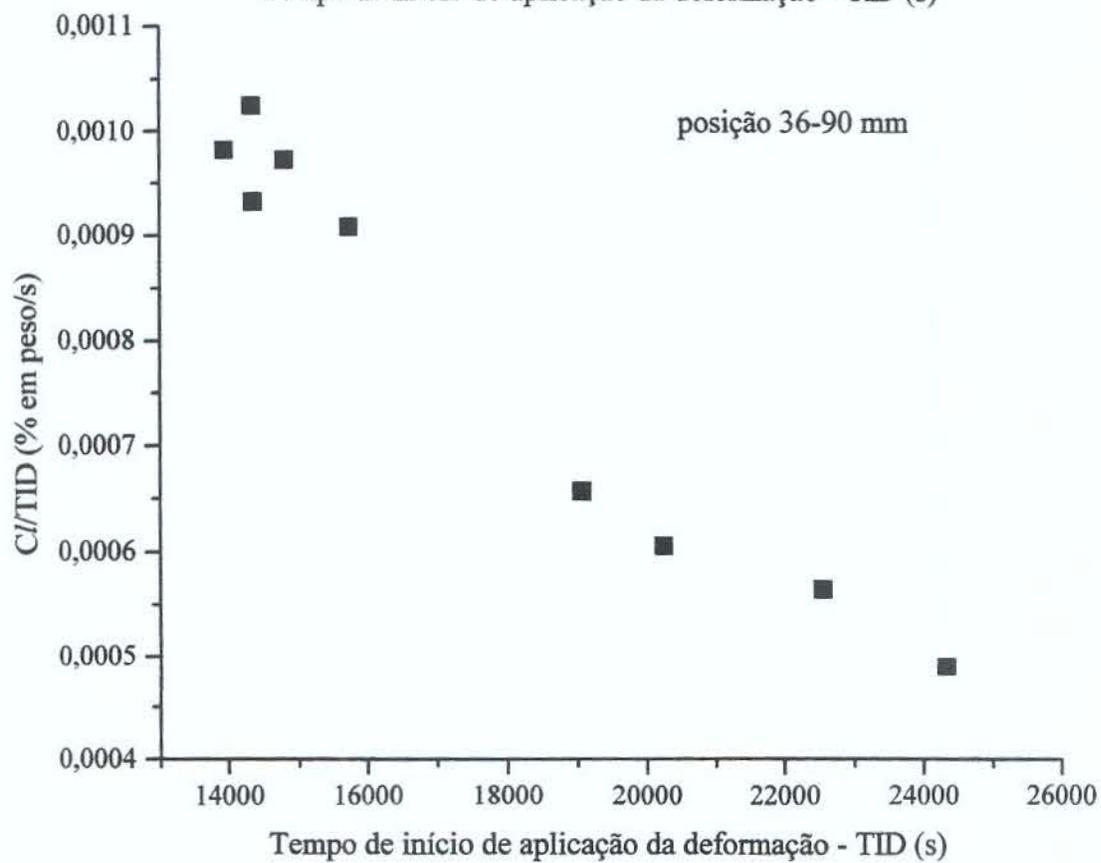
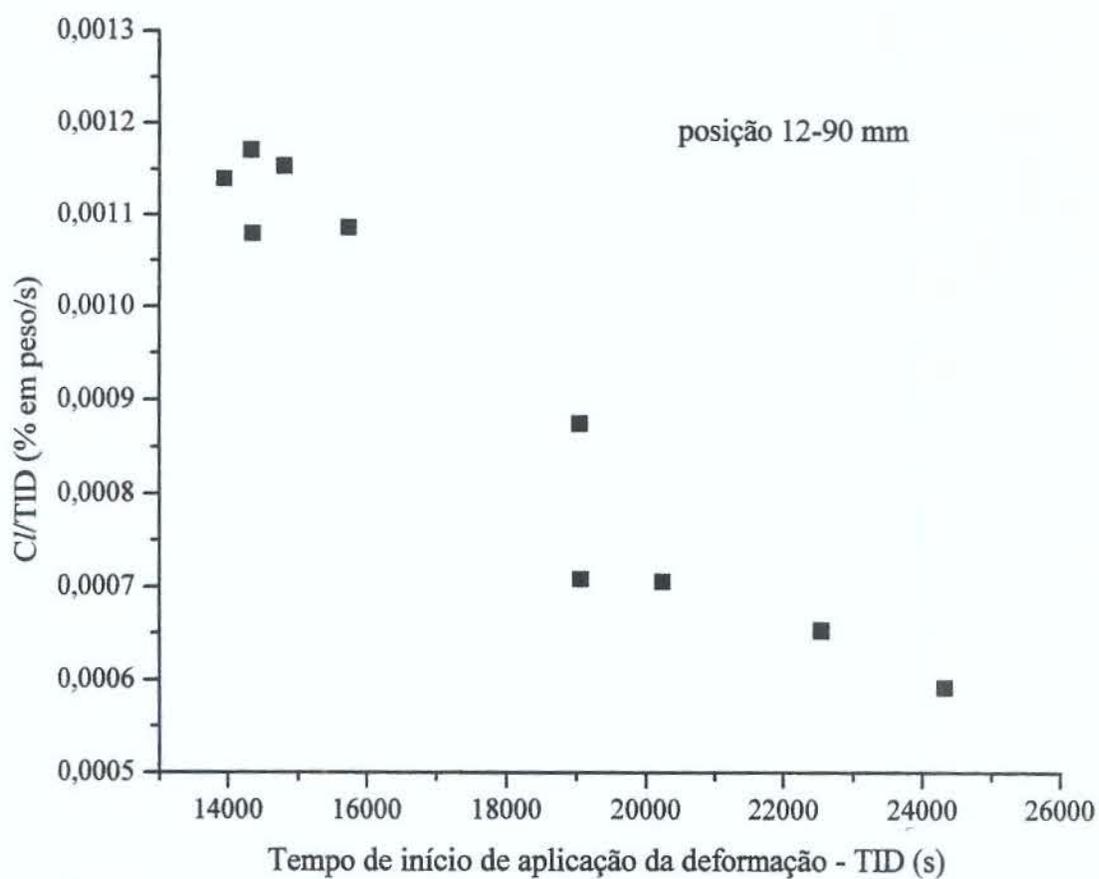


Figura 6.2 – Relação entre o tempo de início de aplicação da deformação (TID) e a relação entre a composição do líquido antes e após a deformação para as posições 12-90 e 36-90 mm para os experimentos listados na Tabela 1.

O valor médio da relação  $\frac{C/DD}{CIAD}$  (indicativo da redução da macrossegregação) na posição 36 mm na horizontal e 90 mm na vertical para os experimentos realizados aplicando-se 20% de deformação é de 0,92255. Por este motivo, foram escolhidos os experimentos SA44 ( $\frac{C/DD}{CIAD} = 0,91354$ ) e SA50 ( $\frac{C/DD}{CIAD} = 0,92683$ ) para servirem como experimentos de teste para as simulações aqui apresentadas, pois, os mesmos apresentam valores próximos do valor médio listado acima. Ao mesmo tempo, foi possível nestes casos a obtenção dos vários parâmetros experimentais necessários para aferir as simulações numéricas. Observa-se ainda que estes experimentos são representativos de duas séries de experimentos. O arranjo experimental utilizado e a metodologia empregada para a realização das experiências são essencialmente os mesmos como descrito no capítulo Materiais e Métodos. Entretanto, foram introduzidas pequenas modificações na série de experimentos a qual pertence o experimento SA50, como por exemplo, a injeção de nitrogênio para homogeneizar a mistura de SCN com acetona, a colocação de dois termopares no mesmo ponto naquelas posições em que a medição da temperatura era essencial. Por este motivo a numeração dos termopares foi modificada, embora as posições de medição em geral não o foram.

Em primeiro lugar são apresentados os dados experimentais relativos ao experimento SA44. Na Figura 6.3, são apresentados todos os dados de temperatura registrados pelo sistema computacional de aquisição de dados. A Figura 6.4 os perfis de temperatura experimentais para os termopares utilizados como condição de contorno e para aqueles utilizados para aferir o modelo numérico (posições a 12 mm e a 36 mm a partir da coquilha de cobre refrigerada). A análise dos perfis de temperatura obtidos pelo conjunto de termopares demonstra que os gradientes térmicos nos planos perpendiculares à coquilha de cobre refrigerada é muito maior do que nos planos paralelos à coquilha, indicando que a condição de transferência de calor suposta, o fluxo de calor ocorre primordialmente na direção perpendicular à coquilha de cobre refrigerada e no sentido desta, foi atendida.

São apresentados a seguir os gráficos relativos aos resultados de perfis de temperatura obtidos pelo conjunto de termopares para o experimento SA50. Na Figura 6.5, são apresentados todos os dados de temperatura registrados pelo sistema computacional de aquisição de dados, incluindo-se um intervalo de tempo próximo ao início da etapa do resfriamento. Os perfis de temperatura obtidos pelo conjunto de termopares demonstram que a

condição de transferência de calor suposta, o fluxo de calor ocorre primordialmente na direção perpendicular à coquilha de cobre refrigerada e no sentido desta, também foi atendida.

Na Figura 6.6 apresenta-se os perfis de temperatura experimentais para os termopares utilizados como condição de contorno e para aqueles utilizados para aferir o modelo numérico (posições a 12 mm e a 36 mm a partir da coquilha de cobre refrigerada).

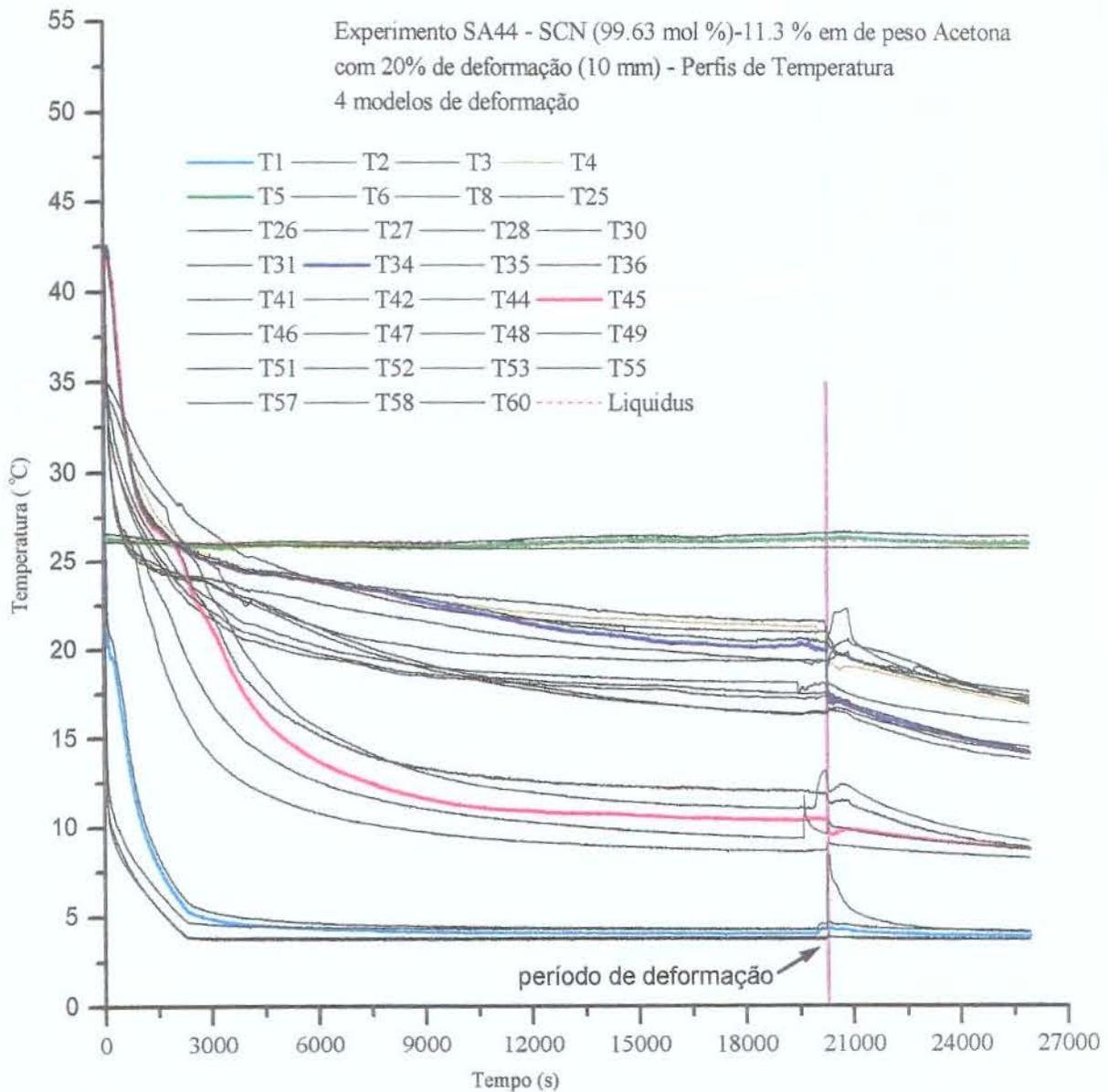


Figura 6.3 – Perfis de temperatura para todos os termopares utilizados no experimento SA44. As posições dos termopares estão apresentadas na Figura 4.4.

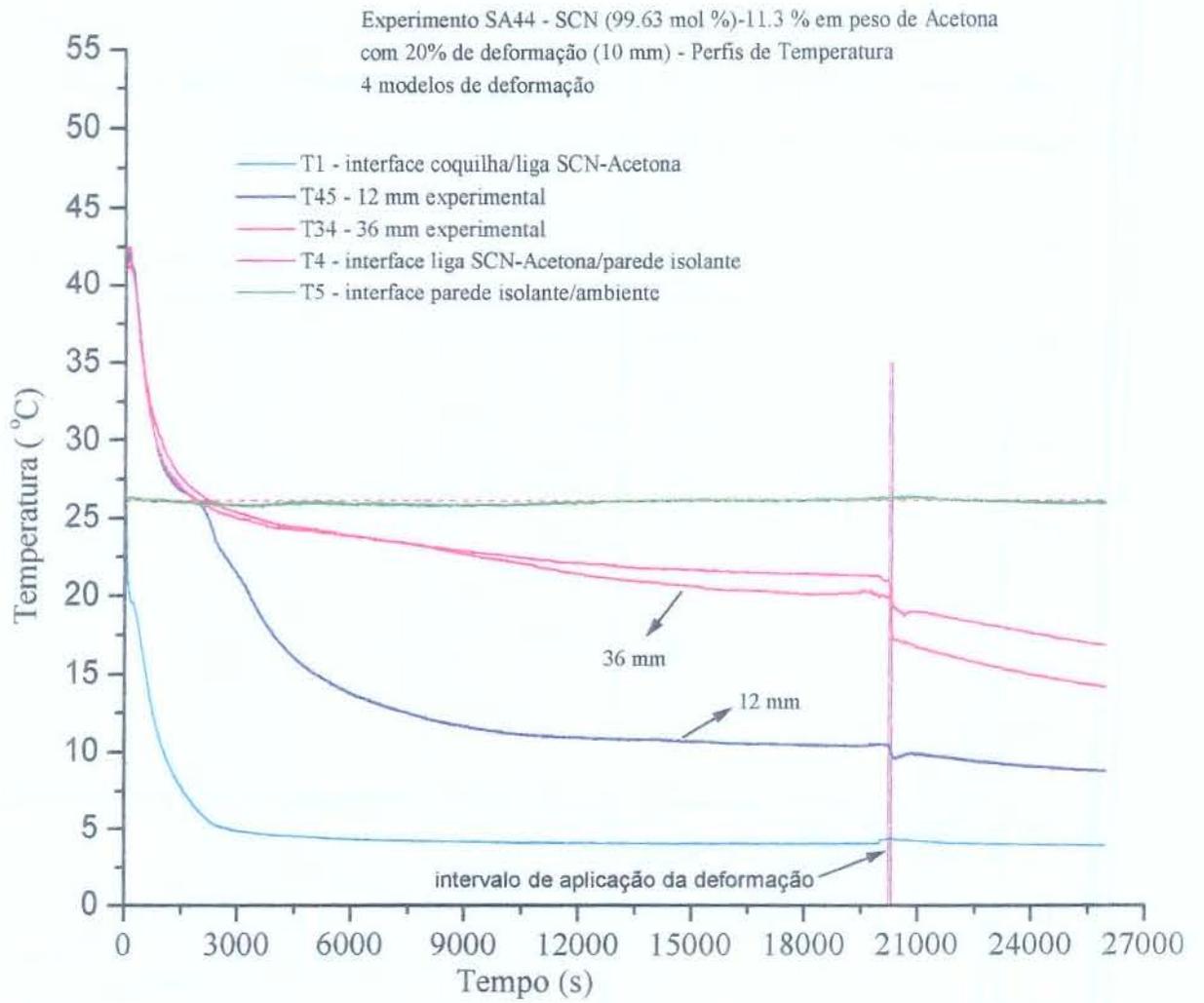


Figura 6.4 – Perfis de temperatura experimentais para os termopares utilizados como condição de contorno e para aqueles utilizados para aferir o modelo numérico (posições a 12 mm e a 36 mm a partir da coquilha de cobre refrigerada) no experimento SA44.

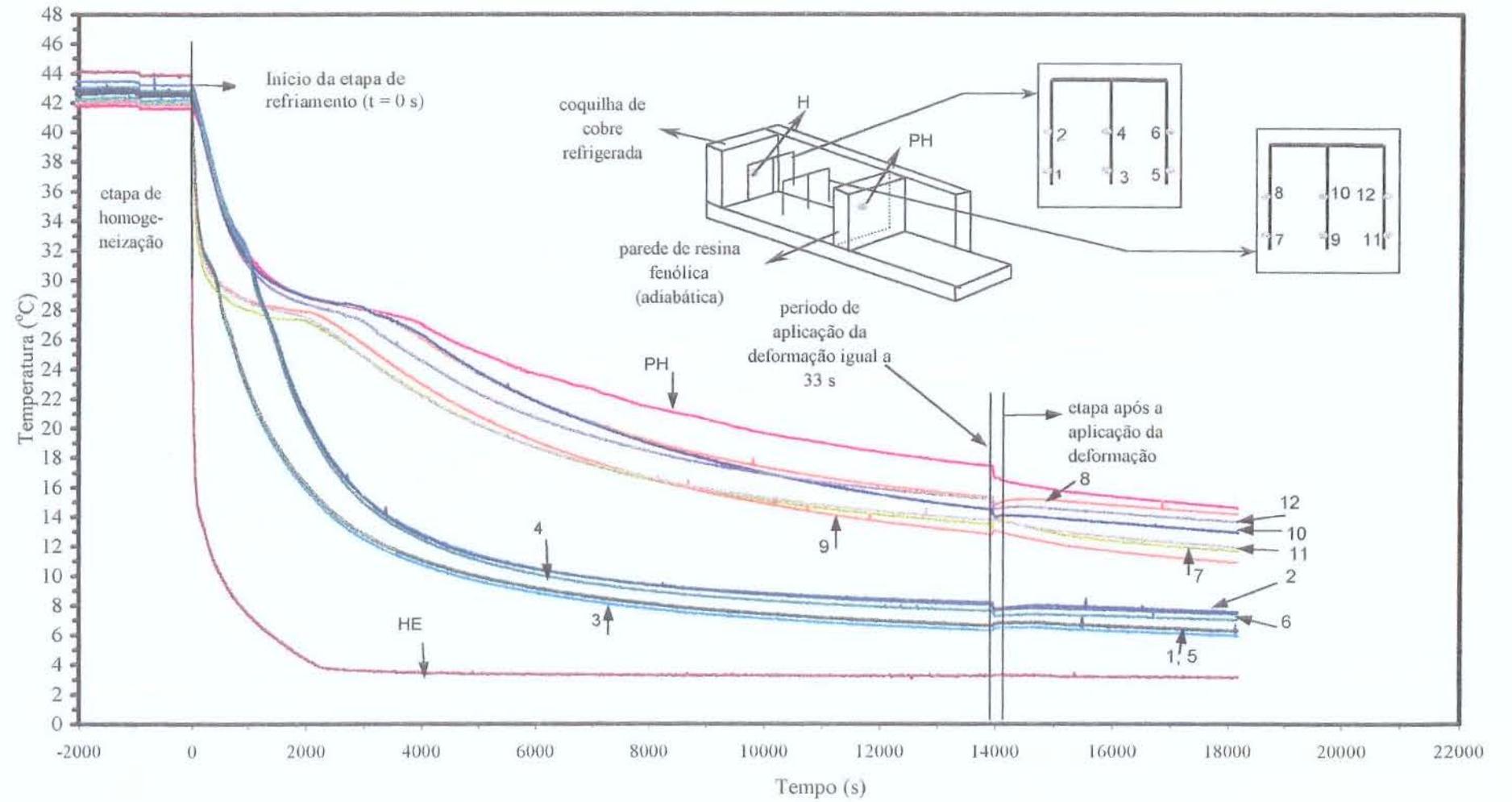


Figura 6.5 – Apresentação de todos os dados de temperatura registrados pelo sistema computacional de aquisição de dados – SA50.

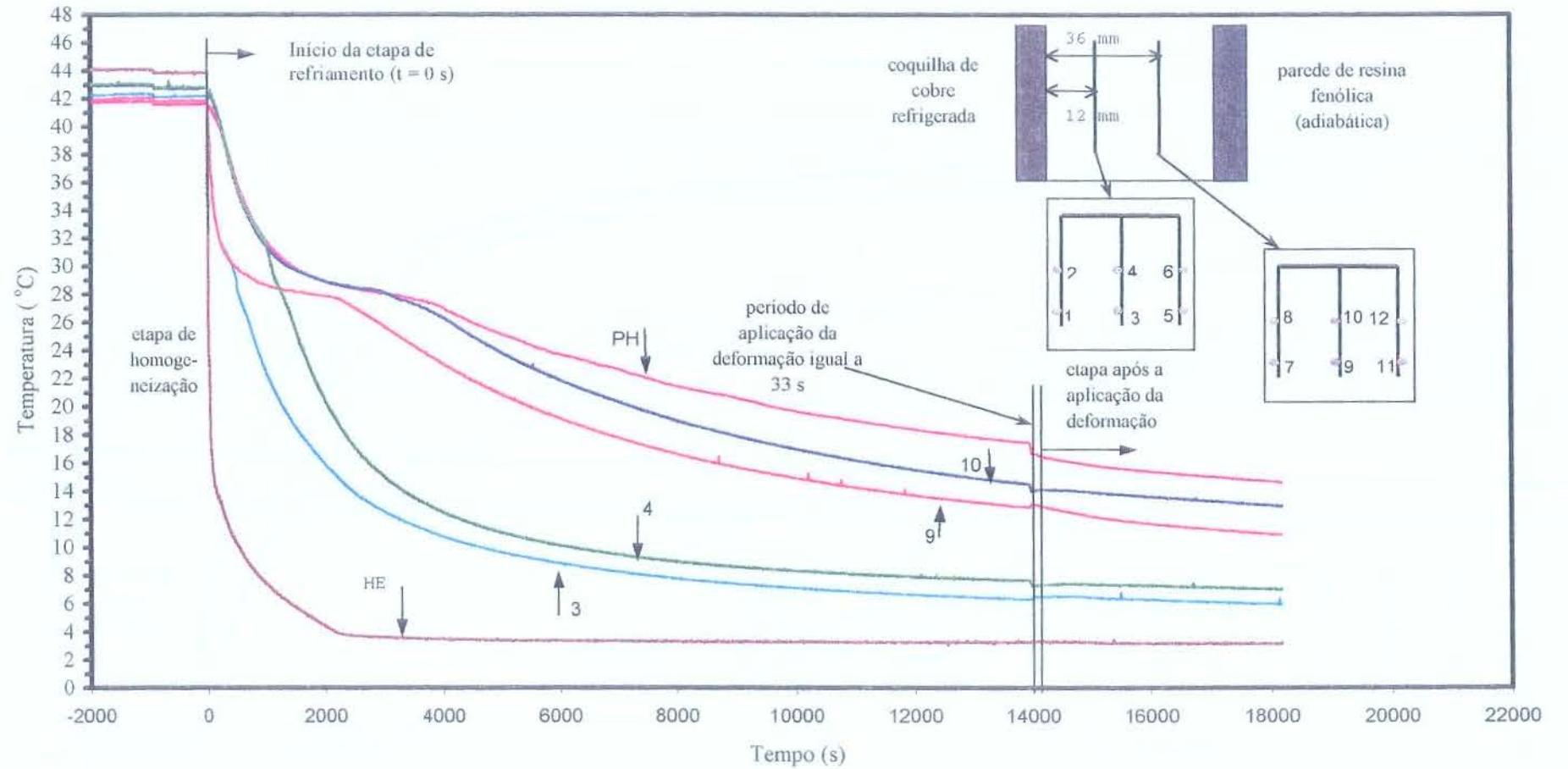


Figura 6.6 – Apresentação de dados de temperatura registrados pelo sistema computacional de aquisição de dados para um plano perpendicular à coquilha de cobre refrigerada - SA50.

A Figura 6.7 apresenta os resultados experimentais de temperatura e composição do líquido para instantâneos de tempo antes e depois da aplicação da deformação, ao longo da seção do esboço. A composição do líquido foi determinada a partir da medida da temperatura *liquidus* das amostras retiradas utilizando-se as seringas e aplicando-se então a equação de Scheil. As equações utilizadas são apresentadas abaixo.

$$\phi_s = 1 - \left( \frac{T - T_m}{T_{\text{liquidus para } C_0} - T_m} \right)^{\left( \frac{1}{k-1} \right)} \quad (6.1)$$

$$C_l = C_0 (1 - \phi_s)^{(k-1)} \quad (6.2)$$

onde  $\phi_s$  é a fração de sólido,  $C_l$  e  $C_0$  correspondem às composições do líquido e inicial da liga,  $k$  é o coeficiente de partição no equilíbrio,  $T_{\text{liquidus para } C_0}$  corresponde à temperatura *liquidus* para a composição inicial da liga e  $T$  é a temperatura *liquidus* medida para a amostra coletada.

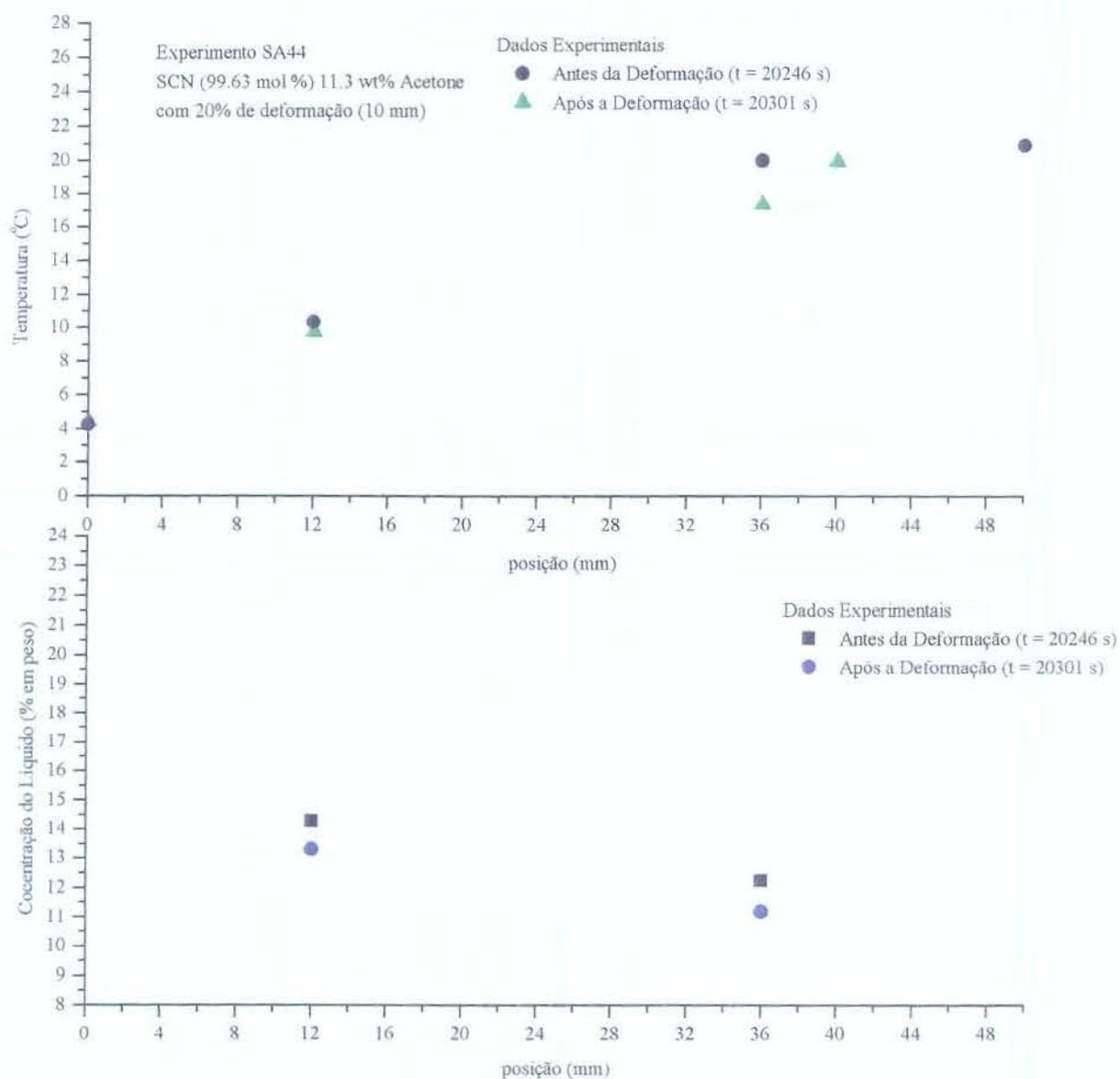


Figura 6.7 – Resultados experimentais de fração de sólido, temperatura e composição do líquido ao longo da seção do esboço.

## 6.2 – Resultados Numéricos para o Caso Unidimensional

Os modelos matemáticos apresentados foram implementados computacionalmente e utilizados para a simulação de vários experimentos realizados empregando-se o aparato experimental descrito.

Na Figura 6.8 são apresentados os perfis testados de evolução da deformação da malha em função do tempo e em função do número do nó. Destaca-se que os dados para os modelos não-lineares foram obtidos a partir dos dados do conjunto de esferas de plástico inseridas na célula de teste, os quais foram utilizados na obtenção de uma equação do tipo exponencial que representa o deslocamento da malha no tempo. O deslocamento das esferas de plástico foi monitorado utilizando-se um câmera de vídeo que permitia distinguir a parte da zona pastosa (situada próxima da coquilha refrigerada e com uma maior fração de sólido) que não se deslocava quando a deformação era aplicada.

As Figuras 6.9 e 6.10 apresentam as comparações dos perfis de temperatura numéricos e experimentais. São mostrados apenas os perfis de temperatura para as posições utilizadas nas simulações realizadas de modo a não tornar confusos os gráficos. Observa-se uma boa concordância entre os perfis numéricos e experimentais para a faixa anterior a aplicação da deformação. Para o período correspondente à aplicação da deformação, a precisão da simulação numérica depende do modelo de deformação considerado. Observa-se que o modelo não-linear e heterogêneo não permitiu a obtenção de bons resultados. Isto se deve principalmente à baixa precisão da equação exponencial quando tentou-se ajustar os dados experimentais de deslocamento das esferas de plástico, numa situação em que a deformação ocorreu de modo bastante distorcido, principalmente nos nós opostos à coquilha de cobre refrigerada.

A Figura 6.11 apresenta uma comparação dos resultados numéricos e experimentais de fração de sólido, temperatura e composição do líquido, ao longo da seção do esboço antes e depois da aplicação da deformação. A variação da composição do líquido dá uma indicação da tendência de formação de macrossegregação quando não é aplicada a deformação. Por sua vez, a redução desta composição para a região próxima à parede adiabática (oposta à coquilha de cobre refrigerada) quando a deformação é aplicada, mostra o efeito desta operação na diminuição daquele defeito.

Os perfis de temperatura ao longo da seção do esboço, dependem do modelo de deformação do domínio utilizado.

Os modelos unidimensionais de deformação do domínio propostos e implementados, os quais corresponderiam a diferentes padrões de deformação plástica, com exceção do modelo não-linear e heterogêneo, apresentaram resultados semelhantes. Entretanto, ainda faz-se necessário a aplicação destes modelos a um maior número de experimentos para concluir-se qual modelo é o mais adequado.

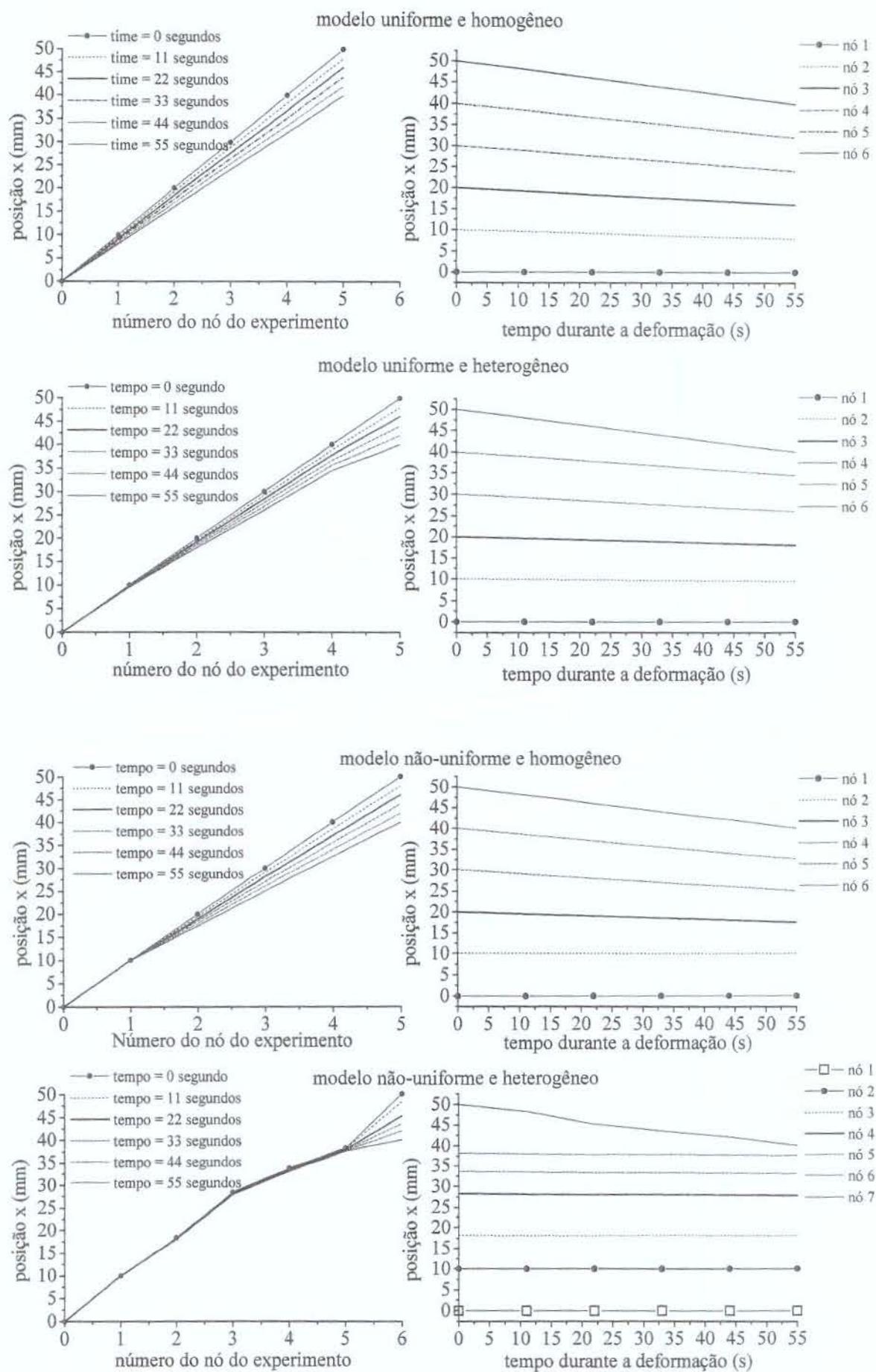


Figura 6.8 – Evolução da deformação da malha (sólido) para os 4 modelos propostos.

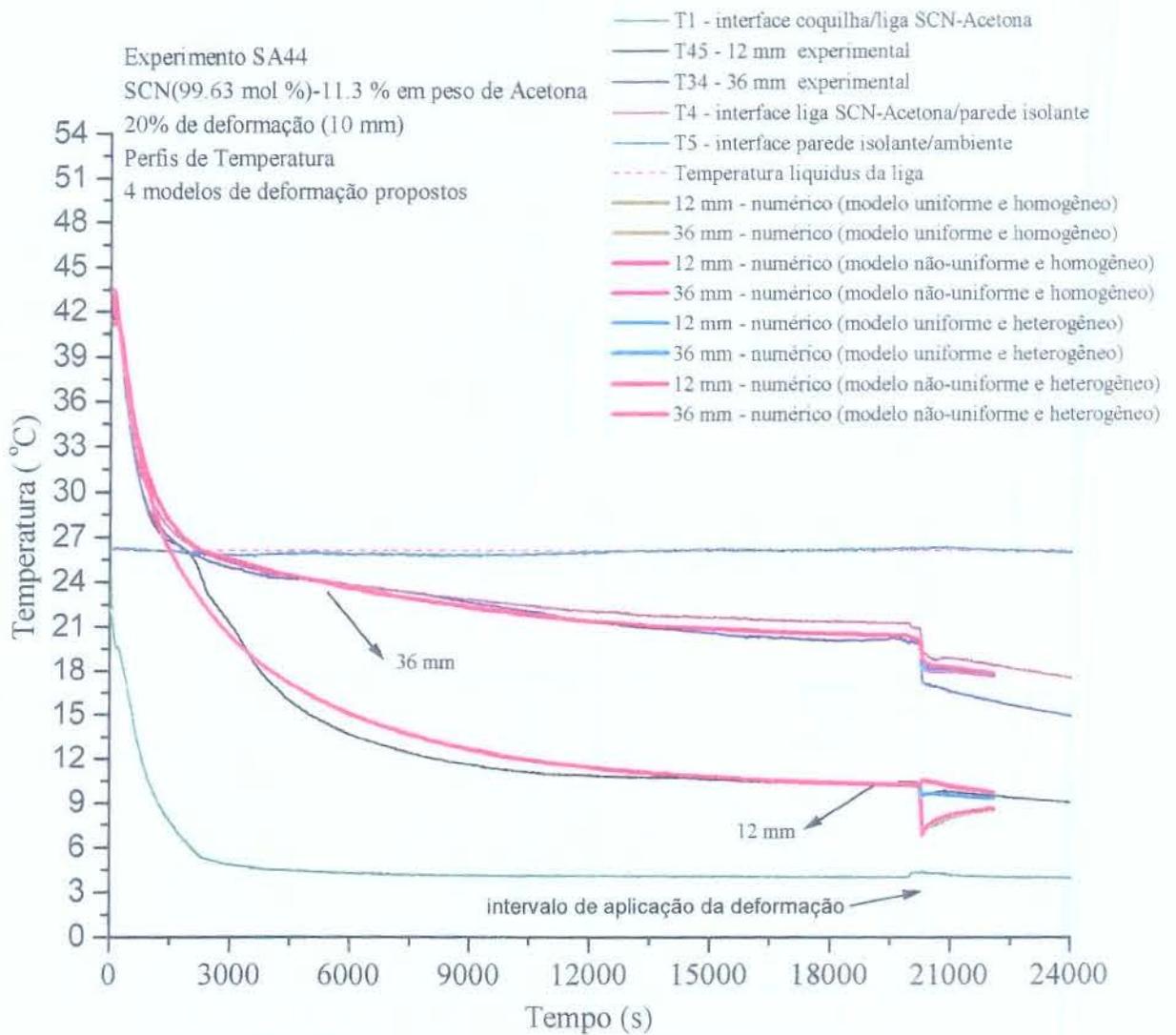


Figura 6.9 – Comparação dos perfis de temperatura numéricos e experimentais para os termopares utilizados como condição de contorno e para aqueles utilizados para aferir o modelo numérico (posições a 12 mm e a 36 mm a partir da coquilha de cobre refrigerada)

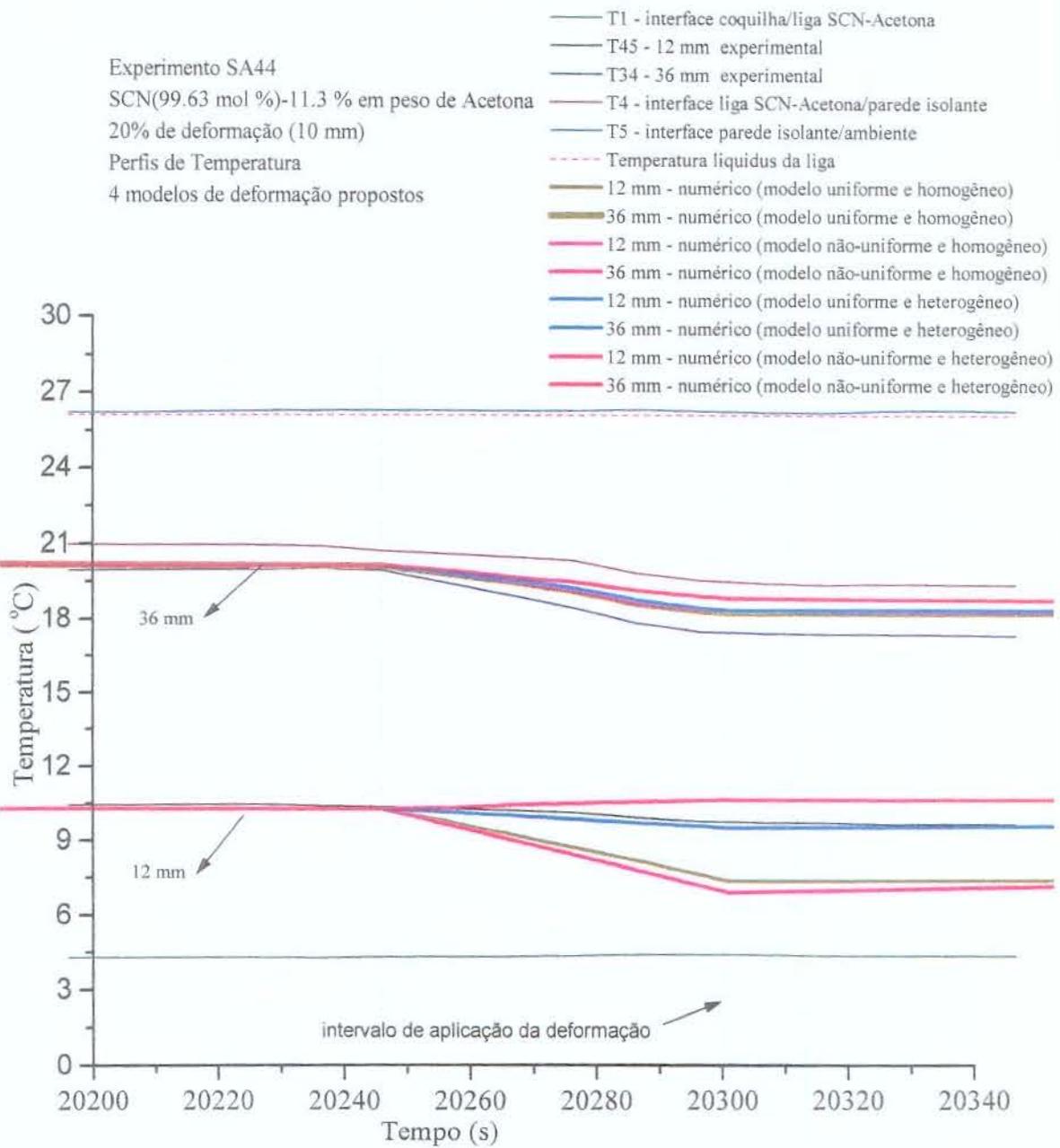


Figura 6.10 – Comparação dos perfis de temperatura numéricos e experimentais para os termopares utilizados como condição de contorno e para aqueles utilizados para aferir o modelo numérico (posições a 12 mm e a 36 mm a partir da coquilha de cobre refrigerada). Ampliação dos dados.

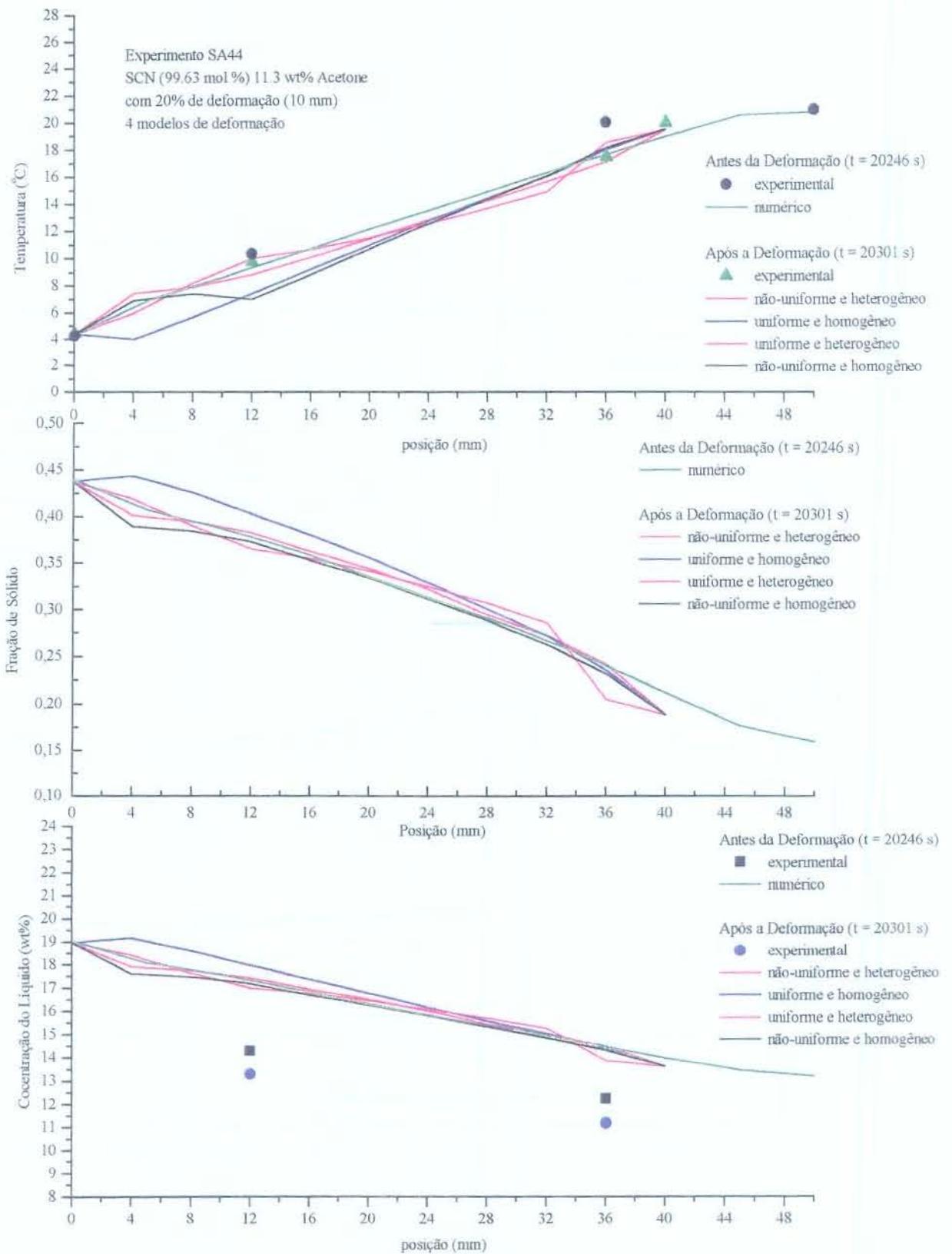


Figura 6.11 – Comparação dos resultados numéricos experimentais de fração de sólido, temperatura e composição do líquido ao longo da seção do esboço antes e depois da aplicação da deformação.

### 6.3 – Resultados Numéricos para o Caso Bidimensional

Considera-se a seguir os resultados das simulações aplicando-se o modelo bidimensional, incluindo-se os efeitos simultâneos de convecção e difusão no metal líquido e na zona pastosa.

Apresenta-se na Figura 6.12 as malhas utilizadas nas simulações realizadas para o caso da liga SCN-acetona para 4 instantes de tempo. A Figura 6.12a mostra a configuração da malha utilizada para o intervalo de tempo que vai do início da simulação até o início da aplicação da deformação. O início da simulação corresponde ao início da etapa de resfriamento do molde, ou seja, o início da circulação de água pela coquilha de cobre refrigerada. Nas Figuras 6.12b e 6.12c tem-se exemplos das configurações das malhas utilizadas para o intervalo de tempo que vai do início ao final da deformação. Nota-se que as malhas apresentadas correspondem a dois instantes de tempo pois, a forma e as dimensões da malha estão mudando continuamente durante a etapa de deformação. Finalmente a Figura 6.12d apresenta configuração da malha utilizada para o período de tempo do final da aplicação da deformação até o final da simulação numérica.

De acordo com o que foi apresentado no Capítulo 4 – Materiais e Métodos, o dispositivo experimental projetado possui duas paredes, com uma distância inicial de 50 mm entre si, sendo uma parede refrigerada e a outra considerada como adiabática. Isto foi feito de modo a permitir a realização de experimentos considerando a semi-espessura de um dado esboço, o que além de permitir uma economia dos compostos empregados (SCN e acetona), facilita o monitoramento e acompanhamento do experimento.

Para facilitar a apresentação dos resultados, todos os gráficos bidimensionais referem-se à semi-espessura do domínio. Observa-se também que as simulações numéricas foram realizadas considerando apenas a semi-espessura do domínio. Como condição de contorno considerou-se as temperaturas medidas nas interfaces coquilha/SCN-acetona e SCN-acetona/parede adiabática. Optou-se pela utilização das temperaturas medidas na interface acetona/parede adiabática porque trata-se de uma condição mais próxima do real, do que a consideração de não transferência de calor nesta interface, visto que por maior que fosse o controle nesta interface, era praticamente impossível; evitar a transferência de uma pequena

quantidade de calor, embora isto não afetasse a visualização da movimentação do líquido nesta região.

Nas Figuras 6.13 a 6.30 apresentam-se os resultados numéricos para os campos de distribuição de temperatura, fração de sólido, composição da mistura, composição do líquido e velocidade para diversos tempos. O tempo igual a 200 s corresponde aproximadamente às condições iniciais de realização do experimento e das simulações numéricas empregando-se o programa bidimensional desenvolvido. As figuras relativas aos tempos de 5700 s, 15700 s e 20246 s apresentam a evolução das variáveis citadas. O tempo de 20246 s corresponde ao início da aplicação da deformação. Os tempos de 20260 s e 20288 s correspondem a instantes de tempo durante a aplicação da deformação e o tempo de 20301 s corresponde ao final da aplicação da deformação.

Nas Figuras 6.27 a 6.30 apresentam-se os resultados para a distribuição das variáveis temperatura, fração de sólido, composição da mistura e do líquido e velocidade para um tempo de 26246 s para os casos de não aplicação da deformação e de aplicação da deformação. Através da comparação das Figuras 6.28 e 6.30, pode-se notar que houve uma redução na intensidade da tendência de formação de macrossegregação central devido a aplicação da deformação.

Os campos de velocidade antes do início da aplicação da deformação, embora apresentem o padrão de convecção típico em relação aos padrões descritos pela literatura, mostram um pequena intensidade da movimentação do líquido. Quando a deformação é aplicada, a velocidade de deslocamento do líquido é intensificada, promovendo o deslocamento do líquido, que apresenta temperaturas inferiores e menor teor de soluto, das regiões mais próximas à coquilha de cobre refrigerada e também das regiões inferiores da célula de teste, para a região próxima a parede adiabática, promovendo assim a redução da tendência de formação de macrossegregação central.

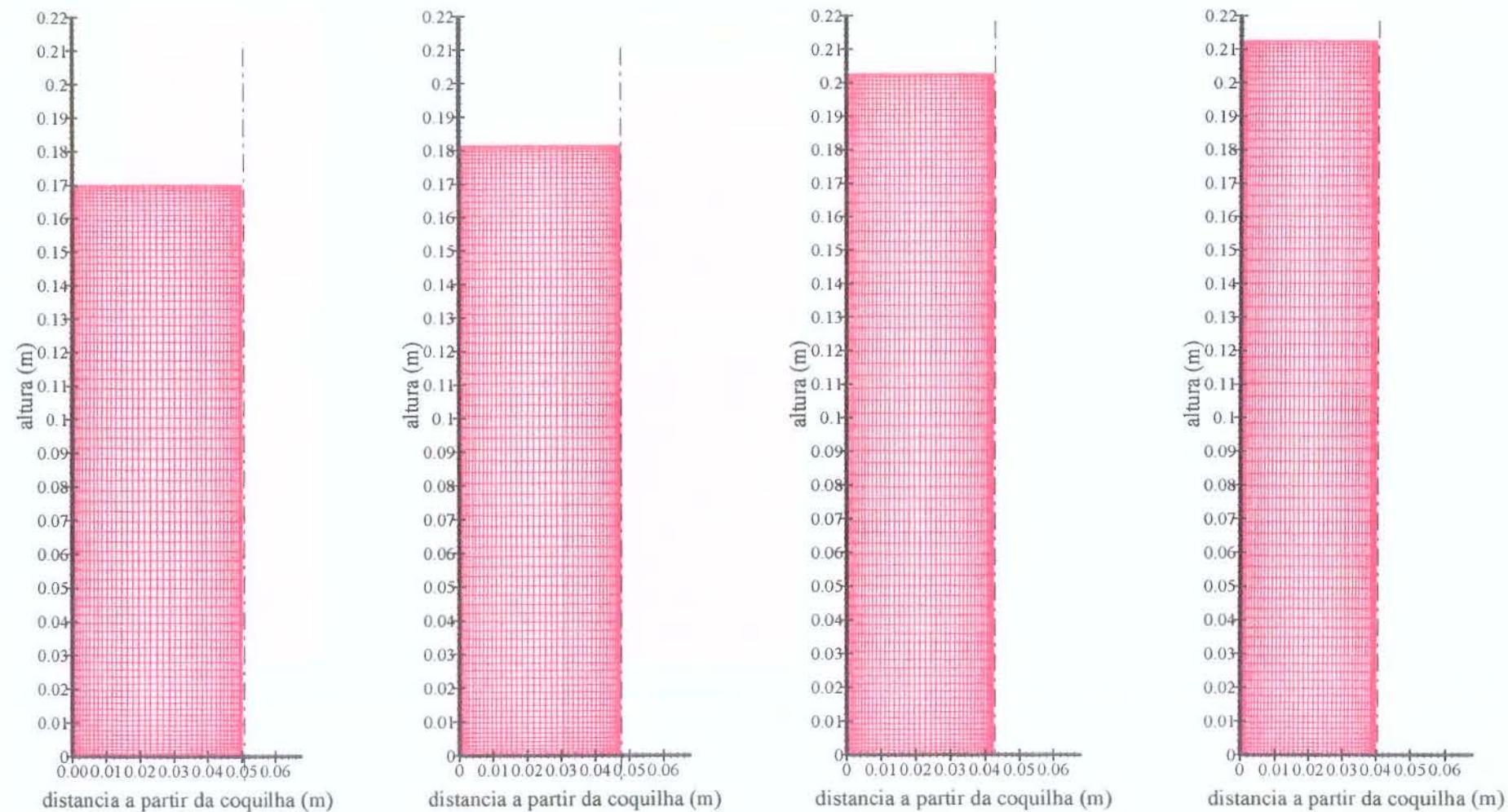


Figura 6.12 – Exemplos das configurações das malhas utilizadas para determinados intervalos de tempo: (a) do início da simulação até o início da aplicação da deformação; (b) e (c) durante a aplicação da deformação; (d) do final da deformação até o final da simulação numérica.

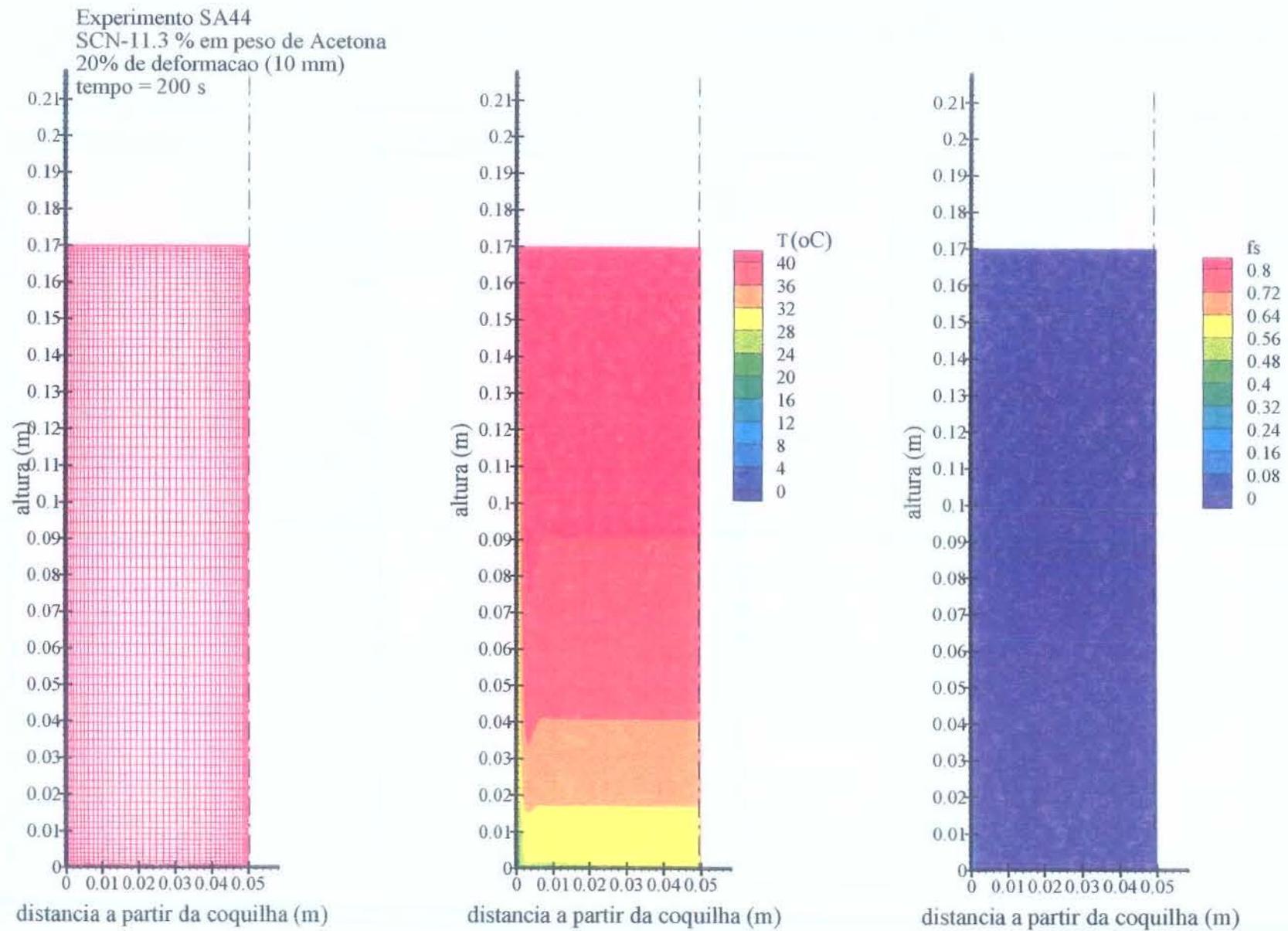


Figura 6.13 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 200 s.

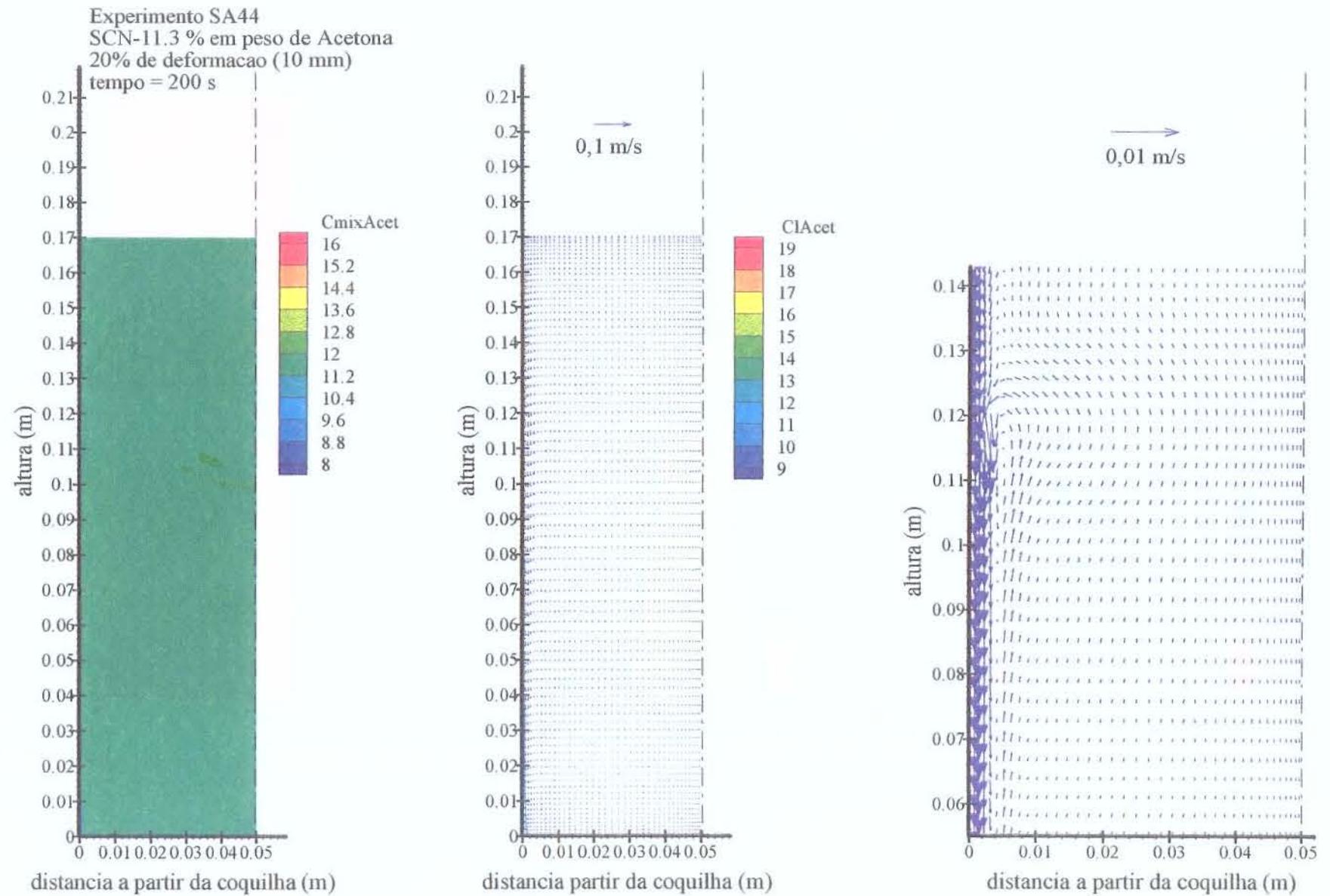


Figura 6.14 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo = 200 s.

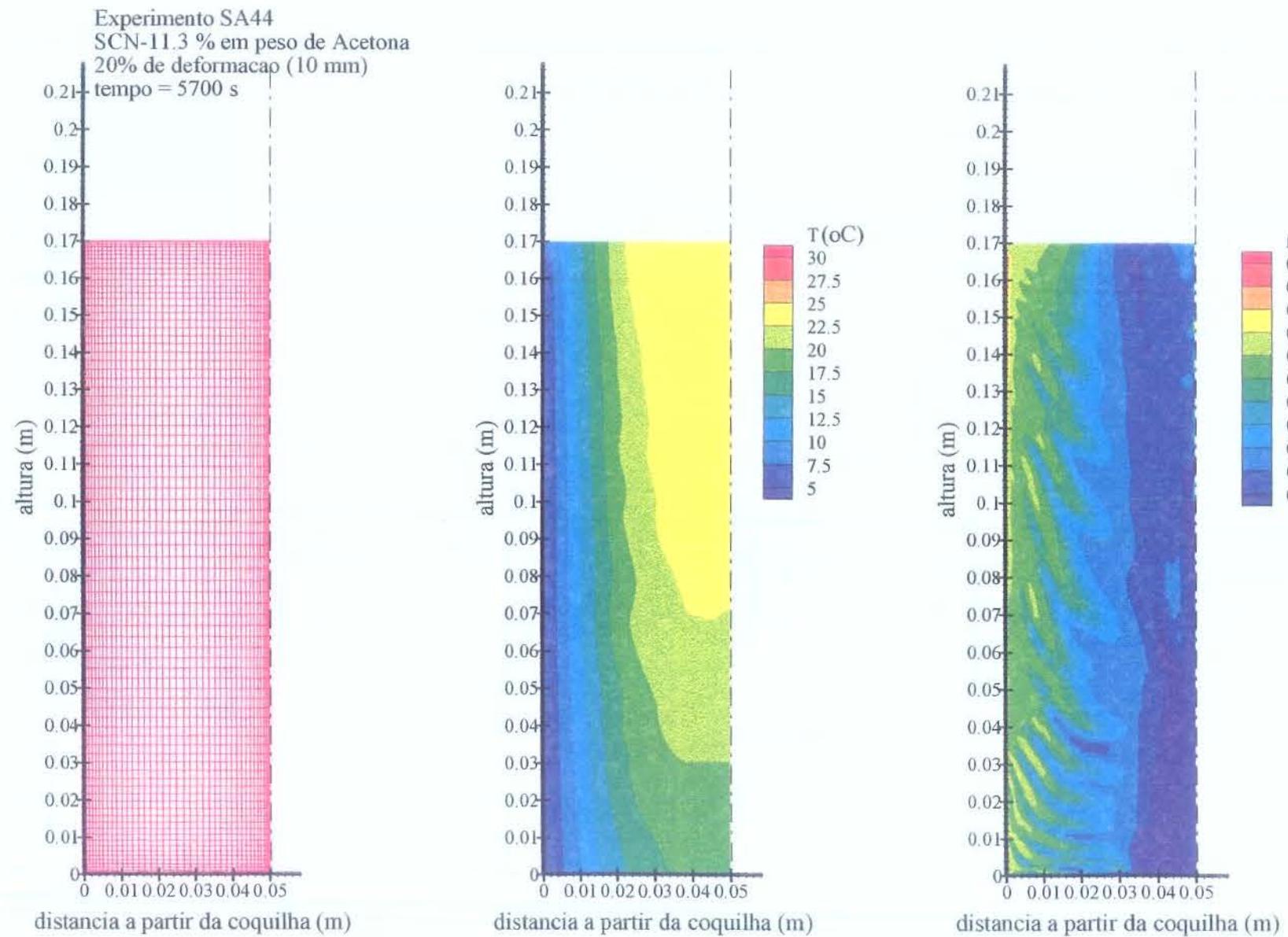


Figura 6.15 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 5700 s.

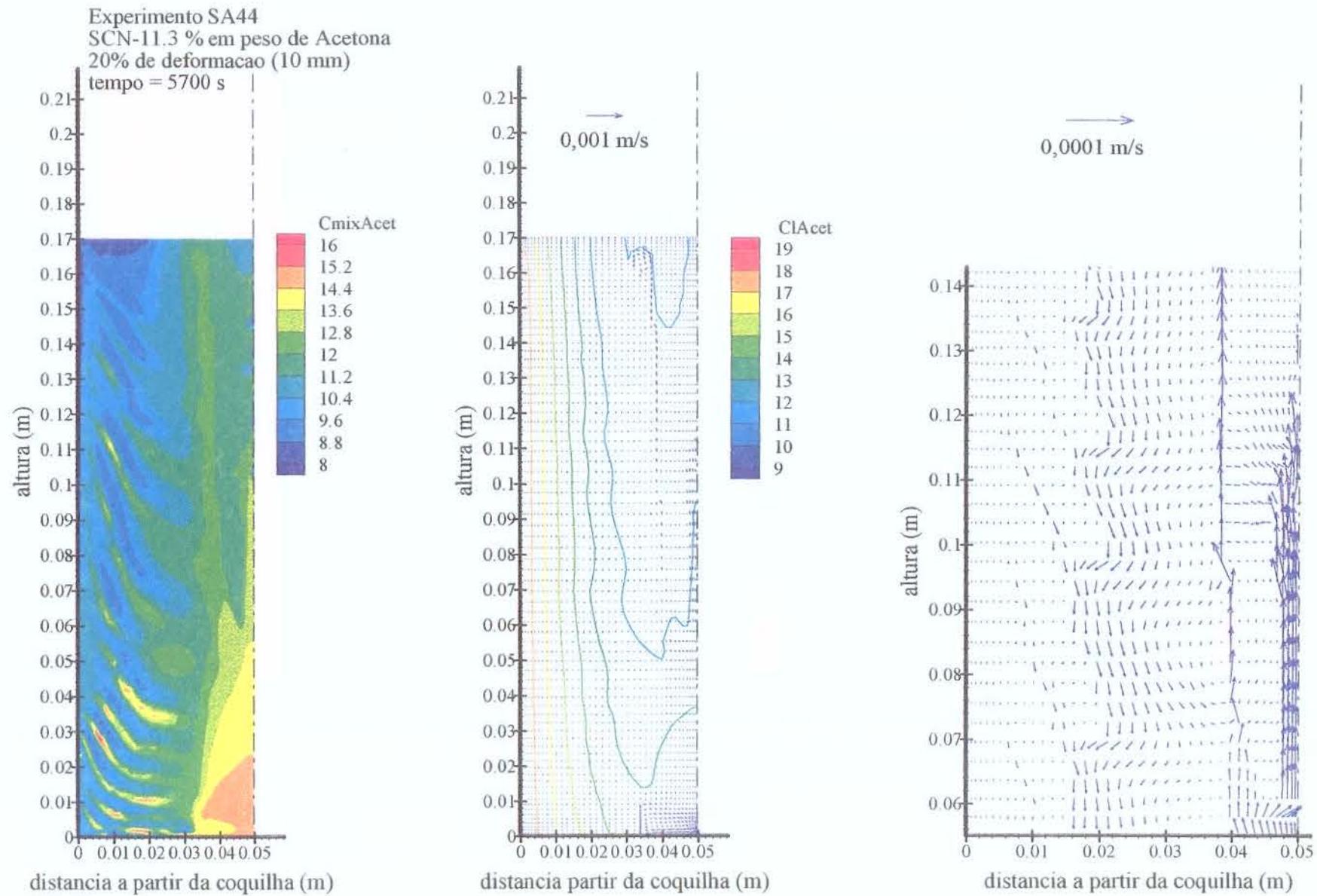


Figura 6.16 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo =5700 s.

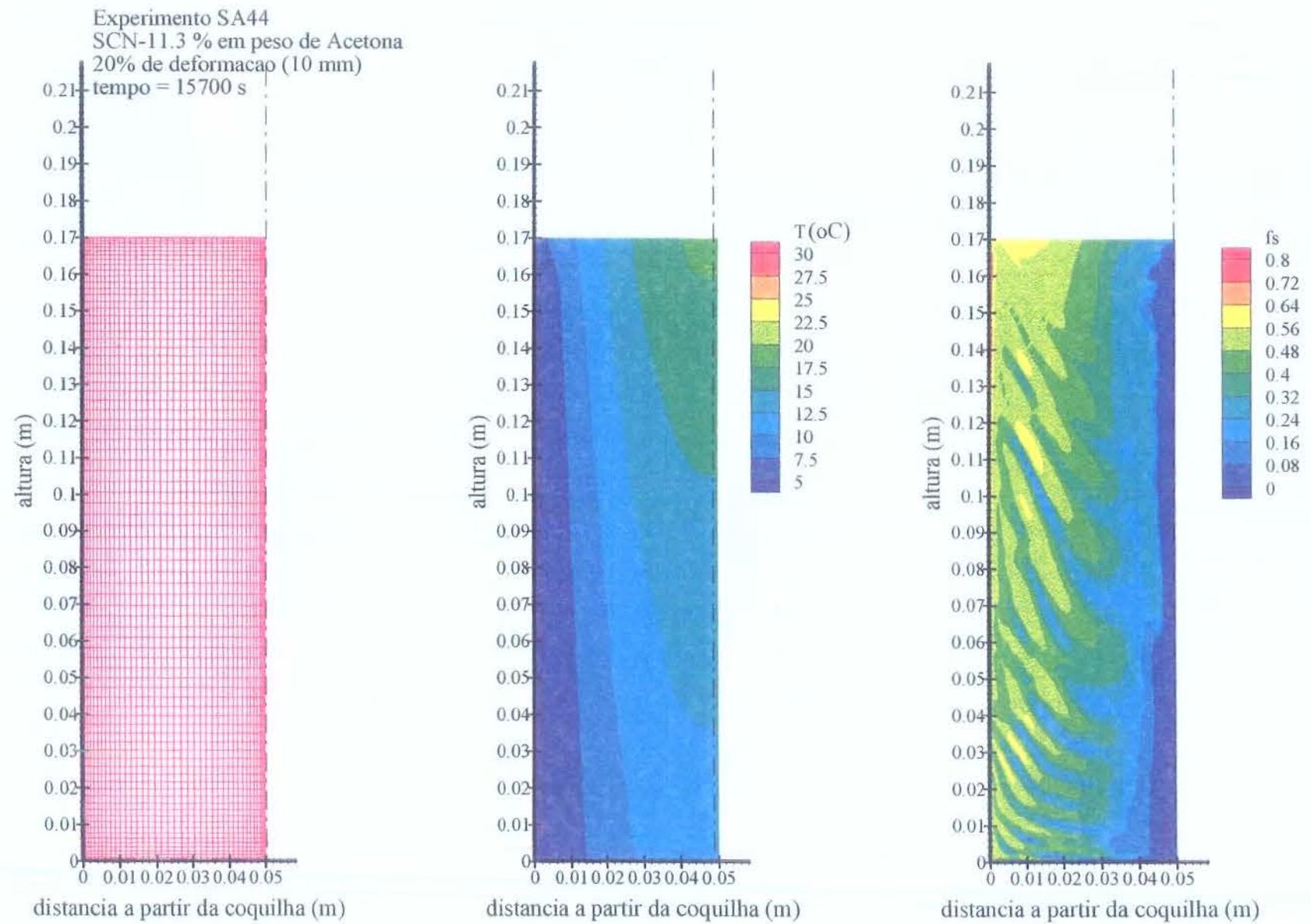


Figura 6.17 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 15700 s.

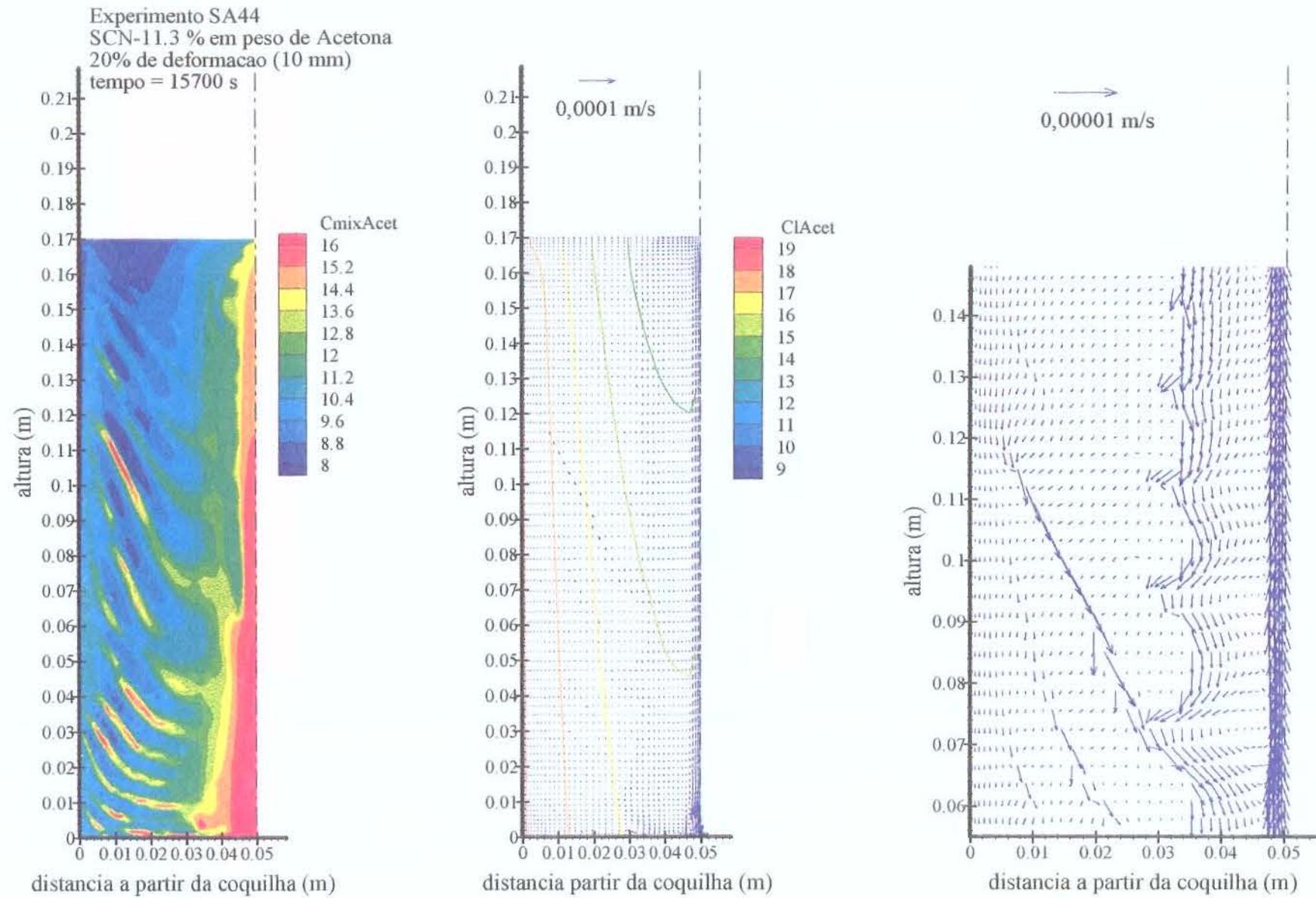


Figura 6.18 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo =15700 s.

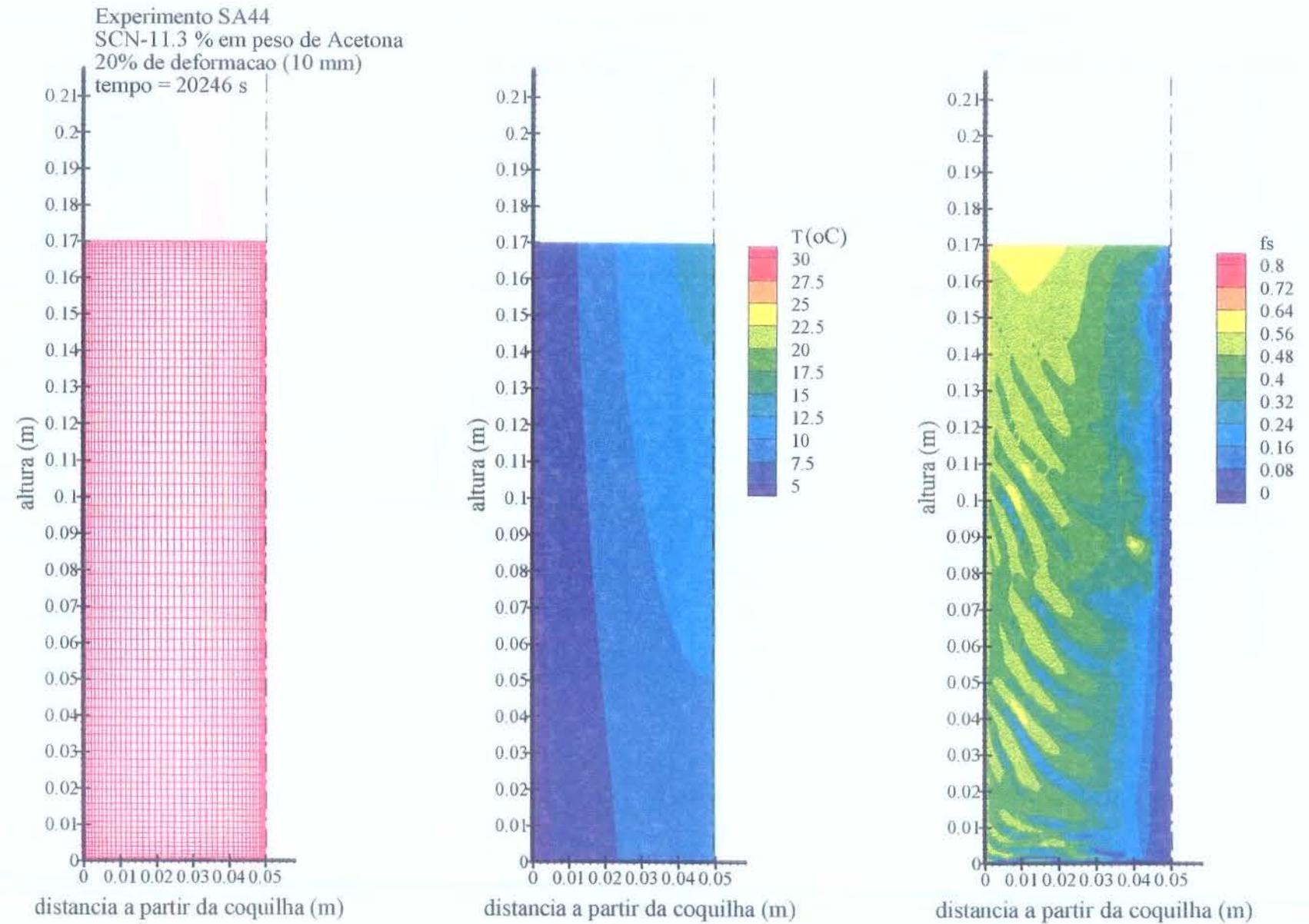


Figura 6.19 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 20246 s.

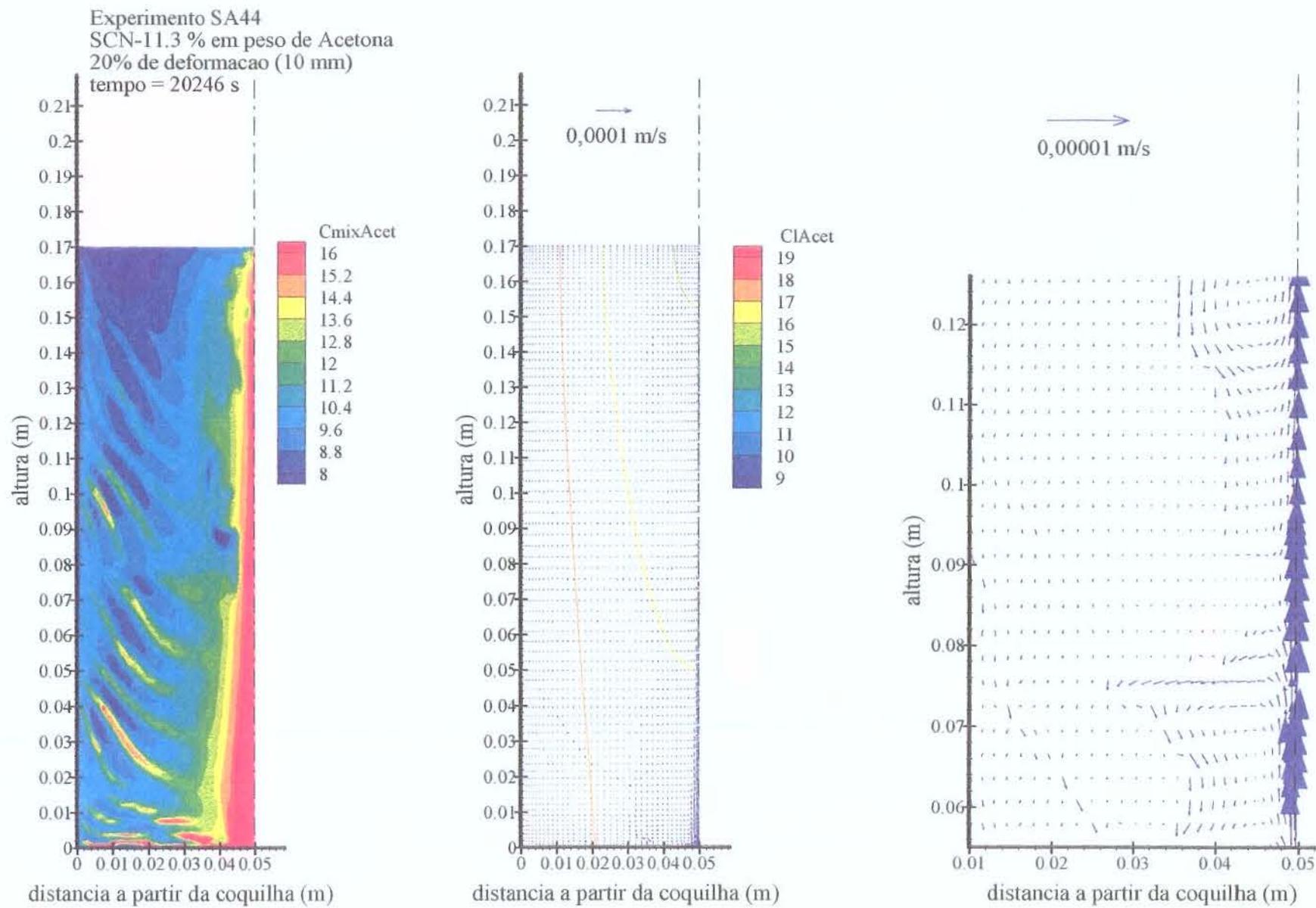


Figura 6.20 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo = 20246 s.

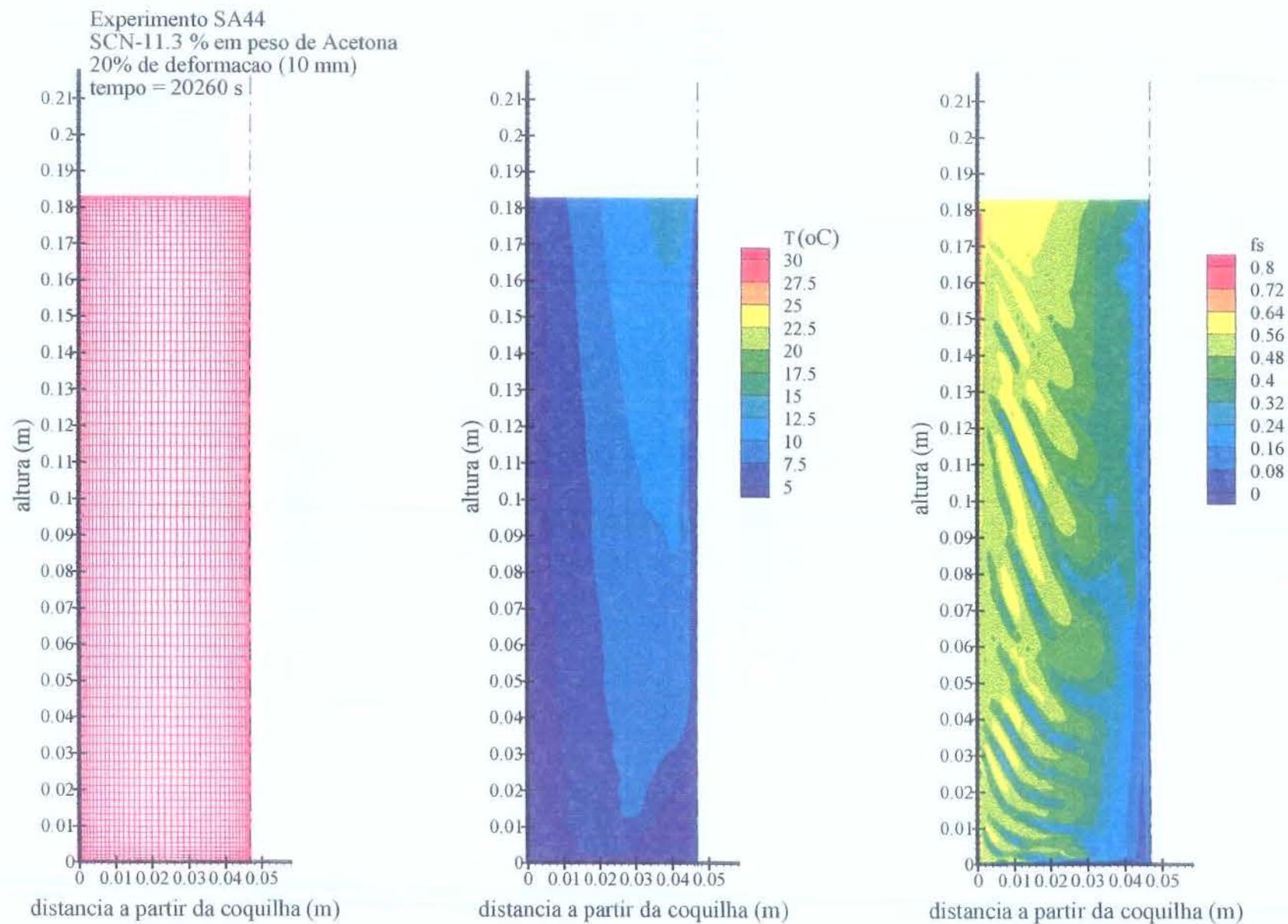


Figura 6.21 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 20260 s.

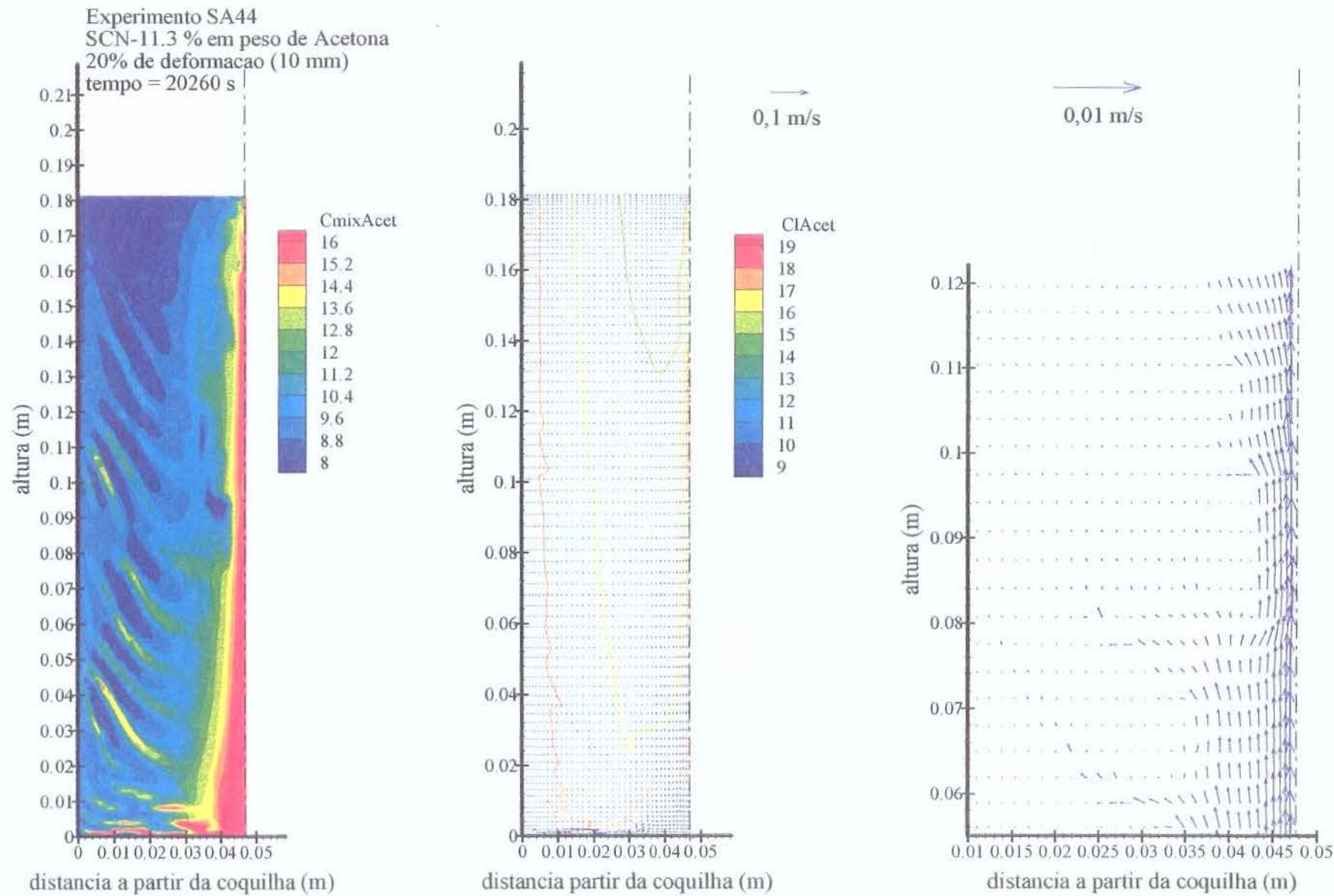


Figura 6.22 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo =20260 s.

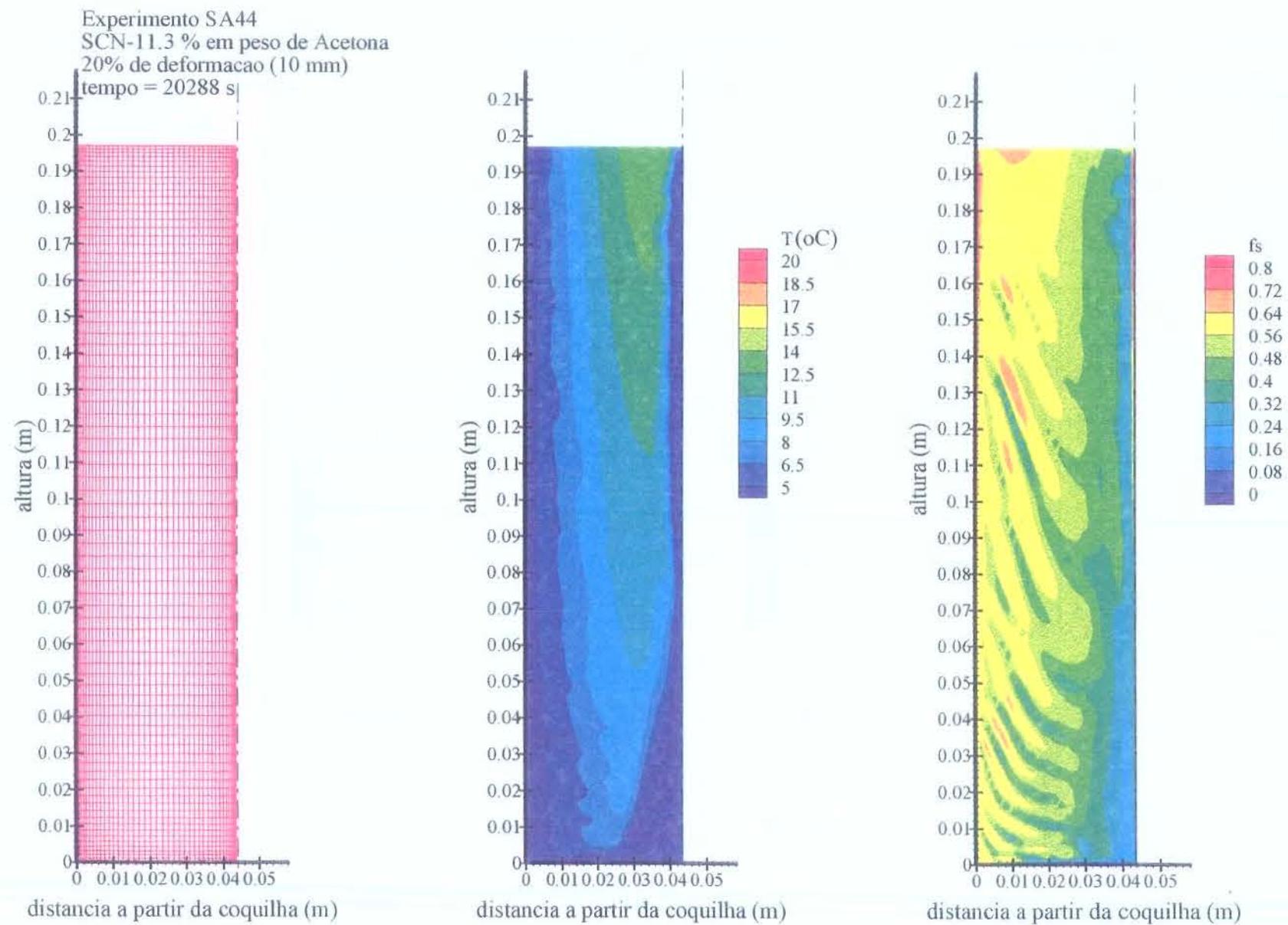


Figura 6.23 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo =20288 s.

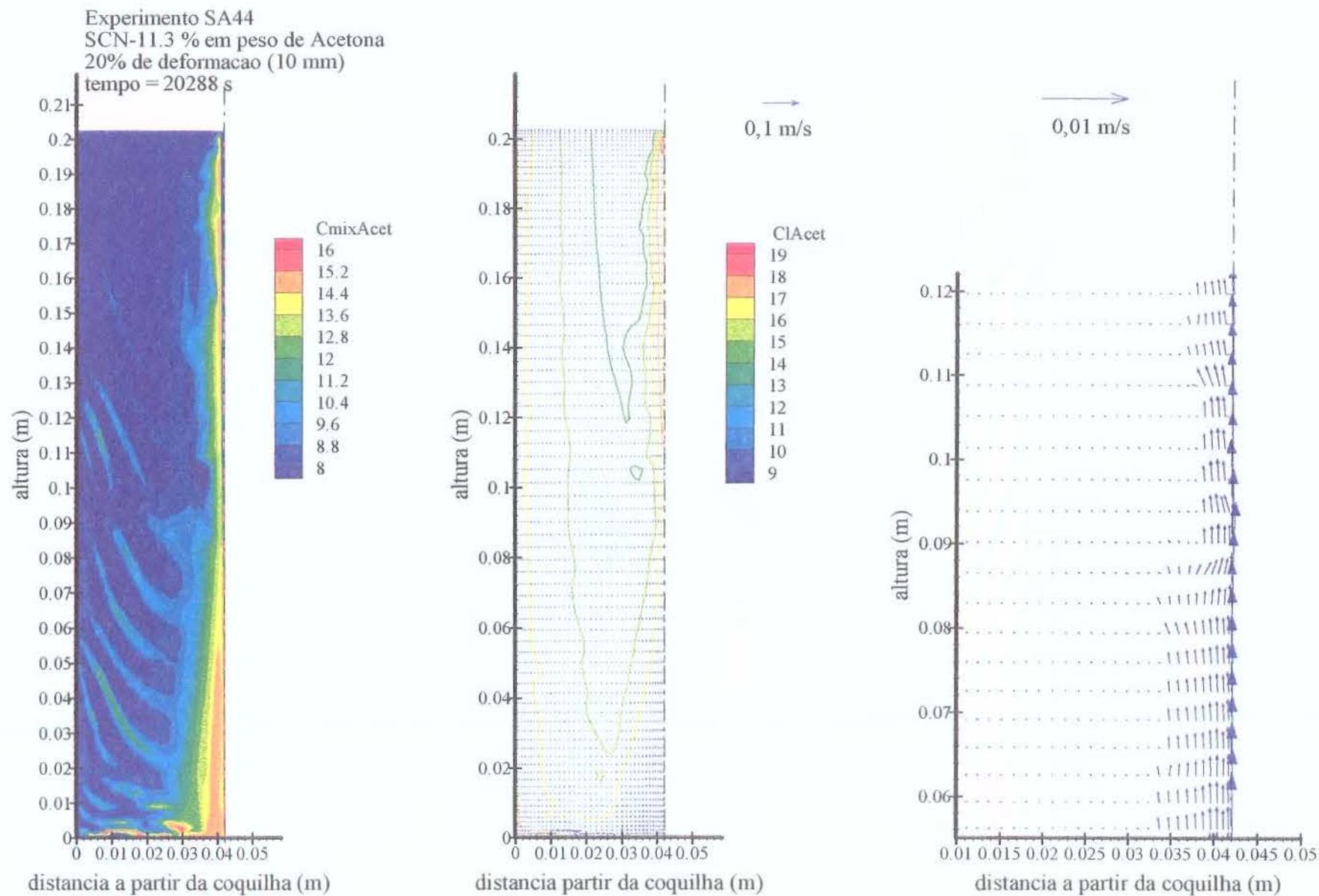


Figura 6.24 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo =20288 s.

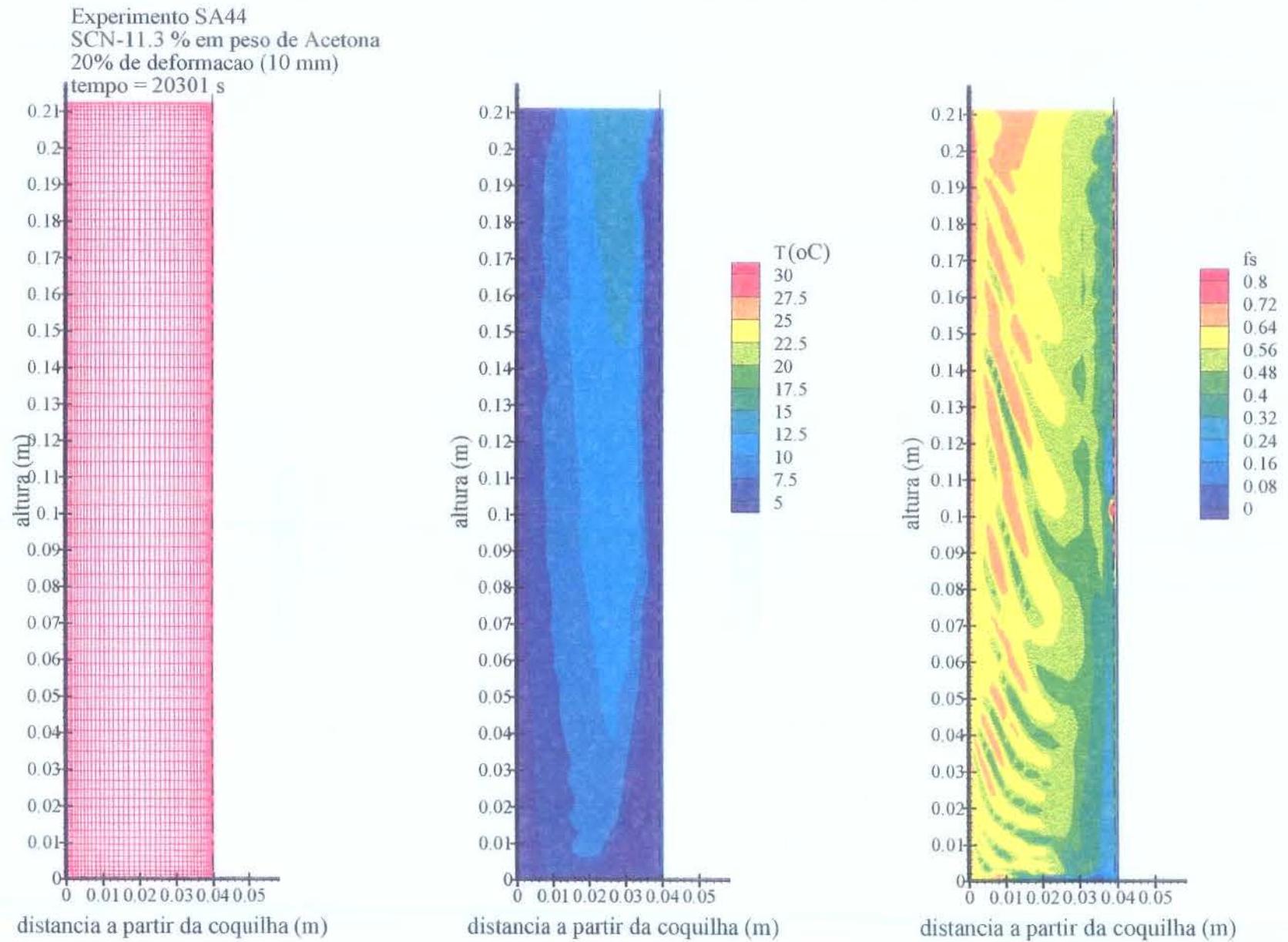


Figura 6.25 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo =20301 s.

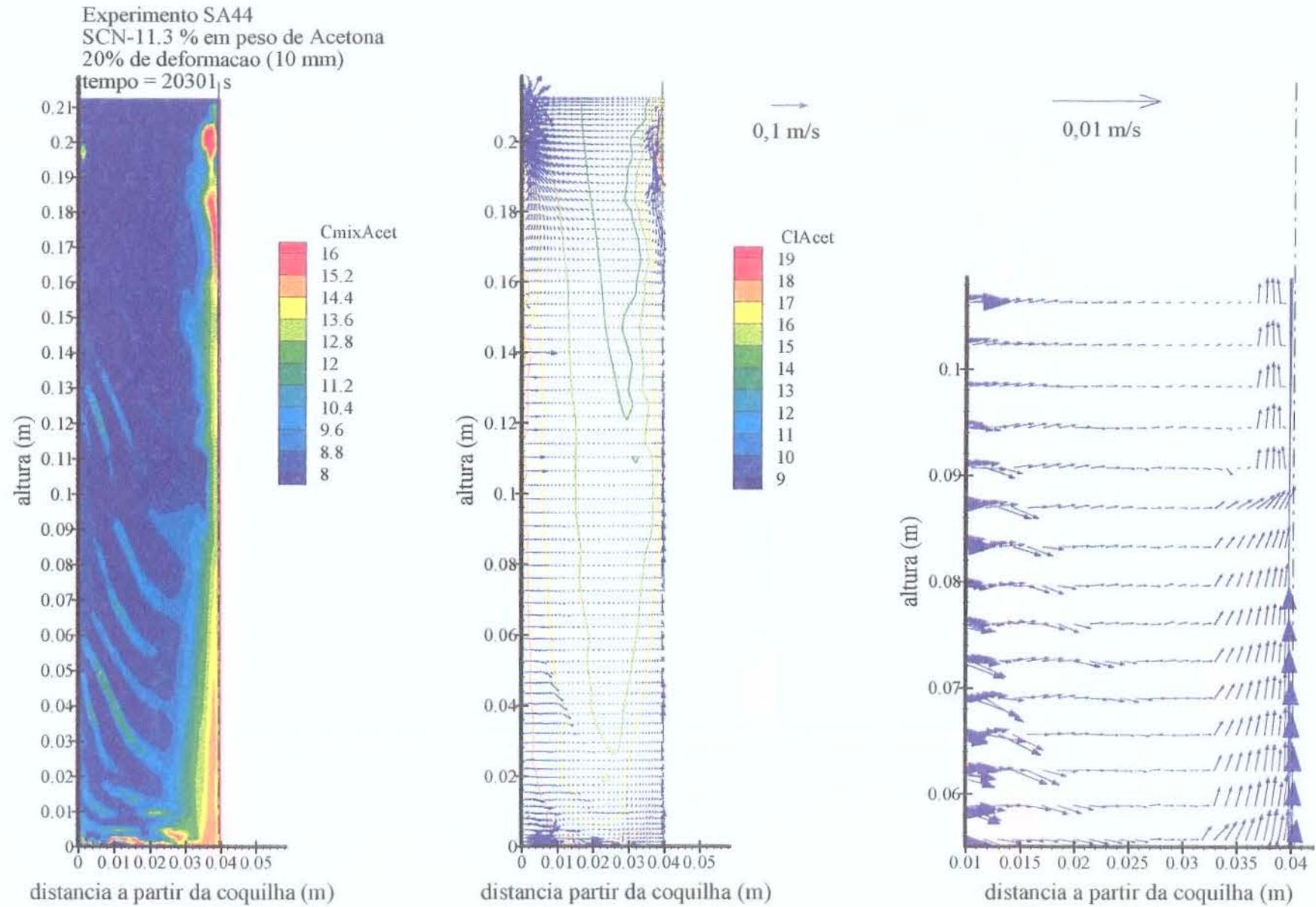


Figura 6.26 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo =20301 s.

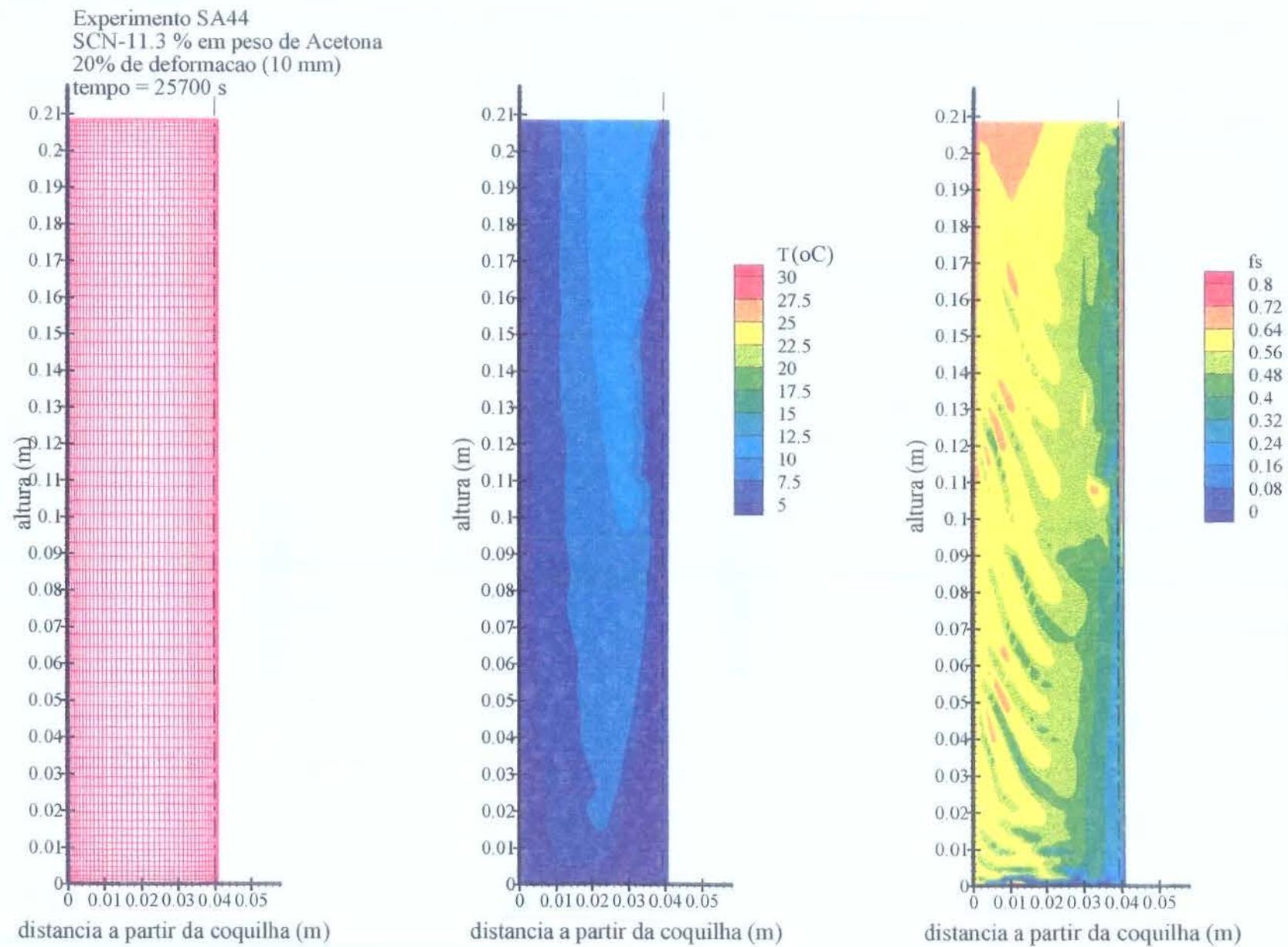


Figura 6.27 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo =25700 s com aplicação de deformação.

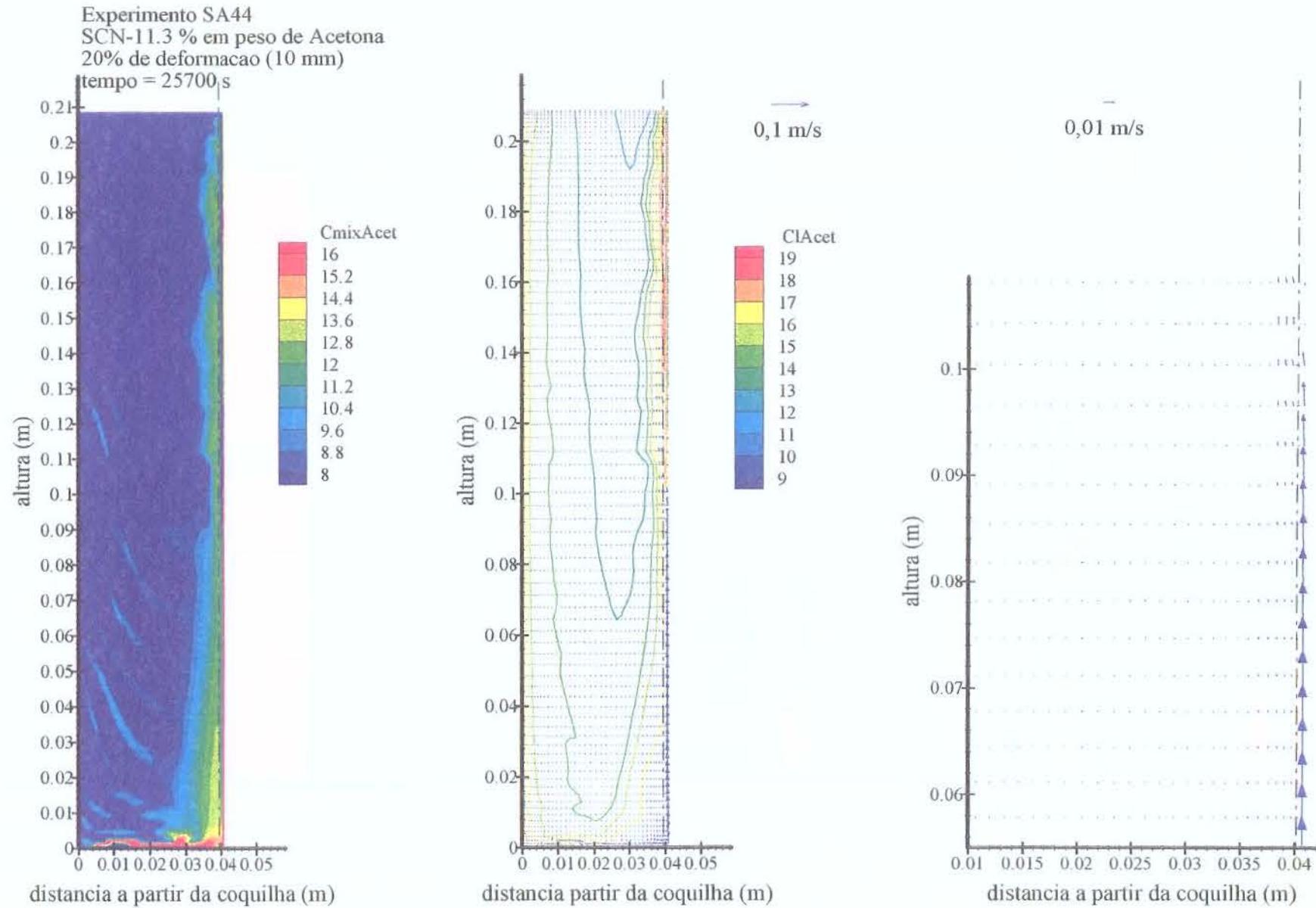


Figura 6.28 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo =25700 s com aplicação de deformação.

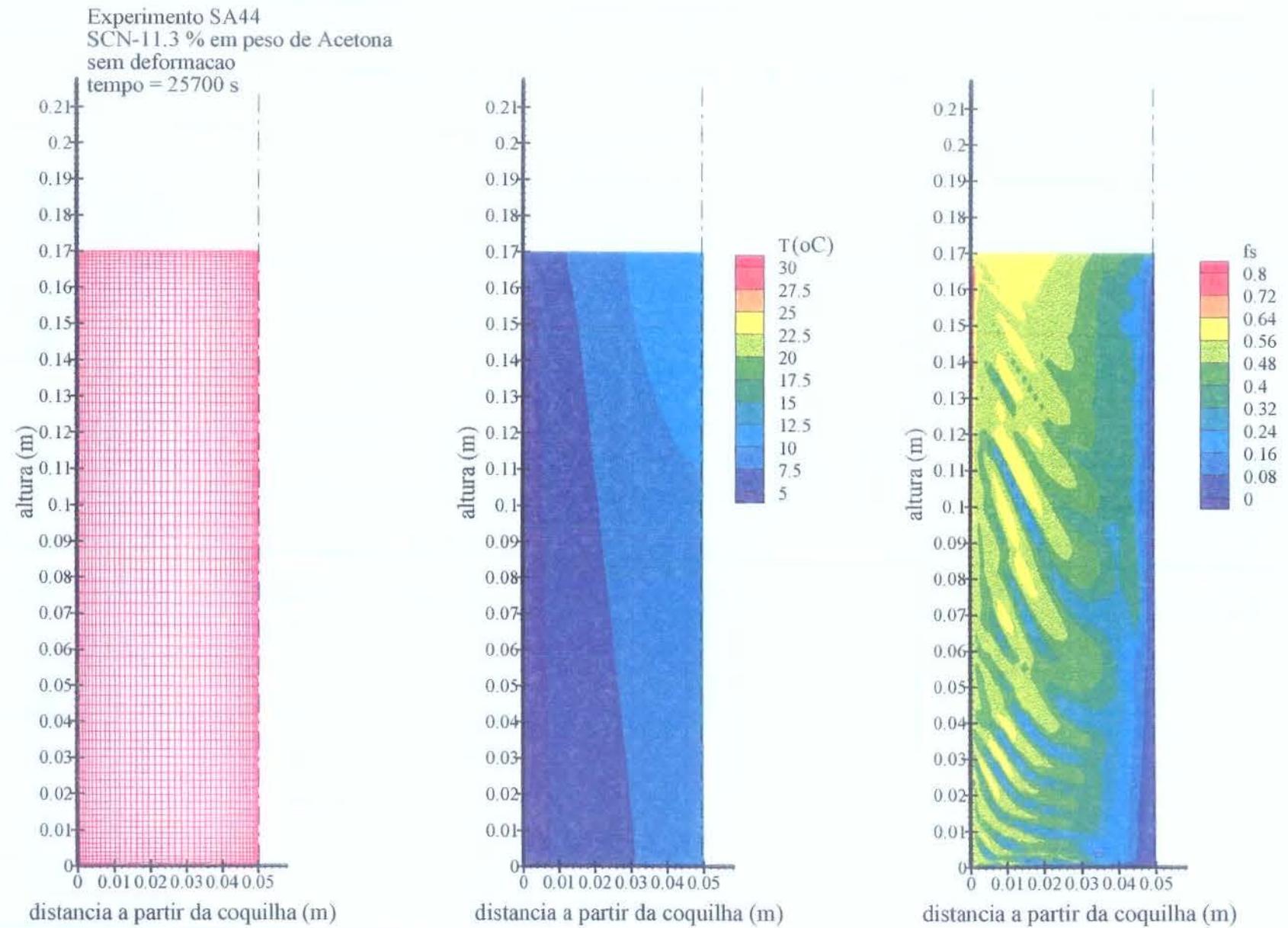


Figura 6.29 – Configuração da malha utilizada, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo =25700 s sem a aplicação de deformação.

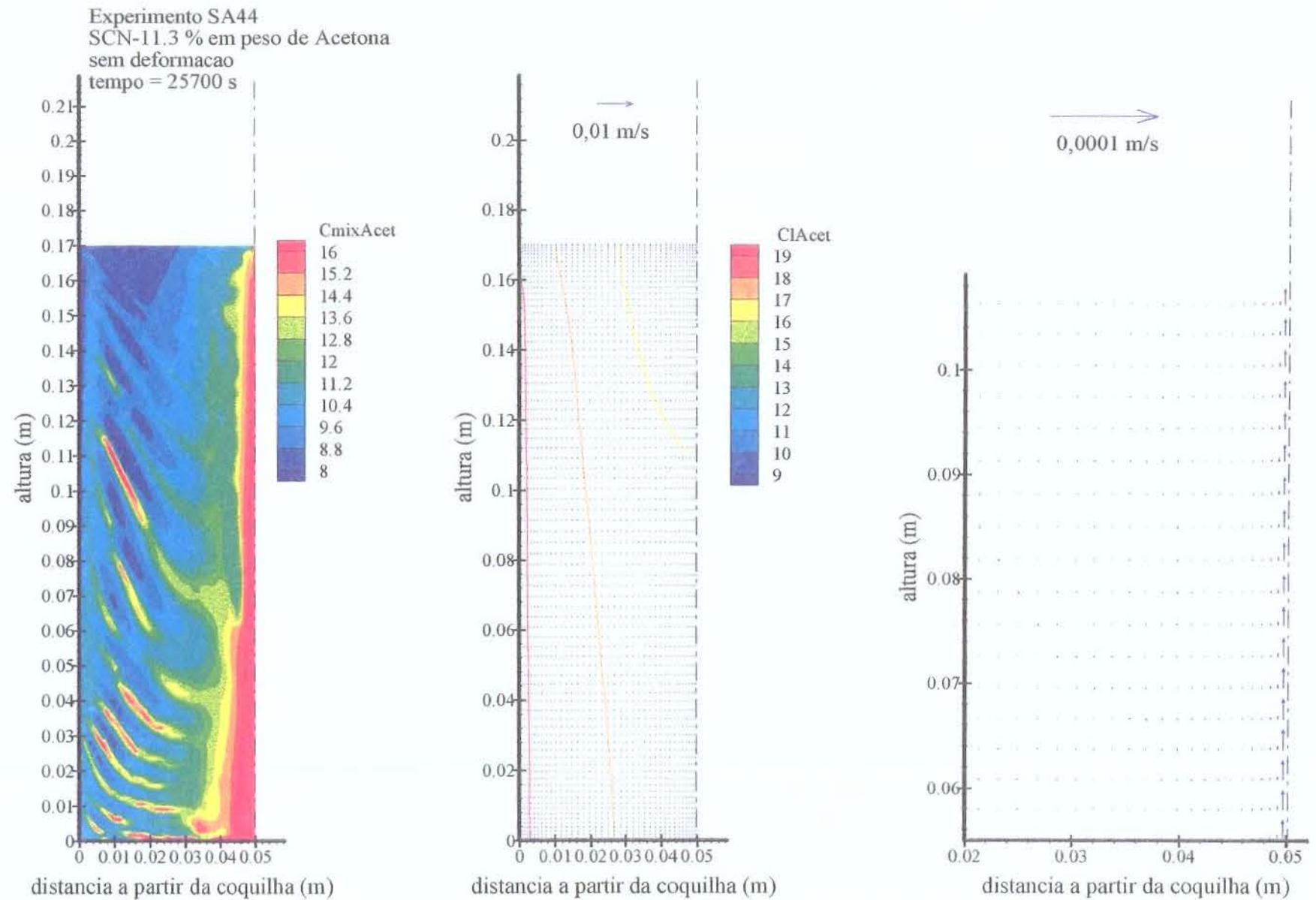


Figura 6.30 – Campos de distribuição de composição da mistura, de velocidade e de composição do líquido para o tempo =25700 s sem a aplicação de deformação.

#### **6.4 - Aplicação do Programa Computacional Desenvolvido na Simulação do Efeito de Deformação do Domínio para um Aço Multicomponente**

Como um exemplo da aplicação do modelo desenvolvido apresentado neste trabalho, simula-se a solidificação e resfriamento de um aço multicomponente. Ressalta-se que, a título de sugestões para trabalhos futuros, as simulações apresentadas aqui, serão confrontadas com experimentos realizados em um simulador, projetado com a participação efetiva do autor do presente trabalho, construído no Departamento de Engenharia de Materiais da Faculdade de Engenharia Mecânica da UNICAMP. Tais experimentos se inserem num projeto de pesquisa mais amplo que visa o estudo de diversas variáveis no lingotamento contínuo de placas finas, laminação de tiras diretamente ou com resfriamento/reaquecimento do esboço, aplicação ou não de deformação plástica no esboço com o núcleo do mesmo no estado líquido. Portanto, os resultados apresentados a seguir servem com parâmetros iniciais no planejamento das experiências a serem realizadas.

O aço escolhido para a realização das simulações é o aço AISI 1008 (% em peso: C = 0,08; Mn = 0,310; Si = 0,080; S = 0,050; P = 0,029), que apresenta como vantagem a disponibilidade de dados de propriedades termofísicas na literatura (Pehlke et al.-1982, Schneider e Beckermann-1995). Esta condição é de suma importância quando se pretende realizar a comparação de dados numéricos resultantes das simulações de solidificação e resfriamento, com os dados experimentais obtidos no simulador físico. Observa-se também que o aço escolhido apresenta um teor de carbono típico para aplicações no lingotamento contínuo de placas destinadas a produção de produtos laminados planos. No Apêndice A apresenta-se as propriedades termofísicas e diversos dados empregados nas simulações numéricas.

As dimensões do domínio são ligeiramente alteradas em relação às dimensões do domínio utilizada nas simulações e experimentos com a liga SCN-acetona, embora a geometria seja a mesma. A espessura suposta para o esboço é de 60 mm e que seria reduzida para 48 mm quando da aplicação da deformação. Observa-se que as simulações numéricas foram realizadas considerando apenas a semi-espessura do domínio. Como condições de contorno considerou-se um coeficiente de transferência de calor constante na interface coquilha/Aço e uma condição do tipo adiabática para a linha de simetria do domínio. Para

facilitar a apresentação dos resultados, todos os gráficos bidimensionais referem-se à semi-espessura do domínio.

Observa-se que no processo de lingotamento contínuo, o esboço percorre regiões com diferentes valores de  $h$ , no molde e na região de resfriamento secundário. Nas simulações realizadas, considerou-se que o molde é estático, portanto, não estão sendo reproduzidas as condições típicas de lingotamento contínuo. Para permitir o estudo da influência da velocidade de extração de calor na formação do perfil de macrosegregação, foram realizados dois conjuntos de simulações numéricas, alterando-se o valor do coeficiente de transferência de calor na interface coquilha/Aço ( $h$ ). Observa-se que este estudo é realizado de modo aproximado, pois, supõe-se que o esboço é resfriado o tempo todo com o valor constante de  $h$ .

Nas Figuras de 6.31 a 6.45 apresentam-se os resultados numéricos para os campos de distribuição de temperatura, fração de sólido, composição da mistura, composição do líquido e velocidade para diversos tempos, considerando-se um coeficiente de transferência de calor de  $1000 \text{ W/m}^2\text{K}$ . O tempo igual a 3 s corresponde aproximadamente às condições iniciais de realização do experimento e das simulações numéricas do programa bidimensional desenvolvido. As figuras relativas aos tempos de 55 s, 65 s, 115 s apresentam a evolução das variáveis citadas. O tempo de 55 s corresponde ao início da aplicação da deformação e o tempo de 65 s corresponde ao final da aplicação da deformação.

Nas Figuras de 6.43 a 6.45 apresentam-se os resultados para a distribuição das variáveis temperatura, fração de sólido, composição da mistura e do líquido e velocidade para o caso da não aplicação da deformação no caso de  $h = 1000 \text{ W/m}^2\text{K}$  e para um tempo – 115 s.

As Figuras de 6.46 a 6.57 apresentam os resultados numéricos para os campos de distribuição de temperatura, fração de sólido, composição da mistura, composição do líquido e velocidade para diversos tempos, considerando-se um coeficiente de transferência de calor de  $150 \text{ W/m}^2\text{K}$ . As figuras relativas aos tempos de 55 s, 240 s, 250 s, 6000 s apresentam a evolução das variáveis citadas. O tempo de 240 s corresponde ao início da aplicação da deformação e o tempo de 250 s corresponde ao final da aplicação da deformação.

Nas Figuras de 6.55 a 6.57 apresentam-se os resultados para a distribuição das variáveis temperatura, fração de sólido, composição da mistura e do líquido e velocidade para o caso da não aplicação da deformação considerando-se  $h = 150 \text{ W/m}^2\text{K}$  e para um tempo = 600 s.

Observa-se em primeiro lugar que para as simulações considerando-se um coeficiente de transferência de calor de  $150 \text{ W/m}^2\text{K}$ , as previsões em relação ao padrão de distribuição da macrossegregação indicam uma maior tendência de macrossegregação do tipo central. Isto se deve ao maior tempo disponível para ocorrer o fluxo de líquido na zona pastosa, devido a menor velocidade de resfriamento.

Analisando os resultados numéricos obtidos, observa-se que devido ao baixo teor de elementos de liga, o nível de macrossegregação previsto é relativamente baixo, razão pela qual não foi possível estudar com detalhes a influência da aplicação da deformação do domínio na redução deste defeito. Entretanto, deve ser destacado que o modelo matemático desenvolvido e o respectivo código computacional implementado, se mostraram adequados para simular a solidificação/deformação plástica de ligas multicomponentes. Uma análise mais detalhada da aplicação do programa desenvolvido será realizada num futuro próximo quando da análise dos experimentos a serem executados (apresentados no Apêndice A).

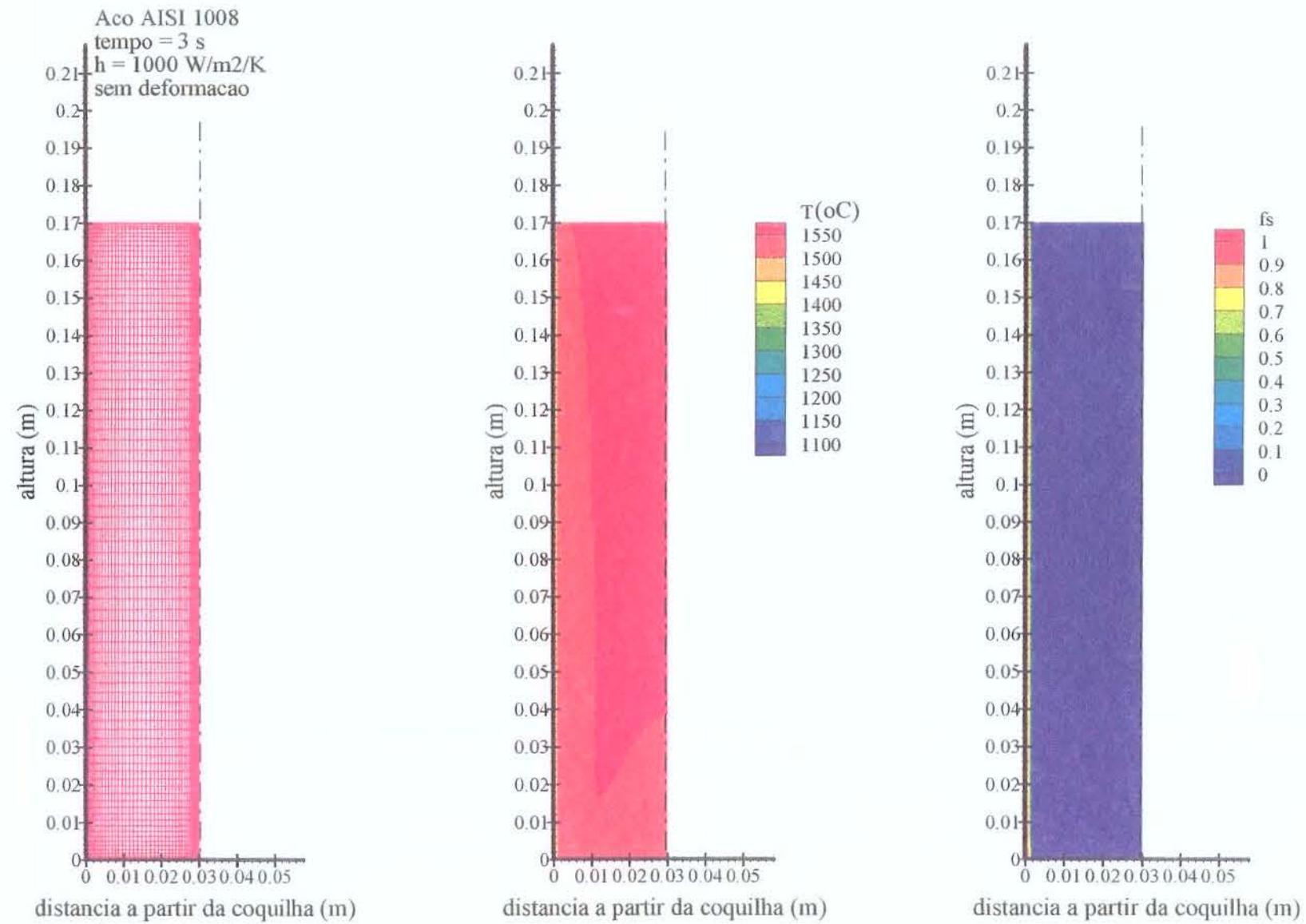


Figura 6.31 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 3 s –  $h = 1000 \text{ W/m}^2\text{K}$ .

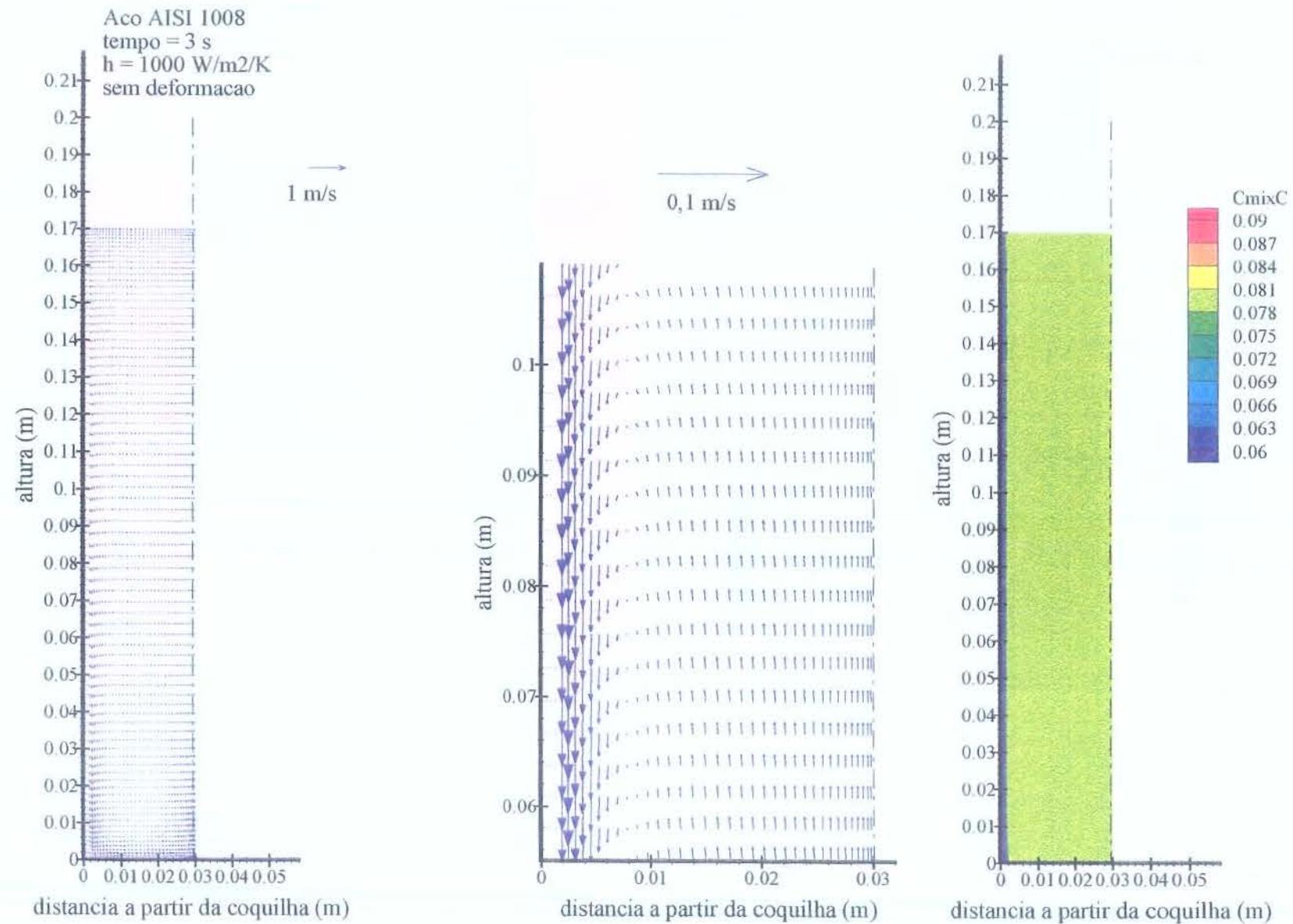


Figura 6.32 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 3 s – h = 1000 W/m<sup>2</sup>K.

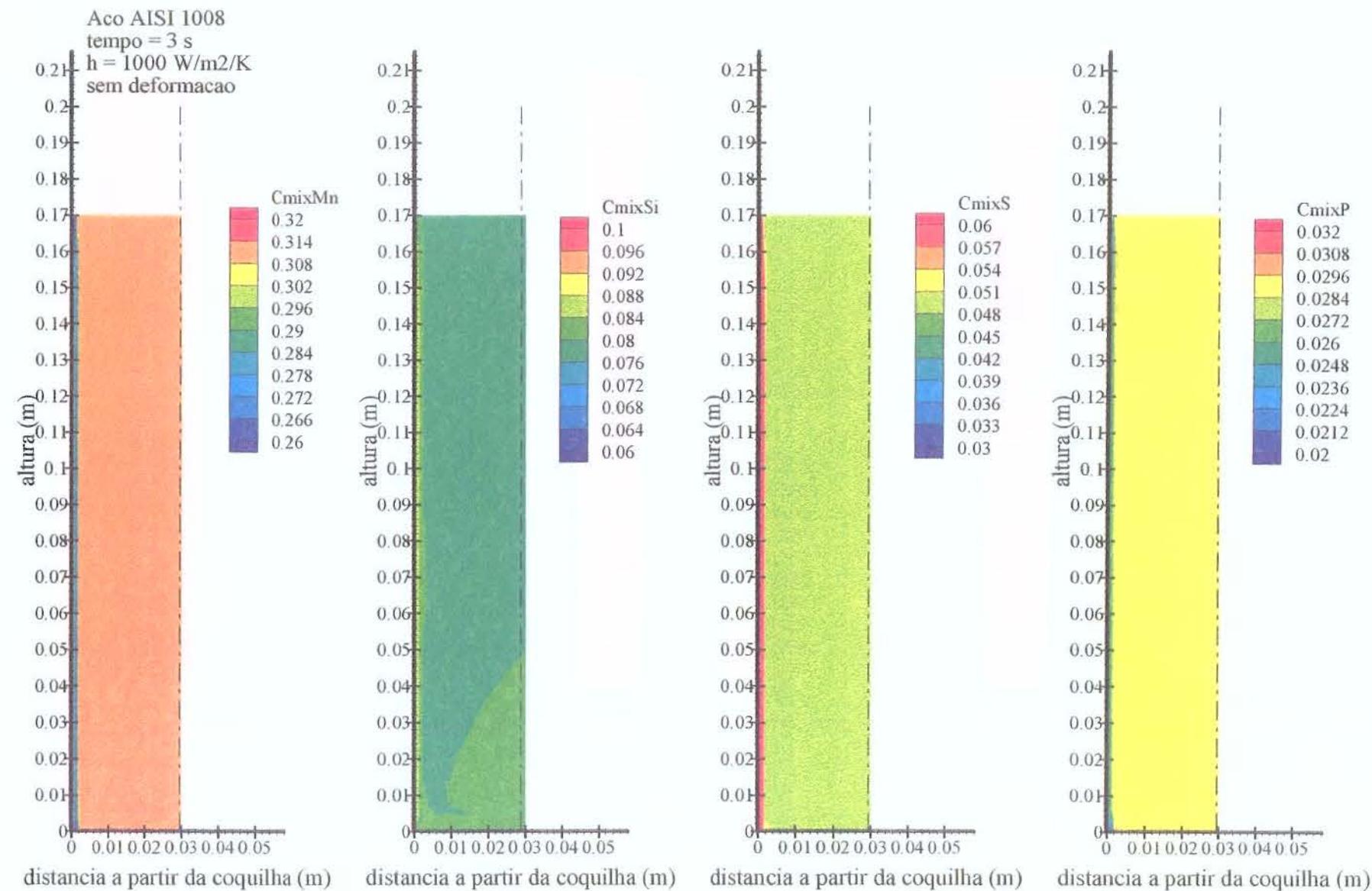


Figura 6.33 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 3 s –  $h = 1000 \text{ W/m}^2/\text{K}$ .

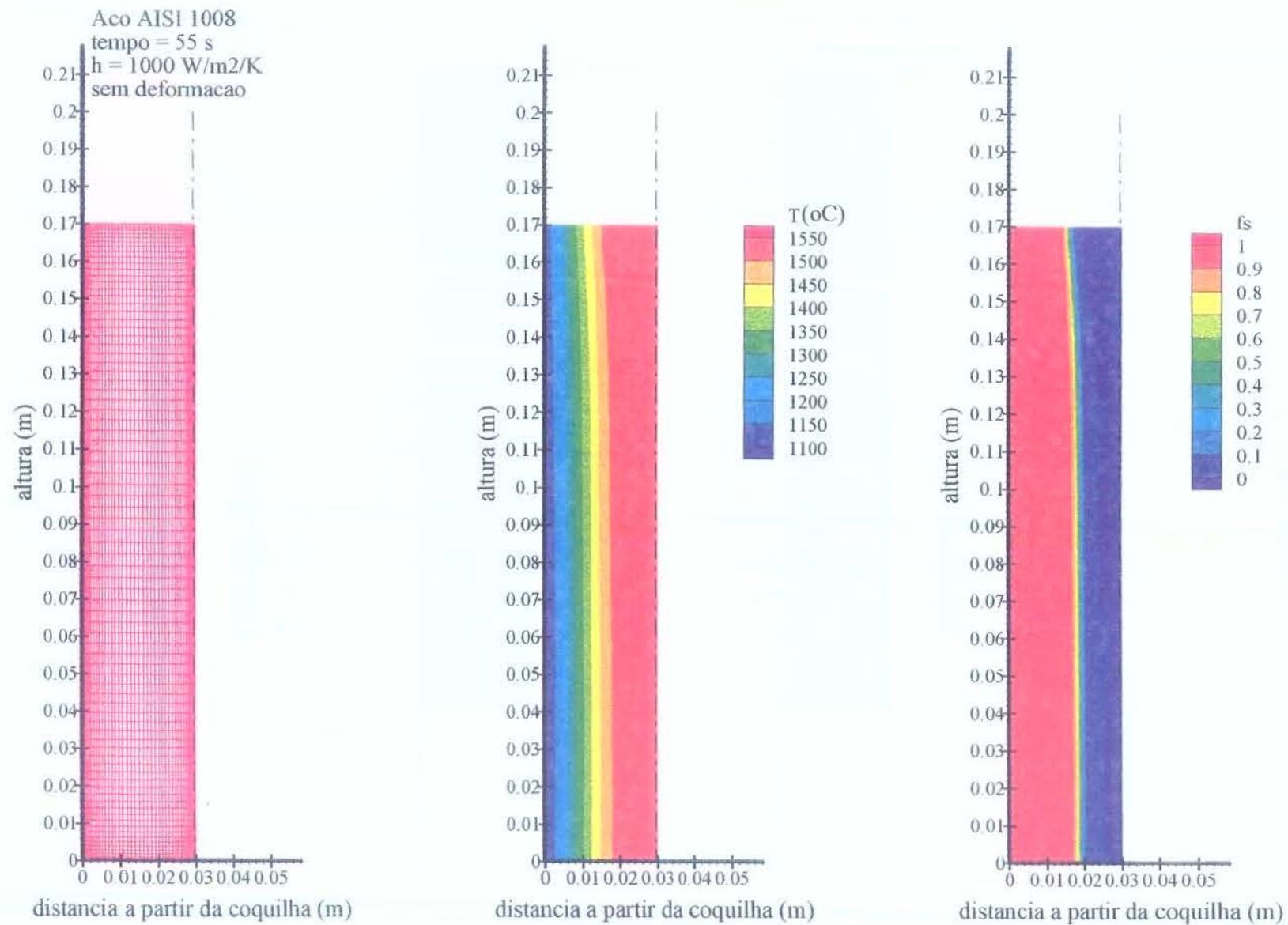


Figura 6.34 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 55 s – h = 1000 W/m<sup>2</sup>K.

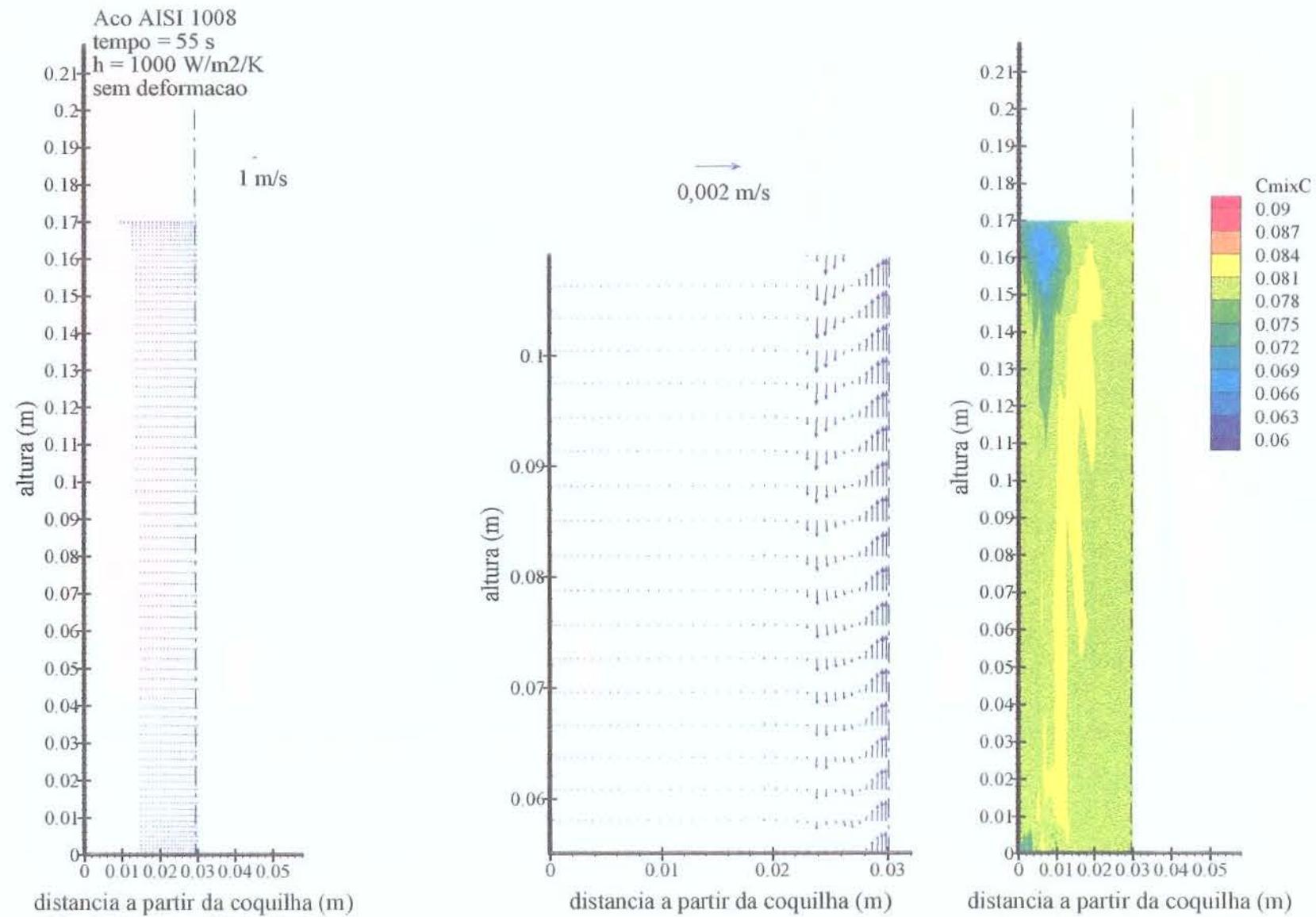


Figura 6.35 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 55 s –  $h = 1000 \text{ W/m}^2/\text{K}$ .

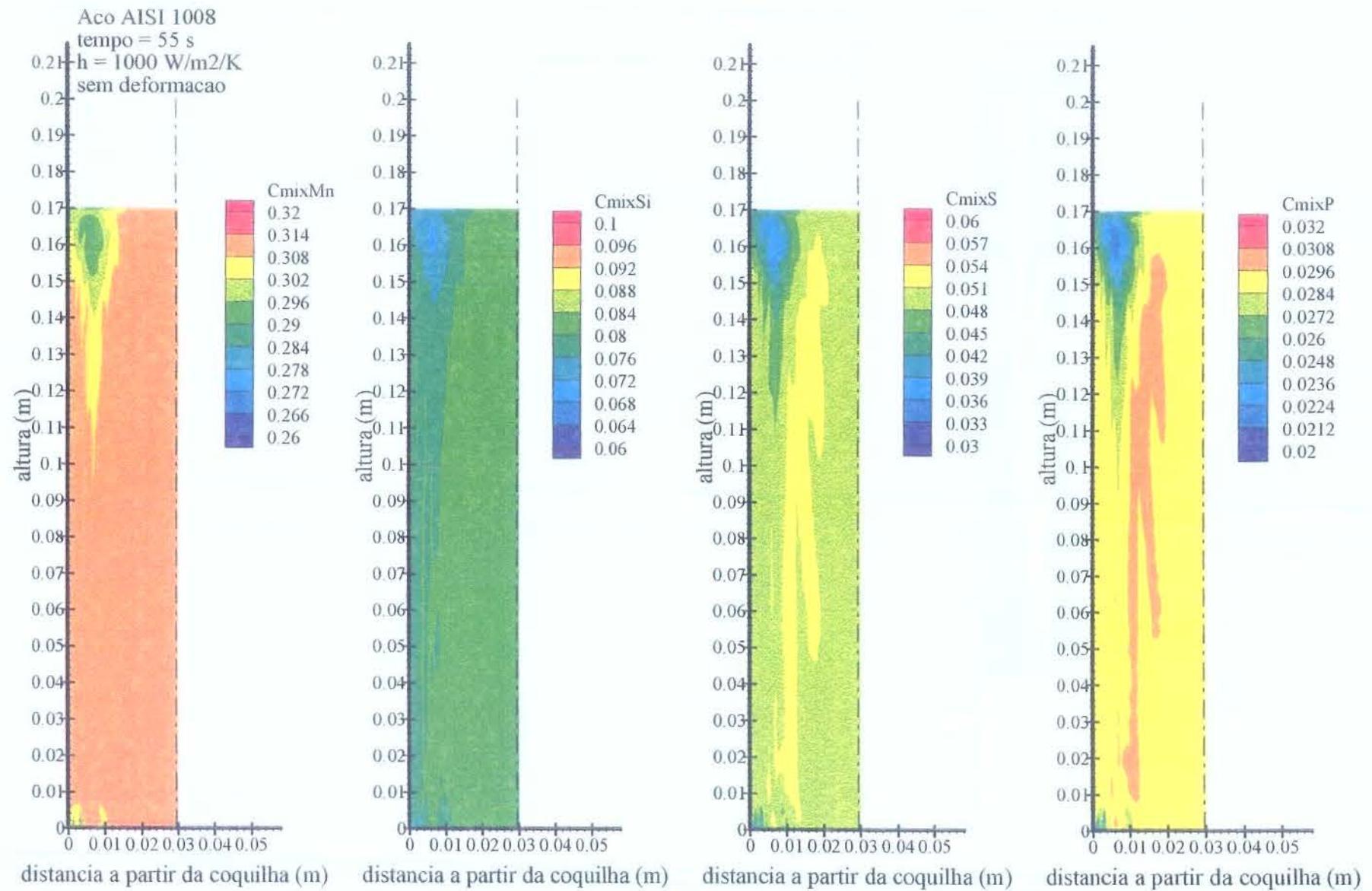


Figura 6.36 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 55 s –  $h = 1000 \text{ W/m}^2\text{K}$ .

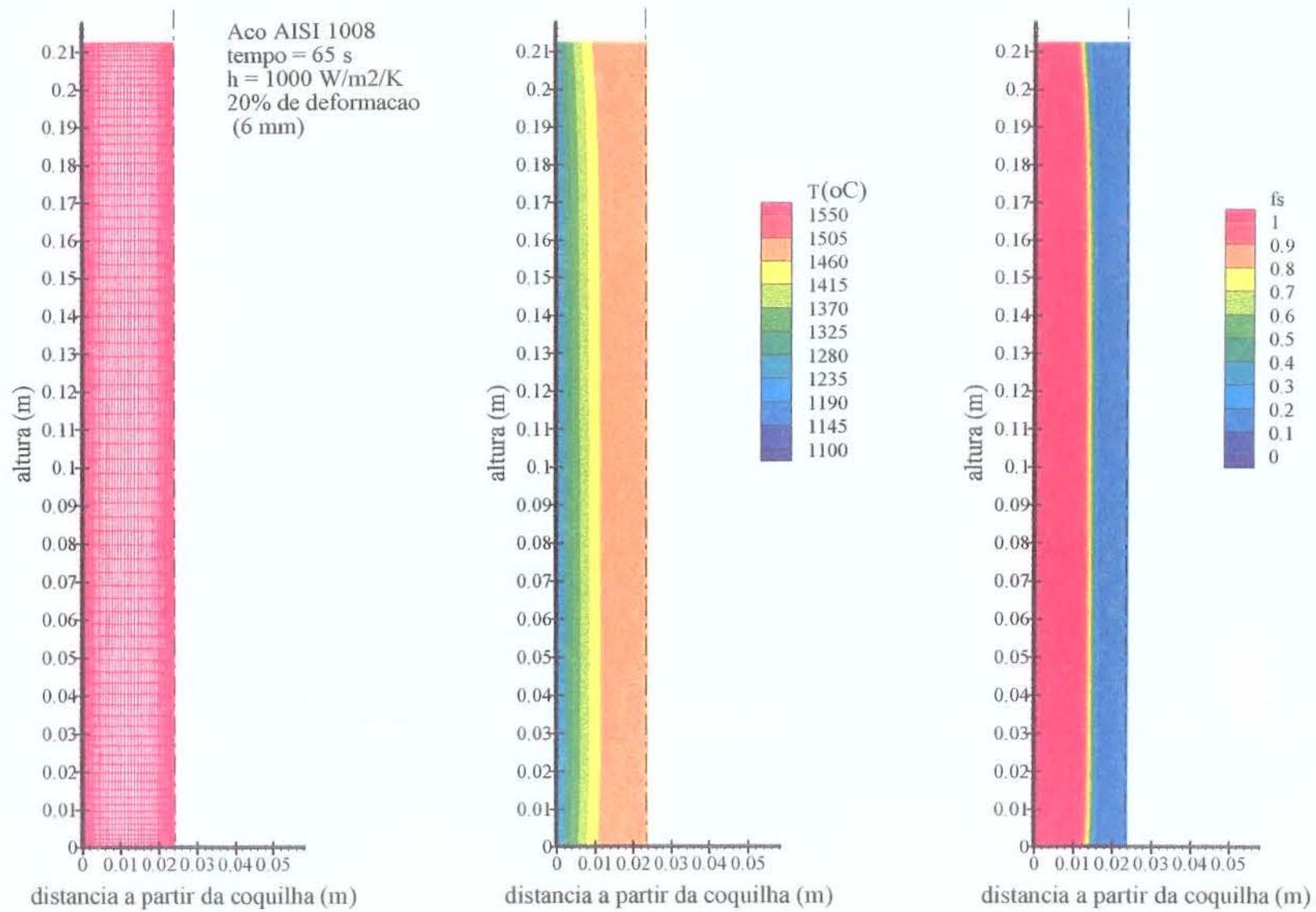


Figura 6.37 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 65 s – h = 1000 W/m<sup>2</sup>K.

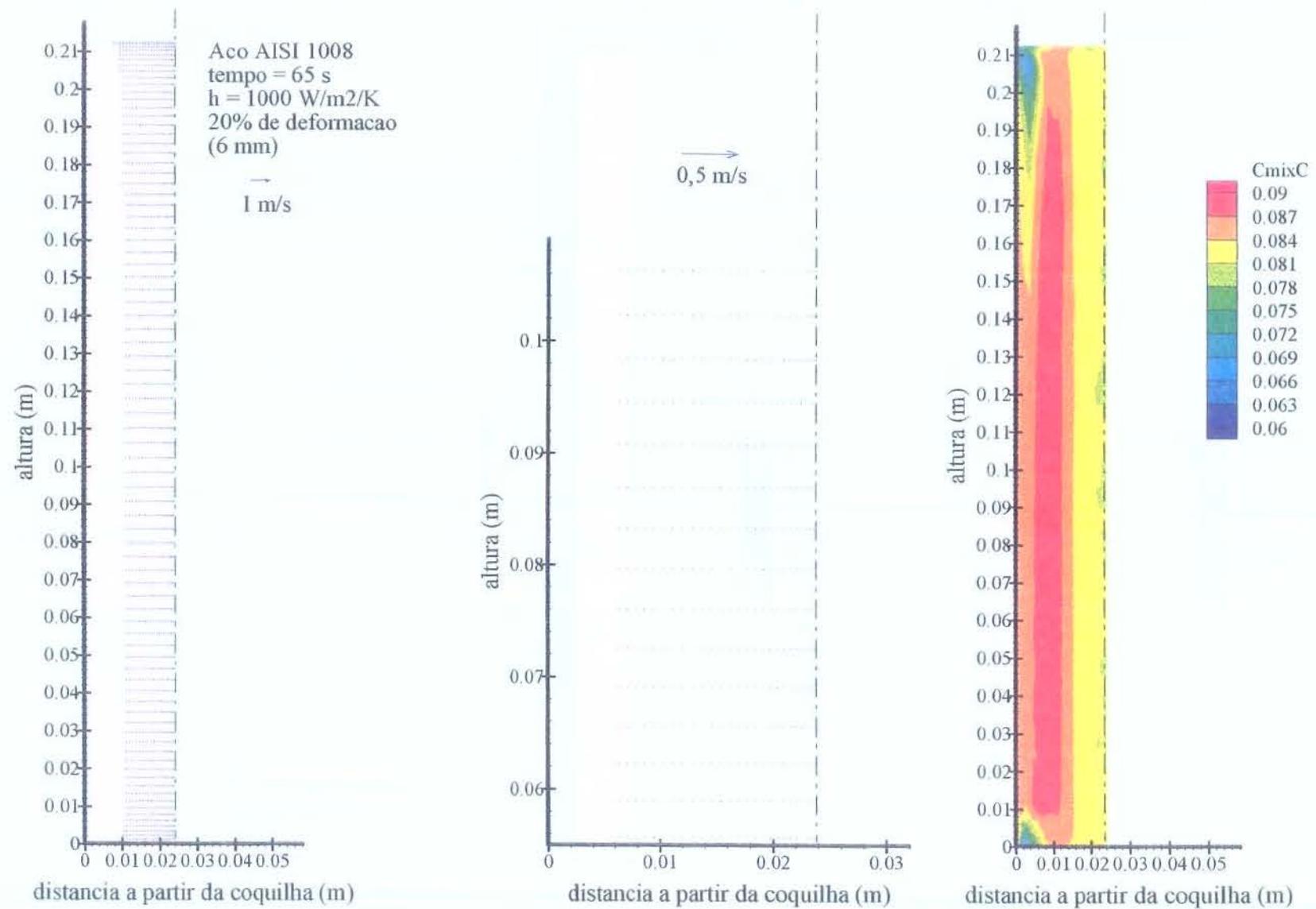


Figura 6.38 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 65 s –  $h = 1000 \text{ W/m}^2/\text{K}$ .

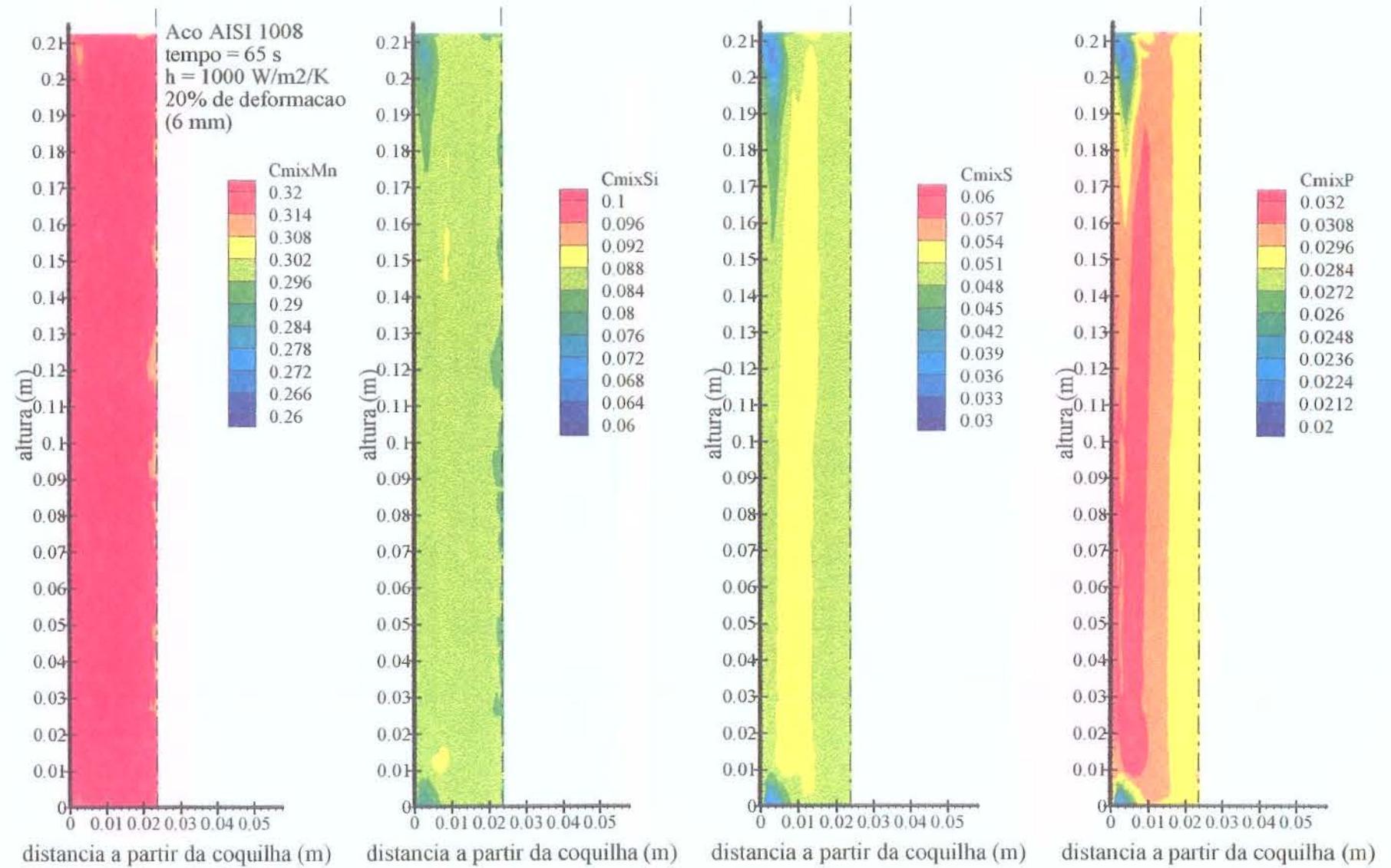


Figura 6.39 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 65 s –  $h = 1000 \text{ W/m}^2/\text{K}$ .

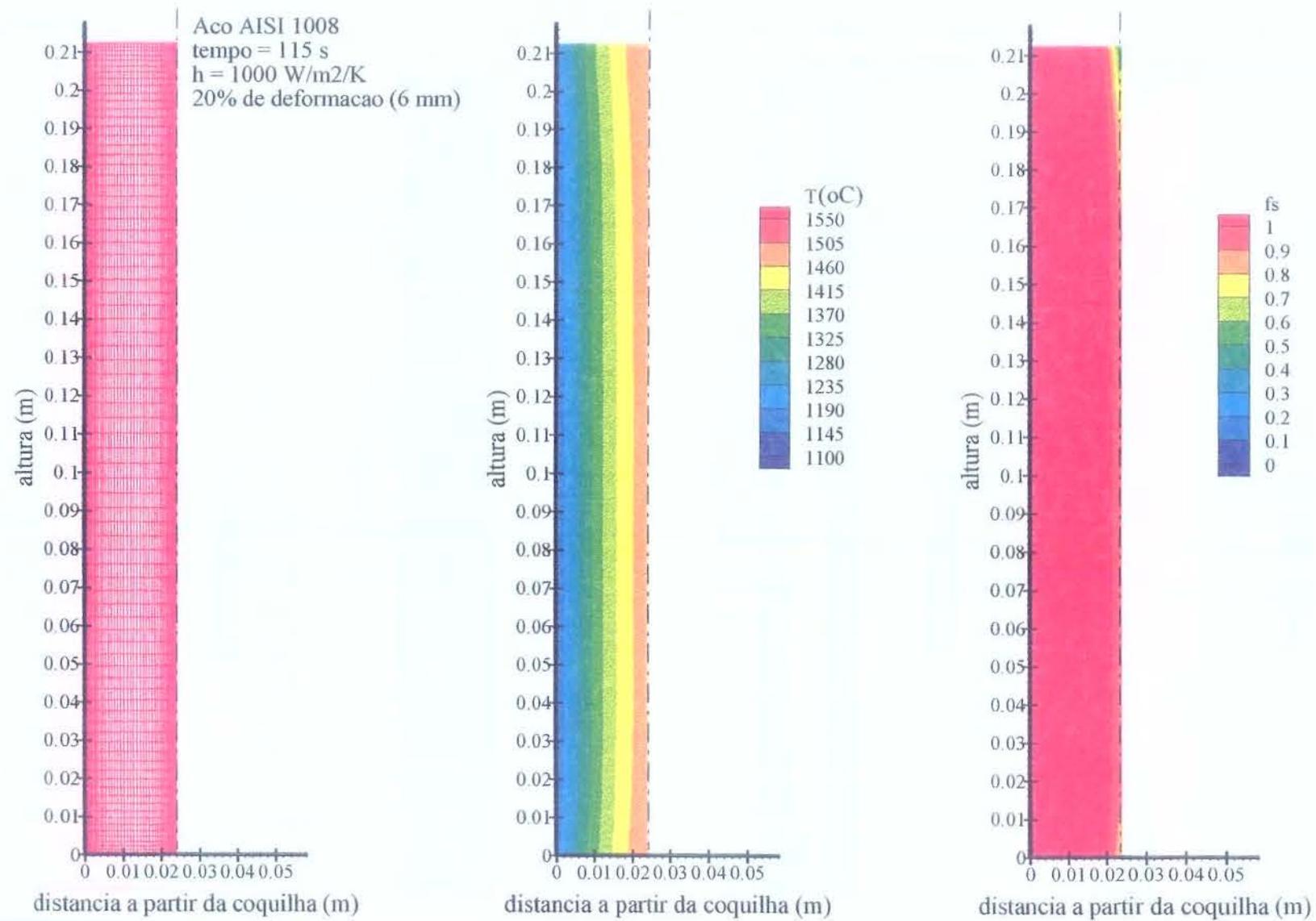


Figura 6.40 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 115 s –  $h = 1000 \text{ W/m}^2/\text{K}$ , com deformação.

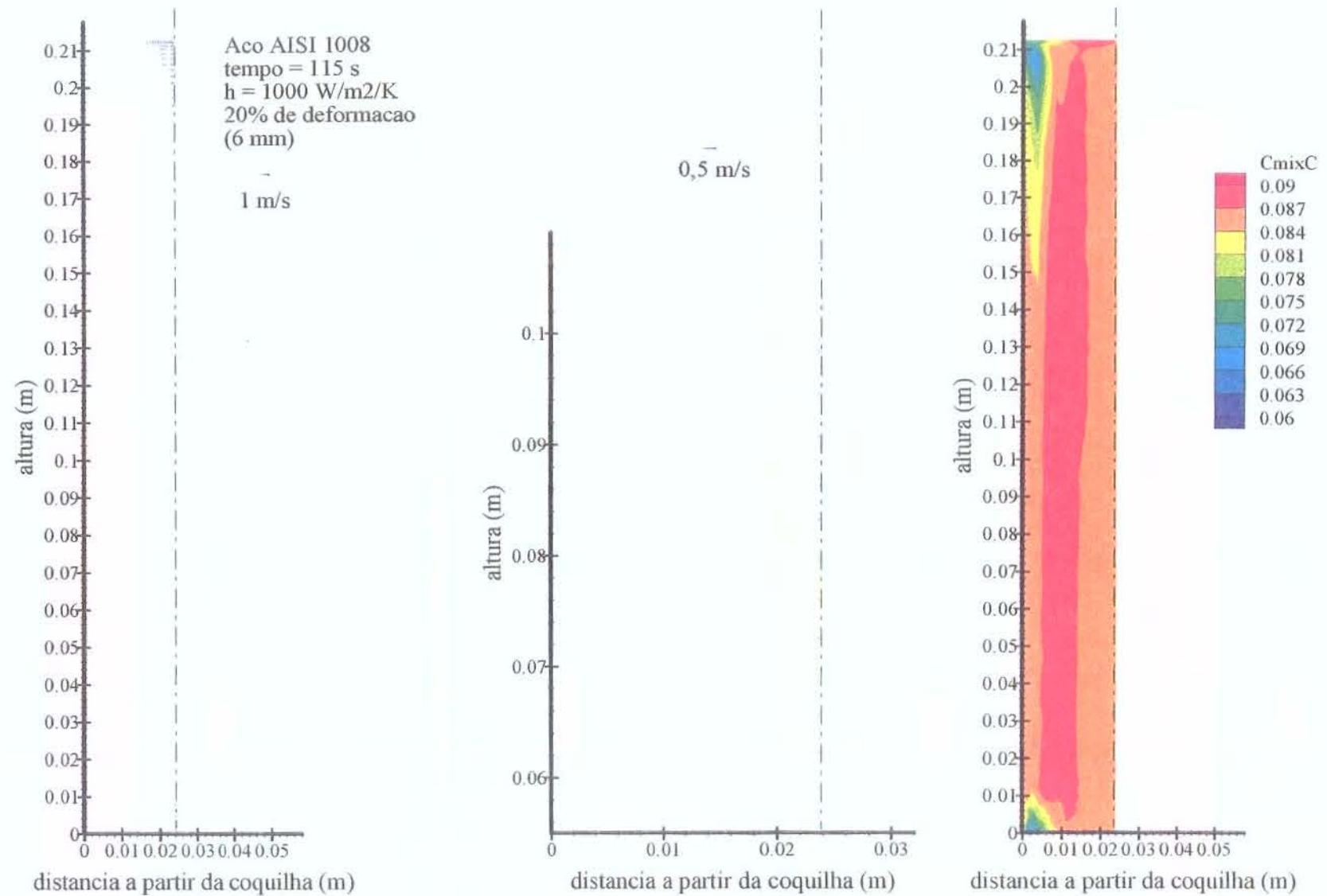


Figura 6.41 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 115 s –  $h = 1000, \text{ W/m}^2/\text{K}$ . com deformação.

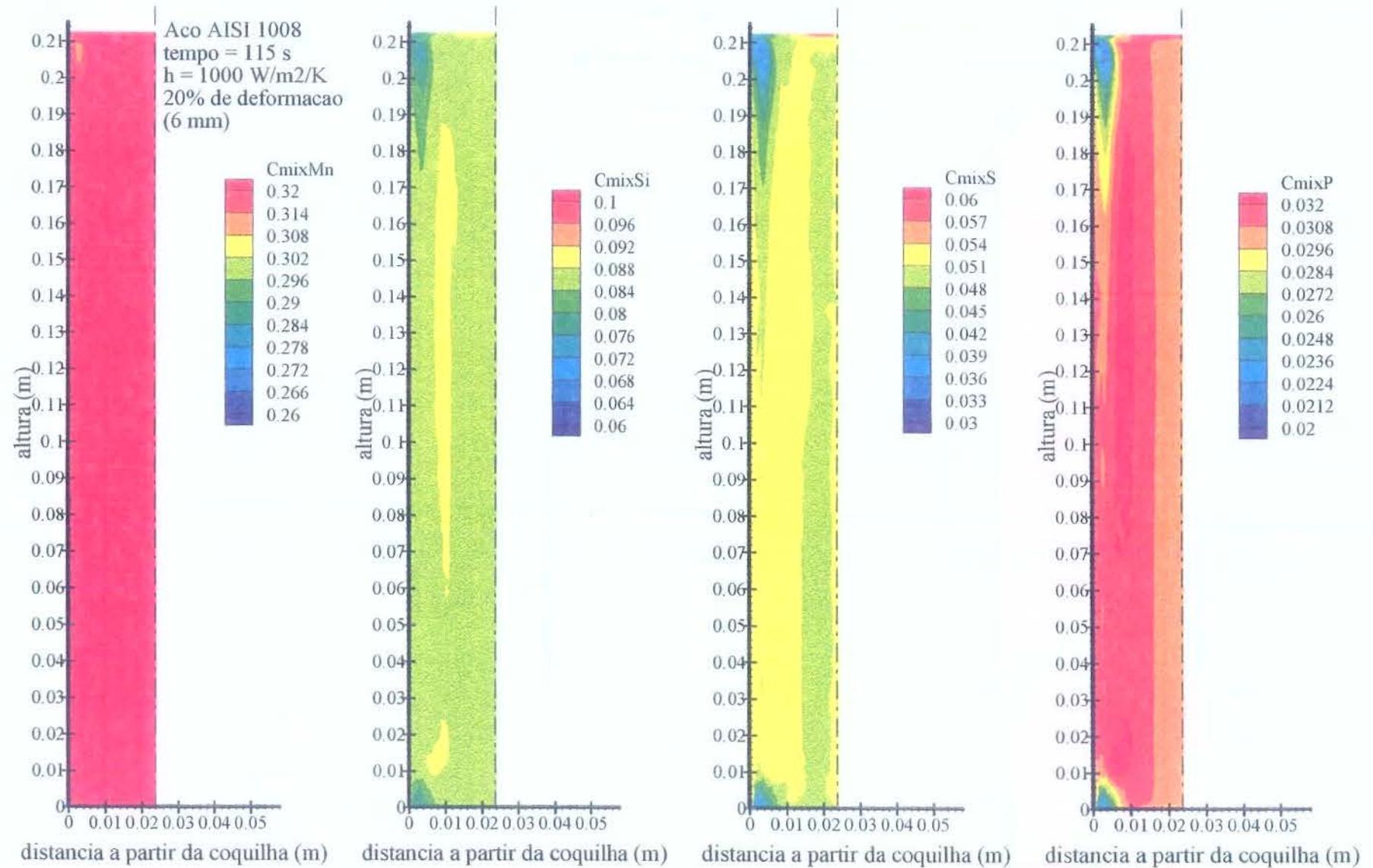


Figura 6.42 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 115 s – h = 1000 W/m<sup>2</sup>K, com deformação.

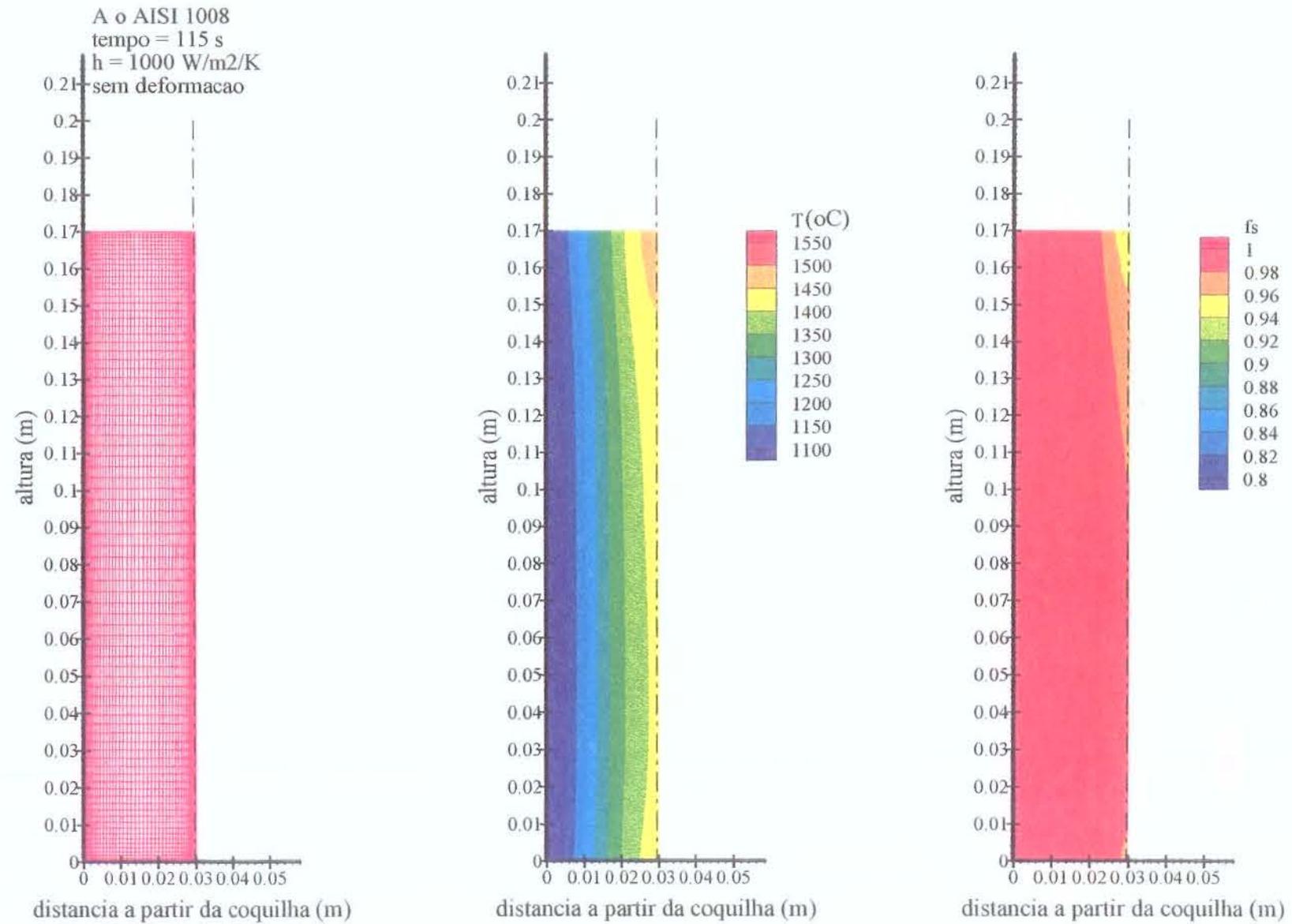


Figura 6.43 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 115 s – h = 1000 W/m<sup>2</sup>K – sem deformação.

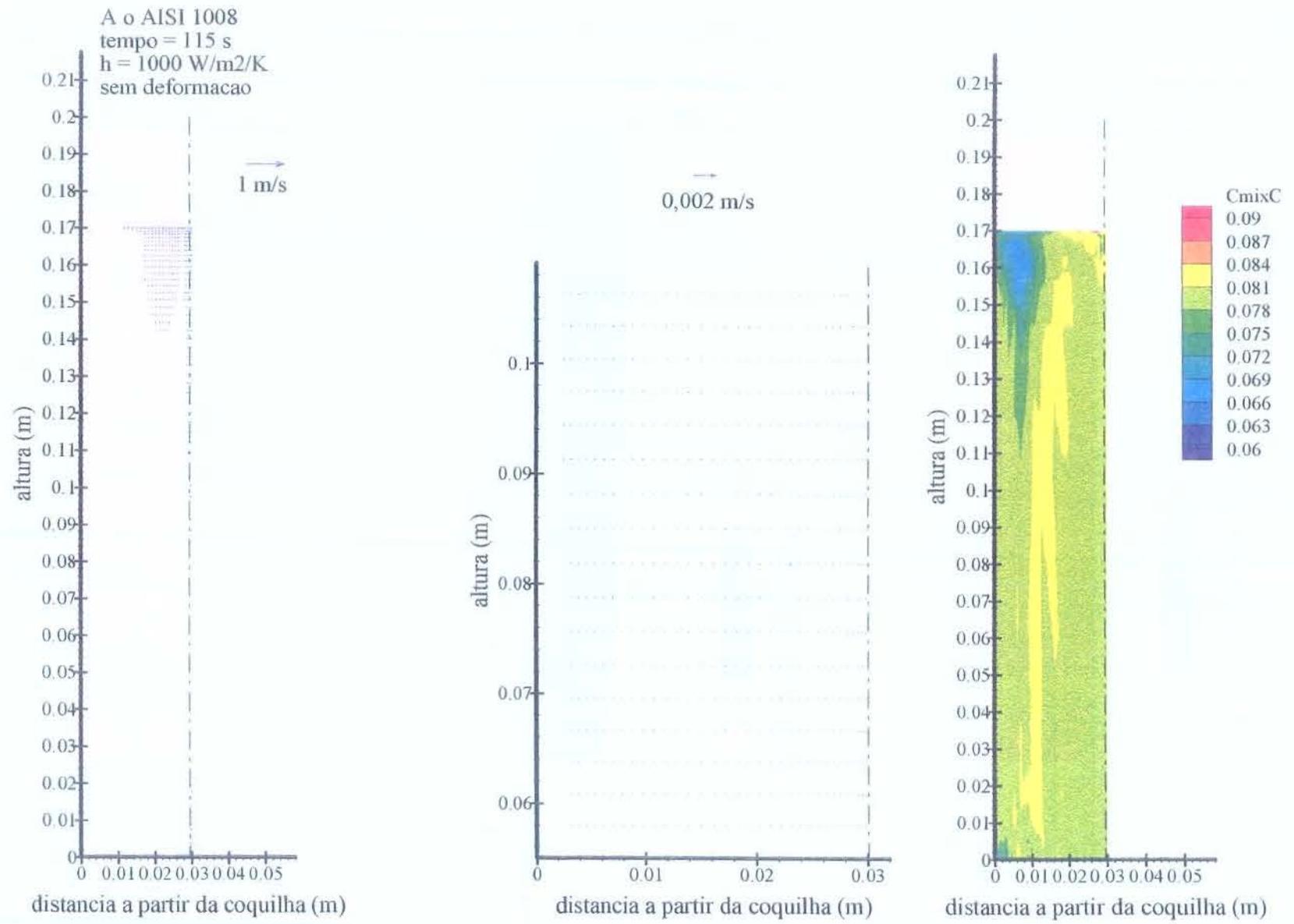


Figura 6.44 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 115 s –  $h = 1000 \text{ W/m}^2/\text{K}$ , sem deformação.

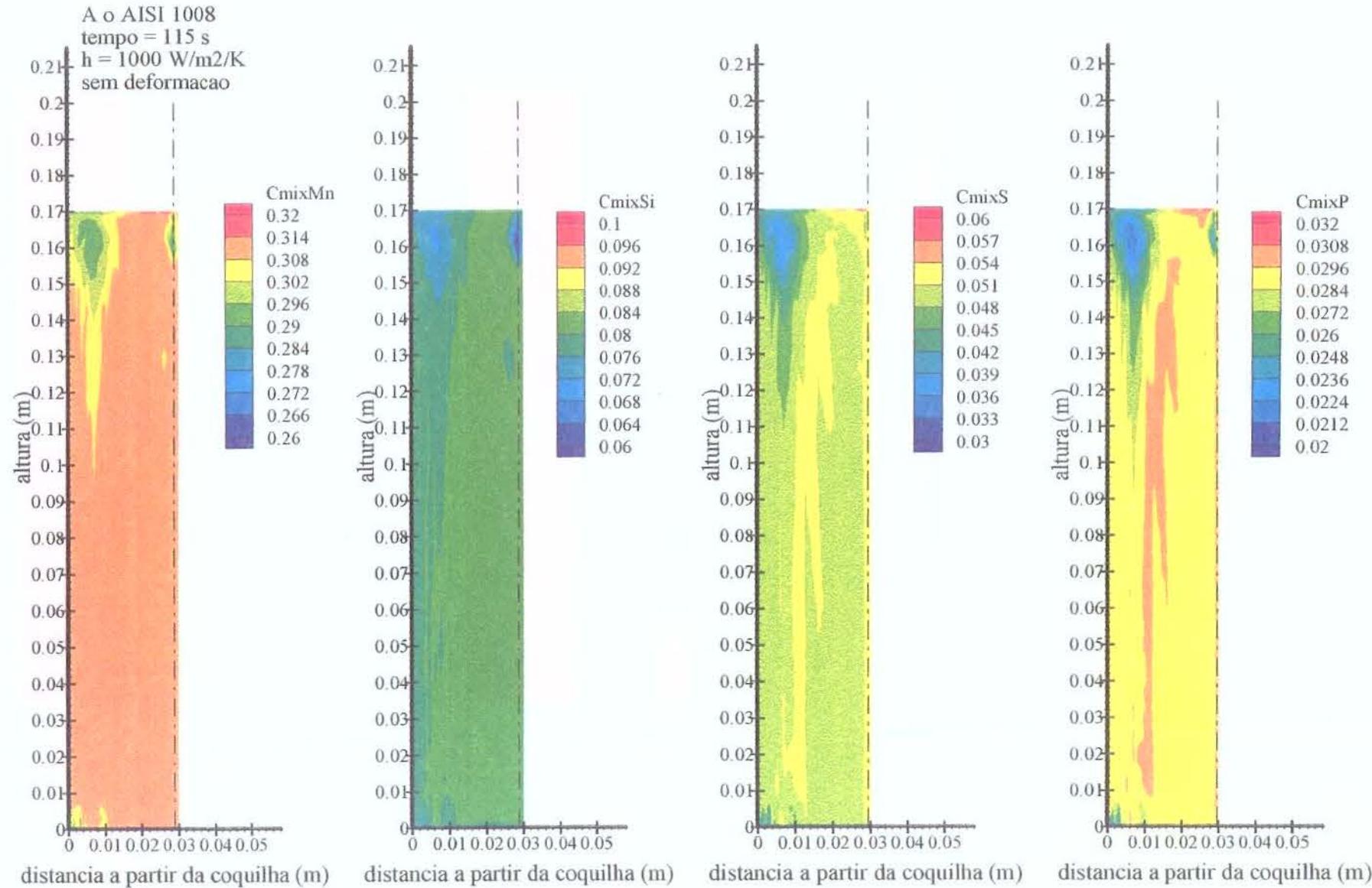


Figura 6.45 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 115 s – h = 1000 W/m<sup>2</sup>K, sem deformação.

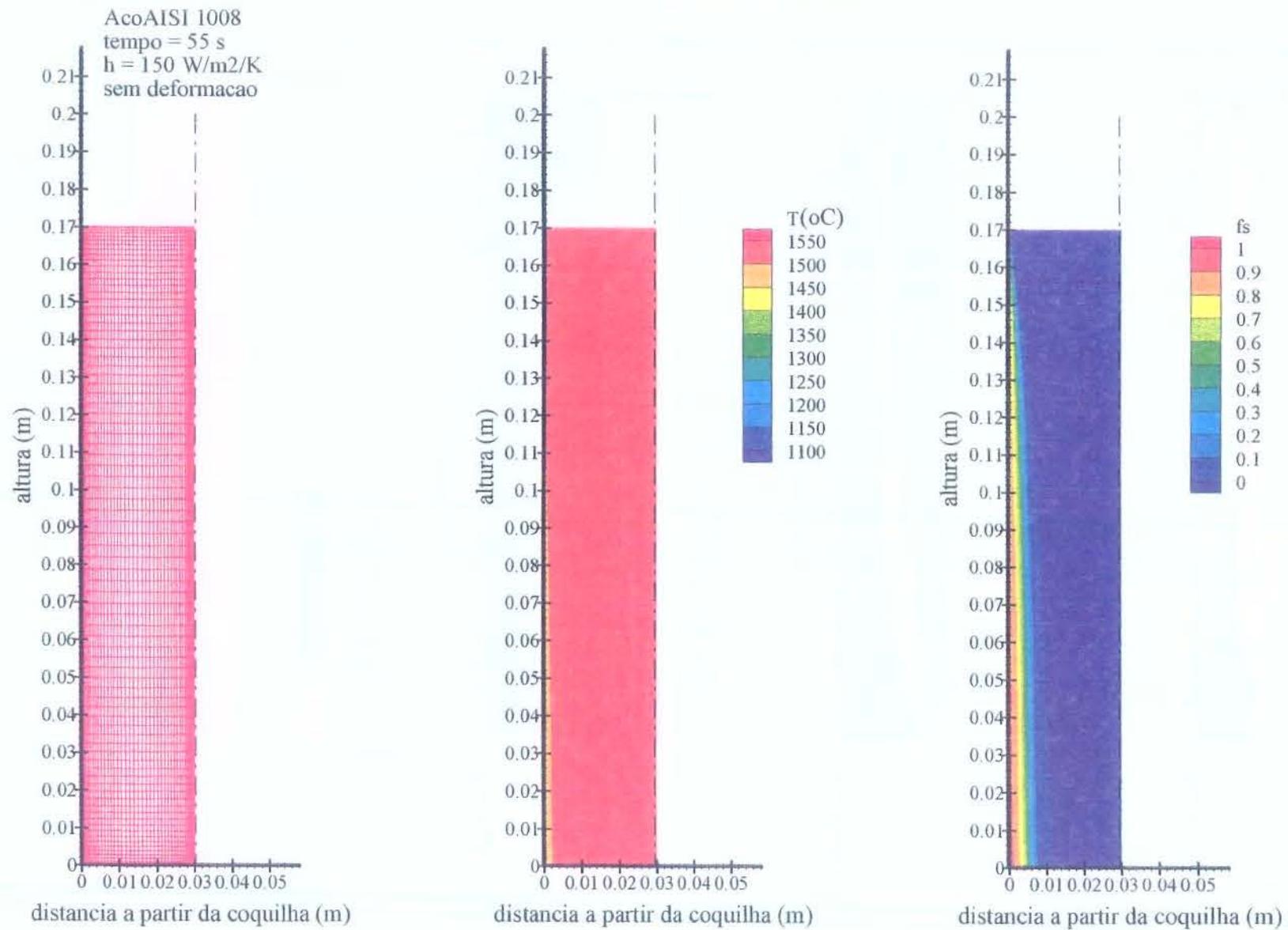


Figura 6.46 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 55 s – h = 150 W/m<sup>2</sup>K.

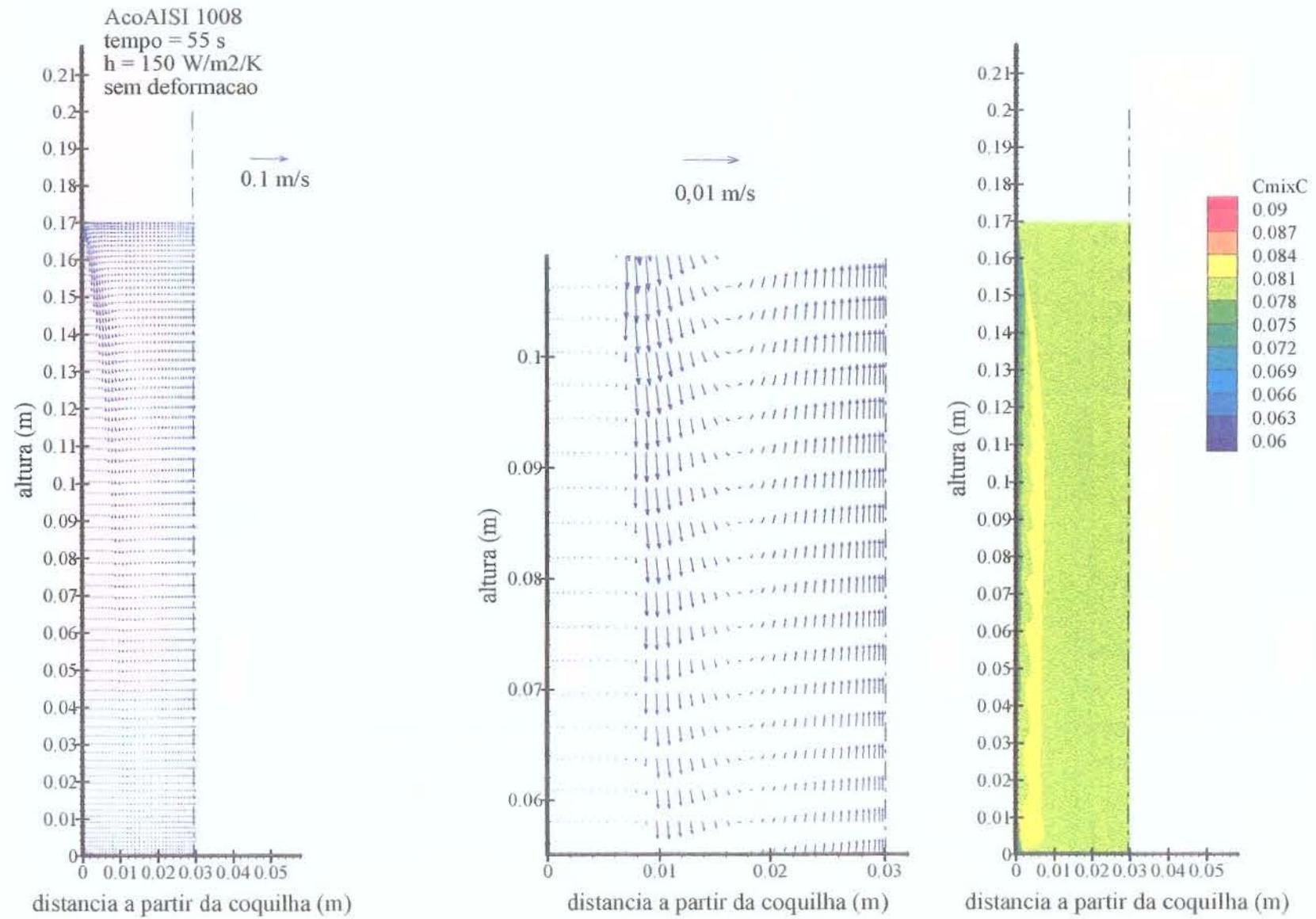


Figura 6.47 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 55 s –  $h = 150 \text{ W/m}^2\text{K}$ .

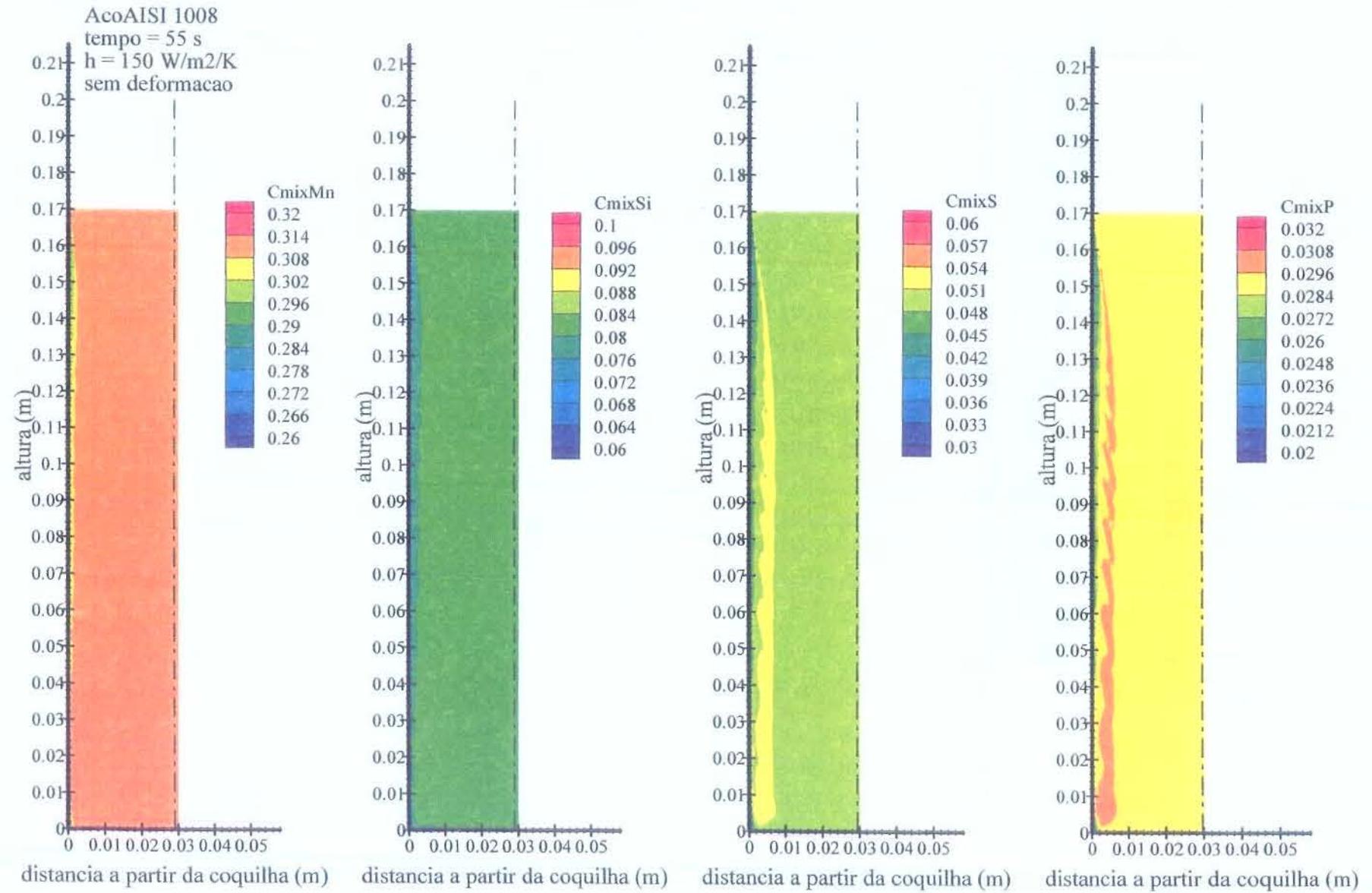


Figura 6.48 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 55 s – h = 150 W/m<sup>2</sup>K.

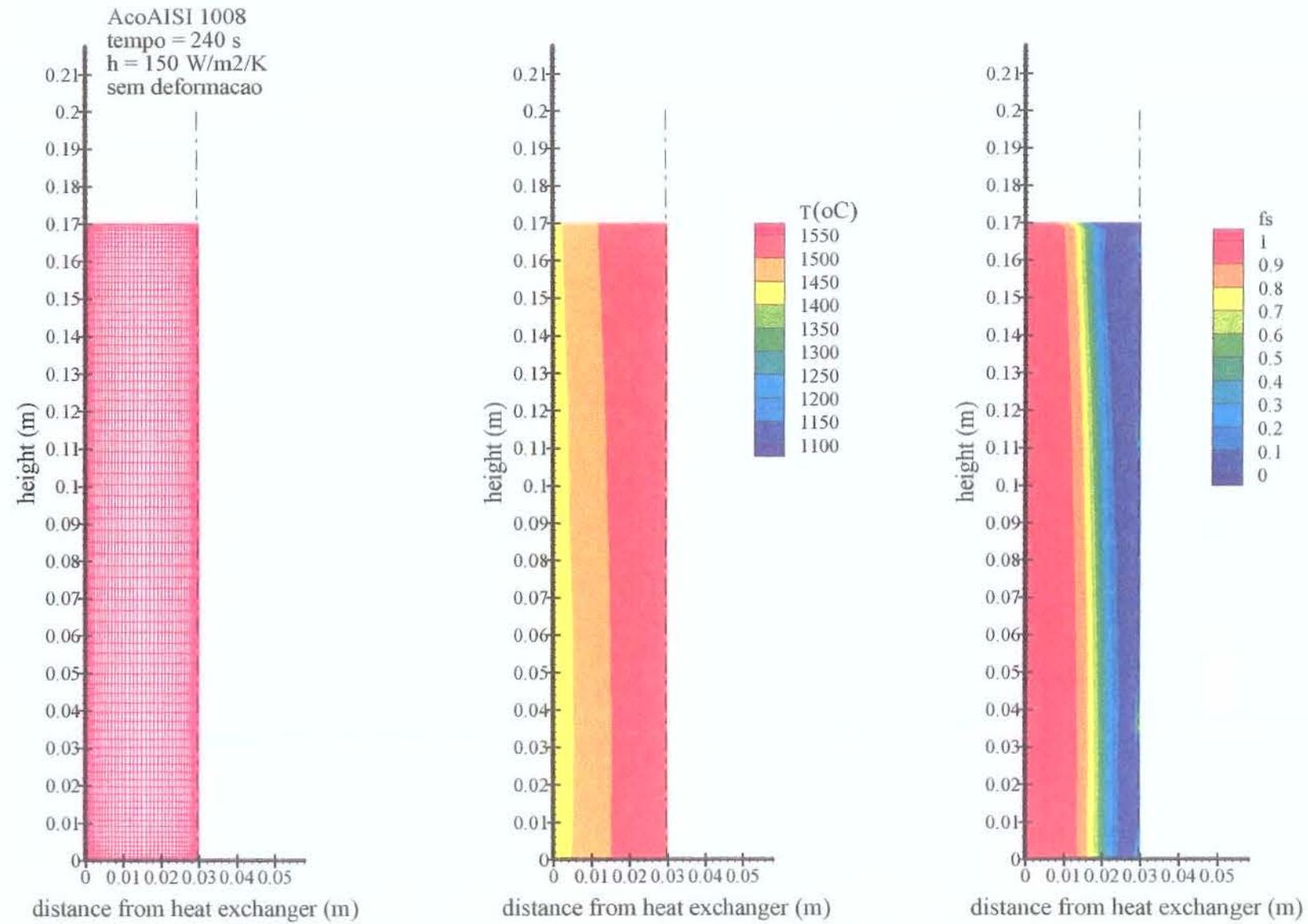


Figura 6.49 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 240 s – h = 150 W/m<sup>2</sup>K.

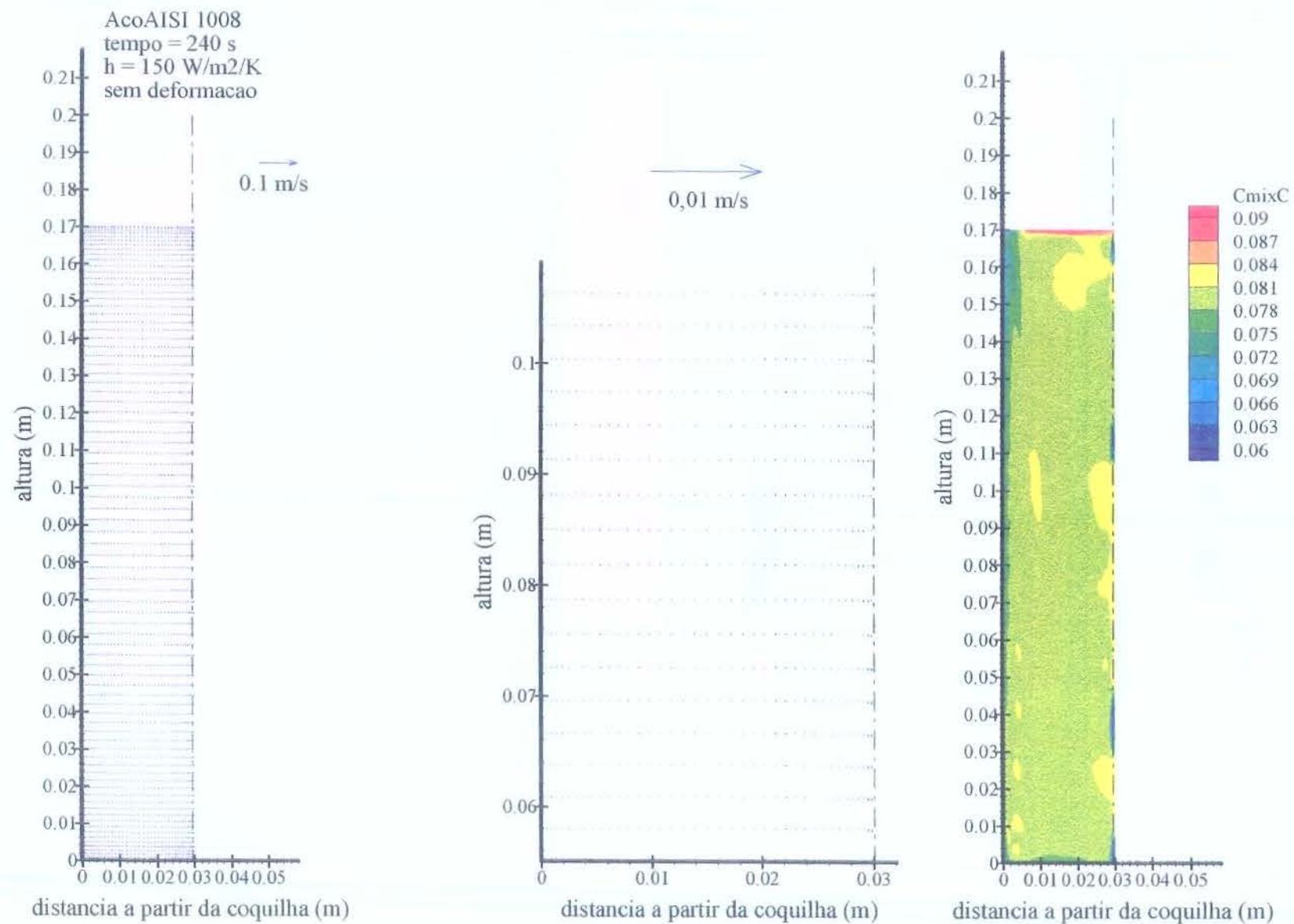


Figura 6.50 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 240 s – h = 150 W/m<sup>2</sup>K..

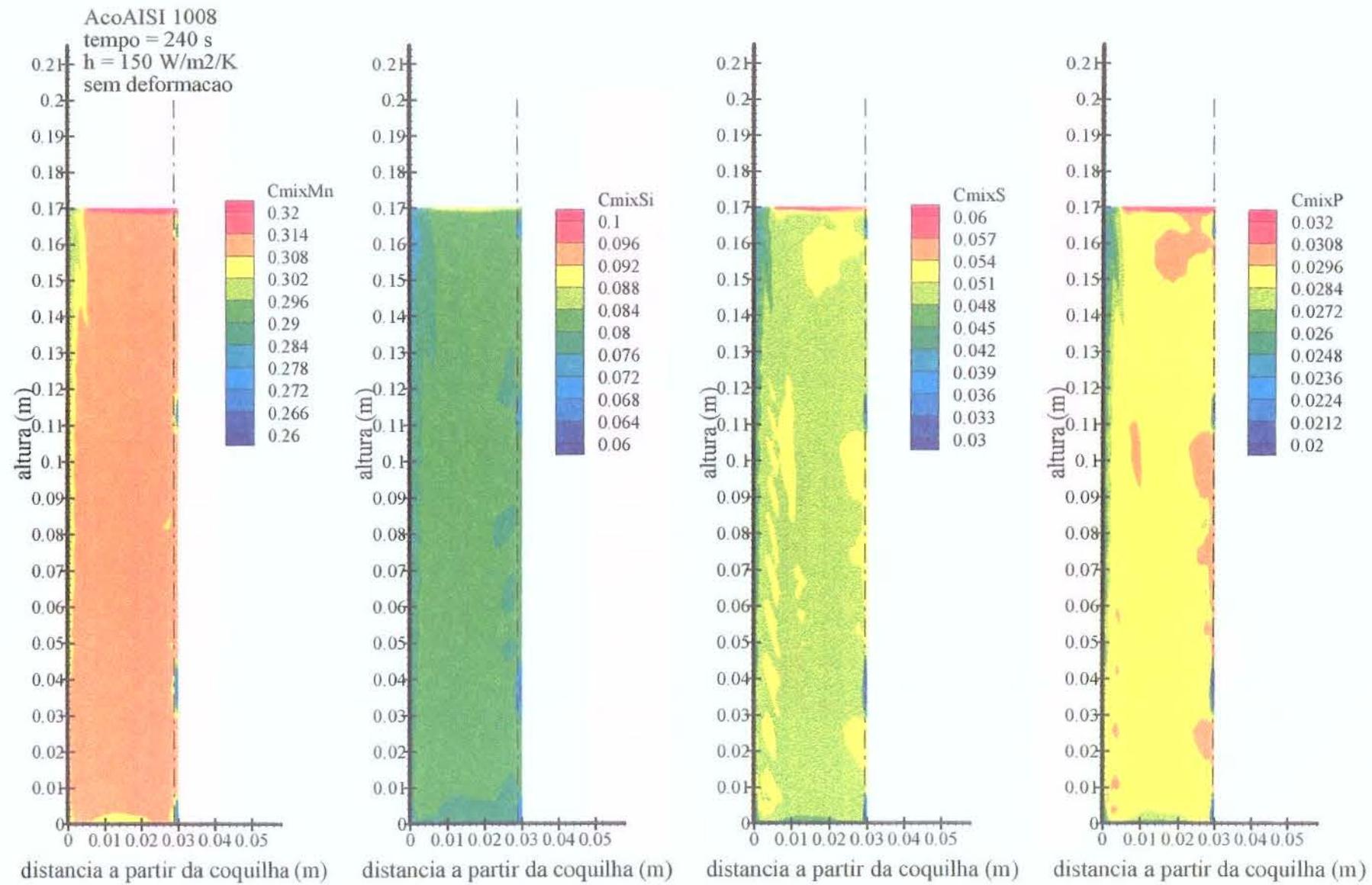


Figura 6.51 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 240 s –  $h = 150 \text{ W/m}^2/\text{K}$ .

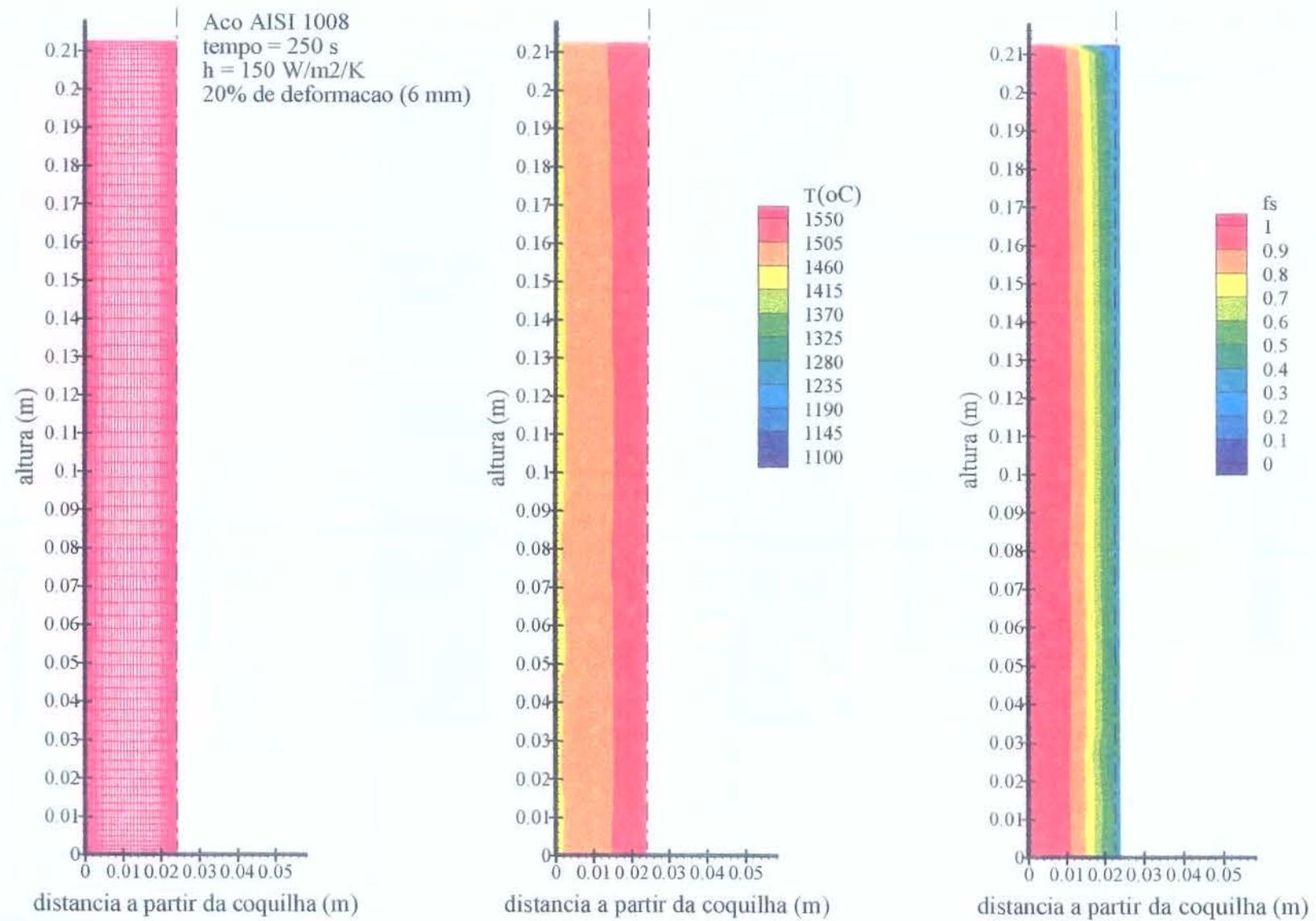


Figura 6.52 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 250 s –  $h = 150 \text{ W/m}^2/\text{K}$ , com deformação.

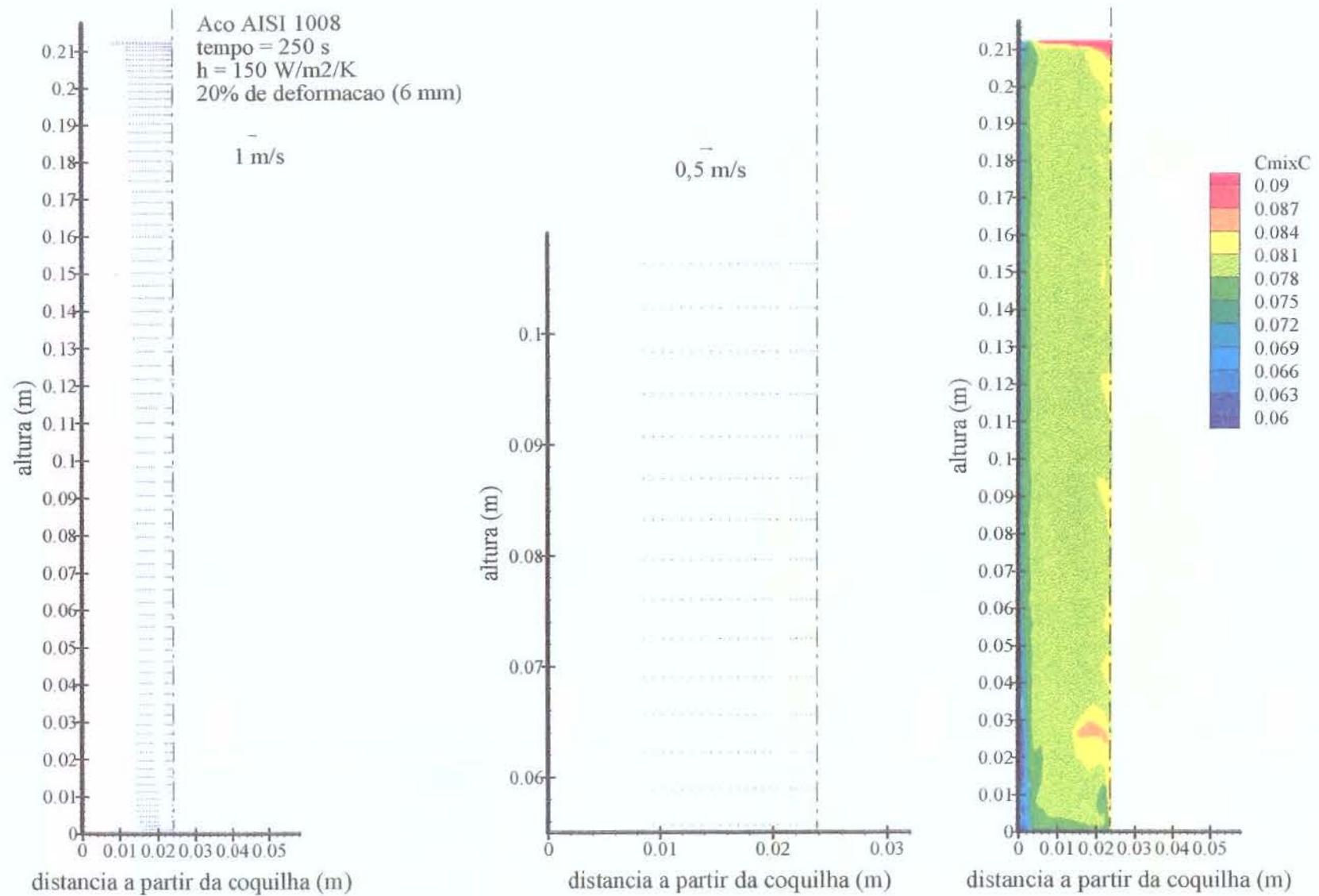


Figura 6.53 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 250 s –  $h = 150, \text{ W/m}^2/\text{K}$ , com deformação.

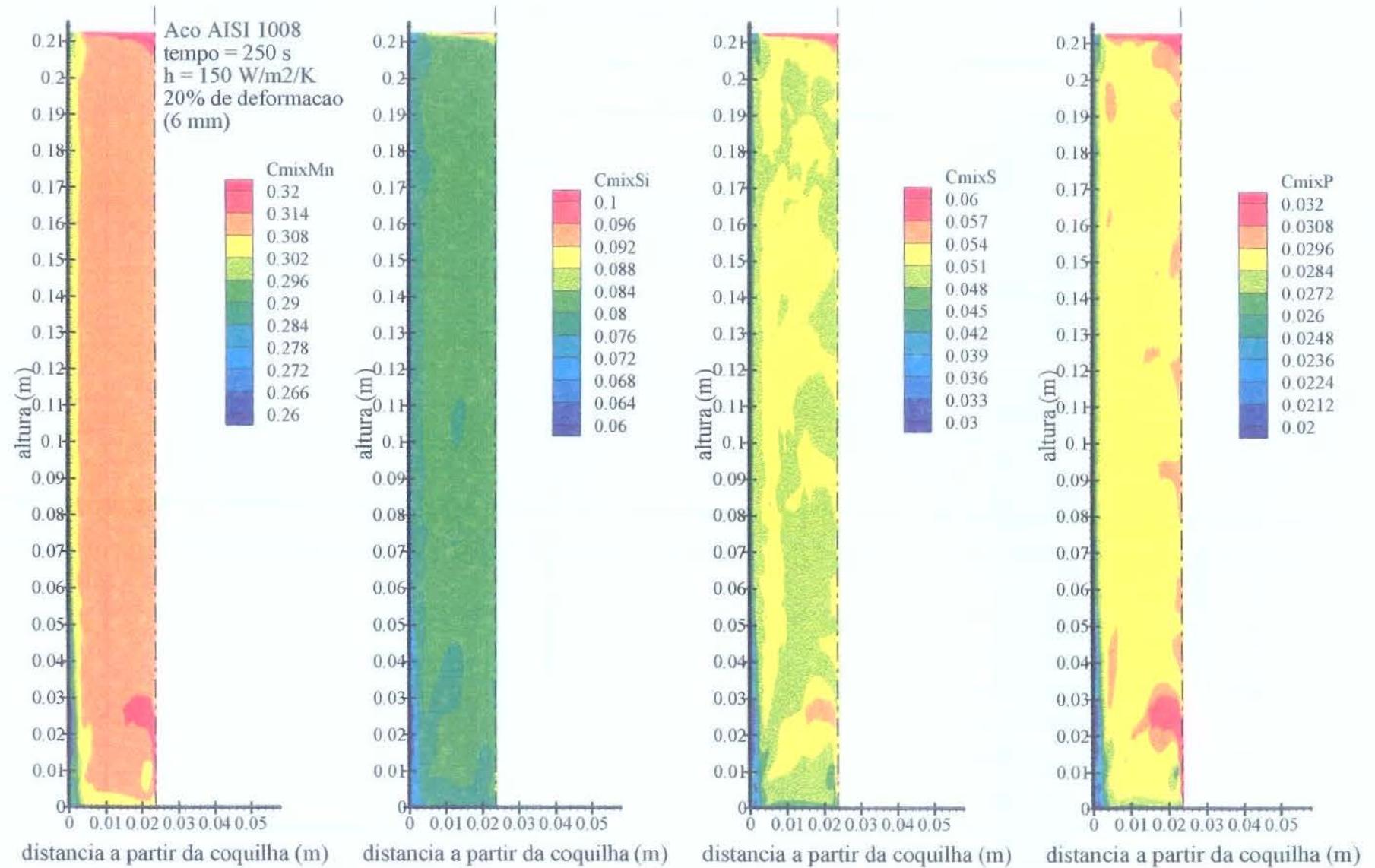


Figura 6.54 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 250 s –  $h = 150 \text{ W/m}^2/\text{K}$ , com deformação.

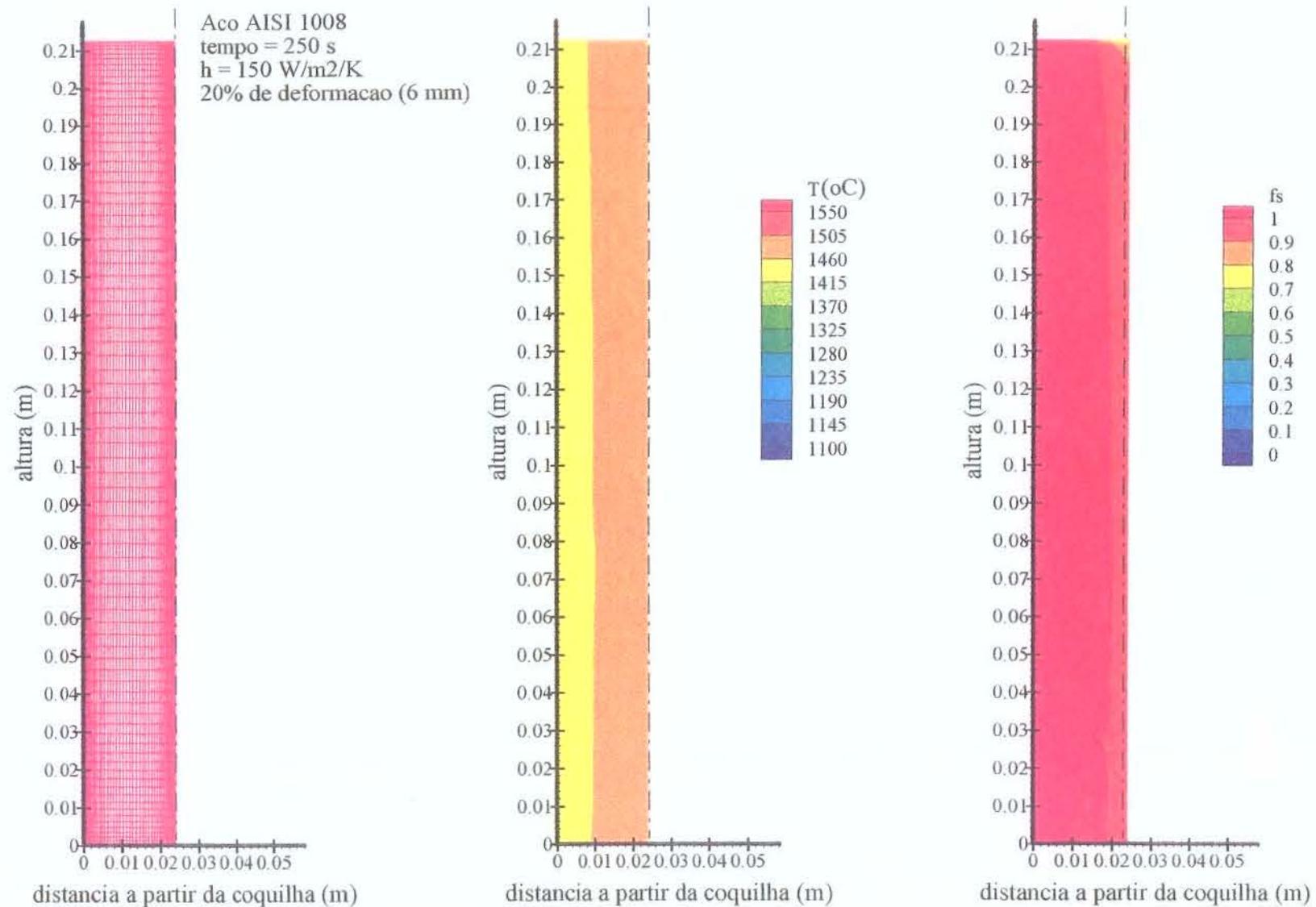


Figura 6.55 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 600 s –  $h = 150 \text{ W/m}^2/\text{K}$ , com deformação.

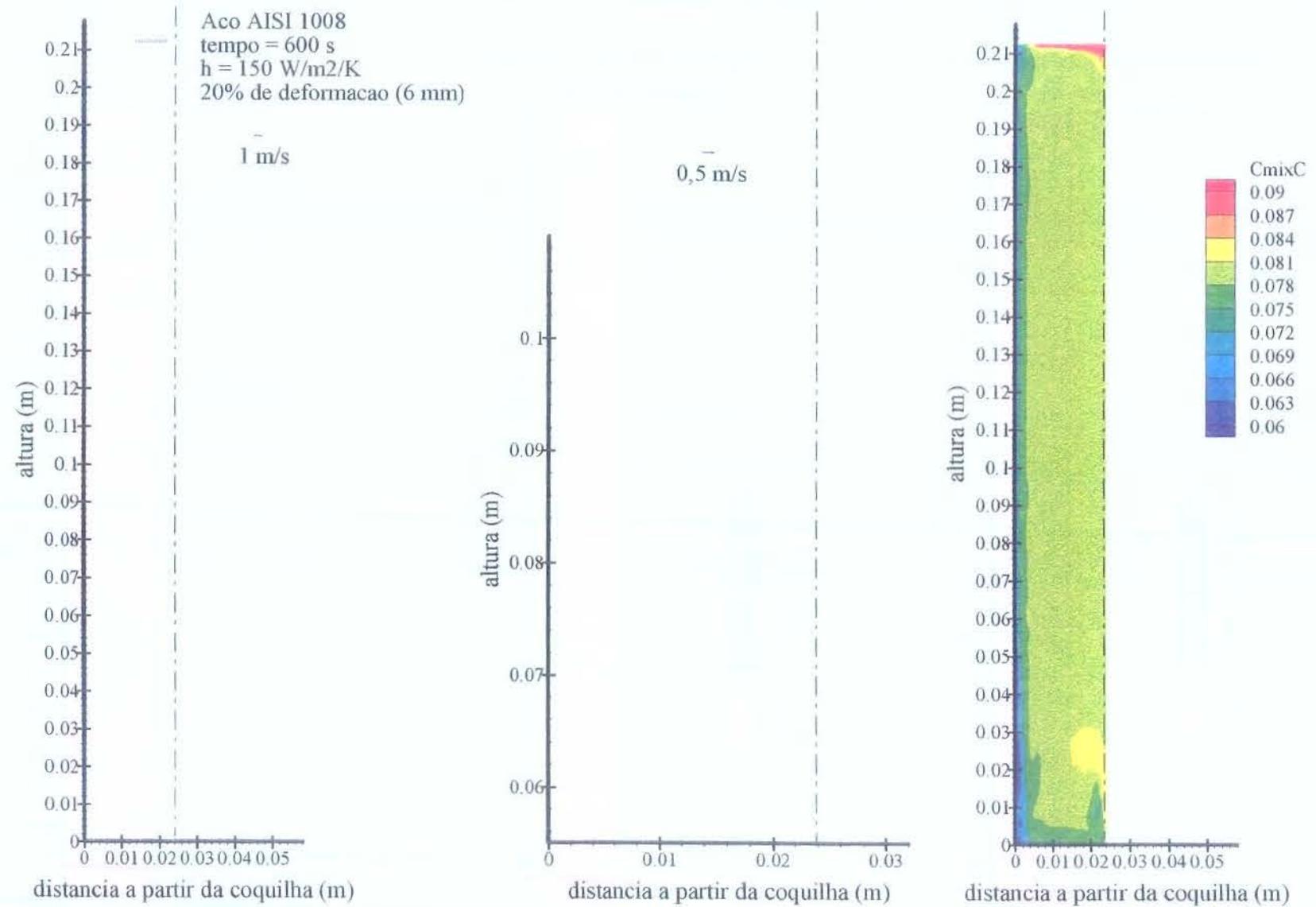


Figura 6.56 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 600 s – h = 150, W/m<sup>2</sup>K. com deformação.

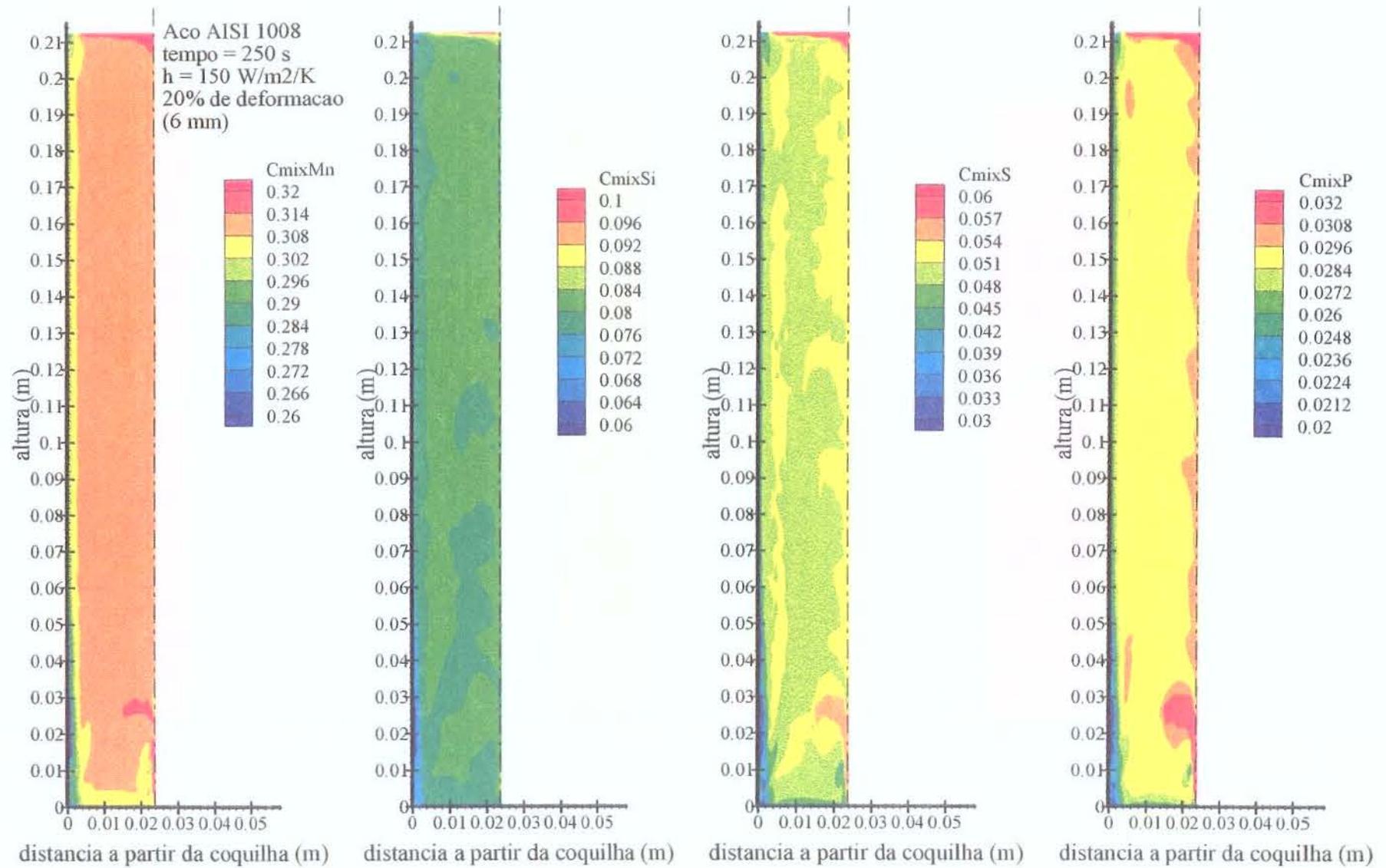


Figura 6.57 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 600 s – h = 150 W/m<sup>2</sup>K, com deformação.

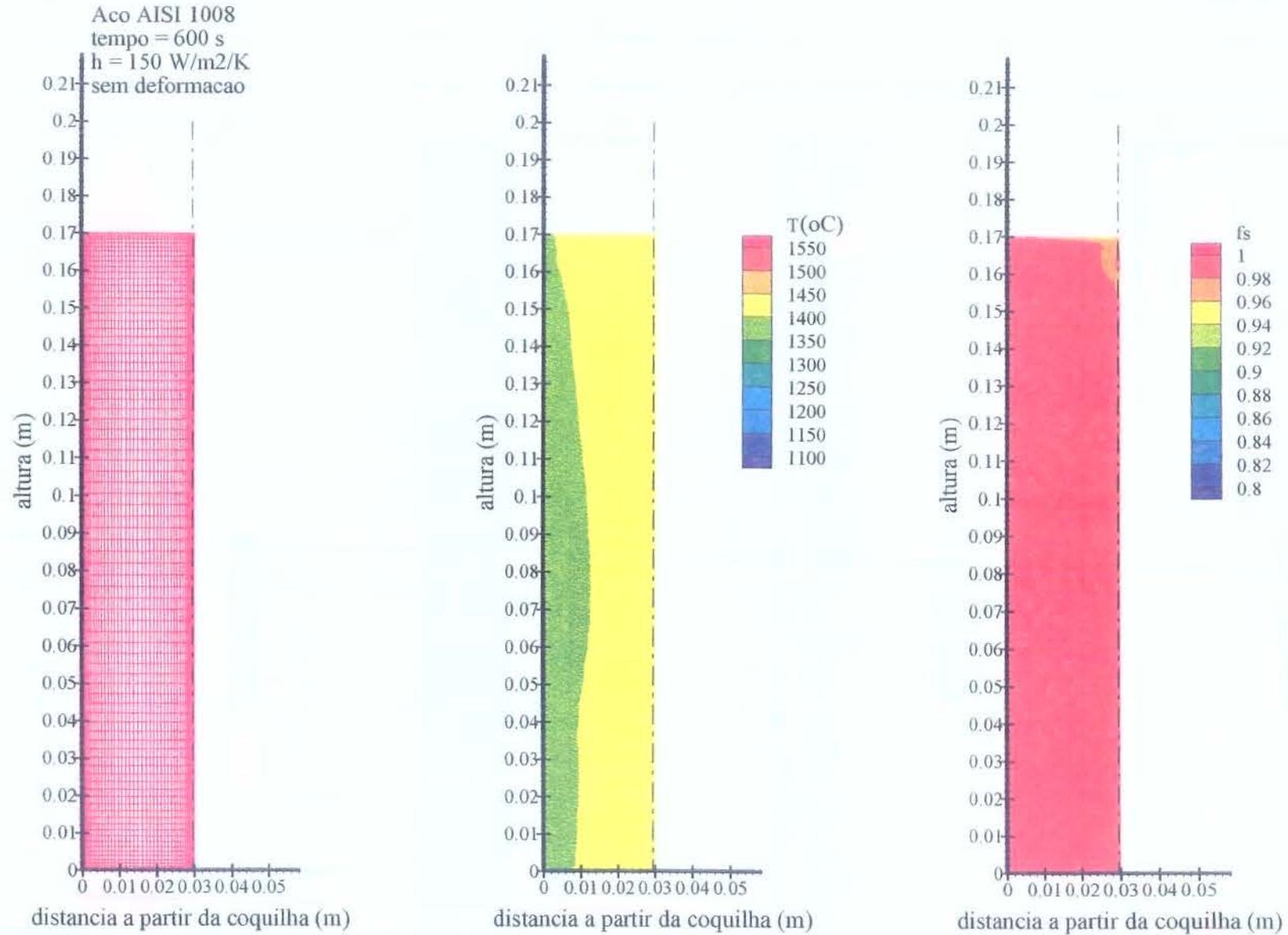


Figura 6.58 – Configuração da malha, campos de distribuição de temperatura e de fração de sólido para o tempo = 600 s – h = 150 w/m<sup>2</sup>K – sem deformação.

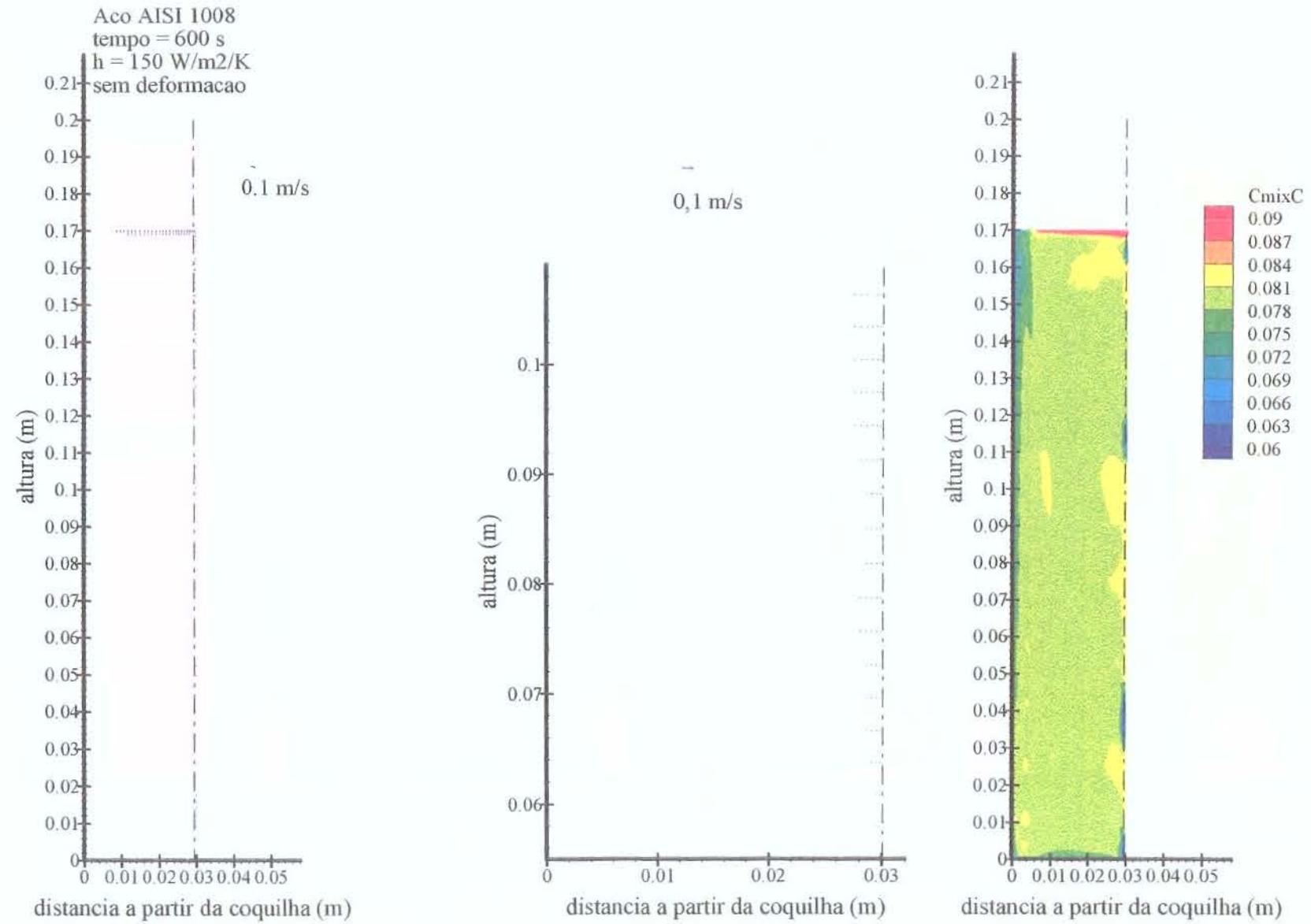


Figura 6.59 – Campos de distribuição de velocidade e de Carbono para a mistura (sólido + líquido) para o tempo = 600 s –  $h = 150 \text{ w/m}^2/\text{K}$ , sem deformação.

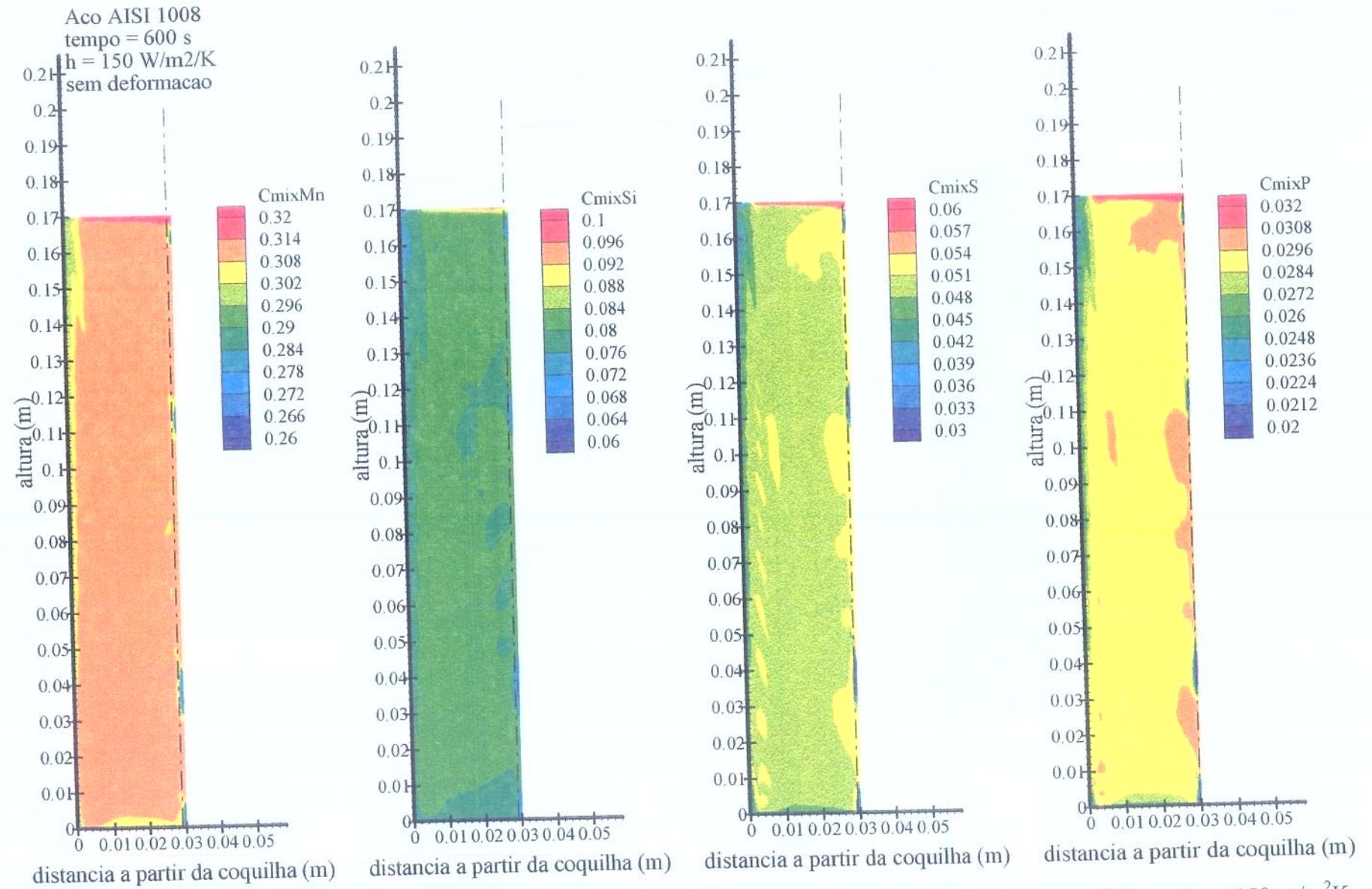


Figura 6.60 – Campos de distribuição de Manganês, Silício, Enxofre e Fósforo para a mistura para o tempo = 600 s – h = 150 w/m<sup>2</sup>K, sem deformação.

Na comparação dos resultados numéricos e experimentais devem ser considerados os fatores que interferem na precisão dos resultados obtidos em ambos os casos. No caso dos dados experimentais, é de fundamental importância a aferição dos termopares utilizados, a calibração do sistema de aquisição de dados, as dimensões dos termopares em relação às dimensões da célula de teste, a precisão das medições do posicionamento dos termopares, a velocidade de aquisição e registro de dados em relação à velocidade de resfriamento do sistema. Por outro lado, a precisão dos resultados numéricos depende da confiabilidade dos dados de propriedades termofísicas disponíveis, do incremento de tempo utilizado e das dimensões e forma da malha empregada. Observa-se ainda que todo o cuidado deve ser tomado na etapa de análise das respostas do programa visando a identificação de instabilidades numéricas, pois, em determinados casos, apesar de se obter a convergência numérica para uma dada situação, pode não existir uma consistência ou coerência de respostas quando são alteradas as condições de contorno e iniciais, indicando a existência de uma falha no modelo matemático ou na implementação do modelo computacional.

O modelo matemático proposto neste trabalho para resolver problemas nos quais exista a ocorrência de forma simultânea dos fenômenos de solidificação e de deformação plástica do material é, considerando-se a extensa revisão da literatura realizada, apresentado pela primeira vez. Apesar do modelo matemático bidimensional proposto ser de caráter geral, ou seja, permitiria a introdução da deformação plástica do domínio, optou-se, por razões de simplicidade e por desconhecimento das equações constitutivas para uma zona pastosa na qual a fração de sólida varia ao longo da seção, a implementação de um modelo onde considerou-se a existência de uma translação rígida do domínio. Os resultados do modelo unidimensional, no qual a deformação do domínio obedece a padrões mais complexos, servem de subsídios para uma posterior implementação de casos onde podem ser empregados modelos mais realistas de deformação plástica no modelo bidimensional.



## CAPÍTULO 7 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA PRÓXIMOS TRABALHOS

O dispositivo desenvolvido e a metodologia adotada na condução dos experimentos mostraram-se adequados para o estudo de alguns dos fenômenos inerentes aos processos que envolvam solidificação e deformação plástica de forma simultânea. Observa-se que o equipamento projetado e construído é original e, apesar de ser relativamente simples, consegue reproduzir determinadas situações típicas de processos reais. Ressalta-se ainda que o aparato experimental tem um potencial de aplicação em termos de variáveis que ainda podem ser testadas, dentre as quais podemos destacar: a velocidade de resfriamento das coquilhas, a velocidade de deformação, a quantidade de deformação aplicada, as espessuras inicial e final do esboço, a quantidade de fração de sólido quando da aplicação da deformação, etc.

Apesar da composição da liga SCN-Acetona utilizada não permitir a verificação da macrossegregação final após a completa solidificação, a mesma permite a observação de fenômenos que estão ocorrendo durante o processo de modo relativamente simples e direto, e não apenas os dados de antes e depois da solidificação como é tradicional nos experimentos para análise de macrossegregação em ligas metálicas.

O modelo matemático unidimensional apresentado mostrou-se adequado para determinar numericamente o perfil de distribuição ao longo da seção do esboço e a variação no tempo das variáveis temperatura, fração de sólido e composição do líquido, antes e depois da aplicação da deformação. A variação da composição do líquido dá uma indicação da tendência de formação de macrossegregação. O modelo unidimensional implementado permitiu analisar a influência da alteração das dimensões do domínio, condição diretamente relacionada com uma aplicação de deformação plástica a um material que esteja solidificando, na alteração das variáveis citadas acima.

O modelo unidimensional permitiu a análise dos efeitos da deformação de modo não uniforme do domínio, apresentando resultados preliminares, necessários na implementação da deformação do domínio para o caso bidimensional, onde, por sua vez, considerou-se a aproximação da existência de uma translação rígida.

Foi proposto um modelo matemático bidimensional baseado no método de volumes ponderados para o caso da ocorrência simultânea de fenômenos de solidificação e de deformação plástica para ligas multicomponentes. Tal modelo foi implementado para uma situação na qual o domínio deformava de modo relativamente simples. O potencial do modelo proposto está na possibilidade de se estudar os efeitos de fenômenos que estão ocorrendo em escala microscópica na determinação de uma gama de variáveis em escala macroscópica.

O fenômeno físico que ocasiona a queda de temperatura na região próxima à parede adiabática é o deslocamento do líquido, que apresenta temperaturas inferiores, oriundo das regiões mais próximas à coquilha de cobre refrigerada e também das regiões inferiores da célula de teste. Tal fenômeno pode ser claramente observado nos gráficos bidimensionais que apresentam os campos de velocidades durante a etapa de aplicação da deformação do domínio. O modelo matemático unidimensional não considera a movimentação de líquido, pois, não resolve as equações de conservação de momento. O mesmo fenômeno é responsável pela redução da macrossegregação central pois, o líquido que é deslocado na direção vertical está enriquecido de soluto.

A aplicação de uma deformação do domínio parece ser um meio efetivo para a redução do defeito de macrossegregação central. O modelo matemático apresentado neste trabalho pode ser utilizado para estudar e quantificar quais seriam os parâmetros de processo que levariam a uma redução mais efetiva do defeito. Como parâmetros de processo pode-se relacionar: fração de sólido no instante da aplicação da deformação, perfil de temperatura ao longo da seção, velocidade de aplicação da deformação, grau de deformação a ser aplicada, composição do material (inclusive para ligas multicomponentes). Além disso, podem ser testados diferentes modelos para descrever a difusão de espécies em escala microscópica (modelos de microsegregação).

## 7.2 - Sugestões para Futuros Trabalhos

I - Comparação dos padrões de convecção visualizados com a utilização da câmera de vídeo com aqueles obtidos nas simulações utilizando-se o código bidimensional desenvolvido. Embora estes dados tenham sido registrados durante a realização dos experimentos com compostos orgânicos, os mesmos não foram utilizados para a comparação de forma qualitativa e/ou quantitativa da distribuição de velocidade no metal líquido. Durante a solidificação havia o desprendimento de uma pequena quantidade de partículas da zona pastosa. Através da observação da trajetória descrita por estas partículas, era possível inferir o fluxo de metal líquido e assim o padrão de convecção na região que se apresentava transparente durante a etapa de resfriamento e deformação. Utilizando-se ainda as imagens gravadas durante a realização do experimento, pode-se medir a velocidade de deslocamento de uma partícula, numa determinada região e instante de tempo. O dispositivo de filmagem dos experimentos, permitia uma ampliação das imagens de 2 a 10 vezes, aumentando assim a precisão das medições.

II – Simular computacionalmente os efeitos de variações nos parâmetros velocidade e quantidade de deformação na alteração dos padrões de macrossegregação para os experimentos com o composto SCN-acetona. Algumas experiências já foram realizadas e já se dispõe de dados experimentais que permitem a comparação e análise e das variáveis citadas.

III - Realização de experimentos com aços utilizando-se o simulador projetado e construído, com efetiva participação do autor do presente trabalho (Gentile et al.-1998) e apresentado em linhas gerais no apêndice B. O projeto de pesquisa no qual está inserido o referido equipamento desenvolvido consiste das seguintes etapas:

1. Projeto, dimensionamento e construção de um simulador estático para o lingotamento contínuo de placas finas, dotado de um sistema de acionamento para redução de espessura durante a solidificação e de instrumentação para controle de temperatura, de deslocamento e de força aplicada.
2. Elaboração e implementação computacional do modelo numérico para determinação de parâmetros térmicos e microestruturais.
3. Realização das experiências monitoradas consistindo das seguintes etapas:
  - obtenção das ligas em fornos à indução;
  - vazamento no simulador com e sem redução de espessura;

- laminação direta ou resfriamento seguido de reaquecimento e laminação;
  - caracterização química, física e microestrutural.
4. Comparação dos parâmetros térmicos e microestruturais obtidos nas experiências com os mesmos parâmetros característicos de plantas industriais e com os resultados da simulação numérica desenvolvida.
  5. Utilizando os resultados obtidos e fazendo uso da habilidade da simulação numérica para simular em diferentes escalas dimensionais, determinar as características básicas a serem obedecidas no projeto e operação de uma planta industrial para lingotamento contínuo de placas finas de aço e a subsequente laminação.

III - A realização de experimentos para a determinação de equações constitutivas para um semi-sólido. Conforme é discutido na revisão apresentada no apêndice C, vários modelos foram propostos para descrever a deformação de um corpo constituído de uma mistura de sólido e líquido. Porém, os modelos consideram que a fração de sólido e a morfologia da microestrutura são uniformes durante a etapa de aplicação da deformação. Observa-se que para o caso do SCN são disponíveis na literatura determinadas propriedades mecânicas para a fase sólida.

## APÊNDICE A - PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS E PARÂMETROS RELATIVOS ÀS SIMULAÇÕES REALIZADAS PARA O AÇO AISI 1008

As propriedades termofísicas relacionadas abaixo foram obtidas a partir dos seguintes artigos: Pehlke et al.-1982, Schneider e Beckermann-1995.

Composição Química (% em peso): C = 0,08; Mn = 0,310; Si = 0,080; S = 0,050; P = 0,029.

Elemento	Modelo de microsegregação *	Teor inicial (% em peso)	Inclinação da linha <i>liquidus</i> (°C/% em peso)	Coefficiente de partição (% em peso/% em peso)	Coefficiente de expansão de soluto (1/% em peso)	Coefficiente de difusão no líquido (m <sup>2</sup> /s)	Coefficiente de difusão no sólido (m <sup>2</sup> /s)
C	0	0,080	-78,0	0,340	$1,10 \times 10^{-2}$	$2,0 \times 10^{-9}$	$5,58 \times 10^{-10}$
Mn	2	0,310;	-3,32	0,750	$1,92 \times 10^{-2}$	$2,0 \times 10^{-9}$	$1,20 \times 10^{-13}$
Si	2	0,080	-17,1	0,590	$1,19 \times 10^{-2}$	$2,0 \times 10^{-9}$	$5,63 \times 10^{-13}$
S	2	0,050	-30,4	0,024	$1,23 \times 10^{-2}$	$2,0 \times 10^{-9}$	$3,28 \times 10^{-13}$
P	2	0,029	-27,1	0,090	$1,15 \times 10^{-2}$	$2,0 \times 10^{-9}$	$2,41 \times 10^{-12}$

\*Modelos de microsegregação que podem ser utilizados:

0 – regra da alavanca

1 - Scheil

2 - back diffusion

Temperatura inicial do metal = 1552,0 °C

Temperatura ambiente = 25,0 °C

Espaçamento interdendrítico primário inicial = 350,0 μm

Espaçamento interdendrítico secundário inicial = 50,0 μm

Calor específico para o líquido = 790,0 J/kg/K

Calor específico para o sólido = 707,0 J/kg/K

Calor latente de fusão =  $270,0 \times 10^3$  J/kg

Massa específica = 7200,0 kg/m<sup>3</sup>

Condutibilidade térmica para o líquido = 35,0 W/m/K

Condutibilidade térmica para o sólido = 30,0 W/m/K

Viscosidade para o líquido =  $6,0 \times 10^{-4}$  kg/m/s

## APÊNDICE B - PROJETO E CONSTRUÇÃO DE UM SIMULADOR DE LINGOTAMENTO CONTÍNUO DE PLACAS FINAS

Na Figura B.1 apresenta-se um desenho esquemático em perspectiva do simulador. Na Figura B.2, uma vista superior do equipamento, são mostrados os diversos componentes do mesmo. Algumas dimensões básicas do equipamento são apresentadas na vista frontal parcial da Figura B.3. Observa-se que o equipamento foi projetado de modo a poder ser utilizado com duas diferentes larguras de amostra (80 ou 160 mm), conforme a espessura da mesma e de acordo com as condições de resfriamento impostas.

Em linhas gerais, o simulador pode ser descrito como sendo constituído de uma câmara para solidificação da liga metálica (14), uma parede de molde metálico fixa (20), refrigerada com circulação de água, de uma parede de molde metálico móvel também refrigerada (17), de uma célula de carga para medição da força necessária para a deformação da liga durante a solidificação (15), de um cilindro hidráulico responsável pela aplicação da força de deformação (18) e de um sistema de guias para direcionamento do movimento (19). As paredes laterais (21) do molde são constituídas de material refratário de modo que o resfriamento e a solidificação da amostra ocorra preferencialmente pelas superfícies em contato com os moldes refrigerados. Para evitar problemas relativos ao vazamento de metal líquido nas regiões de contato da parede móvel com as laterais de material refratário, estão previstas peças metálicas também refrigeradas nestas regiões. Deste modo, se porventura ocorrer o fluxo de metal, o mesmo solidificará imediatamente devido ao contato com estas peças.

O simulador será montado sobre uma estrutura metálica (22) preenchida com areia de modo a evitar problemas devido ao fluxo de metal líquido decorrente de uma possível falha de processo. O fundo do molde (26) será construído de tal forma a possibilitar a abertura do mesmo durante a solidificação do metal. O metal líquido será depositado em uma caixa de

areia posicionada sob o simulador. Desta forma, é possível o exame da morfologia da zona pastosa durante o processo de solidificação/deformação.

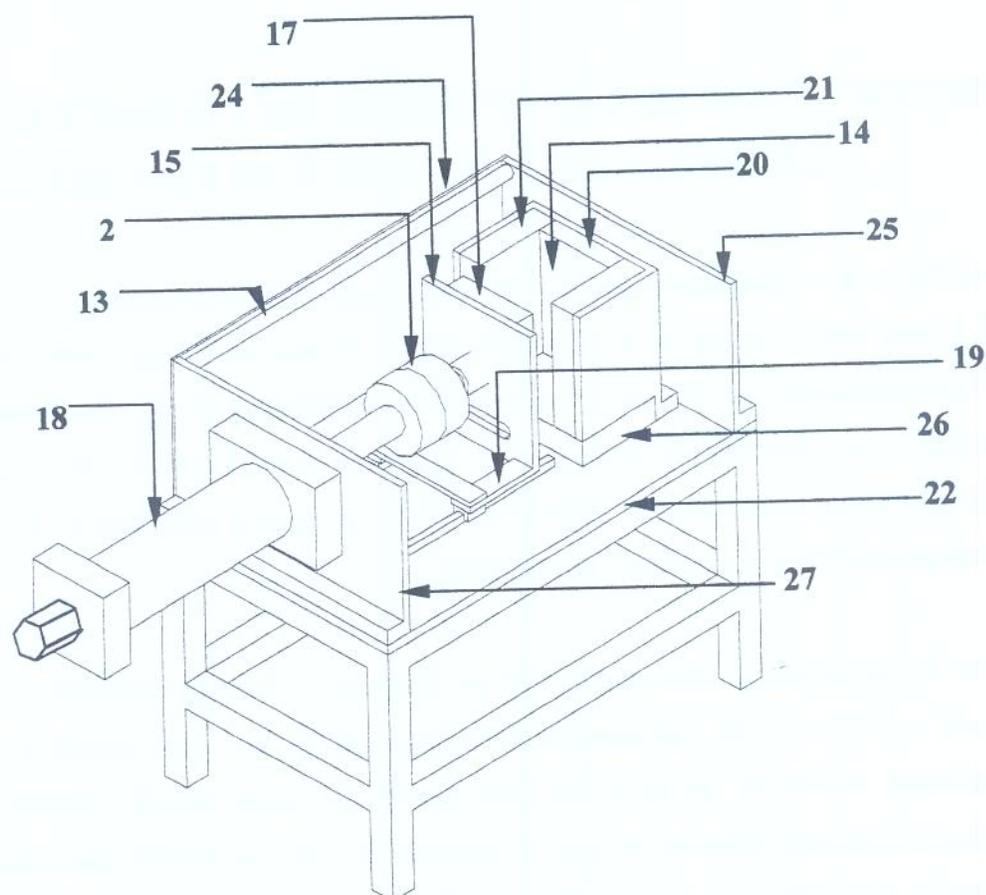


Figura B.1 – Desenho esquemático do equipamento de simulação do lingotamento contínuo de placas finas.

O atuador hidráulico (18) movimentará a parede móvel a uma velocidades e deslocamentos controlados. Uma célula de carga (15) posicionada entre o atuador hidráulico e a estrutura de sustentação da parede móvel (24) permitirá a obtenção de dados relativos a resistência à compressão de uma estrutura “semi-sólida”. Estes dados são fundamentais como dados de entrada do modelo numérico ou para a aferição do mesmo. Os termopares (1-13) coletarão dados a serem utilizados na determinação do coeficientes de transferência de calor nas interfaces metal/molde, como condições de contorno para resolução do modelo numérico e como dados para comparação dos perfis de temperatura no sistema metal e molde.

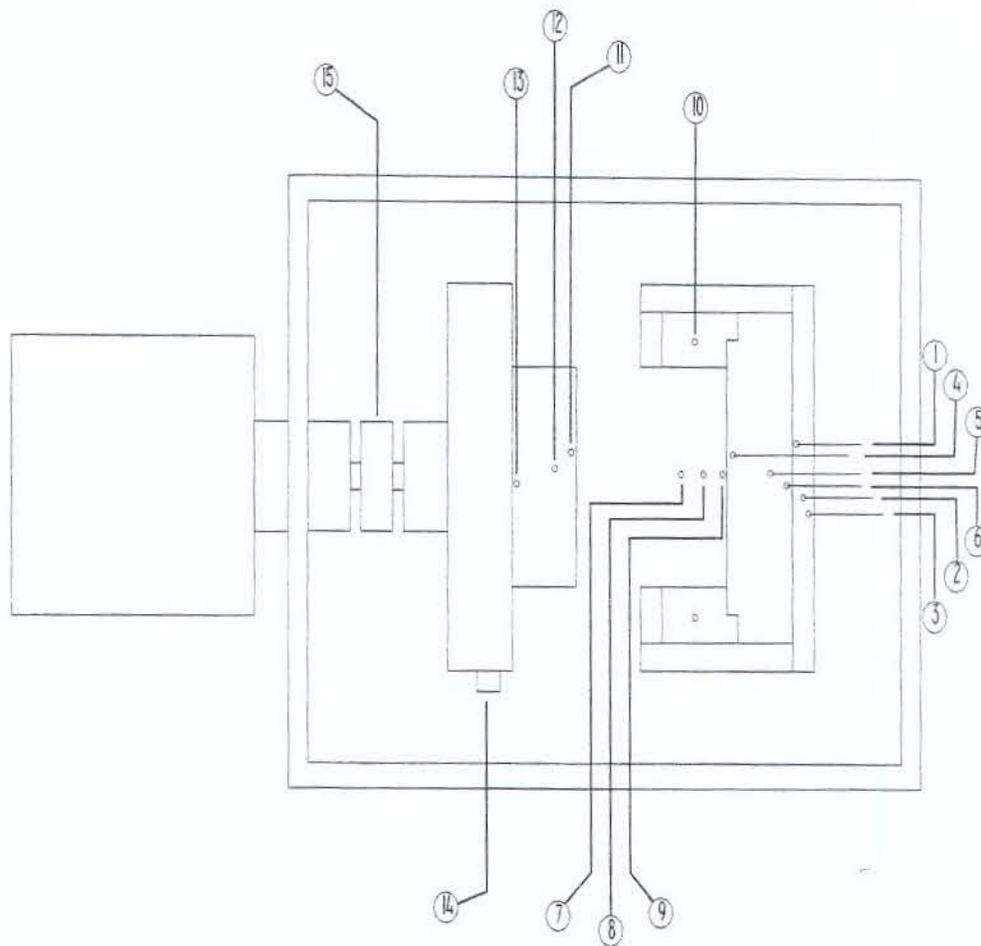


Figura B.2 – Vista superior do simulador de lingotamento contínuo de placas finas.

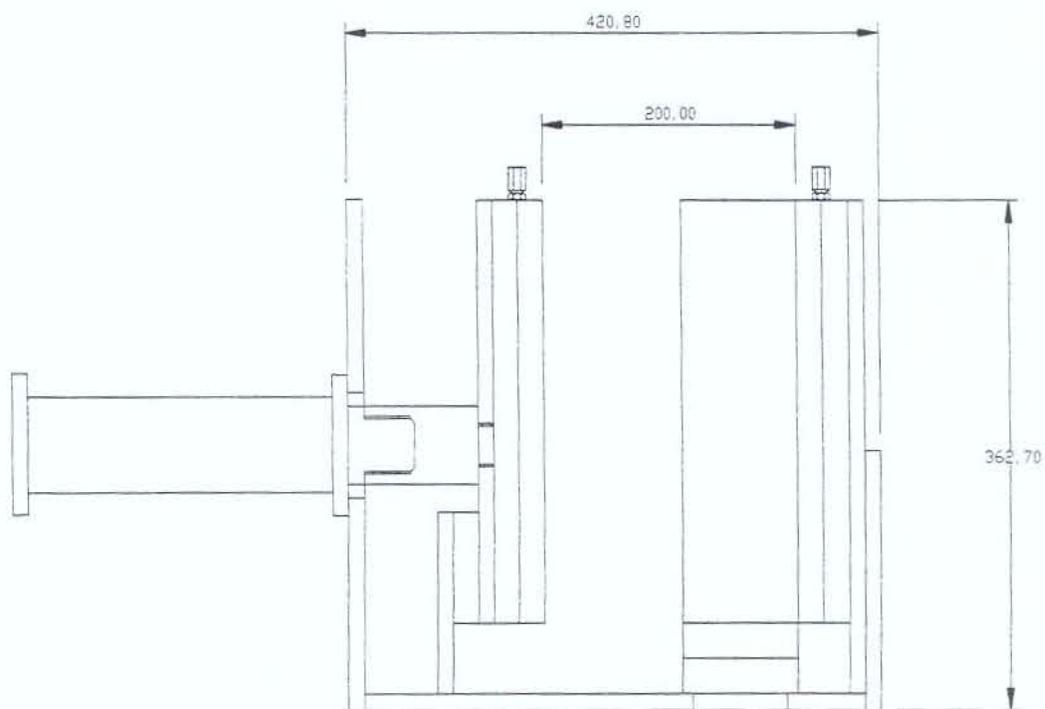


Figura B.3 – Dimensões básicas do simulador de lingotamento contínuo de placas finas.

A taxa de resfriamento imposta nas paredes metálicas do molde será controlada através de válvulas posicionadas na tubulação de alimentação de água do sistema. Destaca-se que a variação da velocidade de resfriamento durante a realização dos experimentos permitirá a simulação física de condições de processo que podem resultar em trincas de lingotamento contínuo.

O simulador projetado permite a realização de ensaios estáticos e dinâmicos. O termo ensaio estático designa, no presente texto, aqueles ensaios realizados sem a movimentação da denominada parede móvel do simulador. Quando da aplicação de deformação através da movimentação da referida peça, o ensaio é considerado dinâmico.

O simulador foi projetado para ser o mais flexível possível em relação às dimensões da placa fundida, à liga a ser estudada, às condições de extração de calor, à quantidade de redução durante a solidificação e a velocidade de aplicação da redução. Obviamente, fatores operacionais e de custos limitam essa flexibilidade. Sendo assim, pode-se comparar resultados de placas fundidas de espessuras reduzidas com placas de espessuras maiores, confrontar resultados de placas fundidas com diferentes reduções e em diferentes condições de solidificação.

Com o equipamento será possível o estudo dos fenômenos de transferência de calor dentro do metal e entre metal e molde, dos efeitos da redução com núcleo líquido sobre a segregação no centro da placa fundida bem como das cargas necessárias para essa redução.

A Figura B.4 mostra o equipamento de simulação do lingotamento contínuo de placas finas já construído.

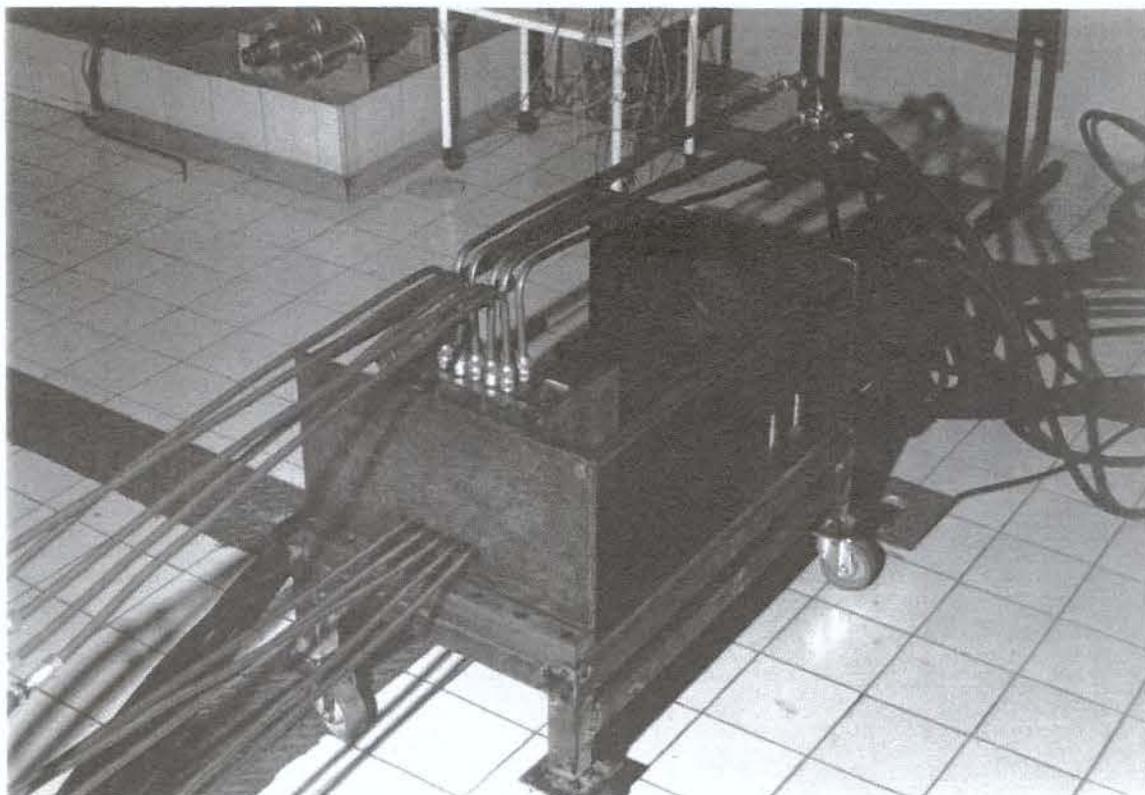


Figura B.4 - Simulador de lingotamento contínuo de placas finas.



## APÊNDICE C - MODELING OF MUSHY ZONE DEFORMATION AT MACROSCOPIC SCALE

### C1 – Introduction

The selection of constitutive equations to describe the relation between stress and strain during the solidification (mushy zone) of metallic alloys depend on the parameters such as temperature, amount of solid fraction, microstructure (columnar or equiaxed, dendritic or globulitic), shear rate, etc. First of all, it is necessary to distinguish between moving and fixed solid structures (Beckermann e Viskanta-1993). An alloy solidifying under a columnar structure may be consider as a fixed structure or packed bed regime and can be treated as a porous media. However, for the case of equiaxed structure, there is a transition between moving and fixed solid structures. It happens because with increasing solid volume fraction, the equiaxed crystals will interact, pack, and eventually form a continuous solid structure. Hence, the material as a whole will behave initially as a dispersed solid phase within a liquid phase (free particle regime) and as porous media for higher solid fraction. Also important is the kind of equiaxed structure. Nguyen et al.-1994 analyzed the experimental results obtained by some authors for alloys in the semi-solid state observed that in the case of solid phase with globular structure, the material can be deformed under very low stresses, and for the dendritic case relatively high stresses are required.

An important parameter to characterize the thermo-mechanical behavior of the mushy zone is the coherency solid fraction  $\phi_s^c$  or the coherency temperature  $T^c$ . The concept of coherency solid fraction can be defined as the fraction of solid at which the solid phase forms a cohesive network, and at which the network begins to develop some strength. This fraction divides the solidification range in two main parts, each of them typical of a specific rheological behavior. The value of this parameter depends on dendrite size and morphology (Dahle e Arnberg-1996). For the equiaxed structures with dendritic morphology, a rigid

structure is formed once the dendrite arms interlock and the dendrite tip movement has ceased, such that the entire volume can be considered as a porous media. The value of coherency solid fraction depends on the solidification conditions so that the literature presents a large interval of values. For example, a number of studies shows it to be in the range of about 0.1 to 0.2 (Flemings-1991) and occasionally high as 0.1 to 0.5 (Dahle e Arnberg-1996, Rappaz and Thevoz-1987). For granular (or globulitic) a value of approximately 0.6 has been reported for  $\phi_s^c$  (Murakami et al.-1984). Some experiments have shown that the shear strength increases with increasing strain rate and/or with increasing grain size. For columnar structure the term coherency temperature is more frequent (El-Bealy and Fredriksson-1992, El-Bealy-1995).

Below the coherency temperature there is another characteristic parameter: the ductility threshold. Above this limit and up to the coherency temperature (known as the brittleness interval) the solid skeleton is rigid but can not sustain significant strain (Hernandez-1995).

## C2 - For low to medium solid fraction ( $\phi_s < 0.6$ to $0.7$ )

Real fluids are both compressible and viscous. To facilitate the discussion on their stress-strain relationships, it is convenient to express the microscopic stress,  $\sigma$ , in the form (Bear e Bachmat-1991):

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p\delta_{ij} \quad \sigma = \tau - pl \quad , \quad (C1)$$

where the deviator  $\tau_{ij}$  is the viscous stress tensor,  $p = -\frac{1}{3}(\sigma_{ii} - \tau_{ii}) \equiv -\frac{1}{3}\sum_i(\sigma_{ii} - \tau_{ii})$  is the pressure and  $\delta_{ij}$  is the Kronecker delta. In the above equation, the pressure  $p$  is considered positive for compression, while  $\tau_{ij}$  and  $\sigma_{ij}$  are considered positive for tension. The viscous stress tensor represents the diffusive flux of linear momentum across a material surface element, which is due to the velocity variation across the element. It acts as a frictional force between adjacent layers of the fluid, per unit area. A typical component of the velocity gradient, relevant to  $\tau_{ij}$ , is  $\partial v_i / \partial x_j$ . Therefore, it is generally assumed that for fluids,

$$\tau_{ij} = \tau_{ij}(\dot{\epsilon}_{ij}) \quad . \quad (C2)$$

For a non-Newtonian viscous incompressible fluid,  $\tau_{ij}$  is given by (Zavaliangos e Lawley-1995):

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\eta(\mathbf{J}_2, \mathbf{J}_3)\dot{\epsilon}_{ij} + B(\mathbf{J}_2, \mathbf{J}_3)\dot{\epsilon}_{ik}\dot{\epsilon}_{kj} \quad , \quad (C3)$$

where  $\eta$  and  $B$  are functions of the second and third invariants ( $\mathbf{J}_2$  and  $\mathbf{J}_3$ ), because the first invariant is zero for incompressible materials. The above equation can not be used for flow where the normal stress difference is important. This equation is often used when the flow is dominated by a variable viscosity. In this case the function  $B$  is usually set equal to zero and the viscosity is taken as a function of the second invariant of  $\dot{\epsilon}_{ij}$  only.

Zavaliangos and Lawley-1995 suggested that, in order to include structure effects, that the parameter  $\eta$  of equation C3 should be a function of the internal variables  $\lambda_i$  and the temperature  $T$ ,

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\eta(\mathbf{J}_2, T, \lambda_i)\dot{\epsilon}_{ij} \quad . \quad (C4)$$

Alexandrou-1996 proposed a new constitutive equation for a semi-solid alloy. The author considered that the material's behavior of semi-solid alloys could be expressed through a continuous shear thinning/thickening Bingham fluid constitutive relation. According to the proposed theory, the stress tensor was given by:

$$\sigma = \left\{ K[\mathbf{\Pi}_{\dot{\epsilon}}/2]^{(n-1)/2} + \frac{\tau_0[1 - \exp(-m|\sqrt{\mathbf{\Pi}_{\dot{\epsilon}}/2}|)]}{|\sqrt{\mathbf{\Pi}_{\dot{\epsilon}}/2}|} \right\} \dot{\epsilon} \quad , \quad (C5)$$

where:

$\dot{\epsilon}$  is the rate of deformation tensor,

$\tau_0$  is the characteristic shear stress of the Bingham fluid,

$m$  is the exponent controlling the exponential variation of the constitutive relation,

$\mathbb{II}_{\dot{\epsilon}}$  is the second invariant of the rate of deformation tensor,

$n$  is the power-law exponent.

The proposed constitutive relation has four independent parameters:  $\tau_0$ ,  $m$ ,  $\mathbb{II}_{\dot{\epsilon}}$  and  $n$ .

The author stated that the values of these parameters can be determined using the available experimental results.

### C3 - For high solid fraction ( $\phi_s > 0.6$ to $0.7$ )

Consider a given REV (representative element volume) of a porous media (Figure 3.1). For the analysis of the forces acting on the phases  $k$  within the REV we need to account, besides the body forces, the effect on the  $k$ -phases of the mixture outside the given REV.

In the case of flow through a deformable porous media the forces associated with the flow deform the medium which in turn affects the flow (Barry and Aldis-1990, Preziosi et al.-1996). The fluid is being displaced and the porous medium is undergoing finite deformation. The competition among the stress in the solid element, pressure in the liquid element and inertial and body forces will determine the evolution of the system (Preziosi et al.-1996, Parker-1987).

Problems involving saturated deformable porous media can be found in various engineering fields as soil mechanics (Vardoulakis-1996A, Vardoulakis-1996B, Thomas e He-1995, Biot-1941), geothermal reservoirs (Lewis e Karahanoglu-1981, Lewis et al.-1986B, Ewing-1991), soft biological tissue (Barry and Aldis-1990, Huyghe and Van Campen-1995A, Huyghe and Van Campen-1995B), magma migration (Spiegelman-1993A, Spiegelman-1993B, McKenzie-1984, Richter and McKenzie-1984), composites infiltration (Preziosi et al.-1996, Sommer and Mortensen-1996), consolidation of powdered metals and semi-solid metallic alloys. A common characteristic of the mathematical models applied to describe the deformation problem is consider that the solid and liquid phases are incompressible at

microscopic scale, but the sample is still compressible at macroscopic scale due to the deformation of the solid skeleton (Bowen-1982).

The first work on flow in deformable porous material was accomplished by Terzaghi in 1925 for one-dimensional consolidation. Biot-1941 and Biot-1955 proposed a theory for three-dimensional consolidation. Terzaghi performed experiments to evaluate the deformation of saturated soil subjected to directed load and hydrostatic load. The author observed that the variation of water pressure (hydrostatic load) produced neither a measurable deformation nor a measurable increase of the shearing resistance. However, with the directed load the resulting deformation was very appreciable. These results led Terzaghi to formulate the concept of effective stress ( $\sigma'$ ) or extra stress, i.e., the stress that really produces deformation should be the total stress applied ( $\sigma$ ) subtracted of the pore fluid pressure ( $p_l$ ), and the last one does not have any influence upon the strength of the porous solid (de Boer and Ehlers-1990). The applied normal stress is reduced due to the presence of existing water pressure.

When the shear stress of the liquid phase can be neglected, the following equation can be written at macroscopic level:

$$\langle \sigma \rangle = (1-n) \langle \sigma_s \rangle^s - n \langle p_l \rangle^l \mathbf{I} \quad , \quad (C6)$$

$$\langle \sigma \rangle = (1-n) \left\{ \langle \sigma_s \rangle^s + \langle p_l \rangle^l \mathbf{I} \right\} - (1-n) \langle p_l \rangle^l \mathbf{I} - n \langle p_l \rangle^l \mathbf{I} \quad , \quad (C7)$$

or

$$\langle \sigma \rangle = \langle \sigma_s' \rangle^s - \langle p_l \rangle^l \mathbf{I} \quad , \quad (C8)$$

where the effective stress is given by

$$\langle \sigma_s' \rangle = (1-n) \left\{ \langle \sigma_s \rangle^s + \langle p_l \rangle^l \mathbf{I} \right\} . \quad (C9)$$

It will be useful to note that it has been assumed that the contact area between the solid grains is negligibly small, so that the pore fluid and associated stress almost completely surrounds each grain (Prévost-1980). The deformation is produced mainly by rearrangement of grains, with localized slipping and rolling, implying that the deformation is governed by the transmission of localized normal and shear forces at the contact points. These forces are not affected by the pressure in the liquid. Hence, it is assumed that a pure (external and internal) fluid pressure  $p_l$  causes only a uniform volumetric strain by compressing the grains (intragranular stress) and the major deformation of the porous skeleton is governed by the effective stress  $\sigma'$  (also called intergranular stress). The shear stress required for deformation increases with the prevailing compressive force or hydrostatic pressure (Sigworth-1996).

Note that the separation of the total stress into the effective stress and the weighted (with the solid volume fraction) liquid pressure is founded on the basic assumption of incompressibility of both constituents, i.e., liquid and solid materials (de Boer and Ehlers-1990). This is a very reasonable assumption since liquids are in general incompressible and since the compressibility of the solid material can be neglected in comparison with the compressibility of the whole porous body.

The process of transient fluid flow through a porous medium that deforms with time is called consolidation. In consolidation theory (and in several fields of application of deformable porous media models), the inertia of the solid constituent is often neglected. This approximation is equivalent to saying that the stress in the solid and the pressure exerted by the liquid balance each other, setting each solid element in equilibrium (in this analysis the gravity is neglected).

The equation for modeling the problem can be derived considering two situations: undrained and drained liquid flow. The undrained conditions means that the liquid is not allowed to be extracted from the solid skeleton or sucked into the solid skeleton during the deformation (Martin et al.-1997). For the drained deformation, the liquid phase is allowed to flow out of the solid matrix. In the case of undrained liquid, the solid and the liquid velocities are assumed to be equal and the relative discharge of the fluid is assumed to be equal zero (Vardoulakis-1996A). For the drained conditions the relative discharge of the fluid is different of zero, neglecting convective terms. The solid phase can be assumed (at macroscopic scale)

as an elastic phase (Biot-1941), elastoplastic with undrained conditions and not full saturated (Vardoulakis-1996A).

If the mixture theory approach is applied, such as the assumptions being considered only at the macroscale, the form of the constitutive equation then can be chosen to fit experimental data (Murad et al.-1995). The literature presents some models considering different deformation behavior of the solid skeleton as: elastic solid with variable solid fraction (Bowen-1982), piecewise linear non-viscous solid (Prévost-1980), elastic perfectly plastic (de Boer and Kowalski-1983, Ehlers-1989), non-isothermal soil elastic (Vaziri-1996), non-isothermal plastic (Coussy-1989), elastic-plastic (Ehlers-1992, Ehlers-1991) are some examples. In all these cases the solid is granular. The volume fraction concept is applied to account for the deformation of the mixture at the macroscopic level (at microscopic scale the constituents are incompressible).

Barry and Aldis-1990 modeled, using the mixture theory, the deformation of a soft biological tissue considering the medium as isotropic, a viscoelastic behavior. The body forces, inertial terms and osmotic pressure were neglected. The compression of the tissue occurred through a decrease in the fluid proportion in the medium. The authors considered various forms for the permeability as a functional dependence on the strain. The steady-state one-dimensional model was solved by integration using an Euler-Cauchy's numerical scheme.

Lewis and coworkers (Lewis et al.-1986A, Lewis et al.-1986B, Lewis and Karahanoglu-1981) modeled the fluid flow and deformation in geothermal reservoirs considering the following macroscopic constitutive equation for the incremental effective stress ( $d\sigma'$ ) for non-isothermal elastic-plastic porous media:

$$d\sigma' = D_t \left( d\epsilon - d\epsilon_c - d\epsilon_p - d\epsilon_T - d\epsilon_0 \right) \quad , \quad (C10)$$

where  $D_t$  is the tangent matrix  $d\epsilon$  is the total strain,  $d\epsilon_c$  is the creep strain,  $d\epsilon_p$  is the volumetric strain caused by uniform compression,  $d\epsilon_T$  is the reversible part of the strain increment due to temperature increment,  $d\epsilon_0$  represents all other strain increments not associated with stress changing. The authors applied the Finite Element Method, based on the

principle of virtual work, to solve the non-isothermal problem of coupled displacement and pressure.

In the studies concerning about magma migration accomplished by Richter and McKenzie-1984, McKenzie-1984 and Spiegelman-1993 and Spiegelman-1993B), the inertia effects were neglected and the problem is treated as a flow of a low-viscosity fluid through a viscous deformable permeable matrix. Spiegelman-1993 presented a series of analytical solutions using the method of characteristics combining different simplifications as constant or variable porosity, melting or no melting. It is interesting to note that the physical phenomenon related to magma migration comprise a variable melt fraction with the depth. (McKenzie-1984, Richter and McKenzie-1984) observed that a layer with initially uniform fluid content contained above and below by impermeable boundaries, if sufficiently deep, display three regimes: a compacting boundary layer at its base, a non-compacting interior regime, and a growing pure fluid layer at the top. McKenzie-1984 presented the governing equations for motion of melt and matrix using the framework of volume averaged method.

Preziosi et al.-1996 and Sommer and Mortensen-1996 analyzed the infiltration of an initially dry deformable porous medium by a pressurized liquid related to composite materials manufacturing processes. The solid and liquid phases were again considered incompressible at microscopic scale and the authors neglected the inertial forces. Only the saturated region was considered in the models assuming that the unfiltered porous material is rigid. The mathematical models were solved using numerical integration. The authors considered that slug-flow approximation can be used in order to simplify the mathematical model and a viscoelastic behavior was attributed to the wet solid skeleton. Preziosi et al.-1996 also showed that the model has a significant dependence on the assumption of neglected inertial terms.

The analysis of deformation of semi-solid metallic alloys have been accomplished considering that solid/solid contact area is much smaller than fluid/solid contact area (Yu et al.-1995) and that the solid phase and liquid phases are microscopically incompressible. However, for a columnar structure or for a high solid fraction the contact area is appreciable and can transmit strain.

Yu et al.-1995 analyzed the effects of stress within the solid network on the fluid flow neglecting the slip due to the stress and only considering the normal compressibility (due to normal stress). The authors only considered the stress due to solidification, related to the solidification shrinkage and solid contraction, i.e., no external load was applied to the porous media formed by equiaxed crystals. The convection in the bulk liquid was neglected and the solid network is considered as a viscoelastic material. The authors concluded that due to fast cooling rates, the solidification isotherm advances fast and there is not enough time to produce the strain to make the solid network compressible. However, when the cooling rate is small and the effective stress acting on the solid network, and with the gravity network, may play a role in forming "channel space" that fills up with unstable fluid flow. The authors also concluded that the back-flow towards the centerline of ingot is larger when the effective stress is included in the analysis than when it is ignored.

Sigworth-1996, in a recent review about the rheological properties of metallic alloys in the semi-solid state, presented the equations used to relate flow stress and strain rate above the coherency temperature. These equations are based in equations developed for powdered metals. For relate stress and strain two equations are used:

- the hyperbolic sine relationship (Sigworth-1996, Nguyen et al.-1994, Lalli-1985, Pinsky-1984):

$$\dot{\varepsilon}_{eq} = \beta \exp\left(\frac{-Q}{RT}\right) \left[ \sinh \alpha(\sigma_{eq}) \right]^n \quad , \quad (C11)$$

- a power law relationship (Sigworth-1996, Charreyron and Flemings-1985, Hernandez et al.-1992):

$$\sigma_0 = K \dot{\varepsilon}^n \quad , \quad (C12)$$

where:  $\sigma_0$  = the yield stress,  $\dot{\varepsilon}$  = tensile strain rate,  $A$  = coefficient depending of the solid fraction present,  $n$  = the power-law constant.

Suery and Flemings-1982 studied the effect of strain rate on deformation behavior of semi-solid dendritic alloys (Sn-Pb). The authors performed experiments heating small samples (12.7 mm diameter and 6.35 high) just above the eutectic temperature and applied deformation at a constant rate in each experiment. The compression was conducted at rates ranging from  $1.3 \cdot 10^{-3}$  to  $1.2 \cdot 10^3 \text{ s}^{-1}$ . The authors used a tensile testing machine to compress the semi-solid between two parallel discs heated to the desired temperature. The authors also performed some filtering experiments. The solid fraction was calculated using Scheil equation and was considered fixed during each experiment. The materials tested had a solid fraction from 0.4 to 0.9. The samples were machined from cast ingots and presented equiaxed structure. The pseudo-plastic behavior of the semi-solid alloy was described with a power-law equation with the  $\mu = A\dot{\gamma}^{n-1}$ , where  $\mu$  is the viscosity,  $\dot{\gamma}$  the shear rate and the coefficient  $A$  changes with the solid fraction ( $A = a \exp b\phi_s$ ).

Hernandez et al.-1992 and Hernandez-19951 used a modified indentation test to identify the different stages that characterize the thermo-mechanical behavior of mushy zone during solidification: the coherency temperature, the brittleness interval and the ductility domain (viscoplastic interval). The tests consisted in pushing a needle at a constant ratio into a solidifying ingot at isothermal conditions. The authors assumed that the constitutive equation could be represented by Norton-Hoff law (power law) for the viscoplastic part and experimentally quantified the rheological parameters  $n$  and  $K$ .

The tests for the alloy Zn-wt%92-Sn-wt%8 in the semi-solid state were performed below a critical temperature above which the curves relating force and needle displacement were too irregular so that it was impossible to apply the power law equation. The dependence of the parameter  $K$  with temperature was also determined and given by equation,

$$K = K_1 \exp\left(\frac{nQ}{RT}\right). \quad (\text{C12})$$

Considering numerical and experimental results, the authors concluded that the elastic component is predominant in the brittleness interval where deformation cannot go beyond the elastic domain. As the solidification progresses, the ductility increases and the deformation can overtake the viscoplastic domain. In this case the elastic and viscoplastic behavior coexist

and the latter can become important (Hernandez-1995). The experiments were performed for  $\phi_s^c$  between 0.0 and 0.95.

Nguyen et al.-1994 and Martin et al.-1997 studied the formulation of constitutive equations for semi-solid alloys, with equiaxed globular structures, applying the continuum mixture theory. In their models, the authors assumed that the solid and liquid phases were contiguous ( $0.5 < \phi_s < 0.85$ ), for which they considered that the macroscopic compressibility of the solid skeleton is much higher than the compressibility of the dense solid phase (Martin et al.-1997). In all the diffusion processes and the inertia and body terms were neglected. The solid and liquid phases are incompressible at microscopic scale and the macroscopic compressibility of the porous media was taken in account by variation of  $\phi^s$  (macroscopic solid fraction).

Nguyen et al.-1994 assumed that the solid matrix deformation was isotropically modeled using a thermo-viscoplastic law (the elastic deformation was considered negligible). The authors adopted the Darcy's law for the relative liquid phase velocity regarding the solid phase. They considered that the stress field was composed of the solid phase stress in the solid matrix and the interstitial pressure in the liquid (Martin et al.-1997) considered isothermal conditions and a viscoplastic behavior.

Nguyen et al.-1994 and Martin et al.-1997 applied the concept of effective stress:

$$\sigma^s = \sigma^t + p^l \mathbf{I}, \quad (\text{C13})$$

where the superscript means that the variables are macroscopic quantities and considered the effective stress tensor ( $\sigma^s$ ) as decomposed in two parts,

$$\sigma^s = -\pi^s \mathbf{I} + \sigma_p^s, \quad (\text{C14})$$

where  $\pi^s \mathbf{I}$  is the solid phase rate-independent effective pressure and  $\sigma_p^s$  is the rate-dependent contribution of the solid phase effective stress tensor. The authors assumed that the solid

phase strain rate tensor,  $\dot{\epsilon}^s$ , coincides with the viscoplastic part of the strain rate tensor,  $\dot{\epsilon}_p^s$ , which amounts to neglecting the strain of the solid phase associated with the solid phase effective pressure  $\pi^s$ .

The viscoplastic potential was assumed to verify the normality rule (flow rule - Ehlers-1991, Martin et al.-1997, Nguyen et al.-1994):

$$\dot{\epsilon}^s = \frac{\partial \Omega}{\partial \sigma_p^s} \quad , \quad (C16)$$

where  $\Omega$  is the viscoplastic potential, i.e., a generalization of the yield function for rate-dependent materials (Zavaliangos and Lawley-1995, Nguyen et al.-1994) given by:

$$\Omega = \Omega(\sigma_{eq}(\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2, \phi^s), T) \quad , \quad (C17)$$

Nguyen et al.-1994 considered a form for the dependence of  $\dot{\epsilon}_{eq}$  on  $\sigma_{eq}$  for high temperature deformation (creep law),

$$\dot{\epsilon}^s : \sigma_p^s = \dot{\epsilon}_{eq} \sigma_{eq} \quad , \quad (C18)$$

$$\dot{\epsilon}_{eq} = \beta \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \left[ \sinh(\alpha \sigma_{eq}^1) \right]^n \quad , \quad (C19)$$

where  $\beta$  is the pre-exponential factor,  $Q$  is called the apparent activation energy,  $n$  is called the stress sensitivity,  $\alpha$  and  $R$  denotes the gas constant. In the temperature and strain ranges of interest, all these parameters are taken to be temperature- and stress-independent. The determination of the parameters  $\beta$ ,  $\alpha$ ,  $n$  and  $Q$  was performed by a single linear regression for the whole set of tensile test data (Nguyen et al.-1994). The authors, neglecting the third stress invariant, adopted a relation for the equivalent stress, as did by Charreyron and Flemings-1985. These authors assumed that the contribution of the liquid pressure to the deformation

mechanisms was negligible, i.e., the solid skeleton deformation was assumed to be the same as it would be in the absence of liquid, used for metallic powders,

$$\sigma_{eq}^2 = \left[ A(\phi^s) \mathbf{J}_2 + B(\phi^s) \mathbf{J}_1^2 \right] \quad , \quad (C20)$$

with the parameters  $A$  and  $B$  were determined using the data of both filtration and compression test in the semi-solid state (Nguyen et al.-1994). With the simple choice to express the dissipation potential as a function of equivalent stress, which depends on the solid phase stress and the solid volume fraction, all the information on the material density is condensed in only one parameter,  $\phi^s$ , considered as a parameter introducing the hardening (or softening) of the material.

As pointed by Sigworth-1996, the effect of increasing pressure is to reduce the effective shear stress (equal to square of  $\mathbf{J}_2$ ) required for deformation. This is opposite to effect noted above for soils, since the individual grains are now deformable. The overall deformation is therefore not primarily a frictional sliding of grains over one another, but deformation of the entire solid skeleton.

For the model identification, Nguyen et al.-1994 performed isothermal tensile tests in the solid state at various temperatures and strain rates to identify the creep law flow for the aluminum alloy A356. Also, compression and filtration (drained die pressing) tests in the semi-solid state were accomplished to identify the equivalent stress expression. Both compression and filtration experiments were carried out at various constant strain rates and a fixed temperature with an initial solid volume fraction (using Scheil's equation) of 0.44. To validate their model, the authors (Nguyen et al.-1994) performed tests of drained triaxial compression, again for aluminum alloy A356, consisting in to deform the specimen in the semi-solid state. The specimen was wrapped into a deformable envelope, which interior is connected with the atmospheric pressure, and the compression with a superimposed controlled lateral pressure. The validation procedure consisted in the comparison between the measured and calculated axial stress. The measurement of the expelled liquid mass allows the determination of the volumic strain evolution and strain rates.

Martin et al.-1997 proposed that the continuity and the momentum equations took the form:

$$\frac{\partial \phi^s}{\partial t} = -\frac{\partial \phi^l}{\partial t} = -\phi^s \nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}^s - \bar{\mathbf{v}}^s \nabla \phi^s \quad , \quad (\text{C21})$$

$$\nabla \cdot (\sigma^l - \rho^s \bar{\mathbf{v}}^s \bar{\mathbf{v}}^s - \rho^l \bar{\mathbf{v}}^l \bar{\mathbf{v}}^l) = 0 \quad , \quad (\text{C22})$$

and assumed the following relation between  $\dot{\epsilon}_{eq}$  and  $\sigma_{eq}$  (Martin et al.-1997) for a dense solid phase.

$$\dot{\epsilon}_{eq} \approx \alpha^n \beta \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \sigma_{eq}^n \quad . \quad (\text{C23})$$

The authors proposed a new relation for the equivalent stress (Martin et al.-1997),

$$\sigma_{eq}^2 = A(\phi^s) \mathbf{J}_2 + \left[ \sqrt{B(\epsilon^s) \mathbf{J}_1} - \sigma_{eq} \sqrt{1 - c(\phi^s)^2} \right]^2 \quad , \quad (\text{C24})$$

which leads to the explicit formulation of the equivalent stress through the resolution of a second degree equation (for  $c > 0$ ) with the only positive root:

$$\sigma_{eq} = \frac{\sqrt{Ac^2 \mathbf{J}_2 + B \mathbf{J}_1}}{c^2} - \frac{\sqrt{B(1-c^2)}}{c^2} \mathbf{J}_1 \quad (\text{for } c > 0) \quad , \quad (\text{C25})$$

where the  $c(\phi^s)$  function depends on the solid fraction, the solid phase morphology and on the deformation history; thus it can be considered as a state variable of the material.

The model proposed by Martin et al.-1997 were experimentally identified (material constants  $A(\phi^s)$ ,  $B(\phi^s)$  and  $c(\phi^s)$ ), with a Sn-Pb model alloy with dendritic and globular solid phase morphologies, for three stress states (Martin et al.-1997) as shown on Figure 1: undrained triaxial compression (the liquid pressure was measured during the experiments) for

$A(\varepsilon^s)$ , drained hydrostatic densification provides a relation between  $B(\varepsilon^s)$  and  $c(\varepsilon^s)$ , and shear deformation in a Couette rheometer (relation among  $A(\varepsilon^s)$ ,  $B(\varepsilon^s)$  and  $c(\varepsilon^s)$ ). The model was partially validated using a triaxial drained compression.

The undrained triaxial compression and hydrostatic drained compression tests were performed using the equipment built by the authors and presented on the Figure 2 (for the last test no eutectic reservoir and the silicone envelope was cut under the filter). The hydrostatic pressure was applied through silicone oil and an axial stress was superimposed to the hydrostatic component to attain a triaxial state of stress.

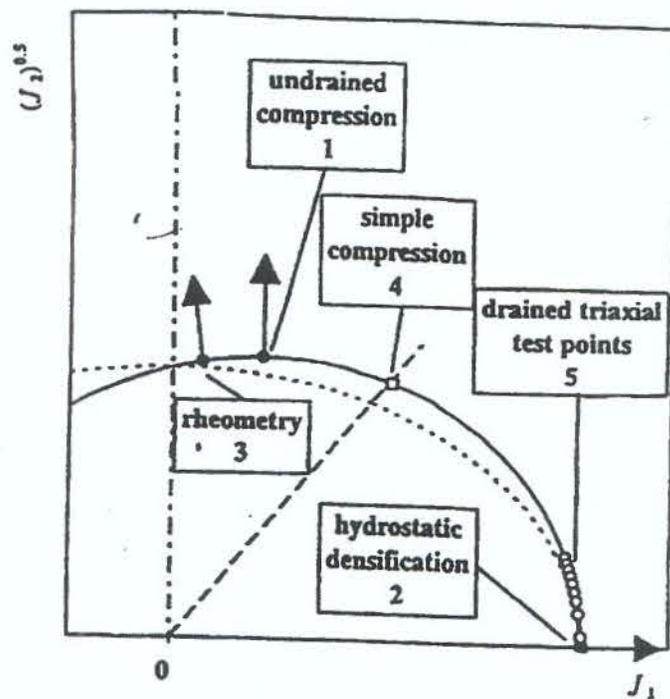


Figure C1 – Experiment proposed by Martin et al.-1997 to identified the material constants  $A(\phi^s)$ ,  $B(\phi^s)$  and  $c(\phi^s)$ .

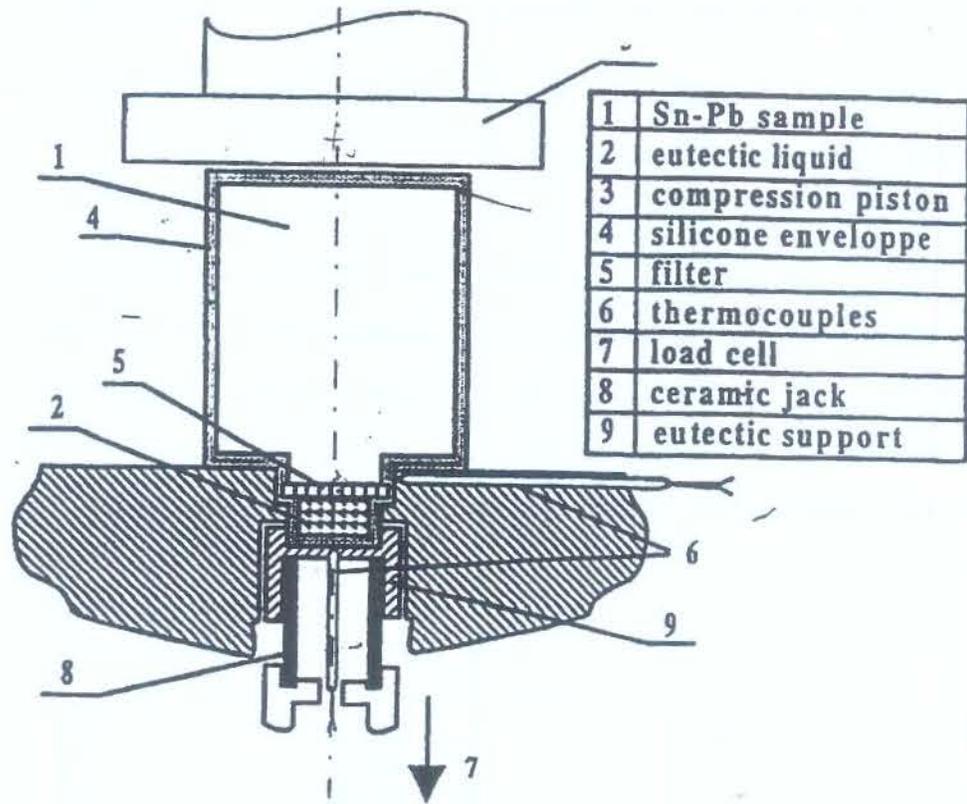


Figure C2 - Equipment built by Martin et al.-1997 to perform the experiments.

Zavaliangos and Lawley-1995 and Zavaliangos and Anand-1993 proposed a rate- and temperature-dependent plastic model with the viscoplastic potential given by:

$$\Omega = \Omega(\sigma_{eq}, \Sigma_h, s, \phi_l, T) \quad , \quad (C26)$$

where  $\Sigma_h$  is the mean normal stress (pressure),  $s$  is a measure of the deformation of the solid (flow stress). Considering  $\Omega_d$  as a viscoplastic potential for a fully dense solid stress,  $\Omega$  was considered as:

$$\Omega = \Omega_d F(X, \phi_l, n) \quad , \quad (C27)$$

where  $X = \Sigma_h / \sigma_{eq}$  is the stress triaxiality and the authors proposed the following form for the function  $F$ :

$$F = A_1 + (A_2 X + A_3)^{(n+1)/2} \quad , \quad (C28)$$

where  $A_i$  refers to functions of porosity and the power exponent  $n$ .

All the models presented above for analysis of the porous media deformation consider the equations applied directly at macroscopic scale, with no connection of properties or phenomenon at the microscopic level. In the following chapter, the volume average method will be applied as an attempt to overcome the above problem.



## APÊNDICE D - AVERAGING OF CONSTITUTIVE EQUATION FOR AN ELASTIC SOLID

### D1 – Introduction

If the solid phase is assumed to be an elastic solid phase (Bear and Pinder-1978, Auriault and Boutin-1992, Hassanizadeh and Gray-1980, Hassanizadeh and Gray-1980) undergoing small deformation, the microscopic stress-strain relationship is given by,

$$(\sigma_s)_{ij} = \mu'_s \left( \frac{\partial(w_k)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial(w_k)_j}{\partial x_i} \right) + \lambda''_s \frac{\partial(w_k)_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad , \quad (D1)$$

where  $\mu'_s$  and  $\lambda''_s$  are the Lamé constants

Averaging the above equation considering only intragranular deformation:

$$\langle \sigma_s \rangle_{ij} = \left\langle \mu'_s \left( \frac{\partial(w_k)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial(w_k)_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle + \left\langle \lambda''_s \frac{\partial(w_k)_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right\rangle \quad (D2)$$

$$\langle \sigma_s \rangle_{ij} = \varepsilon_s \langle \mu'_s \rangle^s \left\langle \left( \frac{\partial(w_k)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial(w_k)_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle^s + \left\langle \hat{\mu}'_s \left( \frac{\partial(w_k)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial(w_k)_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle + \left\langle \lambda''_s \right\rangle^s \left\langle \frac{\partial(w_k)_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right\rangle + \left\langle \hat{\lambda}''_s \left( \frac{\partial(w_k)_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right\rangle \quad (D3)$$

$$\langle \sigma_s \rangle_{ij} = \langle \mu'_s \rangle^s \left( \left\langle \frac{\partial (w_k)_i}{\partial x_j} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial (w_k)_j}{\partial x_i} \right\rangle \right) + \left\langle \hat{\mu}'_s \left( \frac{\partial (w_k)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial w_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle + \langle \lambda''_s \rangle^s \left\langle \frac{\partial (w_k)_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right\rangle + \left\langle \hat{\lambda}''_s \left( \frac{\partial (w_k)_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right\rangle \quad (D4)$$

$$\langle \sigma_s \rangle_{ij} = \langle \mu'_s \rangle^s \left( \frac{\partial \langle w_k \rangle_i}{\partial x_j} + \frac{1}{V_0} \int_{A_s} (w_k)_i n^s dA + \frac{\partial \langle w_k \rangle_j}{\partial x_i} + \frac{1}{V_0} \int_{A_s} (w_k)_j n^s dA \right) + \left\langle \hat{\mu}'_s \left( \frac{\partial (w_k)_i}{\partial x_j} + \frac{\partial (w_k)_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle + \langle \lambda''_s \rangle^s \left( \frac{\partial \langle w_k \rangle_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \frac{1}{V_0} \int_{A_s} (w_k)_k n^s dA \right) + \left\langle \hat{\lambda}''_s \left( \frac{\partial (w_k)_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right\rangle \quad (D5)$$

$$\langle \sigma_s \rangle_{ij} = \langle \mu'_s \rangle^s \frac{\partial \langle w_k \rangle_i}{\partial x_j} + \langle \mu'_s \rangle^s \frac{\partial \langle w_k \rangle_j}{\partial x_i} + \langle \mu'_s \rangle^s \frac{1}{V_0} \int_{A_s} (w_k)_i n^s dA + \langle \mu'_s \rangle^s \frac{1}{V_0} \int_{A_s} (w_k)_j n^s dA + \left\langle \hat{\mu}'_s \left( \frac{\partial (w_k)_i}{\partial x_j} \right) \right\rangle + \left\langle \hat{\mu}'_s \left( \frac{\partial (w_k)_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle + \langle \lambda''_s \rangle^k \frac{\partial \langle w_k \rangle_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \langle \lambda''_s \rangle^k \frac{1}{V_0} \int_{A_k} (w_k)_k n^s dA + \left\langle \hat{\lambda}''_s \left( \frac{\partial (w_k)_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right\rangle \quad (D6)$$

$$\left\langle \hat{\mu}'_s \left( \frac{\partial (w_k)_i}{\partial x_j} \right) \right\rangle \ll \langle \mu'_s \rangle^s \frac{\partial \langle w_k \rangle_i}{\partial x_j} \quad (D7)$$

$$\left\langle \hat{\mu}'_s \left( \frac{\partial \langle w_k \rangle_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle \ll \langle \mu'_s \rangle^s \frac{\partial \langle w_k \rangle_j}{\partial x_i} \quad (\text{D8})$$

$$\left\langle \hat{\lambda}''_s \left( \frac{\partial \langle w_k \rangle_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right\rangle \ll \langle \lambda''_s \rangle^s \frac{\partial \langle w_k \rangle_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (\text{D9})$$

$$\langle \lambda''_s \rangle^s = \lambda''_s{}^*; \quad \langle \mu'_s \rangle^s = \mu'_s{}^* \quad (\text{D10})$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma_s \rangle_{ij} = & \mu'_s{}^* \frac{\partial \langle w_k \rangle_i}{\partial x_j} + \mu'_s{}^* \frac{\partial \langle w_k \rangle_j}{\partial x_i} + \mu'_s{}^* \frac{1}{V_0} \int_{A_s} (w_k)_i n^s dA + \mu'_s{}^* \frac{1}{V_0} \int_{A_s} (w_k)_j n^s dA + \\ & \lambda''_s{}^* \frac{\partial \langle w_k \rangle_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \lambda''_s{}^* \frac{1}{V_0} \int_{A_k} (w_k)_k n^s dA \end{aligned} \quad (\text{D11})$$

$$\nabla \cdot \langle \sigma_s \rangle_{ij} = \nabla \cdot \left[ \begin{aligned} & \mu'_s{}^* \frac{\partial \langle w_k \rangle_i}{\partial x_j} + \mu'_s{}^* \frac{\partial \langle w_k \rangle_j}{\partial x_i} + \mu'_s{}^* \frac{1}{V_0} \int_{A_s} (w_k)_i n^s dA + \mu'_s{}^* \frac{1}{V_0} \int_{A_s} (w_k)_j n^s dA + \\ & \lambda''_s{}^* \frac{\partial \langle w_k \rangle_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \lambda''_s{}^* \frac{1}{V_0} \int_{A_k} (w_k)_k n^s dA \end{aligned} \right] \quad (\text{D12})$$

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \langle \sigma_s \rangle_{ij} = & \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_s'^* \frac{\partial \langle w_k \rangle_x}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu_s'^* \frac{\partial \langle w_k \rangle_x}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_s'^* \frac{\partial \langle w_k \rangle_y}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu_s'^* \frac{\partial \langle w_k \rangle_y}{\partial y} \right] + \\
& \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_s'^* \frac{1}{V_0} \int_{A_s} (w_k)_x n^s dA \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu_s'^* \frac{1}{V_0} \int_{A_s} (w_k)_x n^s dA \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_s'^* \frac{1}{V_0} \int_{A_s} (w_k)_y n^s dA \right] \\
& \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu_s'^* \frac{1}{V_0} \int_{A_s} (w_k)_y n^s dA \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \lambda_s''^* \frac{\partial \langle w_k \rangle_z}{\partial z} \delta_{ij} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \lambda_s''^* \frac{\partial \langle w_k \rangle_z}{\partial z} \delta_{ij} \right] + \\
& \frac{\partial}{\partial x} \left[ \lambda_s''^* \frac{1}{V_0} \int_{A_k} (w_k)_z n^s dA \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \lambda_s''^* \frac{1}{V_0} \int_{A_k} (w_k)_z n^s dA \right]
\end{aligned} \tag{D13}$$

$$\frac{1}{V_0} \int_{A_s} \sigma_s \cdot n s da = M_s^\Gamma = \bar{p}_{si} \nabla \phi_s + M_s^d \tag{D14}$$

$$M_s^d = -M_l^d \tag{D15}$$

$$M_s^d = - \left( -\phi_l^2 \mathbf{K}^{(2)^{-1}} \right) \left( \bar{\mathbf{v}}_{li} - \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \right) \tag{D16}$$

$$M_s^\Gamma = -M_l^\Gamma \tag{D17}$$

The velocity is related to the displacement at the microscopic level by  $\mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t}$ . The macroscopic relationship is obtained through application of (Bear and Pinder-1978):

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \mathbf{v}_k + \frac{1}{V} \int_{A_k} \mathbf{w} (\mathbf{w} \cdot \mathbf{n}^k) dA \tag{D18}$$

Murad and Cushman-1996 also proposed a model to consider the stress at microscopic scale (actually mesoscopic scale in their derivation) to account for the intraparticles contact stress and an additional term to account for the interaction forces within the particles. The equations were averaged to a macroscopic scale using a methodology proposed early by

Murad et al.-1995 and Achanta et al.-1994. The authors considered an elastic constitutive equation.

In the above averaging, the intergranular movement observed by Terzaghi was not account for by Bear and Pinder-1978 in the averaging procedures because the interactions between boundaries of the same phase does not came into play. To circumvent this difficulty, the constitutive equation can be written **directly** in terms of **macroscopic** variables:

$$\nabla \cdot \langle \sigma_s \rangle = (\langle \lambda \rangle + \langle \mu \rangle) \nabla [(\nabla \cdot \langle \mathbf{v} \rangle) + \langle \mu \rangle \nabla \cdot (\nabla \langle \mathbf{v} \rangle)] \quad (\text{D19})$$



## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ACHANTA, S.; CUSHMAN, J.H.; OKOS, M.R. On multicomponent, multiphase thermomechanics with interfaces. *International Journal of Engineering Science*, v.32, n.11, p.1717-1738, 1994.
- ALEXANDROU, A.N. Constitutive modeling of semisolid materials. In: Proceedings of The 4th International Conference on Semi-Solid Processing of Alloys and Composites, Sheffield, June 1996, p.132-136.
- ATKIN, R.J. Continuum Theories of Mixtures: Basic Theory and Historical Development. *Q. J. Mech. Appl. Math.*, V.XXIX, Pt. 2, p.209-244, 1976.
- AURIAULT, J.L.; BOUTIN, C. Deformable Porous Media with Double Porosity. Quasi-Statics. I: Coupling Effects. *Transport in Porous Media*, v.7, p.63-82, 1992.
- BADA, H. et al. Production facilities and operational techniques for continuous forging process. *Kawasaki Steel Technical Report*, n. 32, p.53-59, Mar. 1995.
- BARRY, S.I.; ALDIS, G.K. Comparison of models for flow induced deformation of soft biological tissue. *Journal of Biomechanics*, v.23, n.7, p.647-654, 1990.
- BEAR, J.; BACHMAT, Y. Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media. Dordrecht, Kluwer Academic, 1991, 553p.
- BEAR, J.; BACHMAT, Y. Transport phenomena in porous media - Basic equations. *Fundamentals of Transport Phenomena in Porous Media*, Edited by: J. Bear, M. Y. Corapcioglu, NATO ASI Series, p.1-61, 1984.
- BEAR, J.; PINDER, G.F. Porous media deformation in multiphase flow. *Journal of Engineering Mechanics Division of ASCE*, v.104, n.EM4, p.881-894, 1978.
- BECKERMANN, C.; VISKANTA, R. Mathematical modeling of transport phenomena during alloy solidification. *Applying Mechanical Review*, v.46, n.1, p.1-27, 1993.
- BEJAN, A. Heat Transfer, John Wiley & Sons, New York. 1993, 674p.
- BENNON, W.D.; INCROPERA, F.P.A Continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems - I. Model formulation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v.30, n.30, p.2166-2170, 1987.

- BENNON, W.D.; INCROPERA, F.P.A. Continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems - II. Application to solidification in a rectangular cavity. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v.30, n.10, p.2171-2187, 1987.
- BIOT, M.A. General theory of three-dimensional consolidation. *Journal of Applied Physics*, v.12, p.155-164, Feb. 1941.
- BIRAT, J.P.; STEFFEN, R. Current R&D work on near-net-shape continuous casting technologies in Europe. *Metallurgical Plant and Technology International*, n.3, p.44-57, 1991.
- BÖHMER, W.F.A.; SCHNEIDER, M.C.; BECKERMANN, C.; SAHM, P.R. Combined experimental and numerical investigation of the formation of macrosegregation during multicomponent steel solidification. In: Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VII, 09, 1995, London. *Proceedings...* TMS, 1995, p.617-624.
- BOWEN, R.M. Compressible porous media models by use of the theory of mixtures. *International Journal of Engineering Science*, v.20, n.6, p.697-735, 1982.
- BRIMACOMBE, J.K.; SAMARASEKERA, I.V. The challenge of thin slab casting. *I&SM*, p.29-39, 1994.
- CAREY, V.P., *Liquid-Vapor Phase-Change Phenomena: An Introduction to the Thermophysics of Vaporization and Condensation Processes in Heat Transfer Equipment*. Taylor & Francis, Bristol, 1992, 645p.
- CHARREYRON, P.O.; FLEMINGS, M.C. Rheology of semi-solid dendritic Sn-Pb alloys at low strain rates: application to forming process. *International Journal Mechanical Science*, v.27, n.11/12, p.781-791, 1985.
- CHATTERJEE, A. Recent developments in ironmaking and steelmaking. *Ironmaking and Steelmaking*, n.2, v.22, p.100-104, 1995.
- CHIANG, L.K. Application of soft reduction technique for improving centerline segregation in continuous cast slab. In: *Steelmaking Conference Proceedings 1989*, p.81-89.
- CHIANG, L.K. Continuous casting of thinner slabs at IPSCO. In: *Steelmaking Conference Proceedings 1994*, p.19-30.
- CHIANG, L.K. Continuous casting trials of thinner slabs. In: *Near-Net-Shape Casting in the Minimills, Proceedings...*, Vancouver, Eds. J.K. Brimacombe and I.V.Samarasekera, 1995, p.329-339.
- COUSSY, O. A general theory of thermoporoelastoplasticity for saturated porous materials. *International Journal of Plasticity*, v.4, p.281-293, 1989.

- CRISTALLINI, A. et al. Improvements of billet internal quality by means of soft reduction technique. In: *Steelmaking Conference Proceedings 1994*, p.309-315.
- DAHLE, A.K.; ARNBERG, L. The rheological properties of solidifying aluminum foundry alloys. *JOM*, p.34-37, Mar. 1996.
- DANTZIG, J.A. Mathematical modeling of solidification processes. In: *Technology for Premium Quality Castings, Proceedings...* TMS, 1988, p.41-55.
- de BOER, R.; EHLERS, W. The development of the concept of effective stresses. *Acta Mechanica*, v.83, p.77-92, 1990.
- de BOER, R.; KOWALSKI, S.J. A plasticity theory for fluid-saturated porous solids. *International Journal of Engineering Science*, v.21, n.11, p.1343-1357, 1983.
- DÖRING, K.; WIESINGER, H.; EBERLE, A.; FLICK, A.; HIRSCHMANNER, F.; WALLNER, F.; GIEDENBACHER, G.; GÄBEL, D.; KAHLE, P.; LOOSE, J. Continuous casting and rolling of thin slabs. *Metallurgical Plant and Technology International*, n.5, p.16-29, 1990.
- DREW, D.A. Mathematical models of two-phase flow. *Annual Reviews in fluid Mechanics*, v.15, p.261-91, 1983.
- EHLERS, W. On elastoplasticity model in porous media theories. *Transport in Porous Media*, v.9, p.49-59, 1992.
- EHLERS, W. On thermodynamics of elastic-plastic porous media. *Acta Mechanica*, v.41, p.73-93, 1989.
- EHLERS, W. Toward finite theories of liquid-saturated elasto-plastic porous media. *International Journal of Plasticity*, v.7, p.433-475, 1991.
- EL-BEALY, M. On the formation of a fluctuated macrosegregation phenomenon in the continuous casting process. *Scandinavian Journal of Metallurgy*, v.23, p.140-150, 1994.
- EL-BEALY, M. On the mechanism of halfway cracks and macro-segregation in continuously cast steel slabs: (I). Halfway cracks. *Scandinavian Journal of Metallurgy*, v.24, p.63-80, 1995.
- EL-BEALY, M. On the mechanism of halfway cracks and macro-segregation in continuously cast steel slabs: (II). Macro-segregation. *Scandinavian Journal of Metallurgy*, v.24, p.106-120, 1995.
- EL-BEALY, M.; FREDRIKSSON, H. Effect of thermal strain on macrosegregation in casting processes. In: *Numerical Methods for Thermal Problems, International Conference, 8-12 July, Stanford - USA, 1991*.

- EL-BEALY, M.; FREDRIKSSON, H. On the formation of halfway cracks in continuously cast steel slabs process. In: *Advances in Continuous Casting Research and Technology, Proceedings.....*, Cairo, Apr. 1992.
- EL-BEALY, M.; FREDRIKSSON, H., Modeling of the peritectic reaction and macrosegregation in casting of low carbon steel, *Metallurgical and Materials Transactions B*. (accepted), 1996.
- EL-BEALY, M.; LESKINEN, N.; FREDRIKSSON, H. Effect of various cooling conditions on the formation of halfway cracks in continuous casting process. In: *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VI*, Edited by T.S. Piwonka, V.Voller and L. Katgerman, TMS, 1993, p.569-576.
- EL-BEALY, M.; LESKINEN, N.; FREDRIKSSON, H. Simulations of cooling conditions in secondary cooling zones in continuous casting process. *Ironmaking and Steelmaking*, v.22, n.3, p.246-255, 1995.
- Elimination of center segregation by continuous forging of CC bloom, *Steel Times International*, Mar., p.42-43, 1992.
- ENGSTROM, G.; FREDRIKSSON, H.; ROGBERG, B. On the mechanism of macrosegregation formation in continuously casting steels. *Scandinavian Journal of Metallurgy*, v.12, p.3-12, 1983.
- ESSADIQI, E.; COLLINS, L.E.; RUDDLE, G.E. Secondary processing of thin slab of Ti-Nb microalloyed steel. In: *CIM Conference, Proceedings...*, Vancouver, Aug. 1995.
- ESSADIQI, E.; COLLINS, L.E.; SHEHATA, M.T.; CHIANG, L.K. Thin slab casting simulation of 1020 C steel with liquid core reduction. In: *Second Canada-Japan Symposium on Modern Steelmaking and Casting, Proceedings...*, p.251-264, 1994.
- EWING, R.E. Simulation of multiphase flows in porous media. *Transport in Porous Media*, v.6, p.479-499, 1991.
- FLEMINGS, M.C. Behavior of metal alloys in the semisolid state. *Metallurgical Transactions B*, v.22B, p.269-293, 1991.
- FLEMINGS, M.C.; NEREO, G.E. Macrosegregation: part I. *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, v.239, p.1449-1461, Sept. 1967.
- GANESAN, S.; PORIER, D.R. Conservation of mass and momentum for the flow of interdendritic liquid during solidification. *Metallurgical Transactions B*, v.21B, p.173-181, 1990.

- GENTILE, F.C.; RIZZO, E.M.S.; PALMIERE, W.; TELLES, G.N.; MEI, P.R.; SANTOS R.G. Projeto e Construção de um Simulador de Lingotamento Contínuo de Placas Finas. In: 53<sup>o</sup> Congresso Anual da ABM, Belo Horizonte, 09, 1998, ABM.
- GLICKSMANN, M.E.; SCHAEFER, R.J.; AYERS, J.D. Dendritic growth - A test of theory. *Metallurgical Transactions A*, v.7A, p.1747-1759, 1976.
- GOTTARDI, R.; MARTEGANI, A.D. Net and near net shape continuous casting - new developments in mini-mills. *Metallurgical Plant and Technology International*, n.3, p.46-50, 1992.
- GRAY, W.G.; O'NEILL, K. On the general equations for flow in porous media and their reduction to Darcy's law. *Water Resources Research*, v.12, (2), p.148-154, April 1976.
- GREIS, P. Radical changes in the industry - Some technical trends at METEC 94. *Metallurgical Plant and Technology International*, n.5, p.25-43, 1994.
- GRIFFITH, R.; NASSERSHARIF, B. Comparison of One-Dimensional Interface-Following and Enthalpy Methods for the Numerical Solution of Phase Change. *Numerical Heat Transfer Part B*, v.18, p.169-187, 1990.
- HAHSEN, G.; HELLAWELL, A.; LU, S.Z.; STEUBE, R.S. Some consequences of thermosolutal convection: the grain structure of castings. *Metallurgical and Materials Transactions A*, v.27A, p.569-581, Mar. 1996.
- HAIDA, O. et al. Macro- and semi-macroscopic features of the centerline segregation in CC slabs and their effect on product quality. *Transactions ISIJ*, v.24, p.891-898, 1984.
- HASSANIZADEH, M.; GRAY, W.G. General conservation equations for multi-phase systems: 3. constitutive theory for porous media flow. *Advances in Water Resources*, v.3, p.25-40, Mar. 1980.
- HASSANIZADEH, S.M. Derivation of basic equations of mass transport in porous media, Part 1. Macroscopic balance laws. *Advances in Water Resources*, v.9, p.197-207, 1987.
- HASSANIZADEH, S.M.; GRAY, W.G. General conservation equations for multi-phase systems: 1. Averaging procedure. *Advances in Water Resources*, v.2, p.131-145, Sept. 1979.
- HASSANIZADEH, S.M.; GRAY, W.G. General conservation equations for multi-phase systems: 2. Mass, momenta, energy, and entropy equations. *Advances in Water Resources*, v.2, p.191-203, Dec. 1979.
- HASSANIZADEH, S.M.; GRAY, W.G. Mechanics and thermodynamics of multiphase flow in porous media including interphase boundaries. *Advances in Water Resources*, v.13, n. 4, p.169-186, 1990.

- HATTORI, M. et al. Development of technology for elimination of segregation in continuous cast slabs. In: *Steelmaking Conference Proceedings 1989*, p.91-96.
- HERNANDEZ, P.V. et al. Mushy state behavior: rheological characterization and influence on air gap formation. *ISIJ International*, v.35, n.6, p.805-812, 1995.
- HERNANDEZ, P.V.; CHAZE, A.M.; LEVAILLANT, C. Rheological behaviour of Zn-Sn alloy in the solidification range. In: *Second International Conference on the Semi-Solid Processing of Alloys and Composites*, June 10-12, Cambridge, TMS, 1992, p.316-327.
- HUYGHE, J.M.; VAN CAMPEN, D.H. Finite Deformation Theory of Hierarchically Arranged Porous Solids - I. Balance of Mass and Momentum. *International Journal of Engineering Science*, v.33, n.13, p.1861-1871, 1995A.
- HUYGHE, J.M.; VAN CAMPEN, D.H. Finite Deformation Theory of Hierarchically Arranged Porous Solids - II. Constitutive Behavior. *International Journal of Engineering Science*, v.33, n.13, p.1873-1886, 1995B.
- IRWING, W.R. *Continuous Casting of Steel*. The Institute of Materials, London, 1993, 207p.
- ISHII, M. Two-fluid model for two-phase flow. *Multiphase Science and Technology*, v.5, Edited by G.F. Hewitt, J.H. Delhay, N. Zuber, Hemisphere Publishing Corporation, 1990, p.1-63.
- ISOBE, K. et al. Improvement of segregation in continuously cast billets by soft reduction. In: *Near-Net-Shape Casting in the Minimills, Proceedings...*, Vancouver, 1995, Eds. J.K. Brimacombe and I.V.Samarasekera, p.179-192.
- ITAKURA, T. et al. High carbon steel casting by vertical bending caster with soft reduction. In: *Steelmaking Conference Proceedings 1994*, p.291-295.
- JACOBSSON, N.; RAIHLE, C.M.; LESKINEN, N. Liquid pool measurements: a tool to improve internal quality during continuous casting. *Scandinavian Journal of Metallurgy*, v.21, p.172-180, 1992.
- JAIN, S.C. Cost-effective process modeling: are we there yet? *JOM*, v.46, n.9, p.16, Sept. 1994.
- JANSSEN, R.J.A.; BART, G.C.J.; CORNELISSEN, M.C.M.; RABENBERG, J.M. Macrosegregation in continuous casting steel billets and blooms. *Applied Scientific Research*, v.52, p.21-35, 1994.
- JUCÁ, P.C.S. Malhas adaptativas: Implementação e comparação crítica dos métodos disponíveis. In: *COBEM-Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica*, Brasília, dez. 1993, **Anais**. p.137-140.

- KAWABERI, M. et al. Improvement of properties of rods and bars by continuous forging process. *Kawasaki Steel Technical Report*, n. 32, p.60-68, Mar. 1995.
- KOBAYASHI, S.; OH, S.-I.; ALTAN, T. Metal forming and the finite-element method. Oxford University Press, Oxford, 1989, 320p.
- KOJIMA, S. et al. Concept of continuous forging process and experimental analysis of forged blooms. *Kawasaki Steel Technical Report*, n. 32, p.45-52, Mar. 1995.
- KOTHE, D.; PLESCHIUTSCHNIGG, F.P.; BOEHL, F. New developments in continuous casting technology. *Metallurgical Plant and Technology International*, n.1, p.12-26, 1990.
- KRANE, M.J.M.; INCROPERA, F.P. Analysis of the effect of shrinkage on macrosegregation in alloy solidification. *Metallurgical and Materials Transactions A*, v.26A, p.2329-2339, Sept. 1995.
- KUMAR, K. T.; NAMBURU, R.R. Recent Advances, Trends and New Perspectives via Enthalpy-Based Finite Element Formulation for Applications to Solidification Problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v.30, p.803-820, 1990.
- KURZ, W.; FISHER, D.J. Fundamentals of Solidification. Trans Tech Publications, 1992, 305p.
- LAIT, J.E.; BRIMACOMBE, J.K. Solidification during continuous casting of steel. *ISS Transactions*, v.1, p.1-13, 1982.
- LALLI, L.A. A model for deformation and segregation of solid-liquid mixtures. *Metallurgical Transactions B*, v.16A, p.1393-1403, Aug. 1985.
- LEE, J.T.C.; BROWN R.A. Experimental study of the planar-to-cellular transition during thin-film directional solidification: Observations of the long-time-scale dynamics of microstructure formation. *Physical Review B*, v.47, n.9, p.4937-4951, 1993.
- LESOULT, G. Prediction of cast structures, segregation and defects: Progresses and tendencies Modeling of Casting. In: Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes V, 09, 1990, Davos. *Proceedings...* TMS, 1991, p.363-375.
- LESOULT, G.; COMBEAU, H. Macroseggregations and microstructures. In: Solidification Science and Processing, *Proceedings...*, Honolulu, December, 1995, Ed. by I. Ohnaka and D.M. Stefanescu, TMS, 1996, p.43-53.
- LESOULT, G.; SELLA, S. Analysis and prevention of centerline segregation during continuous casting of steel related to deformation of solid phase. In: Proceedings of The Sixth Iron and Steel Congress, Nagoya, ISIJ, 1990, p.673-680.

- LESOULT, G.; SELLA, S., Spongy behavior of alloys during solidification: flow of liquid metal and segregation in the mushy zone. *Solid State Phenomena*, v.3&4, p.167-178, 1988.
- LEWIS, R. W.; KARAHANOGU, N. Simulation of subsidence in geothermal reservoirs. In: *Numerical Methods in Thermal Problems*, v.II, Pineridge Press, Swansea, 1981, p.326-335.
- LEWIS, R. W.; MAJORANA, C.E.; SCHREFLER, B.A. A coupled finite element model for the consolidation of nonisothermal elastoplastic porous media. *Transport in Porous Media*, v.1, p.155-178, 1986B.
- LEWIS, R. W.; ROBERTS, P.J.; SCHREFLER, B.A. Finite element modelling of two-phase heat and fluid-flow in deforming porous media. *Transport in Porous Media*, v.4, p.319-334, 1986A.
- MALISKA, C.R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. Editora LTC, Rio de Janeiro, 1995, 424p.
- MARTIN, C.L.; FAVIER, D.; SUERY, M. Constitutive modeling and characterization of the flow behavior of semi-solid metal alloy slurries - I. The flow response. *International Journal of Plasticity* (accepted), 1996.
- MARTIN, C.L.; FAVIER, D.; SUERY, M. Viscoplastic behavior of porous metallic materials saturated with liquid. Part II: experimental identification on Sn-Pb model alloy. *International Journal of Plasticity*, (accepted), 1996.
- MASAOKA, T. et al., Improvements of centerline segregation in continuous cast slab with soft reduction technique. In: *Steelmaking Conference Proceedings 1989*, p.63-69.
- MATERIALS PROCESSING IN COMPUTER AGE - II, *Proceedings...* Warrendale, TMS, 1994, Ed. V.R. Voller; S.P.Marsh, N. El-Kaddah, 307p.
- McKENZIE, D. The generation and compaction of partially molten rock. *Journal of Petrology*, v.25, Part 3, p.713-765, 1984.
- MICRO/MACRO SCALE PHENOMENA IN SOLIDIFICATION, *Proceedings...* New York, ASME, 1992, Ed. C. Beckermann; L.A. Bertram; S.A. Pien, R.E. Smelser, 160p.
- MIYAZAWA, K.I.; OHASHI, T. Theoretical analysis of squeezing conditions to suppress the interdendritic fluid flow due to solidification shrinkage in continuous cast steel strand. *Transactions ISIJ*, v.26, p.B-243, 1986.
- MIYAZAWA, K.I.; SCHWERDTFEGGER, K. Macro-segregation in continuously cast slabs: preliminary theoretical investigation on the effect of steady state bulging. *Arch. Eisenhüttenwes.*, v.52, n.11, p.415-422, 1981.

- MODELING OF CASTING, WELDING AND ADVANCED SOLIDIFICATION PROCESSES I, 08, 1980, New Hampshire. *Proceeding...* Warrendale, TMS, 1981, Ed. H.D. Brody; D. Appelian, 553p.
- MODELING OF CASTING, WELDING AND ADVANCED SOLIDIFICATION PROCESSES II, *Proceedings...* Warrendale: TMS, 1984, Ed. J.A. Dantzig; J.T.Berry.
- MODELING OF CASTING, WELDING AND ADVANCED SOLIDIFICATION PROCESSES III, *Proceedings...* Warrendale: TMS, 1987, Ed. S. Kou; R. Mehrabian.
- MODELING OF CASTING, WELDING AND ADVANCED SOLIDIFICATION PROCESSES IV, *Proceedings...* Warrendale:, TMS, 1989, Ed. A. Giamei; R. Abbaschian.
- MODELING OF CASTING, WELDING AND ADVANCED SOLIDIFICATION PROCESSES V, 09, 1990, Davos, *Proceedings...* Warrendale, TMS, 1991, Ed. M. Rappaz; M. R. Ozgu; K. W. Mahin, 836p.
- MODELING OF CASTING, WELDING AND ADVANCED SOLIDIFICATION PROCESSES VI, 03, 1993, Palm Coast. *Proceedings...* Warrendale, TMS, 1993, Ed. T.S. Piwonka; V.R. Voller; L. Katgerman, 763p.
- MODELING OF CASTING, WELDING AND ADVANCED SOLIDIFICATION PROCESSES VII, 09, London, 1995, *Proceedings...* Warrendale, TMS, 1995, Ed. M. Cross; J. Campbell, 1036p.
- MODELING OF CASTING, WELDING AND ADVANCED SOLIDIFICATION PROCESSES VIII, 09, San Diego, 1998, *Proceedings...* Warrendale, TMS, 1998, Ed. B.J. Thomas ; C. Beckermann.
- MOORE, J.J. Review of axial segregation in continuously cast steel. *Iron and Steelmaker*, v.7, n. 10, p.8-16, 1980.
- MURAD, M.A.; BENNETHUM, L.S. CUSHMAN, J.H. A Multi-scale theory of swelling porous media: I. Application to one-dimensional consolidation. *Transport in Porous Media*, v.19, p.93-122, 1995.
- MURAD, M.A.; CUSHMAN, J.H. Multiscale flow and deformation in hydrophilic swelling porous media. *International Journal of Engineering Science*, v.34, n.3, p.313-338, 1996.
- MURAKAMI, T. SHIRAIISHI, T.; OKAMOTO, Fluid flow in interdendritic space in cubic alloys. *Acta Metall.*, v.32, p.1423-28, 1984.
- NABESHIMA, S.; NAKATO, H.; FUJII, T.; FUJIMURA, T.; KUSHIDA, K.; MIZOTA, H. Control of centerline segregation in continuous cast blooms by continuous forging process. *ISIJ International*, v.35, n. 6, p.673-679, 1995.

- NGUYEN, T.G.; FAVIER, D.; SUERY, M. Theoretical and experimental study of the isothermal mechanical behavior of alloys in the semi-solid state. *International Journal of Plasticity*, v.10, n. 6, p.663-693, 1994.
- NI, J.; BECKERMANN, C. A volume-averaged two-phase model for transport phenomena during solidification. *Metallurgical Transactions B*, v.22B, p.349-61, Jun. 1991.
- NI, J.; FELLER, J.; BECKERMANN, C. A two-phase model for transport phenomena during solidification. In: *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes V*, Edited by M. Rappaz, M. R. Ozgu and K. W. Mahin, TMS, 1991, p.675-682.
- NI, J.; INCROPERA, F.P. Extension of the continuum model for transport phenomena occurring during metal alloy solidification - I. The conservation equations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v.38, n.7, p.1271-1284, 1995.
- NI, J.; INCROPERA, F.P. Extension of the continuum model for transport phenomena occurring during metal alloy solidification - II. Microscopic considerations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v.38, n.7, p.1285-1296, 1995.
- NIELD, D.A.; BEJAN, A. *Convection in Porous Media*. New York, 1992, 400p.
- NILLES, P. Quality aspects in near net shape casting. *Metallurgical Plant and Technology International*, n.3, p.46-56, 1994.
- O'CONNOR, T.G.; DANTZIG, J.A. Modeling the thin-slab continuous-casting mold. *Metallurgical and Materials Transactions B*, v.25B, p.443-457, June 1994.
- OGIBAYASHI, S. et al. Improvement of center segregation in continuously cast blooms by soft reduction in the final stage of solidification. In: *Proceedings of The Sixth Iron and Steel Congress, Nagoya, ISIJ*, 1990, p.271-278.
- OGIBAYASHI, S. et al. Influence of roll bending on center segregation in continuously cast slabs. *ISIJ International*, v.31, p.1408-1415, 1995.
- OGIBAYASHI, S. et al. Influence of soft reduction with one-piece rolls on center segregation in continuously cast slabs. *ISIJ International*, v.31, p.1400-1407, 1991.
- OH, K.S. et al. Developments of soft reduction technology for the bloom caster at Pohang works of POSCO. In: *Steelmaking Conference Proceedings 1995*, p.301-308.
- OHNAKA, I.; SHIMAZU, T. 1990 Computer simulation of macrosegregation in continuously cast steel cast. In: *Proceedings of The Sixth Iron and Steel Congress, Nagoya, ISIJ*, p.681-688.
- OHNO, A. *Solidificação dos Metais*. Livraria Ciência e Tecnologia Editora LTDA, São Paulo, 1988.

- PARKER, K.H.; METHA, R.V.; CARO, C.G. Steady flow in porous, elastically deformable materials. *Transactions of the ASME*, v.54, p.794-800, Dec. 1987.
- PATANKAR, S.V. Numerical Heat transfer and Fluid Flow. Hemisphere Publishing corporation, Taylor & Francis Group, New York, 1980, 240p.
- PEHLKE, R.D.; JAYARAJAN, A.; WADA, H. Summary of Thermal Properties for Casting Alloys and Mold Materials. Univ.of Michigan, Ann Arbor, MTIS-PB83-211003, dez. 1982.
- PINSKY, D.A.; CHARREYRON, P.O.; FLEMINGS, M.C. Compression of semi-solid dendritic Sn-Pb alloys at low strain rates. *Metallurgical Transactions B*, v.15B, p.173-181, Mar. 1984.
- PLESCHIUTSCHNIGG, F.P.; HAGEN, I.V.; HOPPMANN, H.D.; GOSIO, G. The ISP process, its potential and first operating results. *Metallurgical Plant and Technology International*, n.4, p.44-68, 1993.
- PRESCOTT, P.J.; INCROPERA, F.P., Convective transport phenomena and macrosegregation during solidification of a binary metal alloy: I-Numerical predictions. *Journal of Heat Transfer*, v.116, p.735-749, 1994.
- PRÉVOST, J.H. Mechanics of continuous porous media. *International Journal of Engineering Science*, v.18, p.787-800, 1980.
- PREZIOSI, L.; JOSEPH, D.D.; BEAVERS, G.S. Infiltration of initially dry, deformable porous media. *International Journal of Multiphase Flow*, v.22, n.6, p.1205-1222, 1996.
- PREZIOSI, L.; JOSEPH, D.D.; BEAVERS, G.S. Infiltration of initially dry, deformable porous media. *International Journal of Multiphase Flow*, v.22, n.6, p.1205-1222, 1996.
- RAIHLE, C.M.; FREDRIKSSON, H. On the formation of pipes and centerline segregates in continuously casting. *Metallurgical and Materials Transactions B*, v.25B, p.123-133, Feb. 1994.
- RAIHLE, C.M.; SIVESSON, P.; FREDRIKSSON, H. Improving inner quality and yield in continuous casting. In: *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VI*, Edited by T.S. Piwonka, V.Voller and L. Katgerman, TMS, 1993, p.577-584.
- RAPPAZ, M.; THÉVOZ, Ph. Solute diffusion model for equiaxed dendritic growth: Analytical solution. *Acta Metall. Materi.* v.35, n.12, p.2929-2933, 1987.
- RICHTER, F.M.; MCKENZIE, D. Dynamical models for melt segregation from a deformable matrix. *Journal of Geology*, v.92, p.729-740, 1984.

- RIZZO, E.M.S. Stress/Strain Effect Modeling in the Macrosegregation Phenomenon During Metallics Alloys Solidification, Internal Report, Department of Mechanical Engineering, The University of Iowa, May 1997.
- ROHDE, W.; FLEMMING, G. Current state, capabilities and further developments of the CSP technology. *Metallurgical Plant and Technology International*, n.4, p.82-98, 1995.
- SAEKI, T. Effect of bulging and solidification structure on segregation in continuously cast slabs. *Transactions ISIJ*, v.24, p.907-916, 1984.
- SAKAKI, G.S.; KWONG, A.T.; PETOZZI, J.J. Soft reduction of continuously-cast blooms at stelco's hilton works. In: *Steelmaking Conference Proceedings 1995*, p.295-300.
- SAMARSKII, A.A.; VABISHCHEVICH, P.N.; ILIEV, O.P.; CHURBANOV, A.G. Numerical Simulation of Convection/Diffusion Phase Change Problems - A Review. *International Journal Heat Mass Transfer*, v.36, n.17, p.4095-5106, 1993.
- SCHNEIDER, M.C.; BECKERMANN, C. A numerical study of the combined effects of microsegregation, mushy zone permeability and flow, caused by volume contraction and thermosolutal convection, on macrosegregation and eutectic formation in binary alloy solidification. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v.38, n.18, p.3455-3473, 1995.
- SCHNEIDER, M.C.; BECKERMANN, C. Formation of macrosegregation by multicomponent thermosolutal convection during the solidification of steel. *Metallurgical and Materials Transactions A*, v.26A, p.2373-2388, Sept. 1995.
- SCHNEIDER, M.C.; BECKERMANN, C. Simulation of micro-/macrosegregation during the solidification of a low-alloy steel. *ISIJ International*, v.35, n.6, p.665-672, 1995.
- SCHNEIDER, M.C.; BECKERMANN, C. Summary of a Method for Numerically Simulating the Columnar Dendritic Solidification of Binary Alloys. Internal Report, Department of Mechanical Engineering, The University of Iowa, Dec. 1992.
- SCHWAHA, K.L.; LINDORFER, B.; BUMBERGER, H.; FÜRST, Ch. Near net shape casting - a status report from VAI. In: *Near Net Shape Casting, Vienna, Proceedings...*, IISI, 1993, p.13-24.
- SHIOMI, M.; ITAKURA, Y.; MORI, K.; OSAKADA, K. Finite element analysis of liquid ejection in continuously cast slab by sequential forging. *International Journal of Machine Tools & Manufacture*, n.38, p.1149-1163, 1998.
- SHYY, W.; UDAYKUMAR, H.S.; RAO, M.M.; SMITH, R. *Computational Fluid Dynamics with Moving Boundaries*. Taylor & Francis, Washington, 1996, 285p.

- SIGWORTH, G.K. Rheological properties of metal alloys in the semi-solid state. *Canadian Metallurgical Quarterly*, v.35, n.2, p.101-122, 1996.
- SIVESSON, P.; RAIHLE, C.M.; KONTTINEN, J. Thermal soft reduction in continuously cast slabs. *Materials Science and Engineering A*, p.299-304, 1993.
- SOMMER, J.L.; MORTENSEN, A. Forced unidirectional infiltration of deformable porous media. *Journal of Fluid Mechanics*, v.311, p.193-207, 1996.
- SPIEGELMAN, M. Flow in deformable porous media. Part 1 Simple analysis. *Journal of Fluid Mechanics*, v.247, p.17-38, 1993A.
- SPIEGELMAN, M. Flow in deformable porous media. Part 2 Numerical analysis - the relationship between shock waves and solitary waves. *Journal of Fluid Mechanics*, v.247, p.39-63, 1993B.
- STEFANESCU, D.M.; UPADHYA, G.; BANDYOPADHYAY, D.; CHEN, I.G. Modeling the Evolution of Equiaxed Microstructures in Castings. *Journal of Metals*, p.22-25, Febr. 1989.
- STEFANESCU, D.M.; UPADHYA, G.; BANDYOPADHYAY, D. Heat Transfer-Solidification Kinetics Modeling of Solidification of Castings. *Metallurgical Transactions A*, v.21, p.997-1005, 1990.
- STEUBE, R.S.; HELLAWELL, A. The use of a transparent aqueous analogue to demonstrate the development of segregation channels during alloy solidification, vertically upwards. *International Video Journal of Engineering Research*, v.3, p.1-16, 1993.
- SUERY, M.; FLEMINGS, M.C. Effect of strain rate on deformation behavior of semi-solid dendritic alloys. *Metallurgical Transactions A*, v.13A, p.1809-1819, Oct 1982.
- SUGIMARU, S. et al. Theoretical analysis of the suppression of solidification shrinkage flow in continuously cast steel blooms. *Materials Science and Engineering A*, v.173, p.305-308, 1993.
- SUZUKI, M.; KIMURA, K.; KAWAMI, A.; MIZUTANI, M. Improvement in center segregation of high carbon steel continuous casting blooms. *La Revue de Métallurgie - CIT*, p.83-92, Jan. 1992.
- SWAMINATHAN, C.R.; VOLLER, V.R. A general enthalpy method for modeling solidification process. *Metallurgical Transactions B*, v.23B, p.651-664, Oct. 1992.
- THOMAS, B.G. Stress modeling of casting processes: an overview. In: *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VI*, Edited by T.S. Piwonka, V. Voller and L. Katgerman, TMS, 1993, p.519-534.

- THOMAS, B.G.; MOITRA, A.; ZHU, H. Coupled thermo-mechanical model of solidifying steel shell applied to depression defects in continuous-cast slabs. In: Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VII, *Proceedings...*, Edited by M. Cross and J. Campbell, TMS, 1995, p.241-248.
- THOMAS, H.R.; HE, Y. Analysis of coupled heat, moisture and air transfer in a deformable unsaturated soil. *Geotechnique*, v.45, n.4, p.677-689, 1995.
- TRANSPORT PHENOMENA IN SOLIDIFICATION, *Proceedings...* ASME, 1994, Ed. C. Beckermann; H.P.Wang; L.A. Bertram; M.S. Sohal, S.I. Guceri.
- TRIVEDI, R. Interdendritic spacing: Part II. A comparison of theory and experiment. *Metallurgical Transactions A*, v.15A, p.977-982, June 1984.
- TSUCHIDA, Y. et. al Behavior of semi-macroscopic segregation in continuously cast slabs and technique for reducing the segregation. *Transactions ISIJ*, v.24, p.899-906, 1984.
- UPADHYA, G.; PAUL, A.J. Comprehensive casting analysis model using a geometry-based technique followed by fully coupled 3-D fluid flow, heat transfer and solidification kinetics calculations. *AFS Transactions*, v.92, p.925-33, 1992.
- VARDOULAKIS, I. Deformation of water-saturated sand: I. uniform undrained deformation and shear banding. *Géotechnique*, v.46, n.3, p.441-456, 1996A.
- VARDOULAKIS, I. Deformation of water-saturated sand: II. effect of pore water flow and shear banding. *Geotechnique*, v.46, n.3, p.457-472, 1996B.
- VAZIRI, H.H. Theory and application of a fully coupled thermo-mechanical finite element model. *Computers & Structures*, v.61, n.1, p.131-146, 1996.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method. Longman Scientific & technical, 1995, 257p.
- VISKANTA, R. Heat Transfer During Melting and Solidification of Metals. *Journal of Heat Transfer*, v.110, p.1205-1219, Nov. 1988.
- VISKANTA, R. Transport phenomena during solidification of binary systems. In: ENCIT- Encontro Nacional de Ciências Térmicas, Rio de Janeiro, dez. 1992, **Anais**. ABCM, p.P-39-P-50.
- VOLLER, V.R. An overview of the modelling of heat and fluid flow in solidification systems. In: Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes V, Edited by M. Rappaz, M. R. Ozgu and K. W. Mahin, TMS, 1991, p.661-673.
- VOLLER, V.R. Fast implicit finite-difference method for the analysis of phase change problems. *Numerical Heat Transfer Part B*, v.17, p.155-69, 1990.

- VOLLER, V.R.; BRENT, A.D. The modelling of heat, mass and solute transport in solidification systems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v.32, n.9 p.1719-1731, 1989.
- VOLLER, V.R.; PRAKASH, C. A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mush region phase-change problems. *International Journal Heat Mass Transfer*, v.30, n.8, p.1709-18, 1987.
- WANG, C.Y.; BECKERMANN, C. Computer simulations of microstructural development in dendritic alloy solidification with convection. In: *Materials Processing in Computer Age - II*; Edited by V.R. Voller, S.P.Marsh and N. El-Kaddah; TMS, 1995, p.129-143.
- WANG, C.Y.; BECKERMANN, C. Single- vs dual-scale volume averaging for heterogeneous multiphase systems. *International Journal of Multiphase Flow*, v.19, n. 2, p.397-407, 1993.
- WHITAKER, S. Flow in Porous Media I: A Theoretical Derivation of Darcy's Law. *Transport in Porous Media*, V.1, p.2-25, 1986.
- WÜNNENBERG, K. 10th Mannesmann continuous casting conference. *Ironmaking and Steelmaking*, n.5, v.22, p.346-348, 1995.
- YU, Q.; MAKHLOUF, M.; APELIAN, D. Effect of stress acting upon the solid network in the two-phase zone during solidification. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v.38, n.1, p.31-38, 1995.
- ZAVALIANGOS, A.; ANAND, L. Thermo-elasto-viscoplasticity of isotropic porous metals. *Journal of the Mechanics Physics of Solids*, v.41, n.6, p.1087-1118, 1993.
- ZAVALIANGOS, A.; LAWLEY, A. Numerical simulation of thixoforming. *Journal of Materials Engineering and Performance*, v.4, n. 1, p.40-47, 1995.
- ZENG, X.; FAGHRI, A. Temperature-transforming model for binary solid-liquid phase-change problems part I: mathematical modeling and numerical methodology. *Numerical Heat Transfer B*, p.467-479, 1994.

