

---

# Universidade Estadual de Campinas

INSTITUTO DE MATEMÁTICA, ESTATÍSTICA E COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA  
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA APLICADA

---

## Algumas Contribuições à Análise Matemática e à Simulação Computacional da Solidificação de Ligas Binárias

Autor: Roberto Carlos Cabrales  
Orientador: Prof. Dr. Marko Rojas Medar  
Co-Orientador: Prof. Dr. Mario Durán Toro

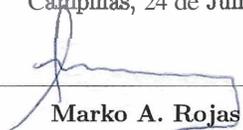
Tese apresentada ao Instituto de Matemática Estatística e Computação Científica, UNICAMP como requisito parcial para obtenção do grau de **Doutor em Matemáticas Aplicadas**.

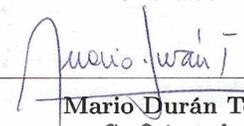
Campinas, Julho de 2007

## Algumas Contribuições à Análise Matemática e à Simulação Computacional da Solidificação de Ligas Binárias

Este exemplar corresponde à redação final da tese devidamente corrigida e defendida por **Roberto Carlos Cabrales** e aprovada pela comissão julgadora.

Campinas, 24 de Julho de 2007.

  
\_\_\_\_\_  
**Marko A. Rojas Medar.** Prof. Dr.  
Orientador

  
\_\_\_\_\_  
**Mario Durán Toro.** Prof. Dr.  
Co-Orientador

### **Banca examinadora:**

Prof. Dr. José Luis Boldrini, U. Estadual de Campinas, Brasil

Prof. Dr. Enrique Fernández-Cara, U. de Sevilla, Espanha

Prof. Dr. Francisco Guillén, U. de Sevilla, Espanha

Prof. Dr. Jaime Ortega, U. del Bío-Bío, Chile

Prof. Dr. Marko Antonio Rojas Medar, U. Estadual de Campinas, Brasil

Tese apresentada ao Instituto de Matemática Estatística e Computação Científica, UNICAMP como requisito parcial para obtenção do grau de **Doutor em Matemáticas Aplicadas.**

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DO IMECC DA UNICAMP  
Bibliotecária: Maria Júlia Milani Rodrigues**

Cabrales, Roberto Carlos

C112a Algumas contribuições à análise matemática e à simulação computacional da solidificação de ligas binárias / Roberto Carlos Cabrales -- Campinas, [S.P. :s.n.], 2007.

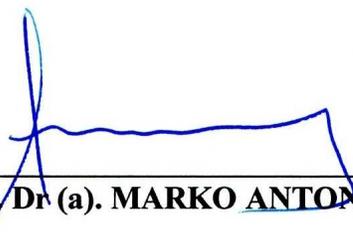
Orientador : Marko Rojas Medar

Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Solidificação. 2. Análise matemática. 3. Simulação (Computadores).  
I. Rojas Medar, Marko. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. III. Título.

**Tese de Doutorado defendida em 24 de julho de 2007 e aprovada**

**Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.**



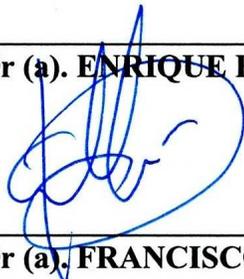
\_\_\_\_\_  
**Prof. (a). Dr (a). MARKO ANTONIO ROJAS MEDAR**



\_\_\_\_\_  
**Prof. (a). Dr (a). JOSÉ LUIZ BOLDRINI**



\_\_\_\_\_  
**Prof. (a). Dr (a). ENRIQUE FERNÁNDEZ CARA**



\_\_\_\_\_  
**Prof. (a). Dr (a). FRANCISCO GUILLÉN GONZÁLEZ**



\_\_\_\_\_  
**Prof. (a) Dr. (a) JAIME ORTEGA PALMA**

---

# AGRADECIMENTOS

*En memória de mi abuela Delia Rebeca Buelvas Salas y de mi amigo Márcio Santos.*

À minha família: minha esposa Paulina, meu filho Luciano e minha filhinha Gabriela que está na barriga da mamãe. Vocês entregaram toda a sua força para mim e deixaram tempo para eu fazer (e desfazer) todo aquilo que esta neste trabalho.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq, pela bolsa de doutorado que me foi concedida entre março de 2000 e maio do 2003.

À Universidade Estadual de Campinas, Unicamp e ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, IMECC por ter permitido realizar meus estudos de Doutorado.

Ao meu orientador Marko Rojas Medar, pelo seu constante encorajamento, apóio e amizade.

Ao meu amigo Arnoldo, pelas longas e frutíferas discussões sobre os aspectos físicos da solidificação e os métodos numéricos usados para sua simulação.

Aos membros da banca examinadora: Jose L. Boldrini, Enrique Fernández-Cara, Francisco Guillén e Jaime Ortega, pelas sugestões e correções no trabalho.

Aos amigos do IMECC: Rogério, Benáia (pela permissão no uso e abuso do seu PC) e Lucy.

Aos amigos da plutocracia: Protásio, André, Bruno, Júnior e Luiz negão.

Aos amigos chilenos: Sebastián, Joaquín, Gustavo e Paul.

Aos meus colegas e amigos da Universidad del Bío-Bío: Ivo, Fernando, Luis Lillo, Luis Friz, Gerardo, Julio, ao "big boss" Fernando pelo apóio e ao Jaime Ortega por acreditar em mim.

Aos meus amigos colombianos: Sofia, Márlío e Elder,

Ao meu amigo peruano: Yurilev.

---

# *RESUMO*

O estudo dos processos de solidificação de metais e ligas é um dos problemas mais complexos da engenharia, tanto do ponto de vista teórico como tecnológico. A complexa natureza dos fenômenos físicos envolvidos fazem impossível a obtenção de soluções de forma simples. Por isto, temos que usar sofisticados modelos matemáticos formados por sistemas de equações diferenciais em derivadas parciais de evolução e não lineares.

No presente trabalho estamos preocupados dos aspectos computacionais da solidificação de ligas binárias: apresentamos um algoritmo numérico que está baseado no método dos volumes finitos em malhas colocalizadas e o método de Euler implícito para o avanço no tempo. Diversos problemas documentados na literatura são usados para verificar a implementação dos algoritmos. Também, apresentamos simulações numéricas que caracterizam e verificam numericamente a formação de canais de convecção.

---

# *ABSTRACT*

The study of metals solidification processes and alloys is a very complex problem in engineering, from the theoretical point of view and from the technological point of view. By the complex nature of the physical phenomena involved it is impossible to find solutions of simple nature. So, we have to use sophisticated mathematical models consisting of non-linear time dependent partial differential equations.

In this work we are concerned with the computational aspect of the solidification of binary alloys: we present a numerical algorithm based in the finite volume method in co-located grids and the implicit Euler method for time advancing. Several problems documented in the literature are used to verify the implementation of the algorithms. Second, we present numerical simulations characterizing and validating the freckles formation.

*Sin embargo, antes de llegar al verso final ya habia comprendido que no saldría jamás de ese cuarto, pues estaba previsto que la ciudad de los espejos (o los espejismos) sería arrasada por el viento y desterrada de la memoria de los hombres en el instante en que Aureliano Babilonia acabara de descifrar los pergaminos, y que todo lo escrito en ellos era irrepetible desde siempre y para siempre, por que las estirpes condenadas a cien años de soledad no tenían una segunda oportunidad sobre la tierra.*

---

# CONTEÚDO

<b>Agradecimentos</b>	<b>v</b>
<b>Resumo</b>	<b>vii</b>
<b>Abstract</b>	<b>ix</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>xv</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xvii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 O Modelo Matemático</b>	<b>5</b>
2.1 O problema da cavidade . . . . .	5
2.2 Aspectos Físicos da Solidificação . . . . .	6
2.2.1 O Diagrama de Fases . . . . .	7
2.3 Princípios de Conservação . . . . .	11
2.3.1 Conservação do Momentum . . . . .	12
2.3.2 Conservação da massa . . . . .	13
2.3.3 Conservação da energia . . . . .	14
2.4 Resumo do Modelo Matemático . . . . .	14
<b>3 Simulação Numérica do Problema de Solidificação</b>	<b>17</b>
3.1 A Equação de Difusão-Convecção . . . . .	17
3.1.1 Discretização Espacial: Volumes Finitos . . . . .	18
3.1.2 Discretização Temporal: O Método de Euler Implícito . . . . .	25
3.1.3 Sub-relaxação e Sobre-relaxação . . . . .	26
3.2 As Equações de Navier-Stokes . . . . .	27
3.2.1 Introdução . . . . .	28
3.2.2 O Método SIMPLER para malhas co-localizadas . . . . .	29
3.2.3 Algoritmo SIMPLER em malhas colocadas . . . . .	32

---

3.2.4	Experimentos Numéricos I: Fluxo numa cavidade quadrada . . . . .	33
3.2.5	Experimentos Numéricos II: Convecção natural . . . . .	33
3.3	As Equações de Solidificação . . . . .	35
3.3.1	Algoritmo . . . . .	38
<b>4</b>	<b>Resultados Numéricos</b>	<b>41</b>
4.1	Experimentos Numéricos I: Gradiente horizontal da densidade . . . . .	42
4.2	Experimentos Numéricos II: Gradiente vertical da densidade . . . . .	45
<b>5</b>	<b>Conclusões</b>	<b>69</b>
5.1	Futuras Linhas de Pesquisa . . . . .	69
<b>A</b>	<b>Parâmetros Físicos da liga Pb-Sn</b>	<b>71</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>73</b>

---

# LISTA DE FIGURAS

1.1	<i>Exemplo da formação de freckles.</i> . . . . .	2
2.1	<b>Lado esquerdo:</b> Esquema do experimento da cavidade, mostrando um detalhe da forma na que crescem as dendritas. A temperatura do lado superior (vermelho) é superior à do lado inferior (azul) e não é permitida entrada nem saída de soluto. <b>Lado direito:</b> Detalhe do crescimento dendrítico do cobre. Foto de Arnaldo Badillo.	6
2.2	Diagrama de Fase em termos da concentração $c$ e a temperatura $\theta$ . A linha inclinada vermelha é a curva de liquidus e a linha inclinada azul e a curva de solidus. . . . .	8
2.3	Diagrama de Fase em termos da concentração $c$ e da entalpia $\mathcal{E}$ . . . . .	10
2.4	Esquema do molde de solidificação, ilustrando algumas das zonas do molde, as interfaces e áreas da fronteira. . . . .	15
3.1	<i>Exemplo de uma partição para um domínio <math>\Omega</math> rectangular em volumes de control.</i> . . . . .	19
3.2	<i>Exemplo de uma partição para um domínio <math>\Omega</math> bidimensional rectangular ilustrando os volumes de controle (volume cinza), os nós computacionais (pontos pretos) e as linhas de conexão entre eles (linhas finas).</i> . . . . .	20
3.3	<i>Exemplo de uma partição para um domínio <math>\Omega</math> tridimensional em forma de paralelepípedo rectangular ilustrando os volumes de controle e os nós computacionais (em cor azul).</i> . . . . .	21
3.4	<i>Volume de controle interno em duas dimensões.</i> . . . . .	21
3.5	<i>Volume de controle interno em três dimensões ilustrando a nomenclatura e o tamanho das arestas.</i> . . . . .	22
3.6	<i>Ilustração do modelo "tube and tank".</i> . . . . .	23
3.7	<i>Variação do coeficiente <math>a_E</math> em relação ao número de Péclet. Apresentamos também os casos limites.</i> . . . . .	25
3.8	<i>Malha desencontrada em 2D. A figura ilustra os nós de cada uma das variáveis e os volumes de controle: pressão (círculo preto, volume cinza), componente horizontal da velocidade (triângulo azul, volume azul claro) e componente vertical da velocidade (triângulo vermelho, volume amarelo).</i> . . . . .	29
3.9	<i>Exemplo de uma malha colocada em 2D, ilustrando um volume de controle típico.</i> . . . . .	30

3.10	<i>Navier-Stokes: Fluxo numa cavidade com tampa deslizante. <math>Re = 10^3</math>, tempo = 20 seg. Desenho das linhas de corrente e das linhas de contorno da pressão. Natação a formação de vórtices nas esquinas inferiores da cavidade, aspecto típico deste problema.</i>	34
3.11	<i>Convecção Natural numa cavidade quadrada. <math>Pr = 0,71, Ra = 10^3</math>. O gráfico ilustra o campo de temperaturas e algumas isotermas (linhas em preto). Também são ilustradas algumas linhas de fluxo (linhas brancas).</i>	35
3.12	<i>Convecção Natural numa cavidade quadrada. <math>Pr = 0.71, Ra = 10^4</math>. O gráfico ilustra o campo de temperaturas e algumas isotermas (linhas em preto). Também são ilustradas algumas linhas de fluxo (linhas brancas).</i>	36
3.13	<i>Convecção Natural numa cavidade quadrada. <math>Pr = 0.71, Ra = 10^5</math>. O gráfico ilustra o campo de temperaturas e algumas isotermas (linhas em preto). Também são ilustradas algumas linhas de fluxo (linhas brancas).</i>	37
4.1	<i>Solidificação: Temperatura e velocidade. <math>t = 205</math> seg.</i>	43
4.2	<i>Solidificação: Concentração e velocidade. <math>t = 205</math> seg.</i>	43
4.3	<i>Solidificação: Fração de Sólido e velocidade. <math>t = 205</math> seg.</i>	44
4.4	<i>Solidificação: Densidade e velocidade. <math>t = 205</math> seg.</i>	44
4.5	<i>Solidificação: Temperatura e velocidade. <math>t = 405</math> seg.</i>	46
4.6	<i>Solidificação: Concentração e velocidade. <math>t = 405</math> seg.</i>	47
4.7	<i>Solidificação: Fração de Sólido e velocidade. <math>t = 405</math> seg.</i>	47
4.8	<i>Solidificação: Densidade e velocidade. <math>t = 405</math> seg.</i>	48
4.9	<i>Solidificação: Temperatura e velocidade. <math>t = 645</math> seg.</i>	48
4.10	<i>Solidificação: Concentração e velocidade. <math>t = 645</math> seg.</i>	49
4.11	<i>Solidificação: Fração de Sólido e velocidade. <math>t = 645</math> seg.</i>	49
4.12	<i>Solidificação: Densidade e velocidade. <math>t = 645</math> seg.</i>	50
4.13	<i>Solidificação: Temperatura e velocidade. <math>t = 765</math> seg.</i>	50
4.14	<i>Solidificação: Concentração e velocidade. <math>t = 765</math> seg.</i>	51
4.15	<i>Solidificação: Fração de Sólido e velocidade. <math>t = 765</math> seg.</i>	51
4.16	<i>Solidificação: Densidade e velocidade. <math>t = 765</math> seg.</i>	52
4.17	<i>Peça metálica com freckles. Tomada de <a href="http://www.icaen.uiowa.edu/becker">http://www.icaen.uiowa.edu/becker</a>.</i>	54
4.18	<i>Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.</i>	56
4.19	<i>Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.</i>	57
4.20	<i>Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.</i>	58
4.21	<i>Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.</i>	59
4.22	<i>Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.</i>	60
4.23	<i>Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.</i>	61
4.24	<i>Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.</i>	62

---

4.25	<i>Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior. . . . .</i>	63
4.26	<i>Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior. . . . .</i>	64
4.27	<i>Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior. . . . .</i>	65
4.28	<i>Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior. . . . .</i>	66
4.29	<i>Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior. . . . .</i>	67

---

# *LISTA DE TABELAS*

4.1	Resumo dos resultados apresentados para a liga $Pb-48\%Sn$ para o caso de gradiente vertical de densidade. . . . .	45
4.2	Resumo dos resultados apresentados para a liga $Pb-48\%Sn$ para o caso de gradiente vertical de densidade. . . . .	55
A.1	Propriedades Físicas da liga Pn-Sn . . . . .	71

---

---

# CAPÍTULO 1

---

## INTRODUÇÃO

A elaboração de novas ligas metálicas é o principal objetivo da engenharia metalúrgica. Muitos profissionais da área dedicam grandes esforços e recursos econômicos para entender as diferentes propriedades dos metais. Baseados na sua experiência, misturas originais de vários elementos tem sido utilizadas para muitas aplicações práticas: na fabricação de partes fundamentais na indústria aeronáutica (turbinas por exemplo), de carros, peças de equipamentos eletrônicos, etc.

Em geral, a qualidade das ligas depende das proporções dos metais utilizados e existem especificações a serem seguidas segundo normas estritas. Desta forma, se obtém uma liga com determinadas propriedades mecânicas, térmicas, magnéticas, etc, que sejam adequadas às necessidades do projeto desenvolvido. Em alguns casos, a solidificação rápida destas ligas no seu processo de fabricação é uma das principais razões de falha antes do tempo previsto pelo desenho industrial. A liga resultante não possui as especificações desejadas devido a que sua natureza não foi mantida sob controle. O problema se origina no processo de fabricação e não na seleção do material usado. Por tanto, um melhor entendimento da evolução da solidificação é necessário para melhorar a qualidade das ligas obtidas.

O estudo dos processos de solidificação de metais e ligas é um dos problemas mais complicados de resolver na engenharia, tanto do ponto de vista teórico e tecnológico. A complexa natureza dos fenômenos físicos envolvidos é um impedimento para obter soluções adequadas de maneira simples. Para isto, temos que fazer uso de sofisticados modelos matemáticos que, em general, são formados por sistemas de equações diferenciais em derivadas parciais evolutivas e não lineares. Pelo correto uso das leis que governam o processo de solidificação (físicas, químicas, etc), o profundo análise matemático das equações envolvidas, métodos numéricos adequados e uma boa simulação computacional, é possível melhorar o entendimento deste fenômeno, influenciando assim no desenho, qualidades dos produtos, diminuição dos custos entre outros aspectos.

O processo de solidificação pode ser considerado como uma mudança no ordenamento atômico desde um estado desorganizado até a formação de uma estrutura ordenada, conhecida como estrutura cristalina, e que inclui a nucleação e o crescimento de cristais, os quais produzem diferenças no processo quando tratamos com substâncias puras ou ligas. A mudança de fase é produzida na temperatura de solidificação, que é mais baixa que a temperatura de fusão, devido ao sub-esfriamento necessário para gerar a força que ocasiona a transformação líquido-sólido. Um dos processos de



Figura 1.1: *Exemplo da formação de freckles.*

interesse é a solidificação de ligas, onde não existe um frente de solidificação plano, mas gera-se um crescimento dendrítico, devido à diferença de solubilidade entre o líquido e o sólido. Este crescimento dendrítico, gera uma zona com presença de sólido y líquido, chamada zona de mescla, e onde o conhecimento das propriedades físicas é um grande desafio.

Consideremos a solidificação de uma liga binária. Suponhamos que a liga está inicialmente completamente líquida, e com uma concentração homogêneo em cada um de seus componentes. Dependendo das condições de esfriamento e outros diversos fatores, o produto solidificado final pode ter grandes variações espaciais nas concentrações dos diferentes componentes, o que é um defeito no desenho da liga, e que pode trazer como consequência, por exemplo, que os equipamentos elaborados com estes materiais sejam de baixa qualidade.

O principal objetivo do presente trabalho, é desenhar técnicas numéricas que permitam simular computacionalmente a formação destes defeitos, em particular, a formação de chaminés de convecção de soluto, as quais são apontadas como uma das causas para a formação de sardas (freckles, no inglês) as quais fazem que o material obtido possua, em alguns lugares, propriedades metalúrgicas diferentes daquelas calculadas pelo desenho industrial, como a dureza e a maleabilidade (veja a figura 1.1). Abordamos o modelamento matemático e a simulação numérica do problema de solidificação de ligas binárias, explicando em detalhe os algoritmos usados e sua implementação computacional. Todo isto é complementado com a apresentação de diferentes experimentos numéricos que podem ser encontrados na literatura. Alguns deles são usados para validar a implementação dos algoritmos e discutir as diferenças, coincidências e possíveis melhoras obtidas pelos procedimentos adotados por nós.

Para atingir este objetivo, apresentamos em primeiro lugar, o modelo matemático considerado. Em particular, estamos interessados no modelo para ligas binárias, mas ele pode ser estendido para o caso da solidificação de metais puros ou de ligas de mais de dois componentes. Este modelo considera equações de conservação para as variáveis da velocidade, temperatura e concentração, além de relações termodinâmicas entre elas que permitem o cálculo de outras quantidades de interesse como a entalpia, a fração de sólido e a concentração líquida.

O primeiro em formular um modelo matemático rigoroso foi Flemings junto aos seus colaboradores no final da década dos 60's. Eles consideram o fluxo do material líquido a traves das dendritas, as quais são consideradas como uma rede sólida. O fluxo na região líquida e o movimento ou a deformação do sólido não foram tratados explicitamente. Usando um balanço de massa e de soluto num volume elementar de mescla, que é feito considerando a possibilidade saída ou entrada de

---

líquido neste volume e também, supondo densidades diferentes nas duas fases, Flemings derivou a *equação de redistribuição local de soluto*, *LSRE*. Depois, Mehrabian e colaboradores propuseram que o fluxo de líquido na zona de mescla poderia ser calculado usando a lei de Darcy para fluxos em meios porosos. Em 1981, Rider e colaboradores publicam pela primeira vez, um modelo onde se toma em conta o acople que existe entre as zonas de mescla e a zona líquida. Neste caso, resolve-se ao mesmo tempo a lei de Darcy, a equação da energia e a *LSRE* na zona de mescla.

Neste capítulo explicamos os principais mecanismos físicos presentes na solidificação de ligas binárias. O capítulo começa com uma descrição do problema da cavidade, que nos ajuda a introduzir a nomenclatura associado à solidificação. Depois fazemos uma revisão dos aspectos físicos do fenômeno, prestando atenção ao diagrama de fases que permite descrever os estados da liga e também determinamos as relações termodinâmicas que permitem construir o modelo. Finalmente, apresentamos os princípios de conservação considerados para derivar o sistema de equações que usamos para modelar a solidificação de ligas (binárias), detalhando as simplificações consideradas para obter o modelo final.

Depois, descrevemos as técnicas numéricas usadas para determinar o sistema de equações (em dimensão finita) que permite calcular aproximações numéricas das variáveis envolvidas no fenômeno de solidificação. Em geral, as equações de conservação que descrevem a solidificação, são do tipo difusão-convecção. Por isto, o capítulo começa com a descrição da discretização desta equação usando o método dos volumes finitos para o tratamento espacial e o método de Euler implícito para o tratamento das derivadas temporais. Depois, descrevemos o algoritmo para discretizar as equações de Navier-Stokes. Neste trabalho consideramos o método SIMPLER em malhas co-localizadas, onde todas as variáveis de interesse são guardadas no mesmo nó computacional. A seguir, juntamos as idéias anteriores para elaborar o algoritmo numérico usado na simulação computacional do fenômeno de solidificação. Diversos experimentos numéricos documentados na literatura são apresentados para validar a implementação computacional dos algoritmos.

Finalmente, são enumeradas as principais conclusões do presente trabalho e apresentamos futuras linhas de trabalho.

---

---

## CAPÍTULO 2

---

# O MODELO MATEMÁTICO

Começamos o presente capítulo apresentando um exemplo que serve para introduzir a nomenclatura associada à solidificação de ligas. A seguir, descrevemos os principais aspectos físicos do fenômeno, discutindo os diferentes princípios físicos usados e as simplificações consideradas. Finalmente, fazemos um resumo do sistema de equações matemáticas consideradas no trabalho.

### 2.1 O problema da cavidade

Consideremos a seguinte situação em duas dimensões: temos uma cavidade de forma retangular preenchida com uma liga em estado líquido, submetida à ação da força da gravidade. Supomos que a liga é binária, isto é, a liga está formada por dois componentes. O componente que está em maior quantidade, chama-se *solvente* e o outro *soluto*. Juntos formam a *solução* e a *concentração* é a propriedade que nos diz a proporção de soluto na solução.

Supomos que a concentração inicial de soluto é homogênea. Supomos também que a mescla possui uma temperatura inicial constante e superior à temperatura de fusão e que a mescla está em repouso. A seguir, o lado inferior da cavidade é submetido a resfriamento, entretanto que o lado superior é mantido à temperatura inicial e os outros são isolados termicamente (veja a Figura 2.1). Não é permitida a entrada e saída de soluto. O objetivo do experimento é estudar a evolução da concentração de soluto dentro da cavidade. A solidificação da liga começa no lado inferior da cavidade. Este é o processo de transporte de calor: as regiões que estão perto deste lado da cavidade, experimentam uma *mudança de fase*, passando da fase líquida à sólida. A superfície que separa estas fases, se chama *frente de solidificação* e, em geral, é de forma irregular ou dendrítica no caso de solidificação rápida. O crescimento do frente de solidificação é instável (veja a figura 2.1)

Por outro lado, lembremos que o fluido está submetido à ação da gravidade. Se o gradiente de temperatura é suficientemente grande, o processo de convecção natural começará imediatamente. Isto é o processo de transporte de momentum. Agora, pelas condições fixadas para o experimento, o soluto é conservado, mas é conhecido que a solubilidade deste é menor no sólido que no líquido. Logo, alguma parte do soluto é levado pelas correntes de convecção do sólido ao líquido. Este processo, que se apresenta na escala da cavidade, é conhecido como *macrosegregação*. Também

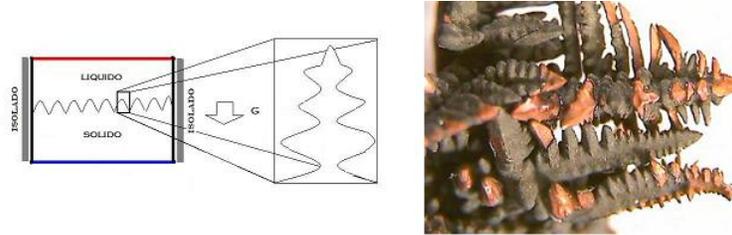


Figura 2.1: **Lado esquerdo:** Esquema do experimento da cavidade, mostrando um detalhe da forma na que crescem as dendritas. A temperatura do lado superior (vermelho) é superior à do lado inferior (azul) e não é permitida entrada nem saída de soluto. **Lado direito:** Detalhe do crescimento dendrítico do cobre. Foto de Arnaldo Badillo.

é possível que uma parte do soluto rejeitado do sólido seja capturado pelas ramas das dendritas antes de ser transportado no interior da fase líquida. Isto origina a formação de pequenos nódulos de soluto altamente concentrado. Este fenômeno chama-se *microsegregação*.

## 2.2 Aspectos Físicos da Solidificação

No presente trabalho consideramos o modelo para a solidificação de uma liga binária formada por dois componentes: o soluto e o solvente. A dedução detalhada das equações que formar este modelo são apresentadas no trabalho de [Ahm95] e não serão repetidas aqui. Agora, é preciso estabelecer alguma nomenclatura e conceitos básicos.

A forma geométrica irregular do frente no caso de solidificação rápida é complexa demais, pelo que, na prática é impossível descreve-la totalmente (ainda numericamente, já que é preciso um grande custo computacional). Ao invés de calcular explicitamente a forma geométrica do frente, tem surgido técnicas que usam volumes promédio para encontrar as equações de conservação que governam a solidificação de sistemas (veja [NB91]). Nesta aproximação, se faz uma ponderação sobre cada uma das fases das equações de conservação para as variáveis de interesse (como temperatura, concentração, velocidade). O princípio deste procedimento, é integrar as variáveis num volume elementar, cada variável na sua própria fase. O efeito deste procedimento é que a forma final do frente desaparece e é substituída por uma zona de estado intermediário: entre sólido e líquido. Esta zona se chama *zona de mescla*, o ainda no inglês *mushy zone*.

Esta zona de mescla, **não é** uma terceira fase e somente faz referência a uma região onde temos coexistência (no nível macroscópico) das fases líquida e sólida. No interior desta zona, a proporção de cada fase é dada pela função de *fração de sólido*  $f_s$ , que é uma função que indica a fração de matéria no estado sólido por unidade de volume. Também temos a *fração de líquido*  $f_l := 1 - f_s$ , que indica a fração de matéria no estado líquido por unidade de volume.

Para modelar o transporte de soluto na região de mescla, denotamos por  $c_s$  a concentração de soluto no sólido e por  $c_l$  a concentração de soluto no líquido. Se consideramos que a velocidade de difusão é infinita dentro de uma caixa isotérmica elementar localizada no interior da zona de mescla (regra de nível), então as concentrações líquida e sólida são constantes nessa caixa e assim,

se define a concentração media  $c$  como

$$c = c_l \mathbf{f}_l + c_s \mathbf{f}_s = c_l(1 - \mathbf{f}_s) + c_s \mathbf{f}_s. \quad (2.1)$$

Esta decomposição é importante, já que, como anotado antes, o transporte de soluto no sólido é menor em várias ordens de grandeza que no líquido. Isto é pela advecção de soluto e a diferença da difusividade de massa.

Por outro lado, como a caixa é isotérmica, temos que  $\theta = \theta_s = \theta_l$ . No caso do momentum, a parte sólida da liga é suposta estática, isto é,  $\mathbf{v}_s = \mathbf{0}$  e assim, a equação de conservação de momento aplica-se à quantidade  $\mathbf{v} = \mathbf{f}_l \mathbf{v}_l$ .

**Observação 2.1** *Pelo processo de ponderação, a derivação rigorosa da equação de conservação de momentum (veja o capítulo 2 da tese de [Ahm95]) entrega alguns termos diferentes para a velocidade na zona de mescla. Por isto, tomou-se a decisão de simplificar a equação de momentum para obter uma equação de Navier-Stokes modificada bem parecida à clássica. Logo,  $\mathbf{v}$  denota a velocidade no líquido sem ponderação pela fração de sólido.*

### 2.2.1 O Diagrama de Fases

Supomos que o processo de solidificação ocorre na presença de equilíbrio termodinâmico. Neste caso, fazemos uso do *diagrama de fase* (veja a Figura 2.2) para determinar o estado da liga. Para o caso de uma liga binária (de dois componentes), o diagrama de fase tem a forma ilustrada pela figura 2.2.

Neste caso, o eixo coordenado horizontal representa a concentração  $c$  e o eixo coordenado vertical representa a temperatura  $\theta$ . A temperatura  $\theta_F$  é a *temperatura de fusão* (na que o solvente puro muda de fase) e a temperatura  $\theta_E$  é a *temperatura eutética*. Por baixo desta temperatura não tudo está no estado sólido sem importar a concentração.

O diagrama de fases também esta formado por duas curvas (veja a Figura 2.2): a curva de liquidus:

$$\begin{aligned} \gamma_l : [\theta_E, \theta_F] &\rightarrow \mathbb{R}_+ \\ \theta &\mapsto \gamma_l(\theta) = P(\theta - \theta_F) \end{aligned} \quad (2.2)$$

e a curva de solidus:

$$\begin{aligned} \gamma_s : [\theta_E, \theta_F] &\rightarrow \mathbb{R}_+ \\ \theta &\mapsto \gamma_s(\theta) = \kappa \gamma_l(\theta) \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde  $P$  é uma constante negativa e  $\kappa \in [0, 1]$  é o *radio de segregação*. Estas curvas são tais que  $\gamma_s(\theta_F) = \gamma_l(\theta_F) = 0$  e  $\gamma_s(\theta) < \gamma_l(\theta)$  para todo  $\theta \in [\theta_E, \theta_F]$ . A concentração  $c_{\max} := \gamma_l(\theta_E)$  se chama *concentração eutética* e em nosso modelo supomos que  $c \leq \gamma_l(\theta_E)$ .

Dada uma temperatura  $\theta \in [\theta_E, \theta_F]$ , a quantidade  $\gamma_l(\theta)$  é a concentração de soluto para a qual a liga líquida começa a solidificar e a quantidade  $\gamma_s(\theta)$  é a concentração de soluto para a qual a liga sólido começa a se fundir. Usando o diagrama de fases obtemos que

$$P = \frac{c_{\max}}{\theta_E - \theta_F}, \quad (2.4)$$

$$\kappa = \frac{c_{\max}}{c_A} \quad (2.5)$$

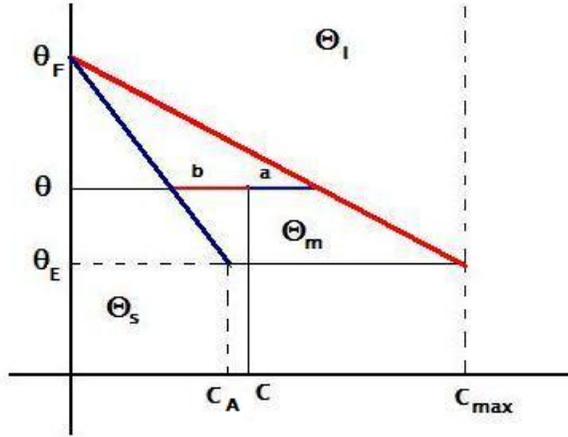


Figura 2.2: Diagrama de Fase em termos da concentração  $c$  e a temperatura  $\theta$ . A linha inclinada vermelha é a curva de liquidus e a linha inclinada azul é a curva de solidus.

onde  $c_A = \gamma_s(\theta_E)$ .

Seja  $\mathcal{O} := [0, \gamma_l(\theta_E)] \times [0, \infty) \subset \mathbb{R}^2$ . Usando as curvas de liquidus e de solidus podemos fazer um divisão do diagrama de fases nos seguintes conjuntos:

$$\mathcal{O}_S = \{(c, \theta) \in \mathcal{O} : c \leq \gamma_s(\theta) \text{ e } \theta \in [\theta_E, \theta_F)\} \cup \{(c, \theta) \in \mathcal{O} : \theta < \theta_E\}, \quad (2.6)$$

$$\mathcal{O}_E = (\gamma_s(\theta_E), \gamma_l(\theta_E)] \times \{\theta_E\}, \quad (2.7)$$

$$\mathcal{O}_M = \{(c, \theta) \in \mathcal{O} : c \in (\gamma_s(\theta), \gamma_l(\theta)) \text{ e } \theta \in (\theta_E, \theta_F)\}, \quad (2.8)$$

$$\mathcal{O}_F = \{(0, \theta_F)\}, \quad (2.9)$$

$$\mathcal{O}_L = \{(c, \theta) \in \mathcal{O} : \gamma_l(\theta) < c \text{ e } \theta \in (\theta_E, \theta_F)\} \cup \{(c, \theta) \in \mathcal{O} : \theta_F < \theta\} \quad (2.10)$$

Dada uma temperatura  $\theta \in (\theta_E, \theta_F)$ , o diagrama de fases determina a concentração de soluto  $\gamma_s(\theta)$  onde a liga no estado sólido começa-se a fundir e a concentração de soluto  $\gamma_l(\theta)$  para a qual o líquido começa-se a solidificar.

Seguindo a definição dos engenheiros metalúrgicos, a região de mescla corresponde a aqueles pontos  $(c, \theta)$  no diagrama de fase para os quais  $c \in [\gamma_s(\theta), \gamma_l(\theta)]$  e para os quais  $\theta \in [\theta_E, \theta_F]$ . Em cada um destes pontos  $(c, \theta)$  temos que  $c = \gamma_l(\theta)(1 - \mathbf{f}_s) + \gamma_s(\theta)\mathbf{f}_s$ . Logo

$$\mathbf{f}_s(c, \theta) = \frac{c - \gamma_l(\theta)}{\gamma_s(\theta) - \gamma_l(\theta)} = \frac{a}{a + b} \quad (2.11)$$

onde  $a := \gamma_l(\theta) - c$  e  $b := c - \gamma_s(\theta)$  (veja a figura 2.2). Naturalmente, a fração de sólido é igual a um na zona sólida e é zero na zona líquida. Existem duas situações nas quais a fração de sólido é uma função multivaluada: quando temos mudança de fase na presença de concentração nula e temperatura de fusão (neste caso  $\mathbf{f}_s(0, \theta_F) \in [0, 1]$ ) e quando  $\theta = \theta_E$ . Neste caso

$$\mathbf{f}_s(c, \theta_E) \in \left[ \frac{c - \gamma_l(\theta)}{\gamma_s(\theta) - \gamma_l(\theta)}, 1 \right]$$

para  $\gamma_s(\theta) < c \leq \gamma_l(\theta)$ .

Usando os conjuntos definidos em (2.6)-(2.10), temos que

$$\mathbf{f}_s(c, \theta) \in \begin{cases} \{1\} & \text{em } \mathcal{O}_S \\ \left[ \frac{c - \gamma_l(\theta)}{\gamma_s(\theta_E) - \gamma_l(\theta_E)}, 1 \right] & \text{em } \mathcal{O}_E \\ \left\{ \frac{c - \gamma_l(\theta)}{\gamma_s(\theta) - \gamma_l(\theta)} \right\} & \text{em } \mathcal{O}_M \\ [0, 1] & \text{em } \mathcal{O}_F \\ \{0\} & \text{em } \mathcal{O}_L, \end{cases} \quad (2.12)$$

para a fração de sólido e

$$c_l(c, \theta) = \begin{cases} \frac{c}{\kappa} & \text{em } \mathcal{O}_S \\ \gamma_l(\theta_E) & \text{em } \mathcal{O}_E \\ \gamma_l(\theta) & \text{em } \mathcal{O}_M \\ 0 & \text{em } \mathcal{O}_F \\ c & \text{em } \mathcal{O}_L, \end{cases} \quad (2.13)$$

para a concentração líquida.

Usando o diagrama de fases podemos estabelecer uma relação entre a entalpia  $\mathcal{E}$ , a temperatura  $\theta$  e a concentração  $c$ . Esta relação é dada pela seguinte equação:

$$\mathcal{E} = \rho C_p \theta + (1 - \mathbf{f}_s)L, \quad (2.14)$$

onde  $\rho$  é a densidade,  $C_p$  o calor específico e  $L$  o calor latente (que representa a energia que necessária para uma mudança completa da fase de uma unidade de volume sujeita à temperatura de fusão e concentração nula). Estas propriedades se assumem constantes.

A definição dada em (2.12) para a fração de sólido como uma função multivaluada gera problemas no sistema que modela a solidificação no estado transiente, já que, neste caso, todo o problema tem que ser estabelecido em termos de funções de valor múltipla. Isto é originado pela dependência da temperatura e da concentração. De fato, quando consideramos a entalpia como uma função da temperatura e da concentração, ela não é contínua. Entretanto, se consideramos a temperatura como uma função da concentração e da entalpia, ela é uma função de Lipschitz. Logo, temos que considerar a temperatura e a fração de sólido como dependendo da concentração e da entalpia.

Supondo que as curvas de solidus e liquidus são linhas retas, estas variáveis podem ser escritas explicitamente em termos da concentração e da entalpia. Esta nova função será denotada como  $f_s$ . Para encontrar a expressão que define  $f_s$ , temos em conta o seguinte:

1. O gráfico da fração de sólido  $\mathbf{f}_s$  no conjunto  $\mathcal{O}_M$  é uma superfície paramétrica em relação à  $\theta$  e  $\mathbf{f}_s$ .
2. Os valores da fração de sólido na fronteira do conjunto de mescla  $\mathcal{O}_M$  podem ser deduzido usando o valor desta na fronteira dos conjuntos sólido e líquido, exceto pelo conjunto  $\mathcal{O}_E$ . O valor da fração de sólido neste conjunto pode ser encontrado sob a hipótese de que, quando tivermos concentração constante em  $\mathcal{O}_E$ , a variação na fração de sólido é proporcional à variação na entalpia.

A Figura 2.3 ilustra o diagrama de fases em termos das novas variáveis  $\mathcal{E}$  e  $c$ . Definindo  $\mathcal{S} = [0, \gamma_l(\theta_E)] \times [0, \infty)$ , os conjuntos  $\mathcal{S}_i, i = S, E, L, M$  escrevem-se como

$$\mathcal{S}_S = \{(c, \mathcal{E}) \in \mathcal{S} : \mathcal{E} < \rho C_p \theta_E\} \cup \{(c, \mathcal{E}) \in \mathcal{S} : c < \gamma_s(\theta_E) \text{ y } \gamma_s(\theta_E)(\rho C_p \theta_F - \mathcal{E}) > \rho C_p(\theta_F - \theta_E)c\}, \quad (2.15)$$

$$\mathcal{S}_E = \{(c, \mathcal{E}) \in \mathcal{S} : \mathcal{E} \geq \rho C_p \theta_E \text{ y } (\gamma_l(\theta_E) - \gamma_s(\theta_E))\mathcal{E} \leq L(c - \gamma_s(\theta_E))\}, \quad (2.16)$$

$$\mathcal{S}_L = \{(c, \mathcal{E}) \in \mathcal{S} : \rho C_p(\theta_F - \theta_E)c \geq \gamma_l(\theta_E)(\rho C_p \theta_F + L - \mathcal{E})\} \quad (2.17)$$

$$\mathcal{S}_M = \mathcal{S} \setminus (\mathcal{S}_S \cup \mathcal{S}_E \cup \mathcal{S}_L) \quad (2.18)$$

Note que o ponto  $(0, \theta_F) \in M_{OF}$  no diagrama de fase  $c - \theta$  é enviado nos pontos  $(0, \mathcal{E})$  do segmento  $\{0\} \times [\rho C_p \theta_F, \rho C_p \theta_F + L] \subset \mathcal{S}_M$  do diagrama de fase  $c - \mathcal{E}$ .

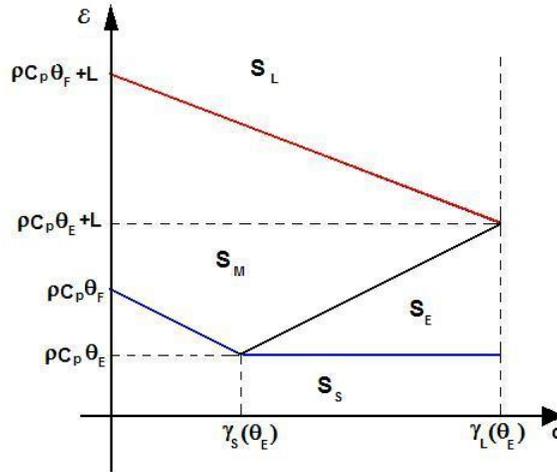


Figura 2.3: Diagrama de Fase em termos da concentração  $c$  e da entalpia  $\mathcal{E}$ .

Neste ponto temos as variáveis  $\tilde{c}, \tilde{\mathcal{E}}, \tilde{\theta}$  e  $\tilde{f}_s$  que estão relacionadas pelas seguintes equações:

$$\tilde{\mathcal{E}} = \rho C_p \tilde{\theta} + (1 - \tilde{f}_s)L, \quad (2.19)$$

$$\tilde{f}_s = f_s(\tilde{c}, \tilde{\theta}), \quad (2.20)$$

onde  $f_s$  é dada pela equação (2.12). O seguinte resultado diz a forma na que temos que selecionar as variáveis livres  $\tilde{c}$  e  $\tilde{\mathcal{E}}$ .

**Proposição 2.1** *Existem duas funções  $f_s : \mathcal{S} \rightarrow [0, 1]$  e  $\theta : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}_+$  tais que*

$$\tilde{\mathcal{E}} = \rho C_p \theta(\tilde{c}, \tilde{\mathcal{E}}) + (1 - f_s(\tilde{c}, \tilde{\mathcal{E}}))L, \quad (2.21)$$

$$f_s(\tilde{c}, \tilde{\mathcal{E}}) = f_s(\tilde{c}, \theta(\tilde{c}, \tilde{\mathcal{E}})), \quad (2.22)$$

para todo par  $(\tilde{c}, \tilde{\mathcal{E}}) \in \mathcal{S}$ .

**Prova:** As expressões de  $\theta$  e  $f_s$  como funções do par  $(\tilde{c}, \tilde{\mathcal{E}})$  são facilmente deduzidas usando a relação (2.21) exceto no conjunto  $\mathcal{S}_M$ . Neste conjunto, elas são obtidas invertendo a seguinte função:

$$\begin{aligned} M : [0, 1] \times [\theta_e, \theta_F] &\rightarrow \overline{\mathcal{S}_M} \\ (f_s, \theta) &\mapsto (c, \mathcal{E}) = (M_1(f_s, \theta), M_2(f_s, \theta)), \end{aligned}$$

onde

$$M_1(x, y) = -P\theta_F + (1 - r)P\theta_F x + Py + (r - 1)Pxy, \quad (2.23)$$

$$M_2(x, y) = \rho C_p y + (1 - x)L. \quad (2.24)$$

onde  $P$  e  $r$  são as constantes que aparecem na definição das curvas de liquidus e solidus, equações (2.2) e (2.3). Resolvemos agora a equação  $\tilde{\mathcal{E}} = M_2(\tilde{f}_s, \tilde{\theta})$  para encontrar  $\tilde{f}_s$ . Levando esta expressão na equação  $\tilde{\theta} = M_1(\tilde{f}_s, \tilde{\theta})$ , a variável  $\tilde{\theta}$  pode ser escrita como a raiz positiva da seguinte equação quadrática:

$$0 = a_2 y^2 + a_1(\tilde{\mathcal{E}})y + a_0(\tilde{c}, \tilde{\mathcal{E}}) \quad (2.25)$$

onde  $\tilde{c}$  e  $\tilde{\mathcal{E}}$  são parâmetros e

$$\begin{aligned} a_2 &= (r - 1)\rho C_p, \\ a_1(\tilde{\mathcal{E}}) &= (1 - r)(\rho C_p \theta_F + \tilde{\mathcal{E}}) + rL, \\ a_0(\tilde{c}, \tilde{\mathcal{E}}) &= -(rL\theta_F + (1 - r)\tilde{\mathcal{E}}\theta_F + \tilde{c}L/P) \end{aligned}$$

Denotando esta raiz como  $\theta_+(\tilde{c}, \tilde{\mathcal{E}})$  temos então a seguinte expressão equivalente:

$$\theta_+(\tilde{c}, \tilde{\mathcal{E}}) = \frac{-2a_0(\tilde{c}, \tilde{\mathcal{E}})}{a_1(\tilde{\mathcal{E}}) + \sqrt{a_1^2(\tilde{\mathcal{E}}) - 4a_0(\tilde{c}, \tilde{\mathcal{E}})a_2}} \quad (2.26)$$

Resumindo todo o anterior, a temperatura se define, em termos da concentração e da entalpia, como

$$\theta(c, \mathcal{E}) = \begin{cases} \mathcal{E}/\rho C_p & \text{em } \mathcal{S}_S \\ \theta_E & \text{em } \mathcal{S}_E \\ \theta_+(c, \mathcal{E}) & \text{em } \mathcal{S}_M \\ (\mathcal{E} - L)/\rho C_p & \text{em } \mathcal{S}_L, \end{cases} \quad (2.27)$$

e a fração de sólido  $f_s$  é dada por

$$f_s(c, \mathcal{E}) = \begin{cases} 1 & \text{em } \mathcal{S}_S \\ (\rho C_p \theta_E + L - \mathcal{E})/L & \text{em } \mathcal{S}_E \\ (\rho C_p \theta_+(c, \mathcal{E}) + L - \mathcal{E})/L & \text{em } \mathcal{S}_M \\ 0 & \text{em } \mathcal{S}_L. \end{cases} \quad (2.28)$$

Tomando em conta as duas equações anteriores e a equação (2.14), obtemos a seguinte relação entre a entalpia  $\mathcal{E}$ , a temperatura  $\theta$  e a fração de sólido  $f_s$ :

$$\mathcal{E} = \rho C_p \theta(c, \mathcal{E}) + (1 - f_s(c, \mathcal{E}))L. \quad (2.29)$$

## 2.3 Princípios de Conservação

Nesta seção usaremos os princípios de conservação do momentum, de conservação de massa e conservação da energia. O primeiro deles nos leva às equações de Navier-Stokes modificadas; o segundo complementa estas equações com a condição de incompressibilidade e nos leva à equação do soluto; finalmente, o terceiro nos entrega a equação do calor.

### 2.3.1 Conservação do Momentum

Neste caso as equações são válidas fora da zona sólida, já que o sólido é suposto estático. Obtemos então as equações de Navier-Stokes mais dois termos de força que são descritos a seguir:

1. A primeira é uma força externa, denotada  $\mathbf{F}_e(c, \theta)$ . Esta força toma em conta a influência da gravidade no fluxo do fluido e deve-se as variações da densidade no líquido. Podemos então distinguir as seguintes dependências:

- A densidade depende da temperatura. Definimos o coeficiente de expansão térmico  $\beta_\theta$ , como

$$\beta_\theta = \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial \theta} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial \theta} \quad (2.30)$$

onde  $V$  é um volume de referencia,  $\rho$  é a densidade, e  $\theta$  a temperatura. Notamos que para os metais, a densidade aumenta com a diminuição da temperatura, e assim temos que  $\beta_\theta > 0$ .

- A densidade depende da composição. Definimos o coeficiente de expansão solutal

$$\beta_c = \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial c_l} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial c_l} \quad (2.31)$$

onde  $V$  e  $\rho$  são como antes e  $c_l$  é a concentração líquida. O signo de  $\beta_c$  depende de qual seja o soluto, e que pode ser mais pesado ou mais leve do que o solvente e também depende do raio de segregação  $r$ , que pode ser maior ou menor do que a unidade. No presente trabalho, supomos que  $k < 1$ .

Usando estes dois coeficientes de expansão, a aproximação de Boussinesq diz que, para valores de referencia da temperatura  $\theta_r$  e concentração  $c_r$ , fixos, temos que a densidade no líquido é dada por

$$\rho_l = \rho_r(1 + \beta_\theta(\theta - \theta_r) + \beta_c(c_l - c_r))$$

onde  $\rho_r = \rho_l(\theta_r, c_r)$ , é uma densidade líquida de referência. Isto corresponde a uma linearização da densidade líquida  $\rho_l$  como uma função da temperatura e da concentração ao redor do ponto  $\rho_r$ .

Usando o anterior e supondo que  $\rho_s = \rho_l = \rho$ , o termo da força externa é:

$$\mathbf{F}_e(c, \theta) = \rho \mathbf{g} = \rho_r(1 + \beta_\theta(\theta - \theta_r) + \beta_c(c_l - c_r)) \mathbf{g},$$

onde  $\mathbf{g}$  é a força da gravidade.

2. A segunda é uma força interna, denotada  $F_i(c, \mathcal{E})$ . O termo que representa esta força leva em conta os efeitos da zona de mescla. Quando a liga solidifica em forma dendrítica (veja figura 2.1) e supomos que não temos movimentação de grãos, zona de mescla pode ser considerada como uma estrutura sólida de dendritas, a traves das quais flui o líquido. Por tanto, esta zona é modelada como um material poroso e opondo-se ao movimento do fluido. Podemos então usar a Lei de Darcy para meios porosos. Nesta lei, a velocidade media  $\mathbf{v} = f_l \mathbf{v}_l$ , é diretamente proporcional ao gradiente das pressões  $\nabla p$  e pode ser escrita como

$$\mathbf{v} = -\frac{K}{\mu} \nabla p,$$

onde  $K$  é a permeabilidade,  $\mu$  a viscosidade dinâmica. Note que o fluxo do fluido entre as dendritas depende muito da permeabilidade  $K$  que é uma função do empacotamento das dendritas (e assim, da fração de sólido  $f_s$ ) e sua orientação. Vários modelos podem ser aplicados. Neste trabalho usaremos aquele baseado na teoria de Kozeny e modificada depois por Carman (veja [Car39], [Sch74]) : a permeabilidade pode ser expressa como uma função da superfície do sólido exposta ao fluido por unidade de volume de sólido,  $S_0$ . Neste caso resulta que

$$K = \frac{\delta^2(1 - f_s(c, \mathcal{E}))^3}{180f_s(c, \mathcal{E})^2},$$

onde  $\delta$  é o espaço que existe entre as ramas secundárias das dendritas. Usando a lei de Darcy e a relação de Carman-Kozeny, tem-se que a força interna é dada por

$$F_i(c, \mathcal{E})\mathbf{v} = \frac{\mu C f_s^2(c, \mathcal{E})}{D^2(1 - f_s(c, \mathcal{E}))^3}\mathbf{v}$$

onde  $C$  é o coeficiente permeabilidade da zona de mescla. A validade de aplicação da relação de Carman-Kozeny é bastante limitada devido à ausência de dados de permeabilidades. Por um lado, o modelo anterior tem sido validado experimentalmente para frações sólidas de valor alto, não existem dados para regiões com fração de sólido pequenas pelas dificuldades associadas com sua medição.

Se  $p$  denota a pressão, temos então a seguinte equação de Navier-Stokes modificada:

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\mu\nabla\mathbf{v}) - F_i(c, \theta)\mathbf{v} - \nabla p + \mathbf{F}_e(c, \theta), \quad (2.32)$$

onde  $\otimes$  denota o produto tensorial.

**Observação 2.2** *O objetivo ao usar a aproximação de Carman-Kozeny é modificar as equações de Navier-Stokes somando um termo de permeabilidade de tal forma que para frações de sólido perto de um (permeabilidade pequena), as equações de fluxo de fluido parecem com a equação de Darcy. Por outro lado, para frações de sólido iguais a zero (no líquido), temos que  $F_i(c, \mathcal{E}) = 0$ , e assim obtemos as equações de Navier-Stokes usuais.*

*Existe outra possibilidade para obter um comportamento análogo no fluxo do fluido. Dantzig, no ano de 1989 [Dan], propôs uma formulação melhorada baseada na viscosidade e assim modelar a resistência que a liga líquida encontra na zona de mescla. Neste caso, toma-se a viscosidade como uma função da fração de sólido,  $\mu = \mu(f_s)$ , de tal forma que  $\mu \rightarrow \infty$  quando  $f_s \rightarrow 1$  e  $\mu \rightarrow \mu_l$  quando  $f_s \rightarrow 0$ , sendo  $\mu_l$  a viscosidade do fluido no líquido.*

*No presente trabalho nós supomos que a viscosidade é aquela no líquido:  $\mu(f_s) = \mu_l = \mu$ .*

### 2.3.2 Conservação da massa

Este princípio entrega duas equações: A primeira é a condição de incompressibilidade (que é uma consequência da aproximação de Boussinesq e é válida em todo o domínio) e que pode ser escrita como:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (2.33)$$

Note que esta condição não permite a contração da liga (mudanças no volume) ocasionada pelas variações na temperatura.

A segunda, é a equação do soluto. Neste caso usamos a lei de Fick para sua derivação. Esta equação, que é válida para todas as zonas, pode ser escrita como

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \nabla c_l - \eta \nabla c) = 0, \quad (2.34)$$

onde  $\eta$  é o coeficiente de difusão de soluto. O coeficiente  $\eta$  não toma conta dos diferentes valores da difusão do soluto nas fases sólida y líquida, mas estes valores são muito pequenos e por isto os efeitos da convecção predominam acima dos difusivos e por isto é tomado constante.

Além disso, a concentração líquida  $c_l$  é igual a  $c$  na zona líquida,  $\gamma_l(\theta)$  na zona de mescla e nula na zona sólida. Como a velocidade é nula na zona sólida, a concentração líquida, podemos defini-la de qualquer forma ali (veja a seguinte seção).

### 2.3.3 Conservação da energia

Neste caso usamos este princípio em conjunto com a lei de resfriamento de Fourier. Desta forma, obtemos a seguinte equação:

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C_p \mathbf{v} \cdot \theta - \kappa_\theta \nabla \theta) = 0, \quad (2.35)$$

onde  $\kappa_\theta$  é a *condutividade térmica*. O processo de convecção somente transporta temperatura no lugar da entalpia pelo fato de que não permitimos transporte de grãos livres: as dendritas sólidas permanecem fixas ao solido e nenhuma partícula sólida é levada pelo fluxo à parte mais quente para ser re-fundida. Se este processo for permitido, temos que levar em conta a convecção da entalpia (veja [Vol91]).

## 2.4 Resumo do Modelo Matemático

Seja  $\Omega \subset \mathbb{R}^d, d = 2, 3$  um conjunto aberto e limitado, com fronteira regular  $\partial\Omega$  representando o molde de solidificação. Seja  $T > 0$ , um determinado instante de tempo. O sistema de equações que modela a solidificação de ligas será pranteado no cilindro  $Q_T = (0, T) \times \Omega$ , com fronteira  $\Sigma_T = (0, t) \times \partial\Omega$ .

Usando os subdomínios definidos em (2.6)-(2.10), podemos definir cinco subconjuntos ou zonas  $\Omega_i(t), i = S, E, M, F, L$  do subdomínio  $\Omega$  para cada tempo  $t \in (0, T)$  como segue

$$\Omega_i(t) = \{\mathbf{x} \in \Omega \mid (c(\mathbf{x}, t), \theta(c(\mathbf{x}, t), \mathcal{E}(\mathbf{x}, t))) \in \mathcal{O}_i\} \quad (2.36)$$

Na figura 2.4 estão ilustradas algumas destas zonas. Também apresentamos os interfaces sólido-mescla,  $\Gamma_{sm}$  e mescla-líquido,  $\Gamma_{ml}$ . Também são ilustrados outras áreas da fronteira  $\partial\Omega$ , as quais serão de interesse para estabelecer alguns dos problemas do presente trabalho.

Definimos os conjuntos  $Q_T^{ml}$  e  $Q_T^s$ , que denotam, respectivamente, os pontos de  $\Omega$  que são líquidos ou de mescla para cada instante de tempo e os pontos de  $\Omega$  que são sólidos para cada instante de tempo. Isto é:

$$Q_T^{ml} = \{(\mathbf{x}, t) \in Q \mid \mathbf{x} \in \Omega \setminus \bar{\Omega}_S(t), t \in (0, T)\}, \quad (2.37)$$

$$Q_T^s = \{(\mathbf{x}, t) \in Q \mid \mathbf{x} \in \Omega_S(t), t \in (0, T)\} \quad (2.38)$$

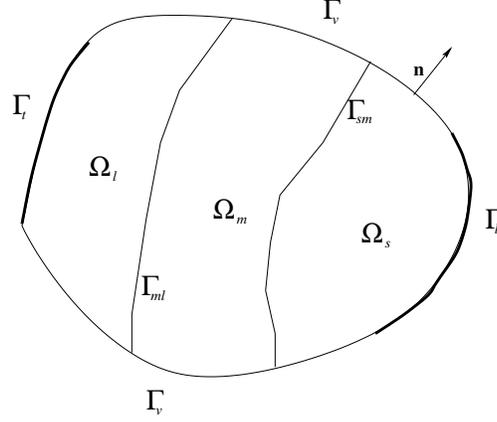


Figura 2.4: Esquema do molde de solidificação, ilustrando algumas das zonas do molde, as interfaces e áreas da fronteira.

Por tanto, o problema de solidificação completo é:

Encontrar um campo vetorial  $\mathbf{v} : Q_T^T \rightarrow \mathbb{R}^d$  e os campos escalares  $p, \mathcal{E}, c : Q_T \rightarrow \mathbb{R}$  tais que as seguintes equações sejam válidas:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}c_l(c, \theta) - D\nabla c) = 0 \text{ em } Q_T, \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C_p \mathbf{v} \theta - \kappa_\theta \nabla \theta) = 0 \text{ em } Q_T, \quad (2.40)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} - \mu \nabla \mathbf{v}) + F_i(c, \theta) \mathbf{v} + \nabla p = \mathbf{F}_e(c, \theta) \text{ em } Q_T^{ml}, \quad (2.41)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \text{ em } Q_T^{ml}, \quad (2.42)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{0} \text{ em } Q_T^s, \quad (2.43)$$

O modelo se complementa com a equação (2.29) e as seguintes relações (veja [Ahm95]):

**Relação 1.** Uma relação para calcular a fração de sólido:

$$f_s = \begin{cases} 1 & \text{no sólido,} \\ \text{solução da equação (2.44) não linear na mescla} & \\ 0 & \text{no líquido} \end{cases}$$

onde a equação não linear é

$$\frac{\mathcal{E} - L + Lf_s}{\rho C_p} = \theta_m + \frac{mc}{1 - (1 - \kappa)f_s}, \quad (2.44)$$

onde  $m$  é a declividade da curva de líquido e  $\kappa$  é o coeficiente de segregação.

**Relação 2.** Uma relação para calcular a concentração líquida:

$$c_l = \psi(f_s)c,$$

onde a função  $\psi$  se define como

$$\psi(f_s) = \begin{cases} \frac{1}{r} & \text{se } f_s = 1, \\ \frac{1}{1 - (1-r)f_s} & \text{se } f_s \in (0, 1), \\ 1 & \text{se } f_s = 0. \end{cases}$$

Como a velocidade é nula no sólido, podemos definir a função concentração líquida  $c_l$  de forma conveniente.

Além disso, temos que impor condições de contorno adequadas para a concentração, a temperatura e a velocidade (as quais dependem da física do problema) e condições iniciais obtidas a partir do instante no qual o material fundido é colocado no molde de solidificação. A figura

**Observação 2.3** *Embora a relação (2.11) defina a fração de sólido como função da concentração e da temperatura, para obter um algoritmo numérico adequado, é conveniente expressá-la como uma função da entalpia e da concentração, como na relação um. De fato, a equação não linear (2.44) é deduzida da seguinte forma: como  $c = f_s c_s + (1 - f_s)c_l$  e  $c_s = r c_l$ , temos que  $c = f_s r c_l + (1 - f_s)c_l = (1 - (1 - r)f_s)c_l$ . Usando a equação da curva de liquidus temos que*

$$\theta = \theta_F + m c_l = \theta_F + \frac{m c}{1 - (1 - r)f_s}$$

onde  $m = 1/P$ . Por outro lado, colocando em evidência a temperatura da equação (2.14) e igualando, se obtém a equação (2.11). Este procedimento também justifica a definição da concentração líquida dada na relação 2 na zona de mescla.

**Observação 2.4** *Notemos que o subdomínio  $\Omega_{ml}$  e as interfaces  $\Gamma_{sm}, \Gamma_{ml}$  não são conhecidos a priori, já que dependem da concentração  $c$  e da temperatura  $\theta$  o que traz uma dificuldade matemática adicional para o estudo do problema. Uma alternativa para contornar esta dificuldade e que foi usada neste trabalho, é considerar uma regularização do problema (2.39)-(2.43) e que é obtida modificando o termo de Carman-Kozeny na equação de conservação de momento. Esta estratégia nos permite escrever as equações do problema (2.39)-(2.43) em todo o domínio  $\Omega$ , permitindo assim o cálculo a posteriori do conjunto  $\Omega_{ml}$  e das interfaces  $\Gamma_{sm}, \Gamma_{ml}$ .*

---

---

## CAPÍTULO 3

---

# SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROBLEMA DE SOLIDIFICAÇÃO

O objetivo do presente trabalho é calcular soluções numéricas aproximadas das equações que modelam a solidificação de ligas binárias. Para atingir este objetivo, vamos a descrever o tratamento no tempo e espaço de cada uma das equações e seu acoplamento. Para isto, usaremos o método dos volumes finitos. A principal razão desta escolha é o embasamento físico deste método. Em particular, este método possui a propriedade da conservação, que é muito importante nos fenômenos governados por equações de transporte. Outra motivação, é comparar os nossos resultados com aqueles obtidos por outros autores usando elementos finitos.

Começamos estudando o tratamento numérico da equação de difusão-convecção. Isto se justifica pelo fato de que todas as equações do problema de solidificação podem ser escritas neste formato. Mais ainda, uma parte do algoritmo que permite aproximar o problema de solidificação é baseado no tratamento de leis de conservação (veja a seção 3.3). Finalizamos o capítulo apresentando alguns resultados numéricos que validam a implementação computacional do algoritmo proposto.

### 3.1 A Equação de Difusão-Convecção

Iniciamos nosso estudo com a descrição da aproximação numérica da equação de difusão-convecção. Seja  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ,  $d = 2, 3$  aberto e conexo com fronteira  $\partial\Omega$  regular e seja  $T > 0$ . A equação de nosso interesse é a seguinte:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = S, \quad (3.1)$$

válida em  $\Omega \times (0, T)$ . A função  $\phi : \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}$  descreve a variável que nos interessa aproximar (temperatura, concentração, etc),  $\rho$  é a densidade de massa,  $S$  pode-se interpretar como uma taxa de geração de volume ou termo fonte e  $\mathbf{J}$  é o transporte da propriedade  $\phi$  devido aos efeitos de convecção e de difusão e está dado por:

$$\mathbf{J} = \rho\mathbf{v}\phi - \Gamma\nabla\phi, \quad (3.2)$$

onde  $\mathbf{v} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$  é uma função de valor vetorial conhecida com componentes  $v_i, i = 1, \dots, d$  tal que  $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$  e que descreve a velocidade do fluido e  $\Gamma$  é o coeficiente de difusão.

A descrição completa do problema se atinge mediante a prescrição de uma condição inicial:  $\phi(\mathbf{x}, 0) = \phi^0(\mathbf{x})$ , onde  $\phi^0 : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$  é conhecida, e condições de contorno adequadas. No presente trabalho, consideramos condições de Dirichlet e/ou Newmann homogêneas: Sejam  $\Gamma_D$  e  $\Gamma_N$  subconjuntos de  $\partial\Omega$  disjuntos e tais que  $\Gamma_D \cup \Gamma_N = \partial\Omega$ , então para todo  $t > 0$  temos que

$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{x}, t) &= g(\mathbf{x}, t), & \forall \mathbf{x} \in \Gamma_D, \\ \nabla\phi \cdot \mathbf{n} &= h(\mathbf{x}, t), & \forall \mathbf{x} \in \Gamma_N.\end{aligned}$$

onde  $g$  e  $h$  são funções conhecidas e  $\mathbf{n}$  é o vetor normal exterior à  $\Gamma_N$ . Resumindo, o problema de difusão-convecção é o seguinte:

Encontrar  $\phi : [0, T] \times \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$  tal que

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\phi - \Gamma\nabla\phi) = S, \quad \forall(\mathbf{x}, t) \in Q_T, \quad (3.3a)$$

$$\phi(0, \mathbf{x}) = \phi^0(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \bar{\Omega}, \quad (3.3b)$$

$$\phi(t, \mathbf{x}) = g(t, \mathbf{x}), \quad \forall(\mathbf{x}, t) \in \Sigma_D, \quad (3.3c)$$

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} = h(\mathbf{x}, t), \quad \forall(\mathbf{x}, t) \in \Sigma_N. \quad (3.3d)$$

onde  $\Sigma_D := \Gamma_D \times (0, T)$  e  $\Sigma_N := \Gamma_N \times (0, T)$ .

### 3.1.1 Discretização Espacial: Volumes Finitos

Devido a que o problema de solidificação envolve o transporte de algumas variáveis, selecionamos o método de volumes finitos para discretizar o problema (3.3)-(3.3). Uma das principais razões é que é um método conservativo, aspecto importante para a física do problema.

#### Geração dos Volumes de Control

O primeiro passo, é a partição do domínio  $\Omega$  em **volumes finitos ou de controle** (veja Figura 3.1), os quais denotaremos por  $\Omega_P, P = 1, \dots, N$ , onde  $N$  é o número de volumes de control. Os volumes são de forma poligonal e tais que se tomamos a intersecção de qualquer par, então as únicas possibilidades para o conjunto que resulta são: o vazio, um ponto, uma aresta (em 2 e 3 dimensões) ou uma cara (somente em 3 dimensões). Além disso, temos que

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{P=1}^N \Omega_P.$$

A priori, não temos nenhuma restrição para escolher a forma geométrica dos volumes de controle nem o seu tamanho, mas existem simplificações quando o domínio  $\Omega$  é de forma retangular. No caso bidimensional, escolheremos os volumes em forma de retângulo com lados paralelos aos eixos coordenados e de tamanhos iguais ou não (veja a Figura 3.2), já no caso tridimensional, estes são construídos na forma de paralelepípedo retangular com caras paralelas aos planos coordenados e de tamanhos iguais ou não (veja a Figura 3.3).

No presente trabalho se assume que os lados (caso 2D) e caras (caso 3D) dos volumes de controle são paralelos aos eixos (caso 2D) e planos (caso 3D) coordenados, respectivamente.

Agora temos que escolher os nós computacionais, isto é, aqueles nós ou pontos de  $\Omega$  onde aproximaremos a variável  $\phi$ . Uma prática comum (adotada neste trabalho), é tomar o centro do volume de controle como o nó computacional. Este nó o denotamos como  $\mathbf{x}_P$  (veja as Figuras 3.2 e 3.3). Para outras aproximações, veja [Pat80] e [FP02].

### Forma integral da Equação

O segundo passo, é integrar a equação (3.1) em cada um dos volumes de controle  $\Omega_P$ . Usando o teorema da divergência no segundo termo do lado esquerdo obtemos a seguinte igualdade:

$$\int_{\Omega_P} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dx + \int_{\partial\Omega_P} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} ds = \int_{\Omega_P} S dx, \quad (3.4)$$

para  $P = 1, \dots, N$  e onde  $\partial\Omega_P$  é a superfície do volume de controle e  $\mathbf{n}$  ó o vetor unitário normal exterior ao elemento diferencial de área  $ds$ .

A equação (3.4) contém integrais de volume e integrais de superfície que temos que aproximar. Isto se faz em termos de  $\phi_P(t)$ , notação que usamos para designar uma aproximação ao valor de  $\phi(\mathbf{x}_P, t)$ . Assim, obtemos uma equação para cada volume de controle, formando assim um sistema de equações de  $N$  equações e  $N$  incógnitas. Naturalmente, neste procedimento temos que incorporar adequadamente as condições de contorno. A seguir estudamos a descrição destas aproximações.

### Aproximação das integrais de volume: termos temporal e fonte

A aproximação das duas integrais de volume que aparecem na equação (3.4) se faz usando a regra do ponto médio, isto é, para todo  $t > 0$  temos

$$\int_{\Omega_P} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dx \approx \rho|\Omega_P| \frac{d\phi_P(t)}{dt}, \quad (3.5)$$

$$\int_{\Omega_P} S dx \approx |\Omega_P| S_P(t), \quad (3.6)$$

onde  $|\Omega_P|$  é a área (volume em 3D) do conjunto  $\Omega_P$ . Note que esta aproximação somente faz uso do valor (aproximado) da variável  $\phi$  no nó  $\mathbf{x}_P$ , sem o compromisso de nenhum outro nó computacional,

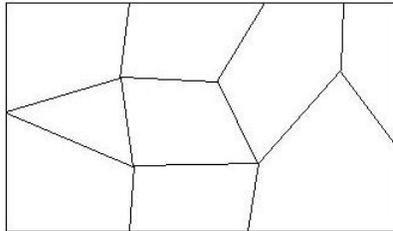


Figura 3.1: Exemplo de uma partição para um domínio  $\Omega$  rectangular em volumes de control.

o que facilita sua implementação computacional. Além disso, como todos os nós computacionais estão no interior de  $\Omega$ , não temos necessidade de fazer um tratamento especial para aqueles volumes de controle que possuam um lado na fronteira  $\partial\Omega$ .

### Aproximação das integrais de superfície: A lei da potência

Descrevemos agora a aproximação das integrais de superfície que descrevem no transporte da variável  $\phi$ :

$$\int_{\partial\Omega_P} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \, ds = \int_{\partial\Omega_P} (\Gamma \nabla \phi - \rho \mathbf{v} \phi) \cdot \mathbf{n} \, ds. \quad (3.7)$$

No caso bidimensional, estamos na presença de uma integral de linha e no caso tridimensional de uma integral de superfície. Nas figuras 3.4 e 3.5 ilustramos um volume de controle interno típico, (um volume  $\Omega_P$  tal que  $\partial\Omega_P \cap \partial\Omega = \emptyset$ . O caso no qual  $\Omega_P$  tiver intersecção não vazia com a fronteira  $\partial\Omega$  do domínio  $\Omega$  será tratado mais adiante) e a nomenclatura usada no trabalho.

Note que  $\partial\Omega_P = \bigcup_j \partial\Omega_{P,j}$ , onde  $j = w, e, n, s$  no caso bidimensional (veja a Figura 3.4) e  $j = b, t, w, e, s, n$  no caso tridimensional (veja a Figura 3.5). Logo, a integral (3.7) pode ser escrita como

$$\int_{\partial\Omega_P} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \, ds = \sum_j \int_{\partial\Omega_{P,j}} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \, ds \quad (3.8)$$

Também temos que o vetor normal  $\mathbf{n}$  coincide com algum dos vetores da base canônica, segundo a superfície onde se esteja integrando.

Para explicar a aproximação da integral de fluxo  $\mathbf{J}$ , vamos considerar a situação bidimensional. A extensão a três dimensões é trivial. Também, vamos considerar somente a integral sobre a superfície  $\partial\Omega_{P,e}$ . O procedimento para aproximar as outras integrais é análogo. Neste caso  $\mathbf{n} = \mathbf{e}_1$  e assim

$$\int_{\partial\Omega_{P,e}} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \, ds = \int_{\partial\Omega_{P,e}} J_x(\mathbf{x}_e, t) \, ds = \int_{\partial\Omega_{P,e}} \left( \rho v_x(\mathbf{x}, t) \phi - \Gamma \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial x} \right) \, ds. \quad (3.9)$$

para todo  $t > 0$ .  $J_x$  e  $v_x$  denotam a componente do fluxo e da velocidade na direção de  $\mathbf{e}_1$ , respectivamente. Usando a regra do ponto médio para aproximar a última integral em (3.9), temos

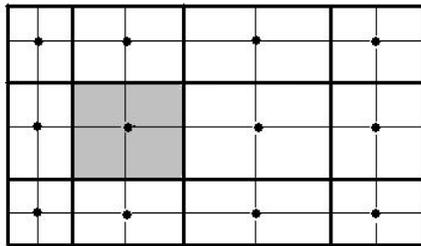


Figura 3.2: Exemplo de uma partição para um domínio  $\Omega$  bidimensional retangular ilustrando os volumes de controle (volume cinza), os nós computacionais (pontos pretos) e as linhas de conexão entre eles (linhas finas).

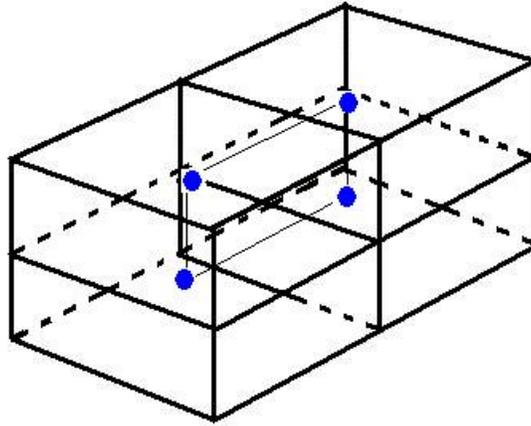


Figura 3.3: Exemplo de uma partição para um domínio  $\Omega$  tridimensional em forma de paralelepípedo retangular ilustrando os volumes de controle e os nós computacionais (em cor azul).

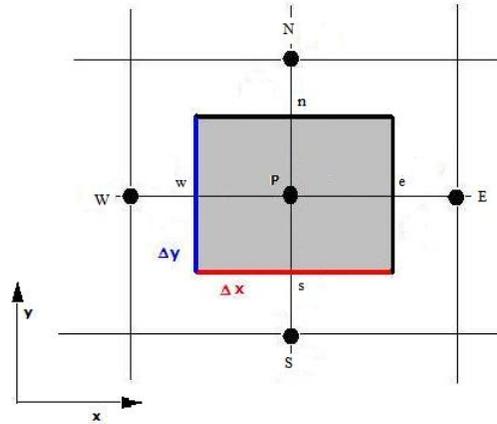


Figura 3.4: Volume de controle interno em duas dimensões.

que

$$\int_{\partial\Omega_{P,e}} J_x ds \approx |\partial\Omega_{P,e}| J_e(t) = |\partial\Omega_{P,e}| \left( \rho v_x(\mathbf{x}_e, t) \phi(\mathbf{x}_e, t) - \Gamma \frac{\partial\phi(\mathbf{x}_e, t)}{\partial x} \right)$$

onde  $|\partial\Omega_{P,e}|$  é a área da superfície  $\partial\Omega_{P,e}$ .

Introduzimos agora os **fluxos (locais) por convecção (de massa)**  $F_e$  e por **difusão**,  $D_e$ , da propriedade  $\phi$ , cuja definição é dada por:

$$F_e := \rho |\partial\Omega_{P,e}| v_x(\mathbf{x}_e, t) \quad (3.10)$$

$$D_e := \frac{\Gamma |\partial\Omega_{P,e}|}{\|\mathbf{x}_E - \mathbf{x}_P\|} \quad (3.11)$$

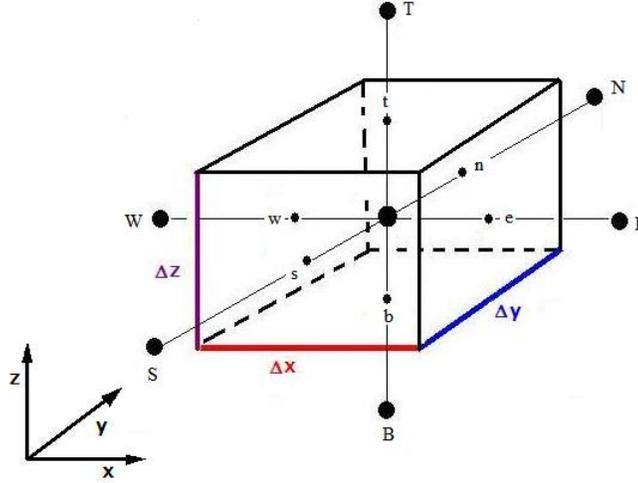


Figura 3.5: *Volume de controle interno em três dimensões ilustrando a nomenclatura e o tamanho das arestas.*

Podemos então escrever a equação anterior como

$$\int_{\partial\Omega_{P,e}} J_x ds \approx |\partial\Omega_{P,e}| J_x(\mathbf{x}_e, t) = F_e \phi(\mathbf{x}_e, t) - D_e \frac{\partial\phi(\mathbf{x}_e, t)}{\partial x} \quad (3.12)$$

Além disso, definimos o **número de Péclet** (local) como a razão entre os fluxos convectivo e difusivos, ou seja:

$$Pe := \frac{F_e}{D_e}, \quad (3.13)$$

Na aproximação da integral (3.12) temos que avaliar a variável  $\phi$  e sua derivada parcial em relação à  $x$  no ponto  $\mathbf{x}_e$ , (veja as figuras 3.4 e 3.4) que não é um nó computacional. Por tanto, temos que usar estratégias de interpolação. Uma vez feito isto para todas as caras  $\partial\Omega_{P,j}$  obtemos a discretização da equação (3.7) e que pode ser escrita como:

$$\int_{\partial\Omega_P} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} ds \approx a_P \phi_P(t) - \sum_{nb} a_{nb} \phi_J(t) \quad (3.14)$$

onde o índice  $nb$  indica os nós vizinhos de  $\mathbf{x}_P$  (veja as figuras 3.4 e 3.5).

Como o termo difusivo é de tipo elíptico (ou seja, os efeitos se espalham em todas as direções da mesma forma), podemos usar diferenças finitas centradas para aproximar a derivada parcial que aparece em (3.12), isto é

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{x}_e, (t))}{\partial x} \approx \frac{\phi_E(t) - \phi_P(t)}{\|\mathbf{x}_E - \mathbf{x}_P\|}$$

O que segue agora é procurar uma estratégia para aproximar o termo convectivo. Uma delas é usar uma media aritmética simples (interpolação linear) ou seja:

$$\phi_e(t) \approx \frac{\phi_E(t) + \phi_P(t)}{2}$$

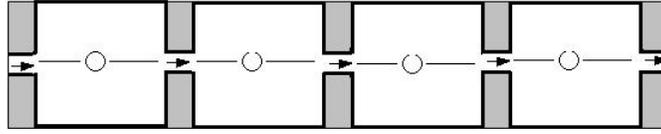


Figura 3.6: Ilustração do modelo "tube and tank".

Este procedimento (chamado o *esquema centrado*) funciona muito bem quando o efeito da convecção é pequeno. Ainda mais, a aproximação é de segunda ordem (veja [Wes02]). Por outro lado, quando a convecção é o fenômeno dominante (como no caso do transporte de soluto na solidificação), a interpolação linear não é apropriada já que podem aparecer oscilações na solução numérica as quais poderiam ser eliminadas com uma malha muito fina, o que certamente, não é adequado pelo custo computacional.

Motivados por isto, diversas estratégias de interpolação tem sido propostas pela comunidade científica, entre as mais populares temos:

1. O esquema *upwind*, introduzido no trabalho de Courant, Isaacson e Rees (veja [CIR52]). Neste esquema, o valor da quantidade  $\phi_e(t)$  é igual ao valor de  $\phi$  no nó do lado da cara "acima do vento" (upwind, no inglês). Isto é

$$\phi_e(t) = \phi_P(t), \quad \text{se } F_e > 0, \quad (3.15a)$$

$$\phi_e(t) = \phi_E(t), \quad \text{se } F_e < 0. \quad (3.15b)$$

Este esquema é baseado no modelo *tank-and-tube* (veja [GPR+]). Como é apresentado na Figura 3.6, os volumes de controle podem ser associados com tanques preenchidos de fluido, que está bem misturado. Este tanques estão conectados em por tubos curtos. O fluxo pelos tanques representa convecção e os muros dos tanques representam difusão. Como o fluido dentro dos tanques está bem misturado, a temperatura deste dentro de cada um deles é uniforme. Logo, é natural supor que o fluxo do fluido em cada um dos tubos possui a temperatura do tanque situado na direção contrária ao fluxo. Em geral, o fluido neste tubo pode não saber nada relacionado com o tanque no qual está esvaziando seu conteúdo, mas pode levar toda informação do tanque da onde provém o fluido.

Uma desvantagem deste esquema é que se apresenta o fenômeno de *difusão falsa* quando as linhas de corrente do fluxo não são paralelas às linhas que definem os volumes de controle (veja [Pat80]).

2. O esquema *híbrido* que foi desenvolvido por Spalding (veja [Spa72]). Consideremos em primeiro lugar, a seguinte expressão

$$\phi = \phi_0 + \frac{\exp(Px/L) - 1}{\exp(P) - 1} (\phi_L - \phi_0) \quad (3.16)$$

que é solução de uma equação de difusão-convecção unidimensional estacionária no intervalo  $[0, L]$  e tal que  $\phi(0) = \phi_0, \phi(L) = \phi_L$ . Considerando  $\phi_P, \phi_E$  e  $\|\mathbf{x}_E - \mathbf{x}_P\|$  como  $\phi_0, \phi_L$  e  $L$ ,

respectivamente, podemos usar (3.16) para determinar o fluxo  $\mathbf{J}_e$ . Desta forma obtemos

$$\mathbf{J}_e = F_e \left( \phi_P + \frac{\phi_P - \phi_E}{\exp(P_e) - 1} \right) \quad (3.17)$$

Repetindo o mesmo procedimento para as outras caras, chegamos em expressões similares. Desta forma, obtemos que o coeficiente  $a_E$  é dado por

$$a_E = \frac{F_e}{\exp(F_e/D_e) - 1} = \frac{F_e}{\exp(P_e) - 1} \quad (3.18)$$

que é uma das expressões do *esquema exponencial*. Vamos a estudar agora a variação do quociente  $a_E/D_e$  como uma função do número de Péclet  $P_e$ . Neste caso

$$\frac{a_E}{D_e} = \frac{P_e}{\exp(P_e) - 1} \quad (3.19)$$

A figura 3.7 apresenta esta variação. Para  $P_e$  positivo, o ponto  $E$  é o vizinho abaixo da corrente e sua influencia diminui na medida que  $P_e$  aumenta. Quando  $P_e$  é negativo,  $E$  coincide com o nó vizinho acima da corrente e tem uma grande influencia. Note que

- Se  $P_e \rightarrow \infty$  então  $a_E/D_e \rightarrow 0$
- Se  $P_e \rightarrow -\infty$  então  $a_E/D_e \rightarrow -P_e$
- Se  $P_e = 0$  então a declividade é  $a_E/D_e = 1 - P_e/2$ .

Estas linha retas estão ilustradas na figura 3.7. O uso de esta observação é o que origina o esquema híbrido:

$$\frac{a_E}{D_e} = \begin{cases} -P_e & \text{se } P_e < -2, \\ 1 - \frac{P_e}{2} & \text{se } -2 \leq P_e \leq 2, \\ 0 & \text{se } P_e > 2, \end{cases} \quad (3.20)$$

Usando uma notação mais compacta temos

$$a_E = D_e \max \left\{ -P_e, 1 - \frac{P_e}{2}, 0 \right\} \quad (3.21)$$

3. O esquema da , descrito no trabalho de Patankar (veja [Pat81]). Neste caso, o que se faz é aproximar melhor a curva azul da figura 3.7, melhorando o comportamento de tipo exponencial desta curva. De fato, a expressão que define este esquema para o coeficiente  $a_E$  escreve-se como:

$$\frac{a_E}{D_e} = \begin{cases} -P_e & \text{se } P_e < -10, \\ (1 + 0,1P_e)^5 - P_e & \text{se } -10 \leq P_e < 0, \\ (1 - 0,1P_e)^5 & \text{se } 0 \leq P_e \leq 10, \\ 0 & \text{se } P_e > 10, \end{cases} \quad (3.22)$$

Em notação mais compacta temos

$$a_E = D_e \max \left\{ 0, \left( 1 - \frac{0,1|F_e|}{D_e} \right)^5 \right\} + \max\{0, -F_e\} \quad (3.23)$$

**Esta é a técnica escolhida neste trabalho para aproximar as equações a serem consideradas.**

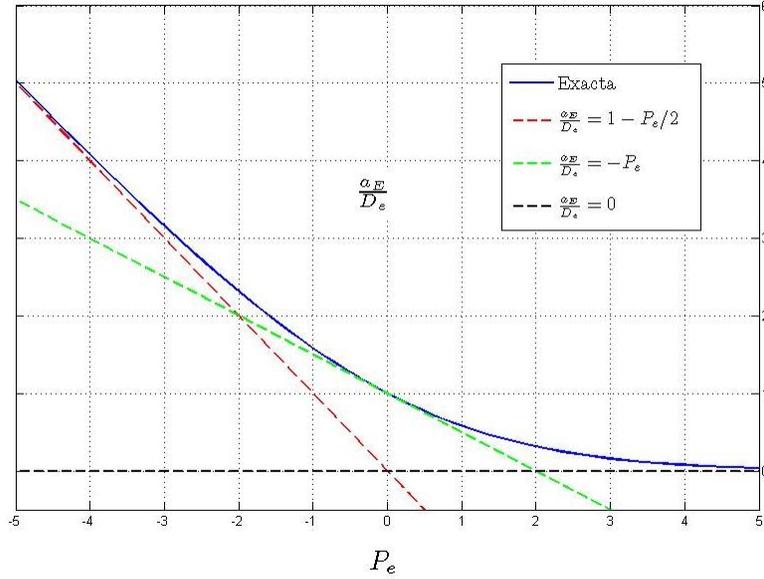


Figura 3.7: Variação do coeficiente  $a_E$  em relação ao número de Péclet. Apresentamos também os casos limites.

### Condições de Contorno

Quando alguma das superfícies  $\partial\Omega_{P,j}$  esta contida na fronteira do domínio  $\Omega$ , é preciso analisar a expressão do fluxo  $\mathbf{J}$  para calcular corretamente a integral (3.7) neste conjunto.

No caso de condição de contorno Dirichlet:  $\phi(\mathbf{x}, t) = g(\mathbf{x}, t)$  para  $t > 0$  e  $\mathbf{x} \in \partial\Omega_{P,j} \cap \Gamma_D$ . Temos que  $\mathbf{J} = \rho\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)g(\mathbf{x}, t) - \Gamma\nabla\phi$ , e assim, temos que aproximar as componentes do gradiente de  $\phi$ . Um caminho para fazê-lo, é usando diferenças finitas unilaterais. Por exemplo, se  $\mathbf{n} = \mathbf{e}_1$  e este vector estiver apontando para o interior do domínio  $\Omega$ , então

$$\nabla\phi \cdot \mathbf{n} = \frac{\partial\phi}{\partial x_1} \approx \frac{\phi_P(t) - g(\mathbf{x}_w, t)}{\|\mathbf{x}_P - \mathbf{x}_w\|} \quad (3.24)$$

No caso de uma condição de Newmann:  $\nabla\phi \cdot \mathbf{n} = h(\mathbf{x}, t)$  para  $t > 0$  e  $\mathbf{x} \in \partial\Omega_{P,j} \cap \Gamma_N$ . Neste caso

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{n} = \rho(\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n})\phi(\mathbf{x}, t) - \Gamma h(\mathbf{x}, t). \quad (3.25)$$

É importante então, levar em conta o valor da velocidade para cada um dos pontos em  $\partial\Omega$ . Em geral se supõe que a velocidade respeita a condição de não deslizamento (no slip no inglês), o que resulta em  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{n} = \Gamma h(\mathbf{x}, t)$  e assim a integral resulta em calcular uma integral de linha (superfície) com integrando conhecido.

### 3.1.2 Discretização Temporal: O Método de Euler Implícito

Para cada nó computacional  $\mathbf{x}_P, P = 1, \dots, N$  consideramos a função de valor real  $\phi_P(t)$  definida para todo  $t > 0$  como a aproximação da propriedade  $\phi$  no ponto  $(\mathbf{x}_P, t)$ . Podemos então escrever as equações (3.5), (3.6) e (3.14) como

$$\rho|\Omega_P| \frac{d\phi_P(t)}{dt} + a_P\phi_P(t) - \sum_{nb} a_{nb}\phi_{nb}(t) = |\Omega_P|S_P(t), \quad t > 0 \quad (3.26)$$

com condição inicial  $\phi_P(0) = \phi^0(\mathbf{x}_P)$ . Definindo para todo  $t \geq 0$  a função vetorial  $\Phi(t)$ , que possui como componentes são  $\phi_P(t)$ ,  $P = 1, \dots, N$  tais que  $\Phi(0) = (\phi_P(0)) = (\phi^0(\mathbf{x}_P))$ , temos que resolver um sistema de equações diferenciais ordinárias:

$$\frac{d\Phi(t)}{dt} = A(t)\Phi(t), \quad t > 0 \quad (3.27)$$

$$\Phi(0) = (\phi^0(\mathbf{x}_P)). \quad (3.28)$$

Para tomar conta disto, usamos o método de . Neste algoritmo escolhemos um passo de tempo adequado  $\Delta t > 0$  e para cada  $n = 0, 1, 2, \dots$  definimos  $t_n := n\Delta t$ . O algoritmo inicia com o cálculo do vetor  $\Phi(0)$  e então, para  $n \geq 1$ , calculamos as aproximações  $\Phi^n$  de  $\Phi(t_n)$  como

$$\frac{\Phi^n - \Phi^{n-1}}{\Delta t} = A(t_n)\Phi^n. \quad (3.29)$$

Isto é um sistema de equações lineares que temos que resolver a cada passo de tempo e assim calcular o vetor  $\Phi^n$  para cada  $n = 1, 2, \dots$

### 3.1.3 Sub-relaxação e Sobre-relaxação

Quando resolvemos iterativamente um sistema de equações lineares ou estamos fazendo iterações para tomar conta das não linearidades que podem apresentar as equações (como a Navier-Stokes, veja a seção seguinte), é conveniente aumentar ou diminuir as variações da variável dependente de uma iteração para a outra. Este procedimento se chama *sobre-relaxação* ou *sub-relaxação* dependendo se as variações são aceleradas ou diminuídas. Em geral, a sub-relaxação é usada com o método de Gauss-Seidel o que origina o método SOR (Successive Over-Relaxation pela sua sigla no inglês). Já a sub-relaxação é muito usada para evitar divergência na solução iterativa de equações fortemente não lineares.

Lembremos que a equação (3.29) pode ser escrita como

$$a_P \phi_P = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b_P \quad (3.30)$$

Vamos supor que  $\phi_P^0$  é uma aproximação conhecida de  $\phi$ . A equação (3.30) pode ser escrita como

$$\phi_P = \frac{\sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b_P}{a_P}$$

o que é equivalente a termos

$$\phi_P = \phi_P^0 + \left( \frac{\sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b_P}{a_P} - \phi_P^0 \right) \quad (3.31)$$

onde a expressão dentro do parênteses representa a variação no valor  $\phi_P$  gerada pela iteração atual. Esta variação é modificada ao introduzir um *fator de relaxação*  $\alpha$ :

$$\phi_P = \phi_P^0 + \alpha \left( \frac{\sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b_P}{a_P} - \phi_P^0 \right)$$

ou ainda

$$\frac{a_P}{\alpha} \phi_P = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b_P + (1 - \alpha_P) \frac{a_P}{\alpha} \phi_P^0 \quad (3.32)$$

Quando  $\phi_P$  fica igual a  $\phi_P^0$ , então estes valores de  $\phi$  satisfazem a equação original (3.30). Se  $\alpha \in (0, 1)$  seu efeito é a sub-relaxação, ou seja os valores de  $\phi_P$  ficam próximos de  $\phi_P^0$ . Se  $\alpha$  é pequeno estas variações são pequenas. Se  $\alpha > 1$ , temos sobre-relaxação.

Em geral, não existe uma regra para escolher o melhor valor de  $\alpha$  (embora no capítulo 7 do livro do Péric e Ferziger, [FP02] se apresentam alguns resultados experimentais). Este valor depende de muitos fatores como a natureza física do problema, o número de nós computacionais, o espaçamento entre eles e o algoritmo iterativo usado.

## 3.2 As Equações de Navier-Stokes

Por simplicidade na apresentação, a exposição limita-se ao caso bidimensional. Denotamos por  $u$  e  $v$  as componentes da velocidade na direção dos eixos coordenados  $x$  e  $y$ , respectivamente. As equações de Navier-Stokes modelam o fluxo de um fluido incompressível e viscoso. Escritas na forma conservativa, estas equações são

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\phi) = \nabla \cdot (\mu\nabla\phi) - \nabla \cdot (p\mathbf{e}_i) + S_\phi, \quad (3.33)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (3.34)$$

onde  $\phi = u$  para  $i = 1$ ,  $\phi = v$  para  $i = 2$ ;  $\mathbf{v} = (u, v) : [0, T] \times \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^d$  é a velocidade,  $p$  é a pressão,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica e  $\rho, S_\phi$  são como antes.

A equação (3.33) é a equação de conservação do momentum e a condição de incompressibilidade, equação (3.34), é a equação de continuidade, ou conservação de massa.

Tomando

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_\phi &:= \rho\mathbf{v}\phi - \mu\nabla\phi, \\ Q_\phi &:= S_\phi - \nabla \cdot (p\mathbf{e}_i) \end{aligned}$$

podemos escrever a equação (3.33) no como uma equação de difusão-convecção, onde o termo fonte é dado por  $Q_\phi$ , o que nos permite usar as mesmas técnicas apresentadas na seção anterior para discretizar no espaço a equação (3.33). De fato, para um volume de controle  $\Omega_P$

$$\int_{\Omega_P} Q_\phi = \int_{\Omega_P} (S_\phi - \nabla \cdot (p\mathbf{e}_i)) dx \approx |\Omega_P| S_\phi(\mathbf{x}_P) - \int_{\partial\Omega_P} p(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{n}) ds \quad (3.35)$$

Se as caras dos volumes são paralelas aos eixos coordenados então  $\mathbf{n}$  coincide com algum  $\mathbf{e}_j$ : por exemplo para  $i = 1$ , pela regra do ponto médio temos que

$$\int_{\partial\Omega_P} p(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}) ds = \int_{\partial\Omega_P} p ds \approx A_e(p_e - p_w) \quad (3.36)$$

onde  $A_e = \|\mathbf{y}_n - \mathbf{y}_s\|$ .

Definamos  $A_w := A_e$  e  $A_n := A_s := \|\mathbf{y}_w - \mathbf{y}_e\|$ . Integrando a equação de continuidade (3.34) sobre um volume de controle  $\Omega_P$  temos que

$$\int_{\Omega_P} (\nabla \cdot \mathbf{v}) dx = \int_{\partial\Omega_P} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} ds \approx u_e A_e - u_w A_w + u_n A_n - u_s A_s = 0 \quad (3.37)$$

### 3.2.1 Introdução

Quando queremos resolver numericamente as equações de Navier-Stokes aparece de forma natural uma dificuldade: carecemos de uma equação explícita para a pressão. Isto tem conseqüências nas técnicas usadas para resolver este sistema. Por um lado, se tentamos usar um método acoplado, ou seja, as duas equações ao mesmo tempo, a restrição de incompressibilidade obriga a ter cuidado na hora de calcular as componentes da velocidade nas caras do volume de controle e também no algoritmo usado para resolver o sistema de equações que se origina, que é mal condicionado.

Outra alternativa, é usar algoritmos segregados, isto é, resolver uma equação e depois a outra. Este tipo de algoritmos podem ser divididos em duas categorias: baseados na densidade e baseados na pressão. Na primeira categoria, a equação de continuidade serve como uma equação para a densidade e a pressão é calculada usando as equações de estado e da energia. Embora esta técnica funcione muito bem para os casos de um número de Mach<sup>1</sup> alto, no caso de número de Mach baixo e problemas de transferência de calor (que é caso dos problemas deste trabalho) esta técnica experimenta um deterioro da taxa de convergência e fica instável. Por outro lado, as técnicas baseadas na pressão, desenvolvidas originalmente para problemas de fluidos incompressíveis, tem sido estendidas com sucesso para o caso de fluidos compressíveis.

A discretização das equações de Navier-Stokes resulta num conjunto de equações algébricas não lineares que tem que ser resolvidas numericamente. Para resolve-lo, temos duas alternativas: a aproximação direta e a aproximação segregada. Na aproximação direta, as equações de momentum e de continuidade são resolvidas de forma simultânea. Nesta técnica temos garantida um bom acoplamento entre a velocidade e a pressão. Porém, a quantidade de memória computacional requerida para armazenar os coeficientes do sistema é muito grande, e também, os problemas em mecânica dos fluidos são não lineares, pelo que uma estratégia iterativa tem que ser usada, gerando custos computacionais adicionais. Na aproximação segregada, os sistemas de equações para as diferentes componentes da velocidade são resolvidos seqüencialmente usando uma aproximação da pressão conhecida. Porém, não temos garante de que estas velocidades assim calculadas satisfazem a equação de continuidade (3.34), e assim é obrigação melhora-las. Devido a que a pressão não possui uma equação própria, como podemos melhorar a pressão de tal forma que a velocidade melhorada cumpra com a equação de continuidade? A resposta a esta pergunta aparece com o processo de iteração, onde podemos predizer uma velocidade que gradualmente vai satisfazendo ao mesmo tempo, a equação de momentum e a equação de continuidade.

Na família de métodos segregados, encontramos diversos métodos: O método de passo fracionário, o método de compressão artificial, o método da penalização e o método de correção da pressão. Um dos métodos que pertence a esta última família, e um dos mais conhecido, é o método SIMPLE de Patankar e do qual temos outros derivados como o SIMPLER, SIMPLEC, SIMPLEX.

No método SIMPLE, o autor faz uso da (staggered grid) (veja a figura 3.8 que ilustra a situação em 2 dimensões. A extensão a três dimensões é natural), que foi introduzida por Harlow e Welch na década dos 70's. Nesta malha, os nós computacionais usados para guardar os valores da pressão e a velocidade são diferentes. A principal vantagem desta malha, é que o acoplamento entre a velocidade e a pressão pode ser garantido com sucesso. Desde então a malha desconstruída tem sido muito difundida (ainda mais pelo trabalho do Patankar, [Pat80]). Porém, esta malha é inconveniente para a implementação de algoritmos em malhas em coordenadas curvilíneas

---

<sup>1</sup>medida de velocidade relativa que se define como o quociente entre a velocidade do objeto e a velocidade do som no médio onde se movimenta o objeto

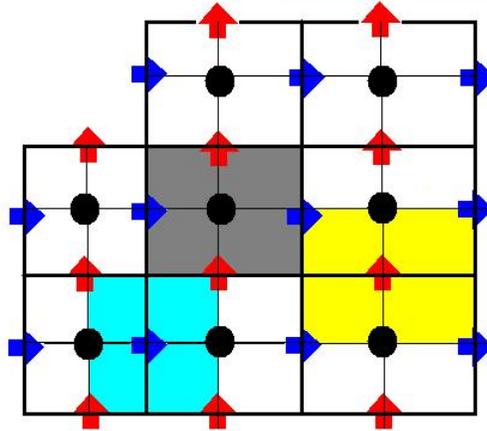


Figura 3.8: Malha descontrada em 2D. A figura ilustra os nós de cada uma das variáveis e os volumes de controle: pressão (círculo preto, volume cinza), componente horizontal da velocidade (triângulo azul, volume azul claro) e componente vertical da velocidade (triângulo vermelho, volume amarelo).

ou não-estruturadas, especialmente em problemas tridimensionais. Estas dificuldades são muito menores em , onde todas as variáveis são armazenadas no mesmo nó (veja a figura 3.9 para uma ilustração no caso bidimensional). O ponto crítico no uso deste tipo de malha é: **como eliminar as dificuldades que aparecem quando fazemos o desacoplamento entre a velocidade e a pressão?** Na década dos 80's, Rhie e Chow ([RC83]) resolvem esta questão ao introduzir o *método de interpolação de momentum* (MIM pela sua sigla no inglês). Este método foi reformulado por Péric (veja [Per85]) e Majundar (veja [Maj86]). Depois, Majundar (veja [Maj88]) e Miller e Schmidt (veja [MS88]) fazem notar que o método de Rhie e Chow, embora elimine os modos espúrios de pressão, possui a fraqueza de que a solução é dependente, numa boa medida, de um fator de sub-relaxação. Por tanto, para fazer um cálculo computacional eficiente e confiável numa malha colocada, temos que garantir os seguintes aspectos:

1. O algoritmo tem que evitar os modos espúrios da pressão (fenômeno do tabuleiro de xadrez)
2. O processo de solução tem que ser independente de fatores de relaxação
3. O algoritmo tem que ser suficientemente robusto.

Na seguinte seção, apresentamos a implementação do método SIMPLER em malhas colocadas. É bom mencionar, que **os algoritmos apresentados neste trabalho foram implementados também na malha descontrada.**

### 3.2.2 O Método SIMPLER para malhas co-localizadas

No método SIMPLER, começamos com as componentes da velocidade conhecidas, calculados numa etapa ou iteração anterior, tanto nos nós computacionais:  $u_p^0$  e  $v_p^0$ , como nas caras dos volumes

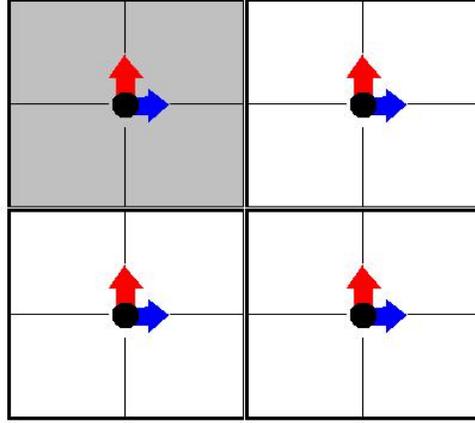


Figura 3.9: Exemplo de uma malha colocada em 2D, ilustrando um volume de controle típico.

de controle:  $u_f^0$  e  $u_f^0$ . Logo, usamos as técnicas de aproximação descritas antes na equação (3.33), para obter sua versão discreta para cada um dos nós  $\mathbf{x}_P$ :

$$\frac{a_P}{\alpha_u} u_P = \sum a_{nb} u_{nb} + b_P + A_e (p_w - p_e)_P + \frac{(1 - \alpha_u)}{\alpha_u} a_P u_P^0 \quad (3.38)$$

A equação (3.38) já tem incorporada o procedimento de relaxação explicado antes. Os termos  $(p_w)_P$  e  $(p_e)_P$  são interpolados linearmente. Por exemplo, para  $(p_e)_P$  temos:

$$(p_e)_P = f_e p_E + (1 - f_e) p_P$$

onde  $f_e = \|\mathbf{x}_e - \mathbf{x}_w\| / (2\|\mathbf{x}_E - \mathbf{x}_P\|)$ . Expressões análogas à (3.38) podem ser encontradas para a segunda componente da velocidade  $v_P$ . Os termos de pressão  $p_s$  e  $p_n$  também são calculados usando interpolação. Da equação (3.38) tiramos que

$$u_P = \alpha_u \left( \frac{\sum a_{nb} u_{nb} + b_P}{a_P} \right)_P + (1 - \alpha_u) u_P^0 + \frac{\alpha_u A_e (p_w - p_e)_P}{(a_P)_P}, \quad (3.39)$$

$$u_E = \alpha_u \left( \frac{\sum a_{nb} u_{nb} + b_P}{a_P} \right)_E + (1 - \alpha_u) u_E^0 + \frac{\alpha_u A_e (p_w - p_e)_P}{(a_P)_E}, \quad (3.40)$$

Em malhas co-localizadas temos que eliminar os modos espúrios da pressão e assim calcular corretamente a velocidade. Isto se consegue usando o mesmo formato empregado para calcular a velocidade nos nós computacionais, equação (3.38). Temos então

$$u_e = \alpha_u \left( \frac{\sum a_{nb} u_{nb} + b_P}{a_P} \right)_e + (1 - \alpha_u) u_e^0 + \frac{\alpha_u A_e (p_P - p_E)}{(a_P)_e} \quad (3.41)$$

O interessante da equação (3.41) é que a diferença  $p_P - p_E$  aparece como na malha desencontrada e esta é a razão pela que o acoplamento entre a pressão e a velocidade pode ser garantido. Se aparecem modos espúrios na pressão, o uso da equação (3.41) para a velocidade nas caras do volume de controle gera pseudo fontes ou sumidouros da taxa de fluxo de massa de cada um dos volumes de controle, os que são eliminados pela equação de continuidade.

A seguir, definimos a *pseudo-velocidade*  $\hat{u}_e^0$  e os coeficientes  $d_{ef}$  como

$$\hat{u}_e^0 = \alpha_u \left[ f_e \left( \frac{\sum a_{nb} u_{nb} + b_P}{a_P} \right)_E + (1 - f_e) \left( \frac{\sum a_{nb} u_{nb} + b_P}{a_P} \right)_P \right] + (1 - \alpha_u) u_e^0 \quad (3.42)$$

$$d_{ef} = \left[ f_e \frac{1}{(a_P)_E} + (1 - f_e) \frac{1}{(a_P)_P} \right] \alpha_u A_e \quad (3.43)$$

por tanto, podemos escrever a equação (3.41) como

$$u_e = \hat{u}_e^0 + d_{ef}(p_P - p_E) \quad (3.44)$$

Em analogia à (3.41) para a velocidade na cara norte do volume de controle  $v_n$ , temos

$$\begin{aligned} v_n &= \alpha_v \left( \frac{\sum a_{nb} v_{nb} + b_P}{a_P} \right)_n + (1 - \alpha_v) v_n^0 + \frac{\alpha_b A_n (p_P - p_N)}{(a_P)_n} \\ &= \hat{v}_n^0 + d_{nf}(p_P - p_N) \end{aligned} \quad (3.45)$$

onde a pseudo-velocidade  $\hat{v}_n$  e o coeficiente  $d_{nf}$  se definem de forma similar à  $\hat{u}_e$  e  $d_{ew}$ .

Agora, substituímos as equações (3.44) e (3.45) na forma discreta da equação de continuidade, equação (3.37), e obtemos assim a equação que serve para calcular a pressão, que denotamos como  $p^*$ . Nesta equação podemos incorporar um fator de sub-relaxação  $\alpha_p$ . Por tanto, a equação final da pressão é

$$\frac{a_P}{\alpha_p} p_P^* = \sum a_{nb} p_{nb}^* + b + \frac{1 - \alpha_p}{\alpha_p} a_P p_P^0 \quad (3.46)$$

onde

$$\begin{aligned} a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S, \\ a_E &= (Ad)_{ef}; \quad a_W = (Ad)_{wf}; \quad a_N = (Ad)_{nf}; \quad a_S = (Ad)_{sf}; \\ b &= (\hat{u}^0 A)_w - (\hat{u}^0 A)_e + (\hat{v}^0 A)_s - (\hat{v}^0 A)_n. \end{aligned}$$

O seguinte passo, é usar o valor de  $p^*$  nas equações de momentum discretas, (3.38), e logo resolvê-las para obter as componentes da *velocidade intermediária*,  $u_P^*, v_P^*$ . Usando estes valores e os da pressão  $p^*$ , calculamos as componentes da velocidade nas caras  $u_f^*$  empregando o *método de interpolação de momentum modificada* ou MMIM, e que foi apresentado por Majumdar e depois estendido por Choi para fluxos transientes. Neste caso,

$$u_e^* = \alpha_u \left( \frac{\sum a_{nb} u_{nb}^* + B_P}{a_P} \right)_e + \frac{\alpha_u A_e (p_P^* - p_E^*)}{(a_P)_e} + (1 - \alpha_u) u_e^0 - \alpha_u [f_e u_E^* + (1 - f_e) u_P^*] \quad (3.47)$$

onde  $B_P = b_P + (\alpha_u)^{-1} (1 - \alpha_u) a_P u_P^*$ . Expressões similares calculam a componente vertical  $v_n^*$ . Os valores  $u_e^*$  e  $v_n^*$  são corrigidos para obter uma expressão que permite calcular as componentes da velocidade  $u_e$  e  $v_n$ . O termo de correção envolve a *correção da pressão*  $p'_P$ , e é dado por

$$u_e = u_e^* + d_{ew}(p'_P - p'_E) \quad (3.48)$$

$$v_n = v_n^* + d_{nw}(p'_P - p'_N) \quad (3.49)$$

Substituindo estas equações na equação da continuidade discreta (3.37), obtemos a equação que permite calcular  $p'$ :

$$a_P p'_P = \sum a_{nb} p'_{nb} + b \quad (3.50)$$

onde

$$\begin{aligned} a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S, \\ a_E &= (Ad)_{ef}; \quad a_W = (Ad)_{wf}; \quad a_N = (Ad)_{nf}; \quad a_S = (Ad)_{sf}; \\ b &= (u^* A)_w - (u^* A)_e + (v^* A)_s - (v^* A)_n. \end{aligned}$$

Novamente, podemos usar um fator de sub-relaxação  $\alpha_p$  para resolver a equação (3.50).

Finalmente, corrigimos as componentes da velocidade nas caras,  $u_e$  e  $v_n$ , usando  $p'$  e as equações (3.48) e (3.49). Para corrigir as componentes da velocidade nos nós computacionais,  $u_P$  e  $v_P$ , usamos as seguintes expressões

$$u_P = u_P^* + d_P^u (p'_w - p'_w)_P \quad (3.51)$$

$$v_P = v_P^* + d_P^v (p'_s - p'_s)_P \quad (3.52)$$

onde a pressão pode é interpolada linearmente e onde temos que

$$d_P^u = \frac{\alpha_u \|\mathbf{y}_n - \mathbf{y}_s\|}{(a_P)_P}; \quad d_P^v = \frac{\alpha_v \|\mathbf{x}_e - \mathbf{x}_w\|}{(a_P)_P};$$

### 3.2.3 Algoritmo SIMPLER em malhas colocadas

Os passos a seguir no algoritmo SIMPLER para malhas colocadas são os seguintes:

**Passo 1** Começar com valores para as componentes da velocidade nas caras do volume de controle e os nós computacionais  $u_f^0, v_f^0, u_P^0, v_P^0$ .

**Passo 2** Calcular os coeficientes da discretização da equação de momentum e as componentes da pseudo-velocidade  $u_e^0$ , equação (3.42), e  $v_n^0$  para determinar o termo fonte da equação da pressão, equação (3.46), baseados nas componentes da velocidade nas caras dos volumes de controle  $u_f^0, v_f^0$  e os nós computacionais  $u_P^0, v_P^0$ .

**Passo 3** Calcular os coeficientes  $d_{ef}$ , equação (3.43), e  $d_{nf}$  da equação da pressão, equação (3.46), usando  $u_f^0$  e  $v_f^0$ .

**Passo 4** Resolver a forma discreta da equação da pressão para obter a aproximação ao campo de pressões  $p^*$

**Passo 5** Usando  $p^*$ , resolver as equações de momentum discretas para obter as componentes da velocidade intermediária  $u_P^*$  e  $v_P^*$ .

**Passo 6** Calcular as componentes da velocidade nas caras dos volumes de controle,  $u_f^*$  e  $v_f^*$ , usando MMIM e os valores de  $u_P^*, v_P^*, p^*$  e os coeficientes das equações de momentum discretas. Usar os valores destas componentes para encontrar o termo fonte da equação de correção da pressão.

**Passo 7** Resolver a equação de correção da pressão, (3.50), para obter os seus valores  $p'$

**Passo 8** Corrigir as componentes da velocidade nas caras dos volumes de controle usando as equações (3.48) e (3.49) e corrigir as componentes da velocidade nos nós computacionais usando as equações (3.51) e (3.52).

**Passo 9** Resolver as equações discretas para outras variáveis escalares se for o caso

**Passo 10** Voltar ao passo 2 e continuar até atingir convergência.

### 3.2.4 Experimentos Numéricos I: Fluxo numa cavidade quadrada

Este é um problema padrão e bem documentado na literatura que serve como teste para verificar a implementação de programas computacionais que resolvem a equação de Navier-Stokes (veja por exemplo, [DGN97] e [FP02]). Neste caso, trabalhamos com a versão adimensional das equações de Navier-Stokes

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_t - \nu \Delta \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p &= \mathbf{f}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \end{aligned}$$

onde  $\nu$  é a viscosidade cinemática do fluido e temos que  $\nu = \frac{1}{Re}$ , sendo  $Re$  o número de Reynolds. As equações anteriores são válidas numa cavidade quadrada  $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ . Supomos que não existem forças agindo no fluido, ou seja  $\mathbf{f} = \mathbf{0}$ . O fluido é suposto inicialmente em repouso ( $\mathbf{u} = \mathbf{0}$  e  $p = 0$ ) e para  $t > 0$ , supomos que é aderente em todas as paredes da cavidade,  $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ , excetuando a parede superior, onde supomos uma velocidade imposta  $\mathbf{u} = (1, 0)$ .

Na figura 3.10 apresentamos os gráficos do campo de pressões e das linhas de corrente para um fluido com  $Re = 1000$  e para  $t = 20$ , usando uma discretização de  $80 \times 80$  volumes finitos. O tamanho de passo temporal usado foi de  $\Delta t = 0,02$ . Estes parâmetros foram usados para capturar a formação dos dois vórtices nos extremos inferiores da cavidade.

Em todos os casos, os experimentos foram rodados num Laptop Toshiba satellite, com processador intel centrino de 1,86 GHz, 512 Mb de memória RAM e 80 Gb de disco duro. Os programas usados para obter os resultados foram escritos em Matlab (©, Mathworks) e os gráficos foram gerados com Tecplot (©, Amtec). Os parâmetros de relaxação para resolver as equações de momento e da pressão foram:

$$\alpha_p = 0,7, \quad \alpha_u = \alpha_v = 0,5,$$

respectivamente. Além disso, o sistema foi resolvido até que a diferença na norma  $L^\infty$  de duas aproximações consecutivas foi menor do que  $10^{-3}$ .

### 3.2.5 Experimentos Numéricos II: Convecção natural

Neste experimento, incorporamos ao fluxo do fluido a variação de temperatura. Este é outro problema bem documentado na literatura (veja por exemplo [DGN97]) que é usado para verificar a implementação de algoritmos numéricos.

O fluido segue sendo incompressível e supomos que as variações da densidade de massa em relação das variáveis espaciais e do tempo são desprezíveis e, por isto, podem-se ignorar. Exceto

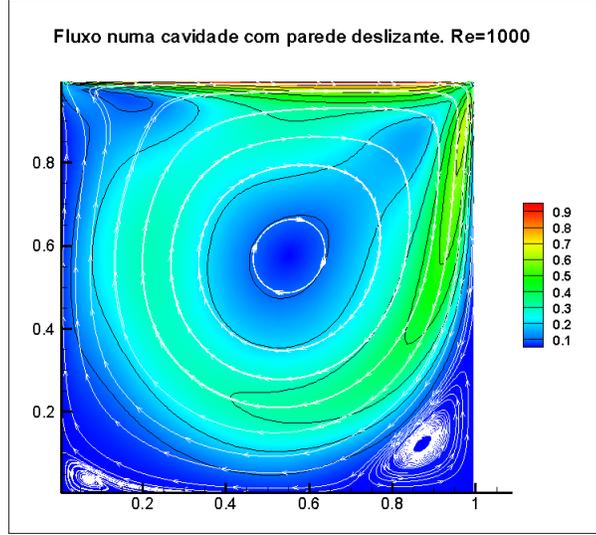


Figura 3.10: *Navier-Stokes: Fluxo numa cavidade com tampa deslizante.  $Re = 10^3$ , tempo = 20* seg. Desenho das linhas de corrente e das linhas de contorno da pressão. Nata-se a formação de vórtices nas esquinas inferiores da cavidade, aspecto típico deste problema.

aqueles ocasionados pelas mudanças de temperatura e dependem linearmente desta. Além disso, supomos que a viscosidade e a condutividade térmica não mudam com as variações na temperatura.

Consideramos o problema estacionário. As equações são as seguintes

$$\begin{aligned} -\frac{\nu}{Pr}\Delta\theta + \mathbf{u} \cdot \nabla\theta &= 0 \\ -\sqrt{\frac{Pr}{Ra}}\Delta\mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} + \nabla p &= \theta\mathbf{k}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \end{aligned}$$

onde  $\theta$  é a temperatura do fluido,  $\mathbf{U}$  a velocidade,  $p$  a pressão,  $\mathbf{k} = (0, -1)$ ,  $\nu$  é a viscosidade,  $Pr$  é o número de Prandtl dado por

$$Pr = \frac{\nu}{\kappa}$$

onde  $\kappa$  é a condutividade térmica e  $Ra$  é o número de Rayleigh dado por

$$Ra = \frac{1}{\kappa\nu}$$

Nas figuras 3.11, 3.12 e 3.13 apresentamos os resultados para  $Pr = 0,71$  e os números de Rayleigh  $Ra = 10^3, 10^4, 10^5$ . Em todos os casos, os experimentos foram rodados num Laptop Toshiba satellite, com processador intel centrino de 1,86 GHz, 512 Mb de memória RAM e 80 Gb de disco duro. Os programas usados para obter os resultados foram escritos em Matlab (©, Mathworks) e os gráficos foram gerados com Tecplot (©, Amtec).

Em cada caso, se considerou uma discretização de  $40 \times 40$  volumes finitos. tomamos os seguintes parâmetros de relaxação para resolver as equações de momento, da pressão e da temperatura:

$$\alpha_P = 0,7, \quad \alpha_u = \alpha_v = \alpha_\theta = 0,5,$$

respectivamente. Além disso, o sistema foi resolvido até que a diferença na norma  $L^\infty$  de duas aproximações consecutivas foi menor do que  $10^{-5}$ .

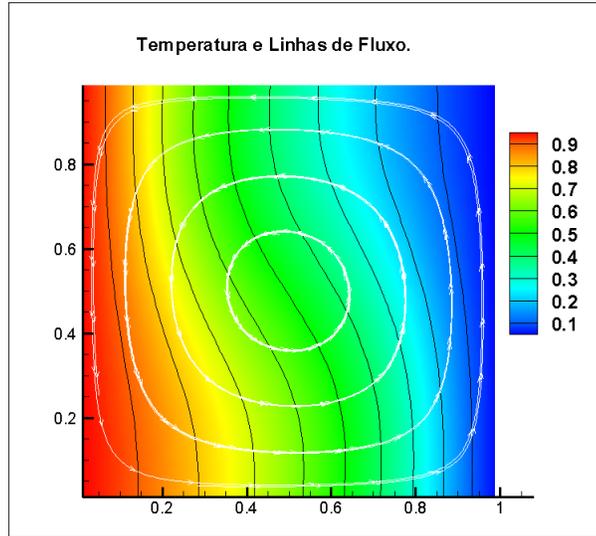


Figura 3.11: *Convecção Natural numa cavidade quadrada.  $Pr = 0,71, Ra = 10^3$ . O gráfico ilustra o campo de temperaturas e algumas isotermas (linhas em preto). Também são ilustradas algumas linhas de fluxo (linhas brancas).*

O sentido do fluxo vem dado pelo sinal do coeficiente de expansão. Neste caso, ele é negativo e assim, temos fluxo no sentido contrário aos ponteiros do relógio. Notamos a influência do aumento no número de Raileigh nas curvas de nível da temperatura (isotermas): o termo convectivo começa a ser dominante no fenômeno.

### 3.3 As Equações de Solidificação

Nesta seção vamos a aplicar as idéias apresentadas antes ao problema de solidificação apresentado na seção 4 do capítulo 1. Lembremos que neste problema temos que resolver quatro equações diferenciais parciais, que são complementadas com algumas relações termodinâmicas junto à condições de contorno e iniciais.

As equações (2.41) até (2.43), são equações do tipo Navier-Stokes, onde temos um termo de força (externa) dado por  $\mathbf{F}_e(c, \theta)$  e outro termo de força interna dado por  $F_i(c, \theta)\mathbf{v}$ . Além disso, as equações são válidas somente naquelas regiões do molde que não são sólidas (onde a velocidade é suposta nula). Isto gera o primeiro inconveniente na hora de tentar gerar um algoritmo numérico para resolver as equações do nosso interesse: a priori, não conhecemos o conjunto onde vamos resolver as equações. A forma adotada neste trabalho para resolver este inconveniente, foi modificar o termo da força interna: se  $\epsilon > 0$  é pequeno (da ordem de  $10^{-5}$ , então tomamos consideramos a função

$$F_i^\epsilon(c, \theta) = \frac{C_0 f_s^2(\cdot, \cdot)}{(1 - f_s(\cdot, \cdot) + \epsilon)^3}.$$

A conseqüência deste truque (veja o capítulo seguinte) é que agora as equações de momentum

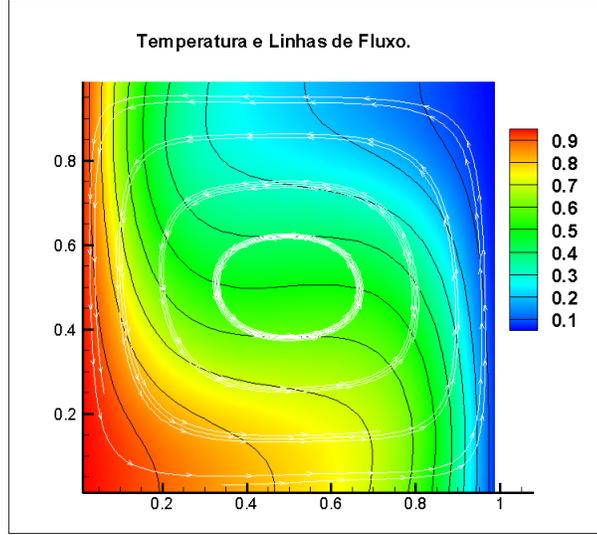


Figura 3.12: *Convecção Natural numa cavidade quadrada.  $Pr = 0.71, Ra = 10^4$ . O gráfico ilustra o campo de temperaturas e algumas isotermas (linhas em preto). Também são ilustradas algumas linhas de fluxo (linhas brancas).*

são válidas em todo o molde, e se  $f_s = 1$ , então a função  $F_i$  assume valores altos, o que obriga à velocidade a tomar valores muito pequenos.

O outro aspecto que temos que levar em conta, é que as equações (2.39) e (2.40) envolvem, cada uma delas, duas variáveis. Assim, (2.39) envolve a concentração líquida no termo convectivo e (2.40) envolve a entalpia no termo temporal. A idéia, é ter um algoritmo baseado no método SIMPLER para resolver as equações de momento em primeiro lugar, e depois, de posse com o valor das componentes da velocidade, resolver as outras duas equações. Temos então que decidir qual é a variável principal nas equações (2.39) e (2.40).

Isto se faz usando um procedimento que faz o desacoplamento da concentração e da concentração líquida na equação (2.39) e da temperatura e entalpia na equação (2.40). Para descrever o procedimento, consideremos a equação diferencial parcial genérica

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_1 \mathbf{v} F_1(u) - \alpha_2 \nabla F(u)) = 0, \quad (3.53)$$

onde  $\alpha_1, \alpha_2$  são constantes conhecidas,  $\mathbf{v}$  a velocidade tal que  $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$  e  $F(u)$  uma função conhecida. A equação (3.53) é complementada com condições de borde e iniciais adequadas. Se  $\lambda$  é uma constante real, podemos escrever então

$$F(u) = \lambda u + F(u) - \lambda u, \quad (3.54)$$

Desta forma, considerando a função  $G(u) = \lambda u - F(u)$ , a equação (3.53) pode ser escrita como

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \lambda \mathbf{v} \cdot \nabla (\alpha_1 u) - \lambda (\alpha_2 \nabla u) = \mathbf{v} \cdot \nabla (\alpha_1 G(u)) - \nabla \cdot (\alpha_2 \nabla G(u)), \quad (3.55)$$

Agora, tomamos  $\Delta t > 0$  como um tamanho de passo temporal suficientemente pequeno e avaliando os termos do lado esquerdo no tempo  $t^{n+1}$ , e os termos do lado direito no tempo anterior,  $t^n$ , obtemos

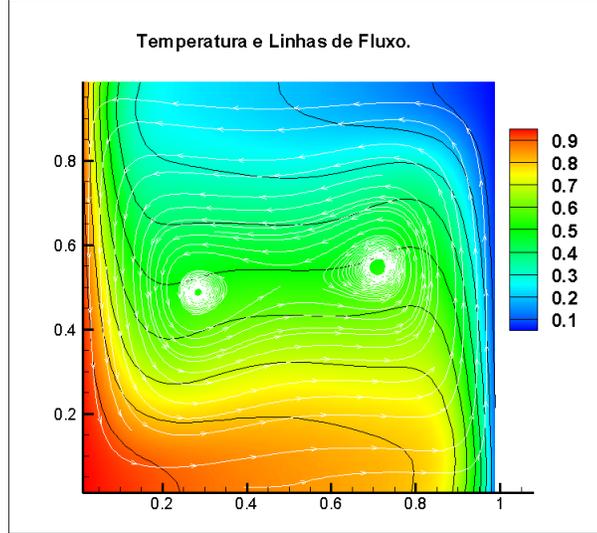


Figura 3.13: *Convecção Natural numa cavidade quadrada.  $Pr = 0.71, Ra = 10^5$ . O gráfico ilustra o campo de temperaturas e algumas isotermas (linhas em preto). Também são ilustradas algumas linhas de fluxo (linhas brancas).*

um esquema numérico baseado na idéia de splitting de operadores no tempo, ou seja

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \lambda \mathbf{v}^n \cdot \nabla(\alpha_1 u^{n+1}) - \lambda(\alpha_2 \nabla u^{n+1}) = \mathbf{v}^n \cdot \nabla(\alpha_1 G(u^n)) - \nabla \cdot (\alpha_2 \nabla G(u^n)), \quad (3.56)$$

Agora usamos as idéias anteriores para as equações (2.39) e (2.40). A primeira delas, pode ser complementada com uma equação que relaciona  $c$  e  $c_l$  (veja a Relação 2, na seção 4 do capítulo 1) dada por

$$c_l = \psi(f_s)c. \quad (3.57)$$

Neste caso, tomando  $u = c$ ,  $F(u) = c_l$ ,  $\alpha_1 = 1$ ,  $\alpha_2 = D$  e  $\lambda = 1$  temos que a discretização no tempo das equações (2.39) e (3.57) fica como

$$\begin{cases} \frac{c^{n+1} - c^n}{\Delta t} + \mathbf{v}^n \cdot \nabla c^{n+1} - \nabla \cdot (D \nabla c^{n+1}) = \mathbf{v}^n \cdot \nabla(c^n - c_l^n) - \nabla \cdot (D \nabla(c^n - c_l^n)), \\ c_l^{n+1} = \psi(f_s^{n+1})c^{n+1}. \end{cases} \quad (3.58)$$

Na segunda, pode ser complementada com uma equação que relaciona  $\mathcal{E}$  e  $\theta$  dada por a equação (2.14). Neste caso, tomamos  $u = \mathcal{E}$ ,  $F(u) = \beta(\mathcal{E}) = \theta$ ,  $\alpha_1 = \rho C_p$ ,  $\alpha_2 = \kappa_\theta$  e  $\lambda = 1/(\rho C_p)$  temos que a discretização no tempo das equações (2.40) e (2.14) fica como

$$\begin{cases} \frac{\rho C_p (Y^{n+1} - \theta^n)}{\Delta t} + \rho C_p \mathbf{v}^n \cdot \nabla Y^{n+1} - \nabla \cdot (\kappa_\theta \nabla Y^{n+1}) = 0, \\ \mathcal{E}^{n+1} = \mathcal{E}^n + \rho C_p (Y^{n+1} - \theta^n), \\ \theta^{n+1} = \frac{\mathcal{E}^{n+1} - L + L f_s^{n+1}}{\rho C_p}, \end{cases} \quad (3.59)$$

onde  $Y$  é uma variável intermediária que aproxima a temperatura. Note que se temos convergência, então  $Y^{n+1} \rightarrow \theta^n$  e assim  $\mathcal{E}^n \rightarrow \mathcal{E}^{n+1}$ .

### 3.3.1 Algoritmo

Baseados nas ideias apresentadas antes e aquelas apresentadas na tese do Ahmad, temos o seguinte algoritmo que serve para resolver as equações que modelam a solidificação de ligas binárias:

1. A discretização espacial é feita usando volumes finitos,
2. Mudança na ordem de cálculo das variáveis: primeiro resolvemos as equações de Navier-Stokes e depois as outras variáveis, começando pela entalpia,
3. Em cada passo de tempo iteramos até que a convergência for declarada,
4. Nós resolvemos as equações de Navier-Stokes **em todo o domínio**  $\Omega$ . Isto se faz adicionando uma constante  $\epsilon > 0$  suficientemente pequena ao denominador na força interna de Carman-Kozeny:  $1 - f_s$  é trocado por  $1 - f_s + \epsilon$ .

No algoritmo descrito logo mais,  $\mathbf{S}$  o vetor que guarda as variáveis do problema de solidificação, ou seja,  $\mathbf{S} = [\mathbf{v}^0, \mathcal{E}, c, c_l, f_s, \theta]$  onde  $\mathbf{v}$  é a velocidade ( $[m/s]$ ),  $\mathcal{E}$  a entalpia ( $[J/(sm^3)]$ ),  $c$  a concentração ( $[\%]$ ),  $c_l$  a concentração líquida ( $[\%]$ ),  $f_s$  a fração de sólido ( $[-]$ ) e  $\theta$  a temperatura ( $[C]$ ). O seguinte é o algoritmo:

**Passo 0. Parâmetros do problema** Seja  $\epsilon > 0$  e  $tol > 0$  suficientemente pequenos. Escolha o incremento no tempo  $\Delta t > 0$  e o número de passos  $N_{final}$ .

**Passo 1. Inicialização das variáveis** Usando as condições iniciais, definimos  $\mathbf{S}^0$ .

Para  $n = 1, 2, \dots, N_{final}$  calculamos  $\mathbf{S}^n$  seguindo os passos 2 até o 7.

**Passo 2. Início das iterações internas** Tomamos  $n_0 := n$  e definimos  $\mathbf{S}^{n_0} = \mathbf{S}^n$ .

Para  $k = 2, 3, \dots$  até convergência, calcular as componentes do vetor  $\mathbf{S}^{n_k}$  seguindo os passos 3 até 7

**Passo 3. Cálculo da velocidade e da pressão** Usamos o algoritmo SIMPLER em malhas colocadas para calcular aproximações da velocidade  $\mathbf{v}^{n_k}$  e da pressão  $p^{n_k}$ .

**Passo 4. Cálculo da entalpia** Calculamos a variável auxiliar  $y^{n_k}$  via

$$\frac{\rho C_p (y^{n_k} - y^n)}{\Delta t} - \nabla \cdot (\kappa_\theta \nabla y^{n_k} - \rho C_p \mathbf{v}^{n_k} y^{n_k}) = 0 \quad (3.60)$$

e logo usamos a seguinte equação para calcular  $\mathcal{E}^{n_k}$

$$\mathcal{E}^{n_k} = \mathcal{E}^{n_{k-1}} + \mu C_p (Y^{n_k} - \theta^{n_{k-1}}). \quad (3.61)$$

**Passo 4. Cálculo da concentração** Calculamos uma aproximação da concentração  $c^{n_k}$  via

$$\frac{(c^{n_k} - c^n)}{\Delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}^{n_k} c^{n_k} - \nu \nabla c^{n_k}) = \nabla \cdot (\mathbf{v}^{n_k} (c^{n_{k-1}} - c_l^{n_{k-1}}) - D \nabla (c^{n_{k-1}} - c_l^{n_{k-1}})) \quad (3.62)$$

**Passo 5. Cálculo da fração de sólido** Calculamos uma aproximação da fração de sólido  $f_s^{n_k}$  usando a relação 1 mencionada no final do capítulo um, ou seja

$$f_{s,P}^{n_k} = \begin{cases} 1 & \text{se } (\mathcal{E}_P^{n_k}, c_P^{n_k}) \in S, \\ \text{solução da equação não linear (3.63)} & \text{se } (\mathcal{E}_P^{n_k}, c_P^{n_k}) \in M, \\ 0 & \text{se } (\mathcal{E}_P^{n_k}, c_P^{n_k}) \in L, \end{cases}$$

onde os conjuntos  $S, M, L$  são obtidos ao escrever o diagrama de fases (2.2) em termos da entalpia  $\mathcal{E}$  e a concentração  $c$  (veja o capítulo um). A equação não linear é

$$\frac{\mathcal{E}_P^{n_k} - L + Lz}{\rho C_p} = \theta_m + \frac{m c_P^{n_k}}{1 - (1 - \kappa)z}, \quad (3.63)$$

onde  $m$  é a declividade da curva de liquidus,  $\kappa$  é o radio de segregação e  $z = f_s^{n_k}$ .

**Passo 6. Cálculo da concentração líquida** Calculamos uma aproximação da concentração líquida  $c_l^{n_k}$  usando a relação 2 mencionada no capítulo um, ou seja

$$c_{l,P}^{n_k} = \psi(f_{s,P}^{n_k}) c_{j,P}^{n_k}, \quad (3.64)$$

onde a função  $\psi$  se define como

$$\psi(f_{s,P}^{n_k}) = \begin{cases} \frac{1}{\kappa} & \text{se } f_{s,P}^{n_k} = 1, \\ \frac{1}{1 - (1 - \kappa)f_{s,P}^{n_k}} & \text{se } f_{s,P}^{n_k} \in (0, 1), \\ 1 & \text{se } f_{s,P}^{n_k} = 0. \end{cases}$$

**Passo 7. Cálculo da temperatura** Calculamos uma aproximação da temperatura  $\theta^{n_k}$  via

$$\theta_P^{n_k} = \frac{\mathcal{E}_P^{n_k} - L + L f_{s,P}^{n_k}}{\rho C_p}.$$

**Passo 8. Verificação da convergência** Se o erro relativo dado por

$$\frac{\|\mathbf{S}^{n_k} - \mathbf{S}^{n_{k-1}}\|_\infty}{\mathbf{S}^{n_k}} < tol \quad (3.65)$$

faça  $n = n + 1$  e vá até o passo 2. Caso contrário, faça  $k = k + 1$  e vá até o passo 3.

---

---

## CAPÍTULO 4

---

# RESULTADOS NUMÉRICOS

Antes de apresentar os resultados obtidos nos experimentos numéricos realizados, faremos algumas observações relacionadas com o desenvolvimento das ferramentas numéricas usadas para modelar a solidificação, em particular, a macrosegregação e sua implementação computacional.

- Experiências numéricas foram feitas usando o  $\theta$ -esquema que aparece no trabalho de Glowinski e Pironneau [GP], tomando  $\theta = 1 - 1/\sqrt{2}$  que é o valor ótimo segundo os autores. Neste algoritmo temos que resolver um problema de tipo Stokes e dois de tipo difusão-convecção.
- Foram testados diversos parâmetros de relaxação para resolver as equações de conservação (momentum, energia e soluto) e a equação da pressão. Um aspecto que frustrou ao autor, é a pouca literatura relacionada com a escolha ótima deste parâmetro (que é fundamental para a convergência dos algoritmos): em geral depende do problema e é escolhido de forma heurística. O livro de Peric e Ferziger [FP02] faz alguns experimentos numéricos para determiná-lo no caso do problema da cavidade com tampa superior deslizante.
- Embora não sejam reportadas, experiências numéricas relacionadas com convecção de Rayleigh-Bénard e com difusão dupla foram feitas. Isto com o objetivo de testar a boa implementação dos algoritmos com outros problemas mais simples do que o problema de solidificação.
- As equações de Navier-Stokes modificadas foram resolvidas em todo o domínio  $\Omega$ . Para isto, foram testadas duas aproximações que foram descritas no capítulo 1: uma baseada na viscosidade e a outra modificando o termo da força interna. Esta última foi a adotada neste trabalho devido que é a mesma metodologia usada no capítulo onde demonstramos a existência de soluções fracas.
- O algoritmo usado para resolver o problema de solidificação também foi implementado usando o método dos volumes de controle baseado em elementos (veja [Pat80], [BP80], [BB83]), [PP83], [Pra86], [NA89], [SB94] e a revisão feita pelo Baliga em [Bal97]). Este método oferece a flexibilidade geométrica do método dos elementos finitos e a propriedade de conservação do método dos volumes finitos. Agora, como os experimentos foram feitos em cavidades retangulares e não estamos fazendo refinamentos adaptativos, é suficiente com o método apresentado

antes. A escolha de malhas colocadas, embora um pouco mais cara computacionalmente pelas interpolações que precisam serem feitas, foi adotada para facilitar a manipulação de índices na implementação, o que é dificultoso no caso da malha desencontrada (staggered grid).

- Como antes, todos os experimentos foram rodados num Laptop Toshiba satellite, com processador intel centrino de 1,86 GHz, 512 Mb de memória RAM e 80 Gb de disco duro. Os programas usados para obter os resultados foram escritos em Matlab (©, Mathworks) e os gráficos foram gerados com Tecplot (©, Amtec).
- Os seguintes foram os parâmetros considerados em ambos experimentos para relaxar e resolver as equações de momento, da pressão e da temperatura, respectivamente:

$$\alpha_P = 0,7, \quad \alpha_u = \alpha_v = \alpha_\theta = 0,5,$$

Além disso, o sistema foi resolvido até que o máximo valor entre a diferença na norma  $L^\infty$  de duas aproximações consecutivas e a do divergente discreto da velocidade, foi menor do que  $10^{-6}$ .

- Várias experiências numéricas foram feitas para explorar a influência nos resultados do parâmetro  $\epsilon$  usado para modificar a função  $F_i(c, \theta)$ . Chegou-se à conclusão que o valor  $10^{-2}$  não altera consideravelmente os resultados e além disso, evita possíveis instabilidades numéricas no caso em que  $f_s$  está perto de 1.
- Em ambos experimentos, consideramos um passo temporal de  $\Delta t = 0,1$ . Além disso, Usouse uma malha de  $60 \times 36$  volumes no primeiro experimento e uma de  $72 \times 24$  no segundo. Os parâmetros físicos usados, são aqueles da tabela A.1 do apêndice A, exceto no segundo experimento donde tomamos

$$\mu = 0,00127, \quad \delta = 8 \times 10^{-5}, \quad \beta_c = -0,42.$$

Nossa principal referencia nesta parte é a tese do Ahmad, [Ahm95]. De fato, nas seções que seguem, nós tentamos reproduzir os seus resultados usando as ferramentas desenvolvidas nas seções precedentes. Diversas diferenças surgiram, as quais serão comentadas, procurando explicar a sua origem.

**Observação 4.1** *No seu algoritmo, Ahmad usou elementos finitos, métodos streamline para o tratamento dos termos convectivos. Também usou penalização na pressão para o tratamento da condição de incompressibilidade (de fato, considerou o elemento  $Q_1 \times P_0$ ). Além disso, para avançar desde um nível de tempo para o outro, ele não usou iterações internas.*

## 4.1 Experimentos Numéricos I: Gradiente horizontal da densidade

Em primeiro lugar, apresentamos resultados relacionados com um problema estudado experimentalmente por Hebditch e Hunt em [Hum74]. Neste experimento, considera-se uma cavidade de 10

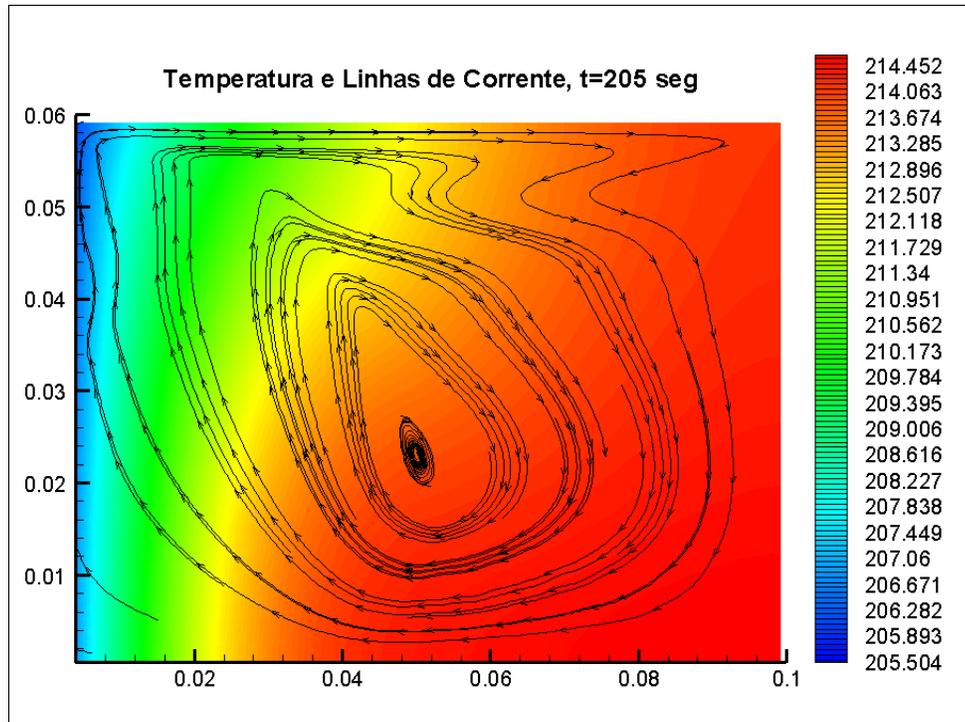


Figura 4.1: *Solidificação: Temperatura e velocidade.  $t = 205$  seg.*

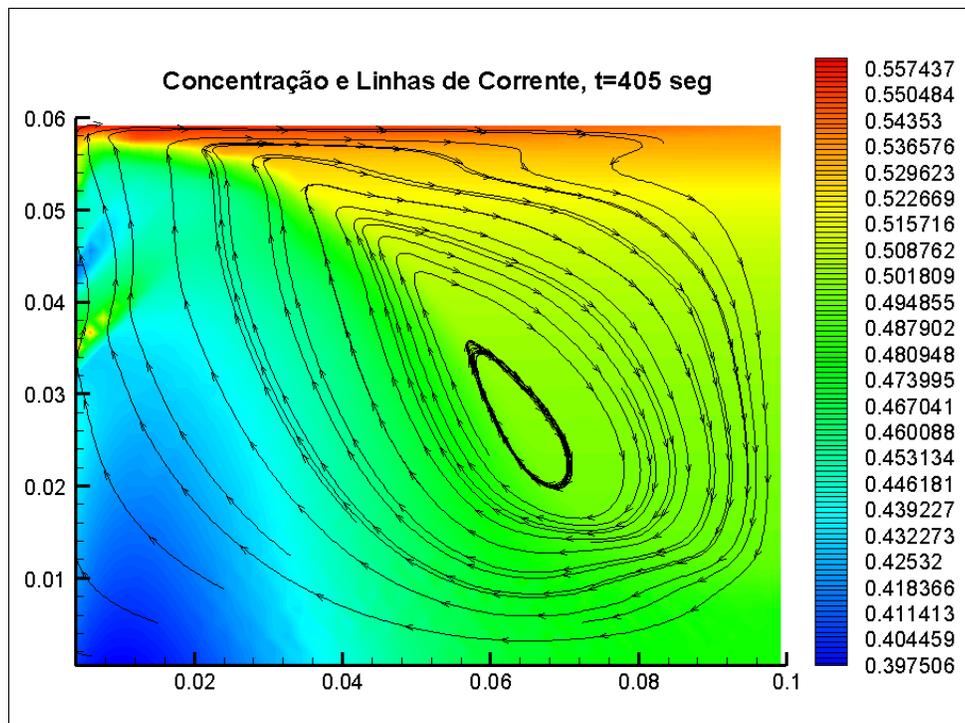


Figura 4.2: *Solidificação: Concentração e velocidade.  $t = 205$  seg.*

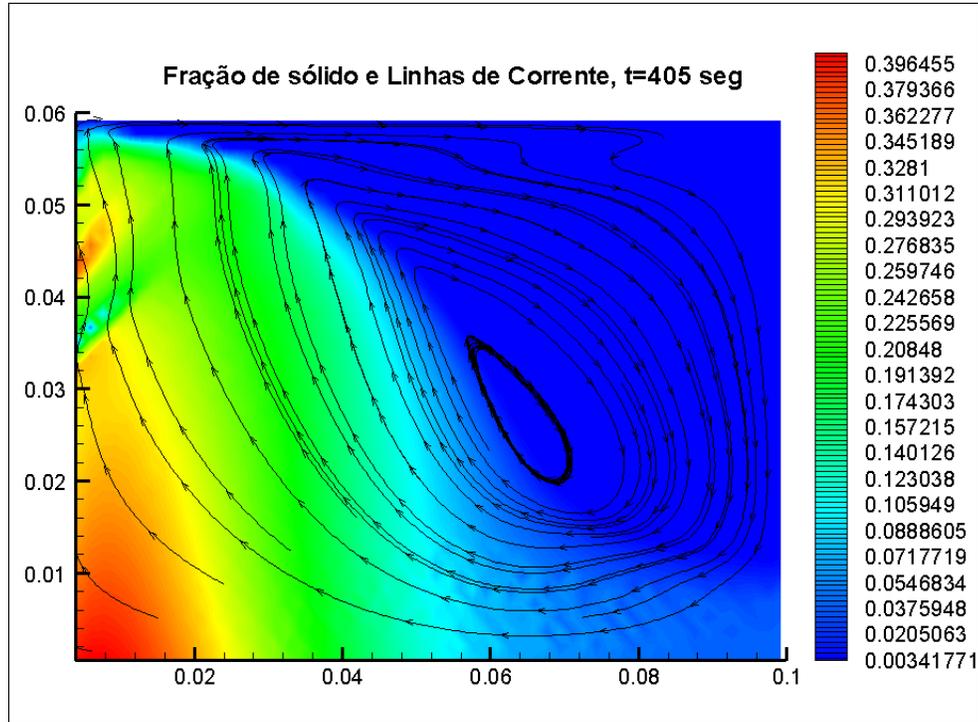


Figura 4.3: *Solidificação: Fração de Sólido e velocidade.  $t = 205$  seg.*

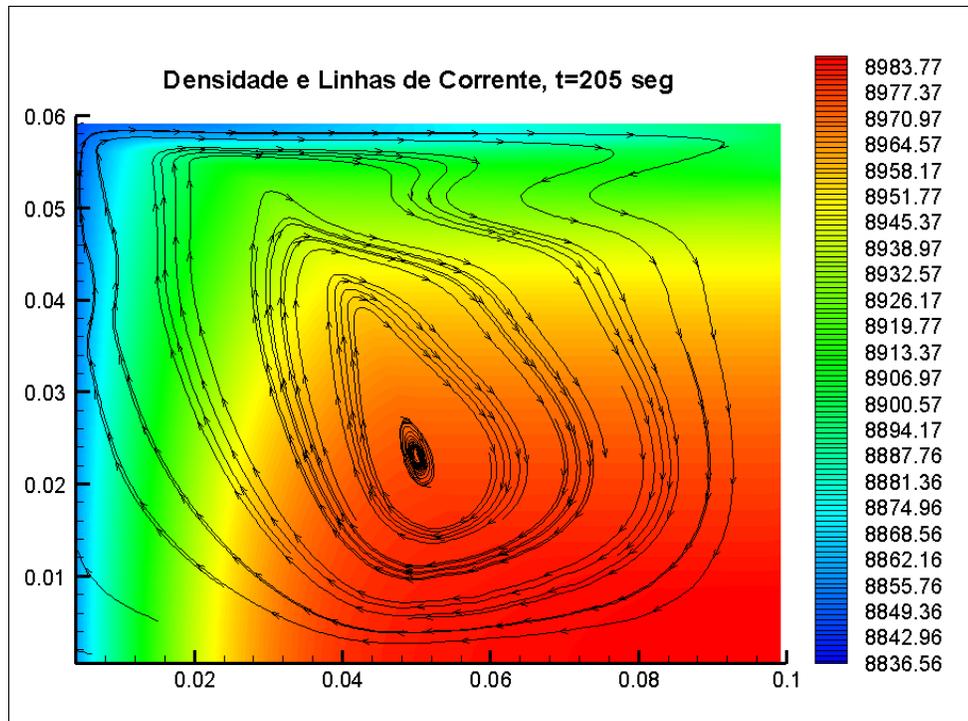


Figura 4.4: *Solidificação: Densidade e velocidade.  $t = 205$  seg.*

cm por 6 cm e com uma profundidade de 1.3 cm. Devido à fineza da cavidade, nos consideramos uma situação bidimensional.

Na cavidade verteu-se uma liga de chumbo (Pb) e estanho (Sn) inicialmente líquida, em repouso, com uma concentração inicial de estanho de 48%. Supomos que não entra nem sai soluto da cavidade e que o fluido se adere às paredes da cavidade. Além disso, os lados da cavidade são isolados termicamente, exceto no lado esquerdo, onde a temperatura é diminuída segundo a relação

$$\theta(t) = \theta_0 - 0,05t$$

onde  $t$  é o tempo (medido em segundos) e  $\theta_0$  é a temperatura inicial da liga. Neste caso,  $\theta_0 = \theta_M + mc_0$ , onde  $c_0 = 0,48$ ,  $\theta_M$  é a temperatura de fusão e  $m$  é a declividade da curva de liquidus (veja a tabela A.1 no apêndice A).

A solidificação começa então, no lado esquerdo da cavidade. Uma vez começamos a diminuir a temperatura neste lado, o fluido começa a se movimentar devido à aparição de um gradiente horizontal de densidade e também pela convecção térmica. Como foi comentado no capítulo 1, uma parte do soluto é rejeitado do frente de solidificação e levado pelo fluxo do líquido (por convecção) para o lado direito. Dependendo do sinal do coeficiente de expansão de soluto  $\beta_c$ , os gradientes de temperatura e de soluto geram movimentos que se opõem ou se somam, gerando um gradiente horizontal de densidade que sustenta o movimento.

Nas figuras 4.1, 4.2, 4.3 e 4.4 apresentamos os gráficos da temperatura, concentração, fração de sólido e densidade no tempo  $t = 205 \text{ seg}$ . Cada um deles ilustra também as linhas de fluxo (corrente) do fluido. A tabela 4.2 faz o resumo daquilo que é ilustrado em cada gráfico.

Variável	Tempo: $t = 205 \text{ seg}$	Tempo: $t = 405 \text{ seg}$	Tempo: $t = 765 \text{ seg}$
Concentração	Figura 4.2	Figura 4.6	Figura 4.14
Densidade	Figura 4.4	Figura 4.8	Figura 4.16
Fração de sólido	Figura 4.3	Figura 4.7	Figura 4.15
Temperatura	Figura 4.1	Figura 4.5	Figura 4.13

Tabela 4.1: Resumo dos resultados apresentados para a liga  $Pb - 48\%Sn$  para o caso de gradiente vertical de densidade.

A seguir, apresentamos também algumas figuras que ilustram a evolução do frente de solidificação da liga.

## 4.2 Experimentos Numéricos II: Gradiente vertical da densidade

Este segundo experimento, é de fato, aquele descrito no início do capítulo 1. O objetivo deste experimento é simular a formação das chaminés de convecção e a sua evolução. Estas chaminés são apontadas hoje como as grandes responsáveis pelos defeitos de solidificação, ou freckles. Determinar as condições sob as quais formam-se estas chaminés, é um problema de grande importância prática na indústria, já que os efeitos ocasionados por eles poderiam ser corrigidos e assim obter um bom produto (veja a figura 4.17)

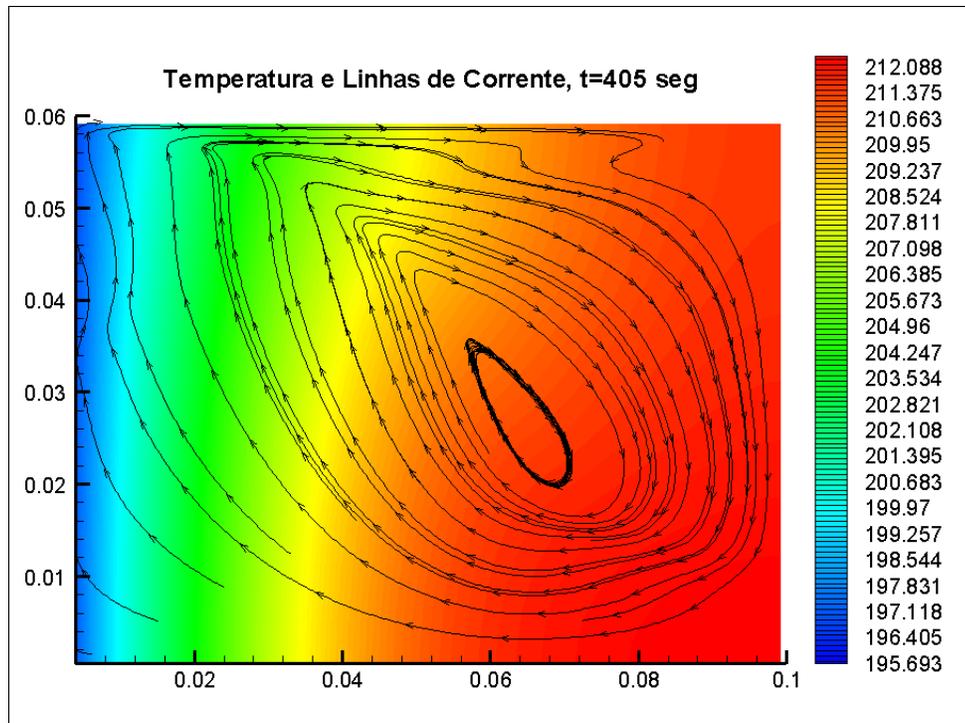


Figura 4.5: *Solidificação: Temperatura e velocidade.  $t = 405$  seg.*

Uma das dificuldades na predição de chaminés, é que praticamente todas as ligas metálicas são opacas, o que dificulta sua observação. Além disso, é difícil fazer medições de, por exemplo, temperatura ou concentração no interior das amostras sem alterar o sistema. A simulação numérica então pode contribuir fortemente no entendimento dos processos físicos que ocorrem durante a solidificação direcional e que originam os freckles. De fato, hoje existem vários códigos comerciais que simulam a solidificação de ligas metálicas, mas sua grande desvantagem continua sendo o custo e, ao serem pagos, é quase impossível testar variantes dos algoritmos e tentar introduzir alguma mudança neles.

A situação física do experimento é a seguinte: temos uma cavidade retangular de  $0.09\text{ m}$  de base por  $0.03\text{ m}$  de altura. Uma liga de chumbo com 48% de estanho, em estado completamente líquida e em repouso é colocada na cavidade. Supomos que não temos entrada nem saída de soluto. As paredes horizontais são supostas aderentes e submetidas a uma temperatura fixa. Em particular, a parede superior é deixada na temperatura inicial  $\theta_0$  e a temperatura da parede inferior é diminuída seguindo a relação  $\theta(t) = \theta_0 - 0,25t$  onde  $t$  é o tempo, medido em segundos. As paredes verticais da cavidade são isoladas térmicamente. Na sua tese, o Ahmad supõe a velocidade nula nas paredes verticais. Nós simulamos esta situação e também exploramos outra condição de contorno: a parede deslizante, onde  $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$  e  $\sigma(\mathbf{v}, p)\mathbf{n} \wedge \mathbf{n} = 0$ .

Nas figuras 4.18 até 4.29, apresentamos os nossos resultados numéricos para o caso dos dois tipos de paredes. A tabela 4.2 faz o resumo daquilo que é ilustrado em cada gráfico.

Quando comparamos os nossos resultados com aqueles apresentados por Ahmad vemos que nós conseguimos simular as duas chaminés de convecção que aparecem na tese do Ahmad, e assim, os resultados, pelos menos qualitativamente, são parecidos. Agora, se fazemos uma análise mais

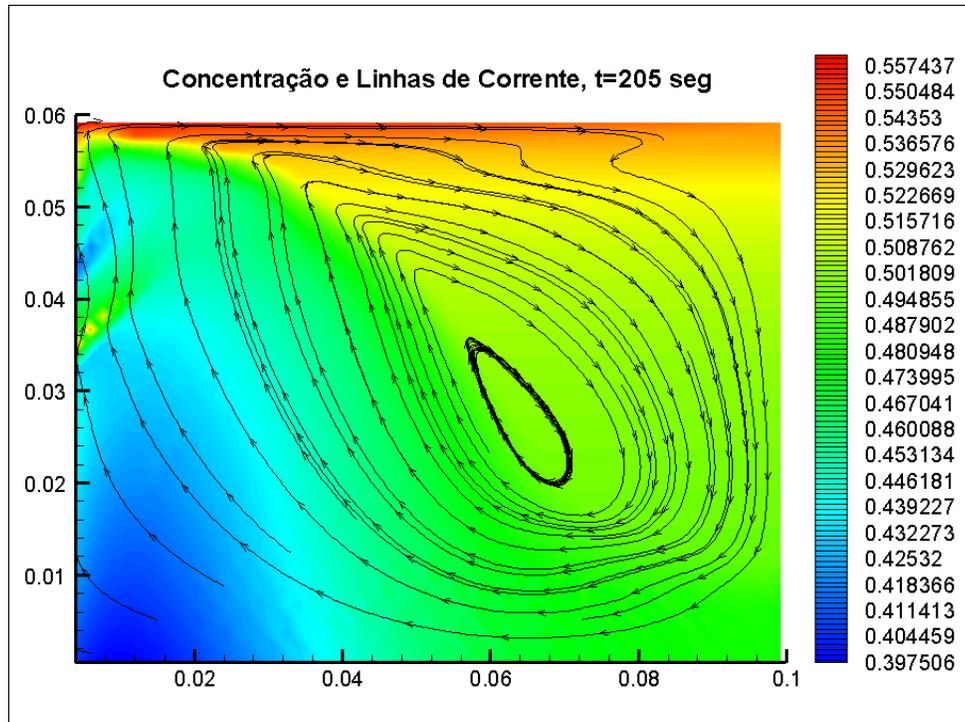


Figura 4.6: *Solidificação: Concentração e velocidade.  $t = 405$  seg.*

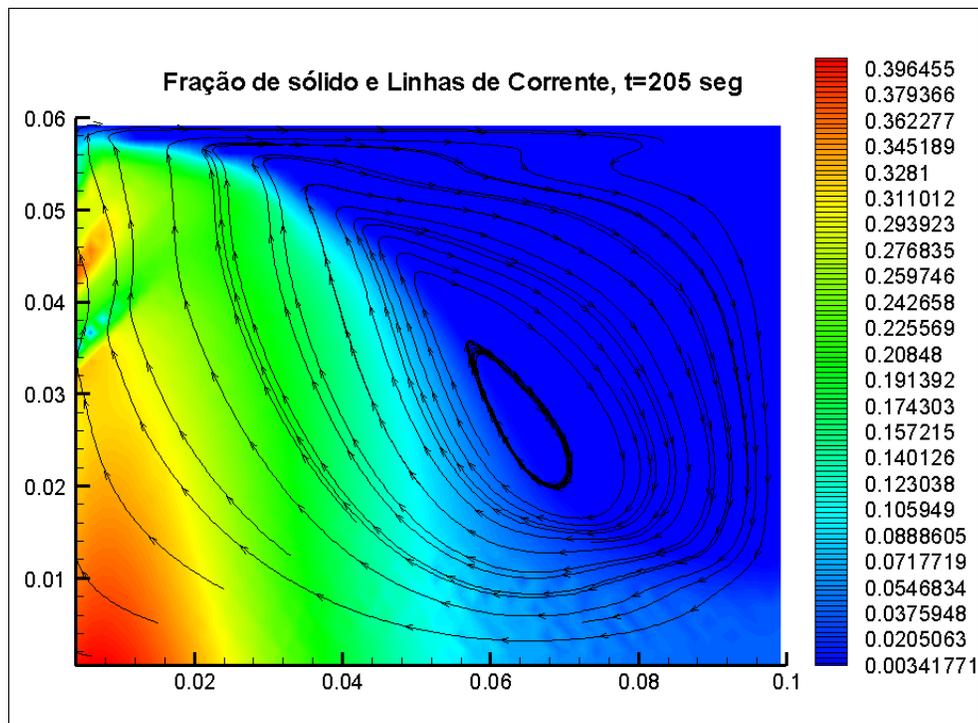


Figura 4.7: *Solidificação: Fração de Sólido e velocidade.  $t = 405$  seg.*

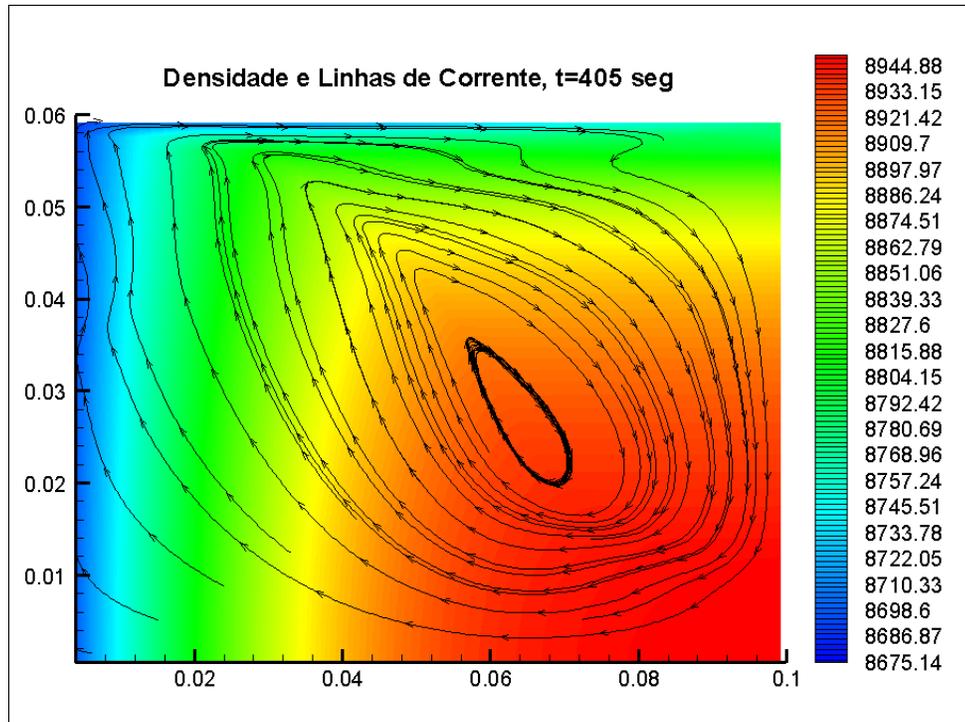


Figura 4.8: *Solidificação: Densidade e velocidade.  $t = 405$  seg.*

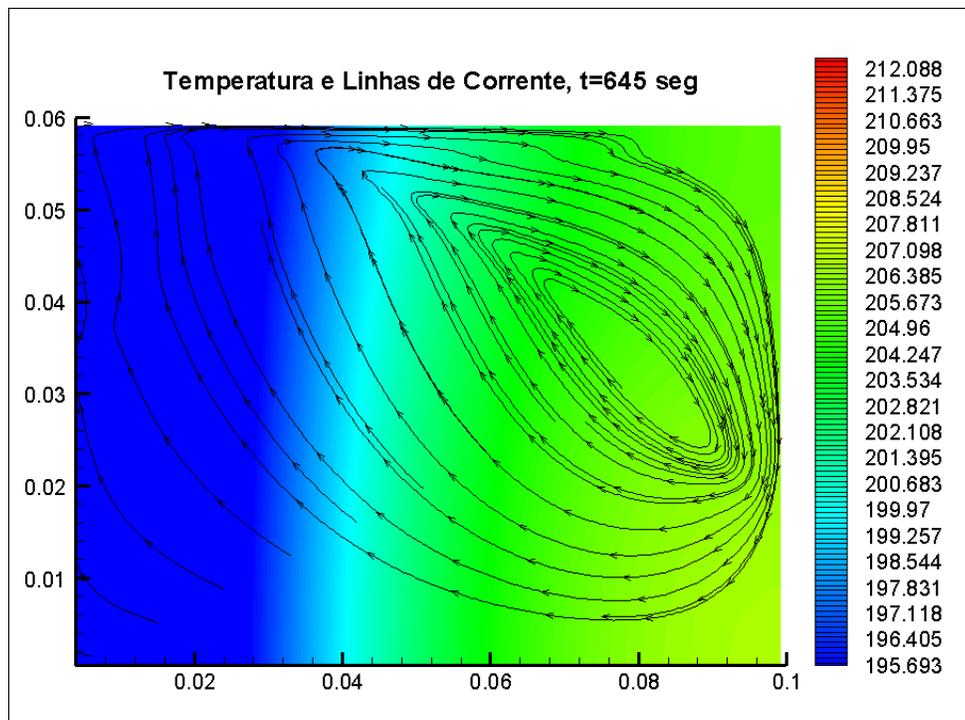


Figura 4.9: *Solidificação: Temperatura e velocidade.  $t = 645$  seg.*

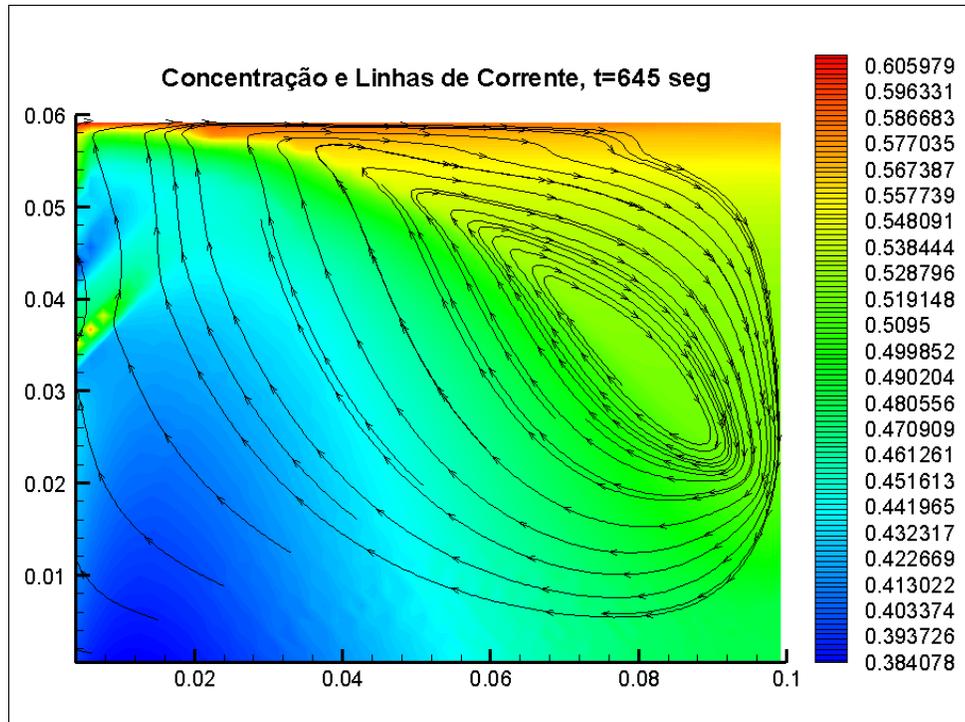


Figura 4.10: *Solidificação: Concentração e velocidade.  $t = 645$  seg.*

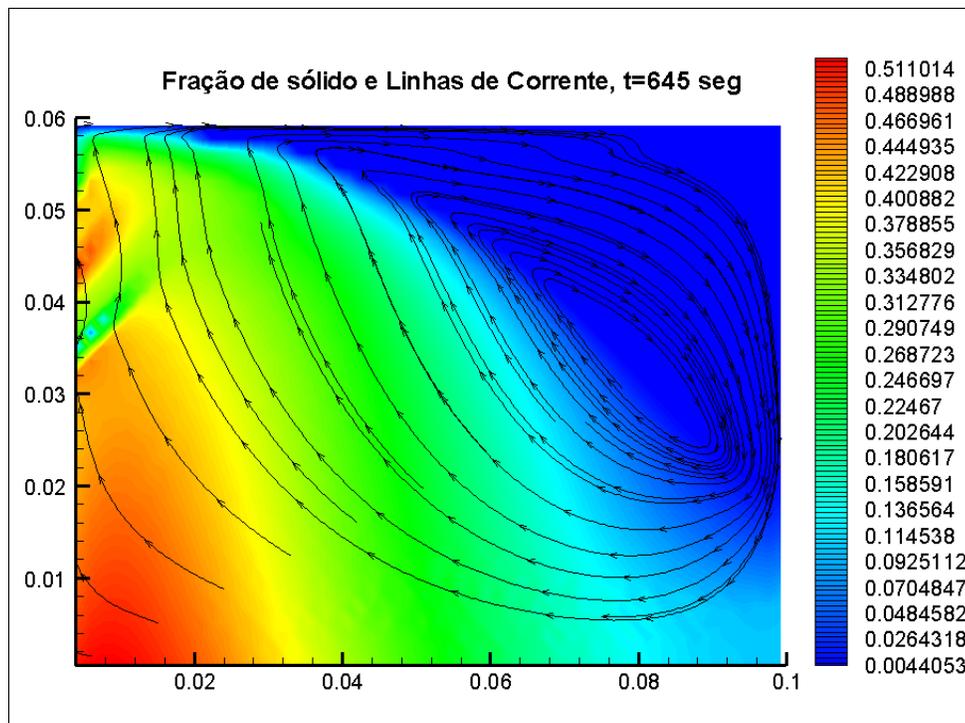


Figura 4.11: *Solidificação: Fração de Sólido e velocidade.  $t = 645$  seg.*

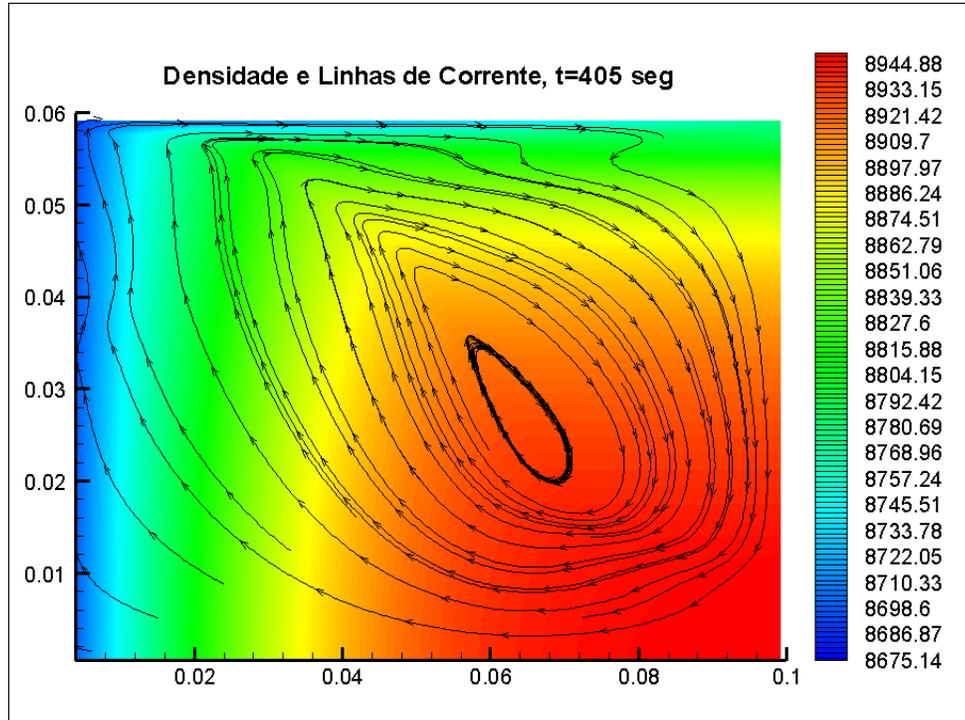


Figura 4.12: *Solidificação: Densidade e velocidade.  $t = 645$  seg.*

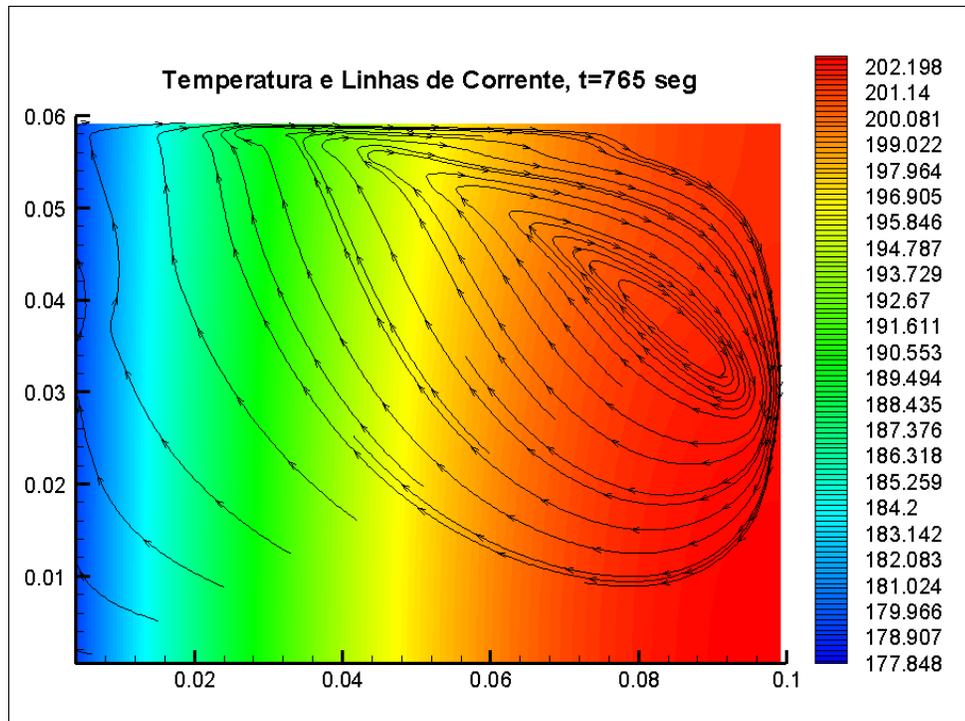


Figura 4.13: *Solidificação: Temperatura e velocidade.  $t = 765$  seg.*

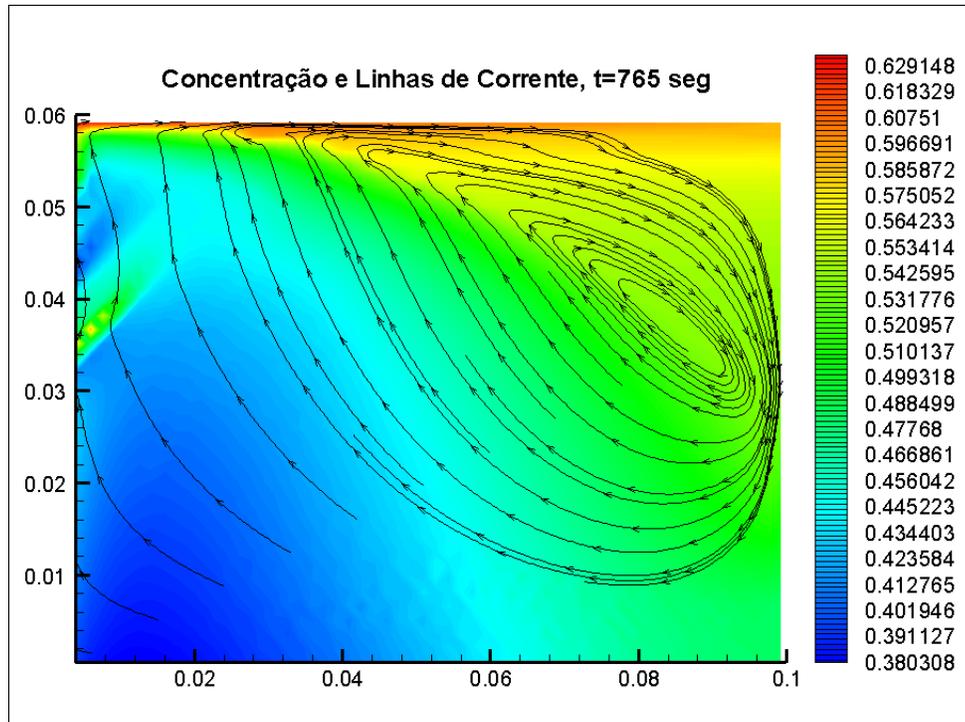


Figura 4.14: *Solidificação: Concentração e velocidade.  $t = 765$  seg.*

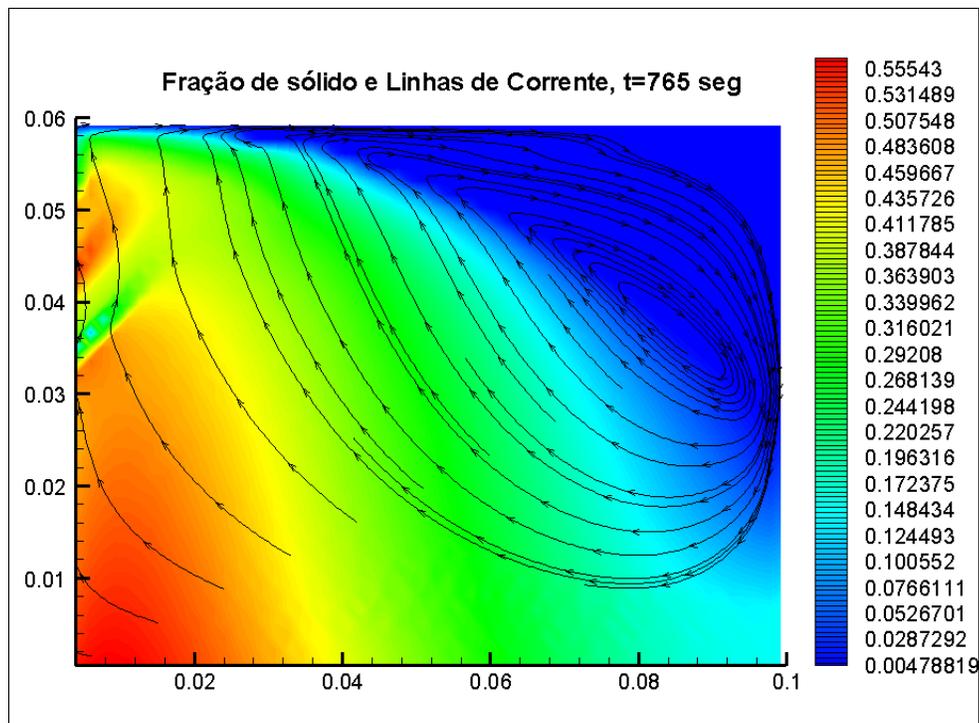


Figura 4.15: *Solidificação: Fração de Sólido e velocidade.  $t = 765$  seg.*

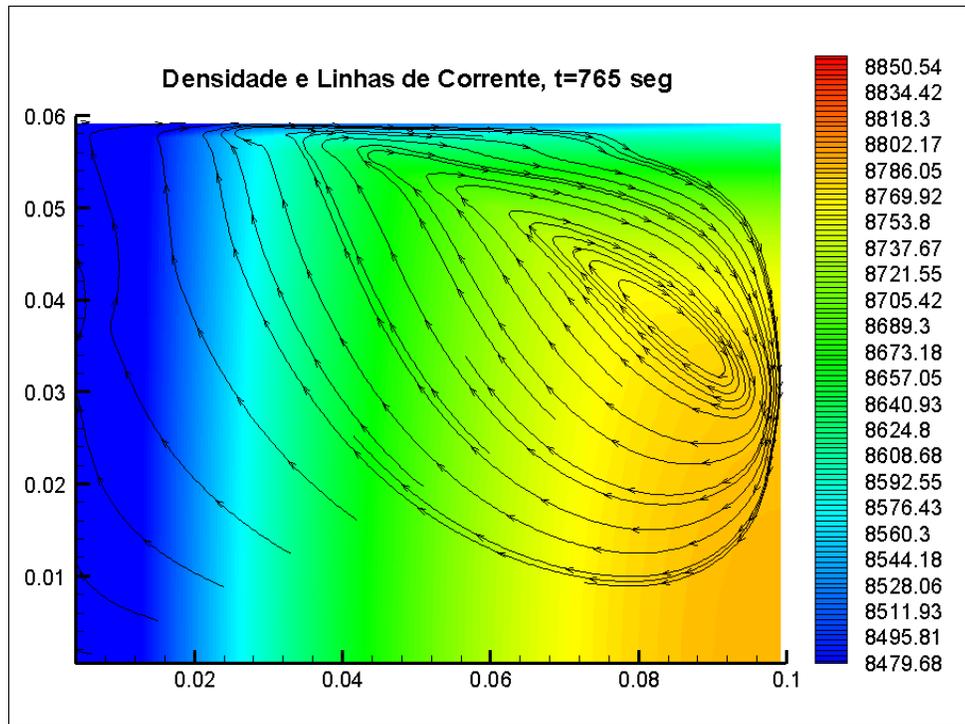
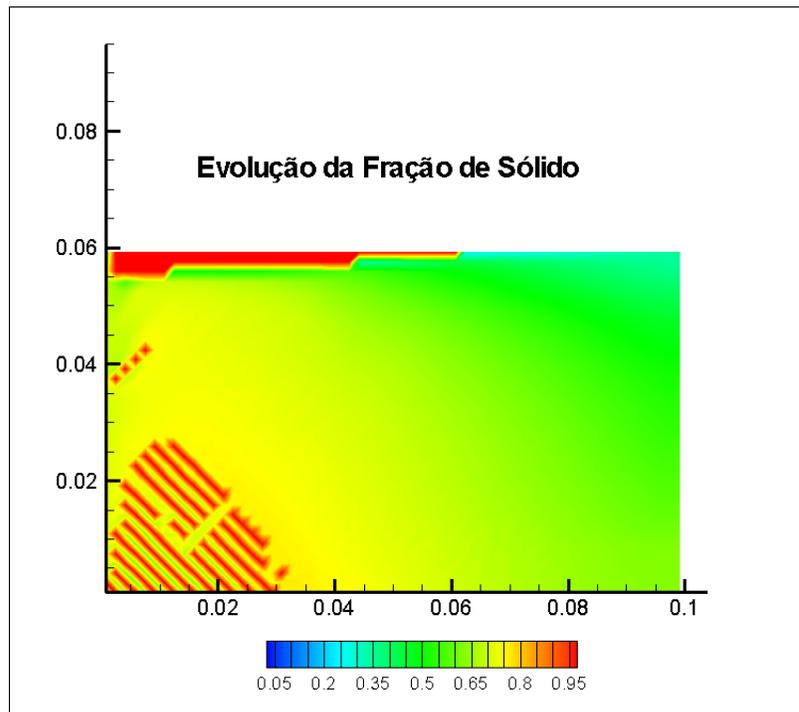
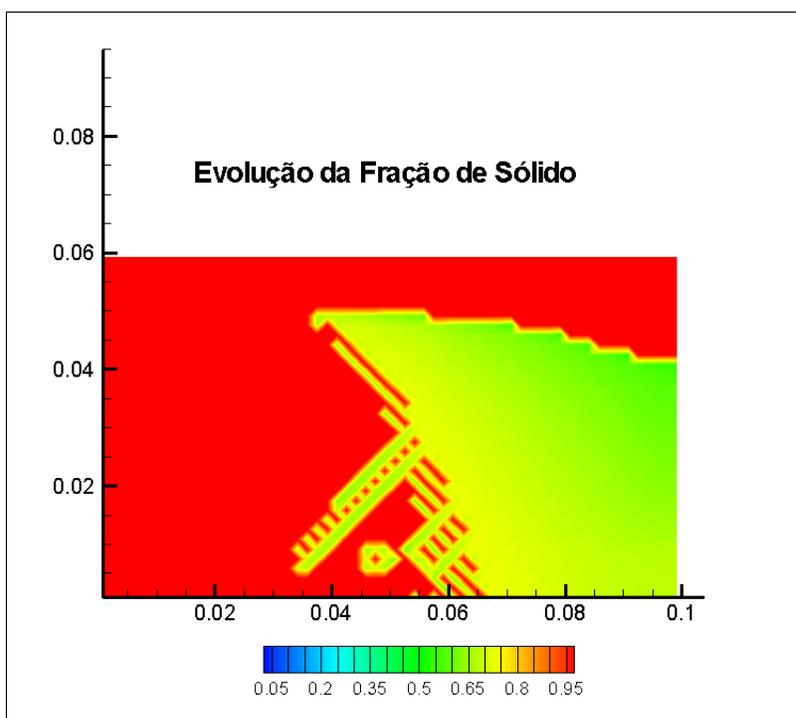
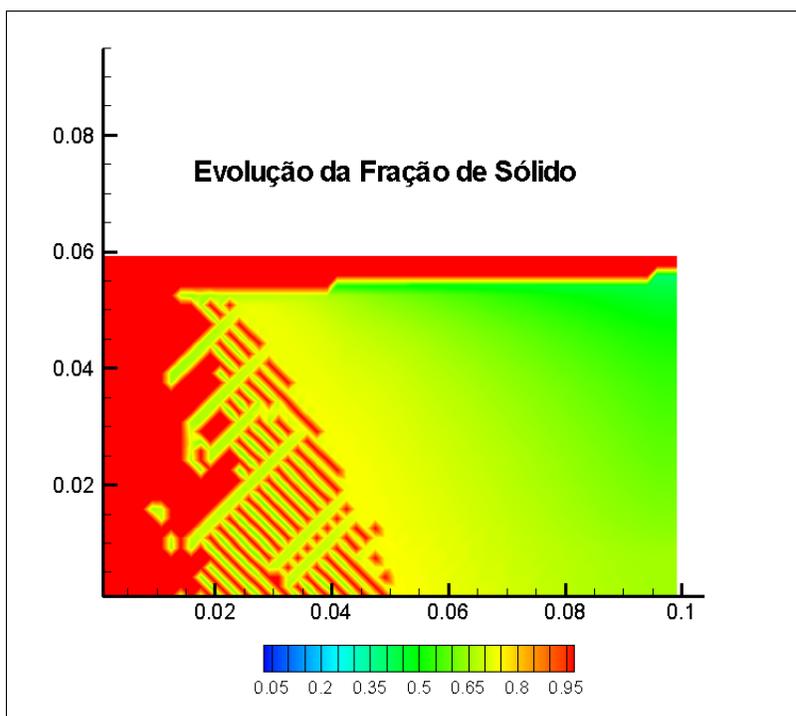


Figura 4.16: *Solidificação: Densidade e velocidade.  $t = 765$  seg.*





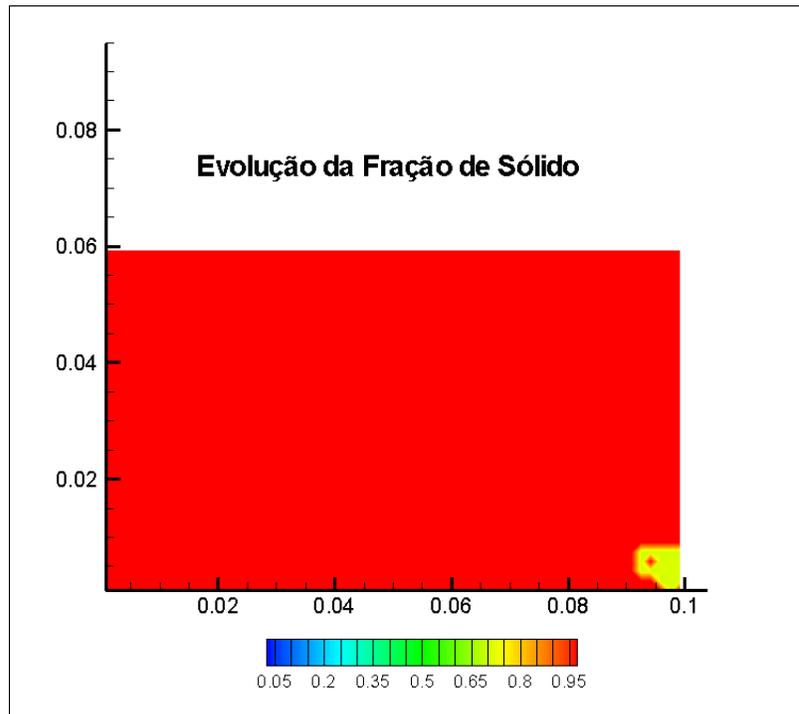


Figura 4.17: Peça metálica com freckles. Tomada de <http://www.icaen.uiowa.edu/becker>.

Variável	Tempo: $t = 35seg$	Tempo: $t = 70seg$	Tempo: $t = 100seg$
Concentração	Figura 4.18	Figura 4.22	Figura 4.26
Densidade	Figura 4.19	Figura 4.23	Figura 4.27
Fração de sólido	Figura 4.20	Figura 4.24	Figura 4.28
Temperatura	Figura 4.21	Figura 4.25	Figura 4.29

Tabela 4.2: Resumo dos resultados apresentados para a liga  $Pb - 48\%Sn$  para o caso de gradiente vertical de densidade.

detalhada, notamos que nossos resultados apresentam simetria (em relação à reta  $x = 0,09/2$ ), quando comparados com os reportados pelo Ahmad. Uma das razões para isto, pode ser o algoritmos que usamos para calcular a velocidade. Em particular, nós verificamos em todo instante a conservação da massa,  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ , no nível discreto. Isto tem que ser feito, já que qualquer mudança na velocidade (que neste caso é pequena, da ordem de  $10^{-3} - 10^{-5} m/seg$ ) acarreta mudanças nas variáveis que estão sendo calculadas.

Por outro lado, se observa a influência da condição de borde sob a velocidade: nota-se pequenas diferenças nos valores das variáveis perto das paredes verticais.

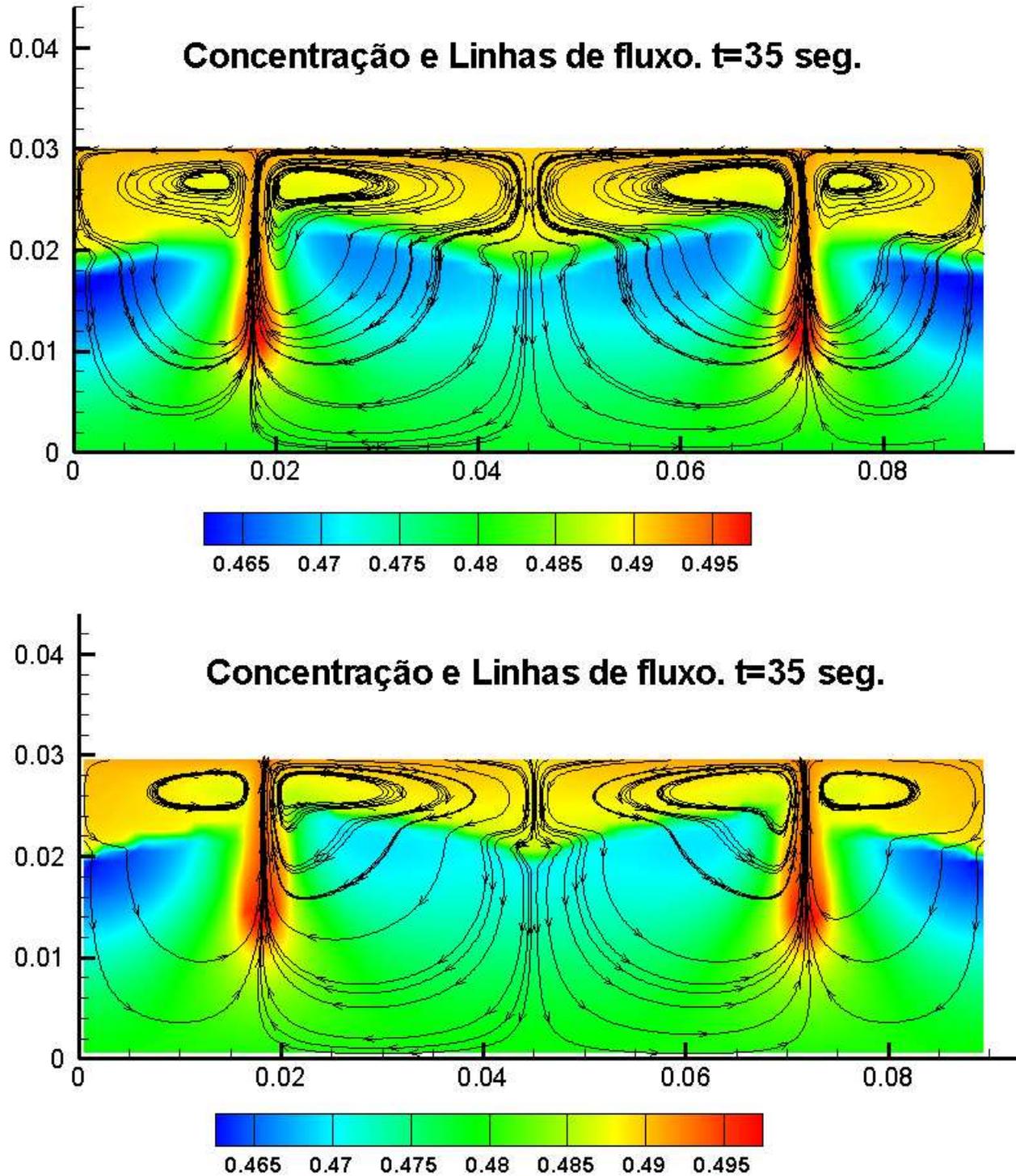


Figura 4.18: *Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.*

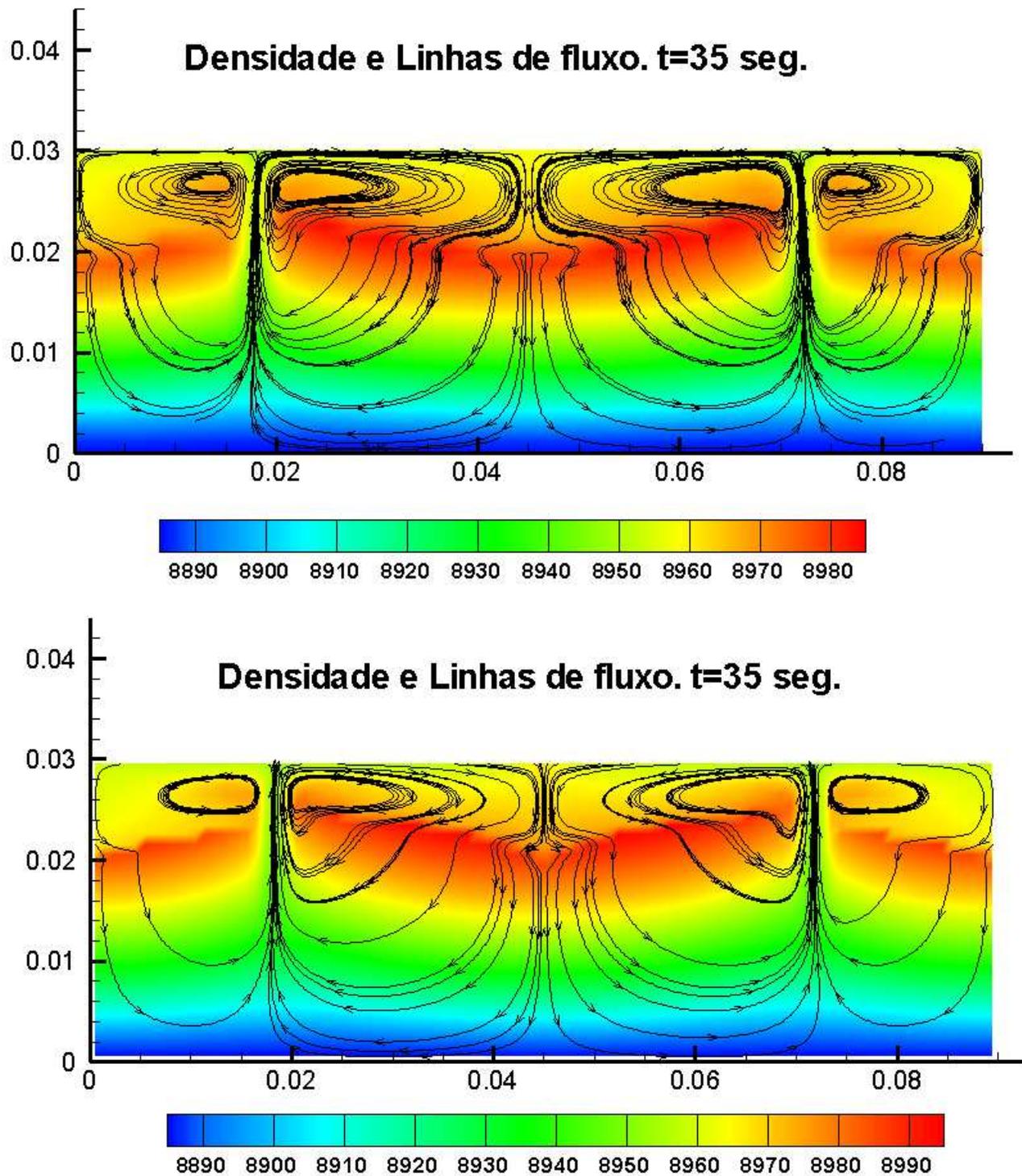


Figura 4.19: *Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.*

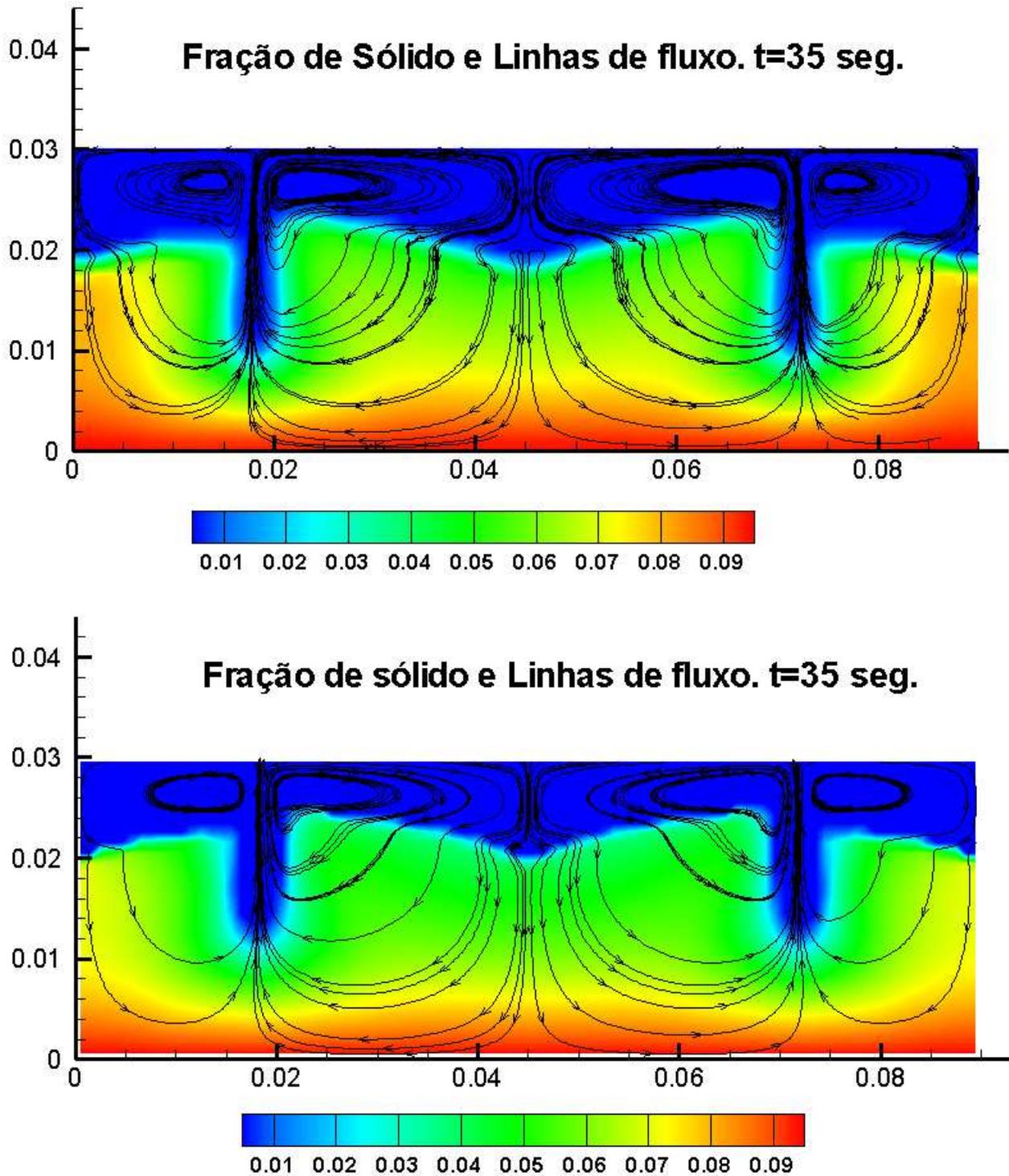


Figura 4.20: *Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.*

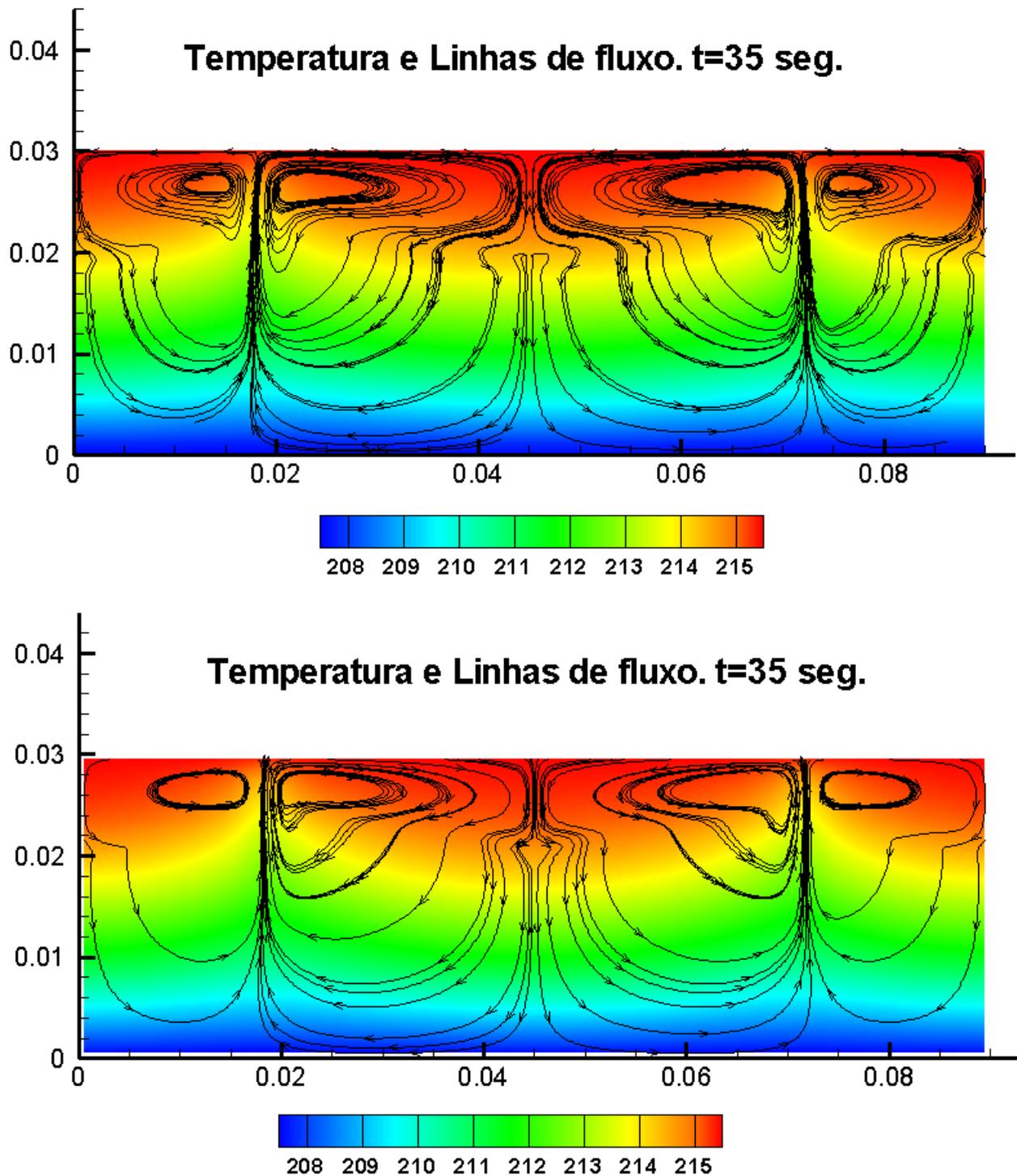


Figura 4.21: *Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.*

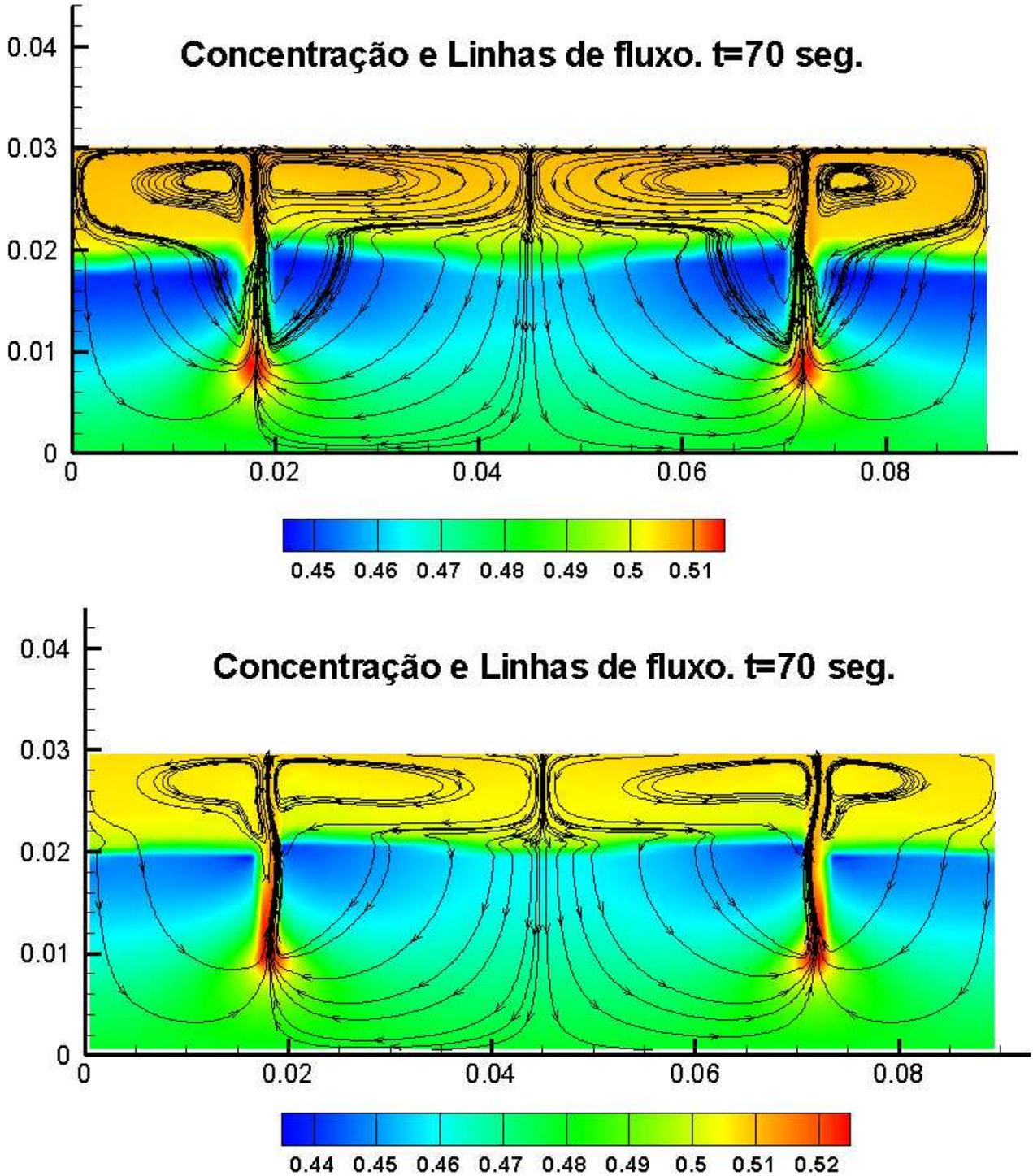


Figura 4.22: Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.

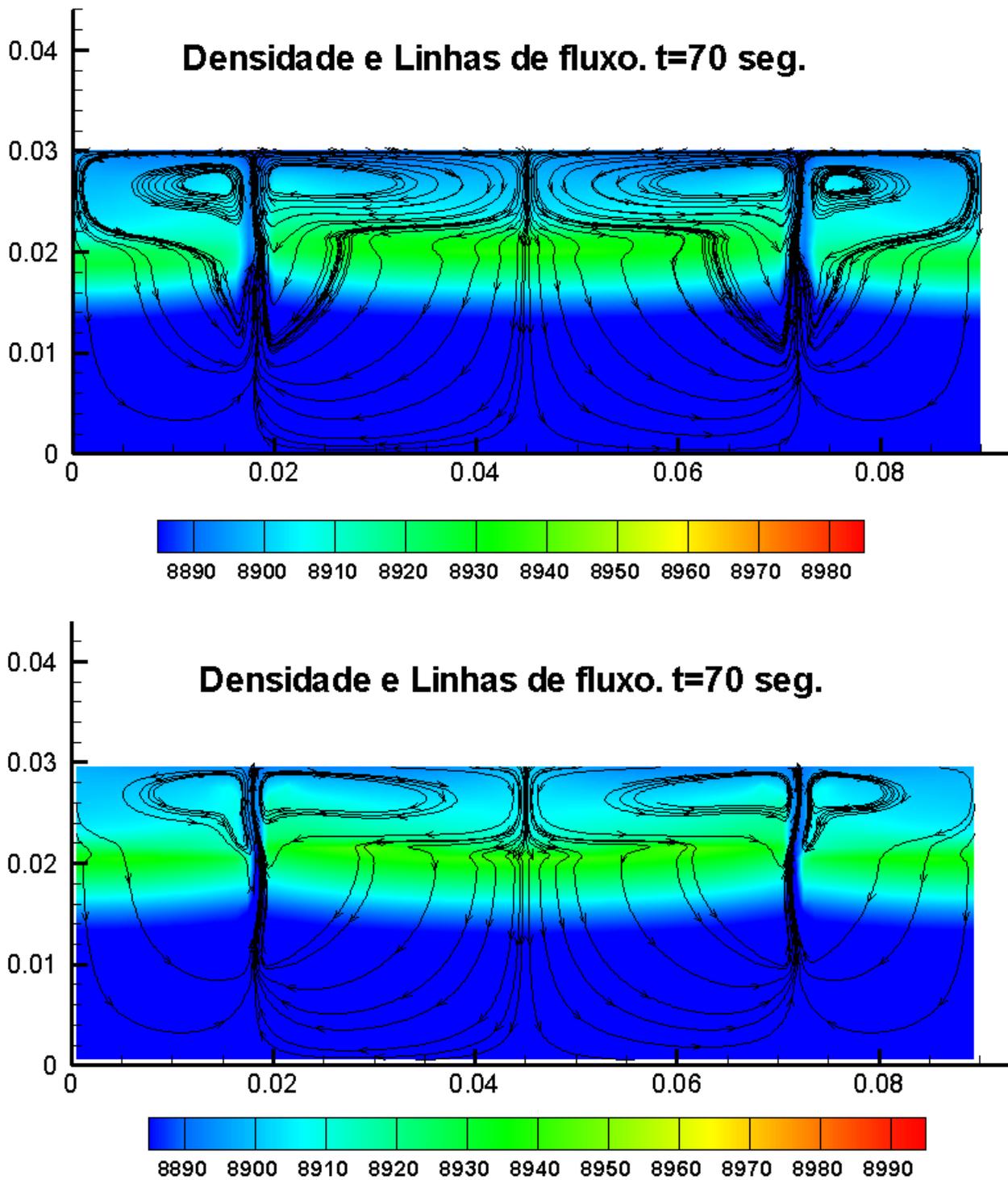


Figura 4.23: *Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.*

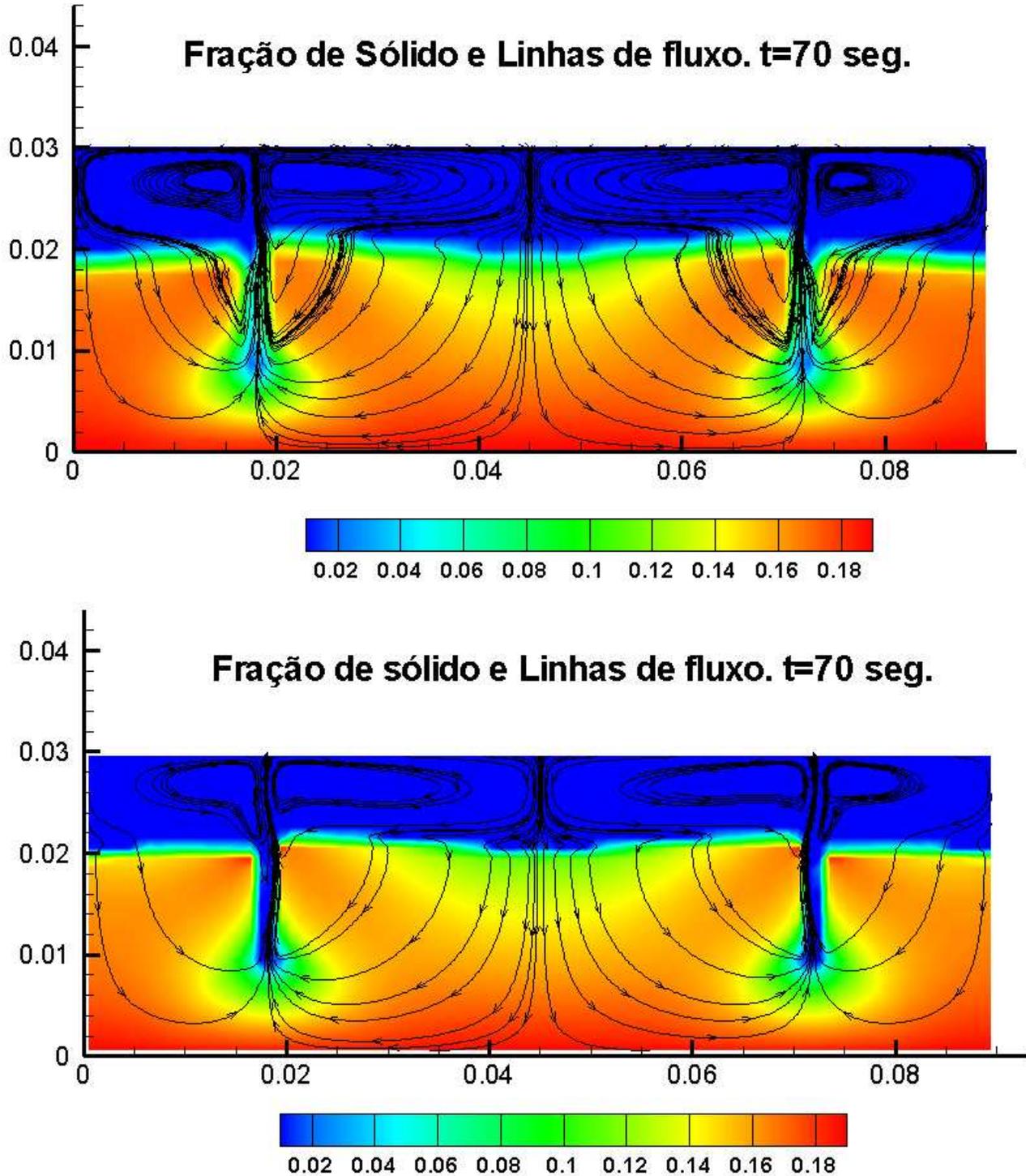


Figura 4.24: Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.

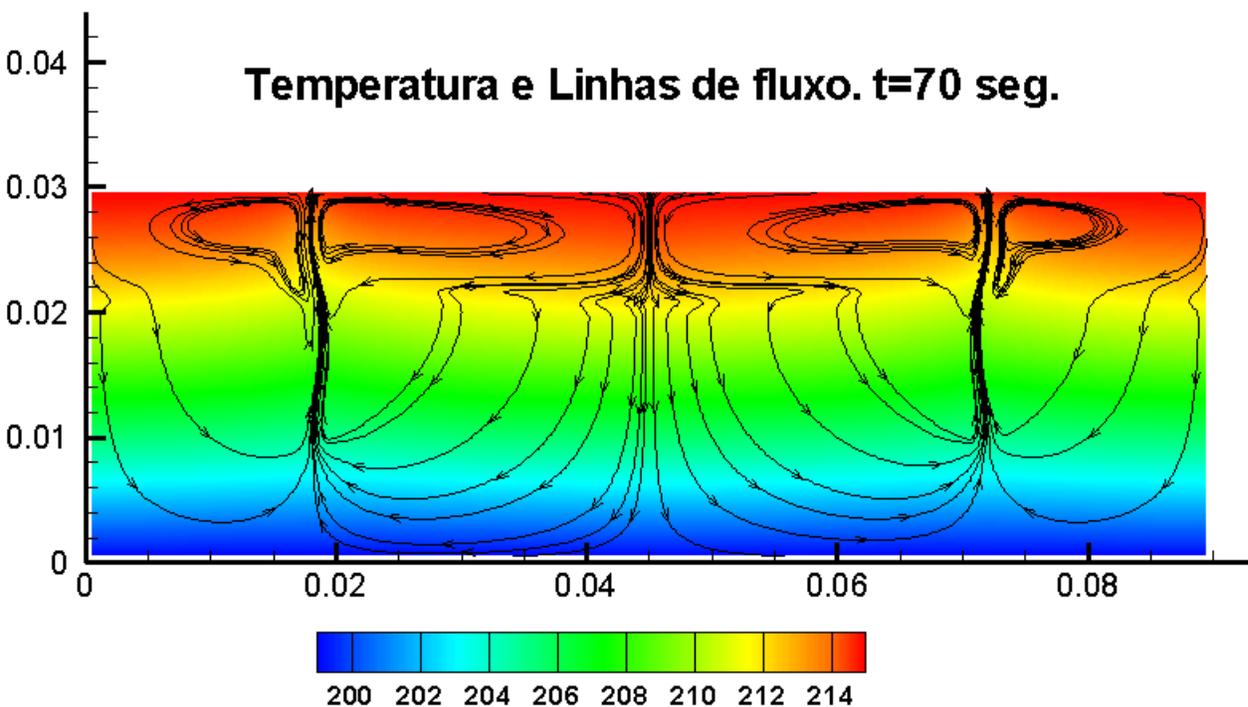
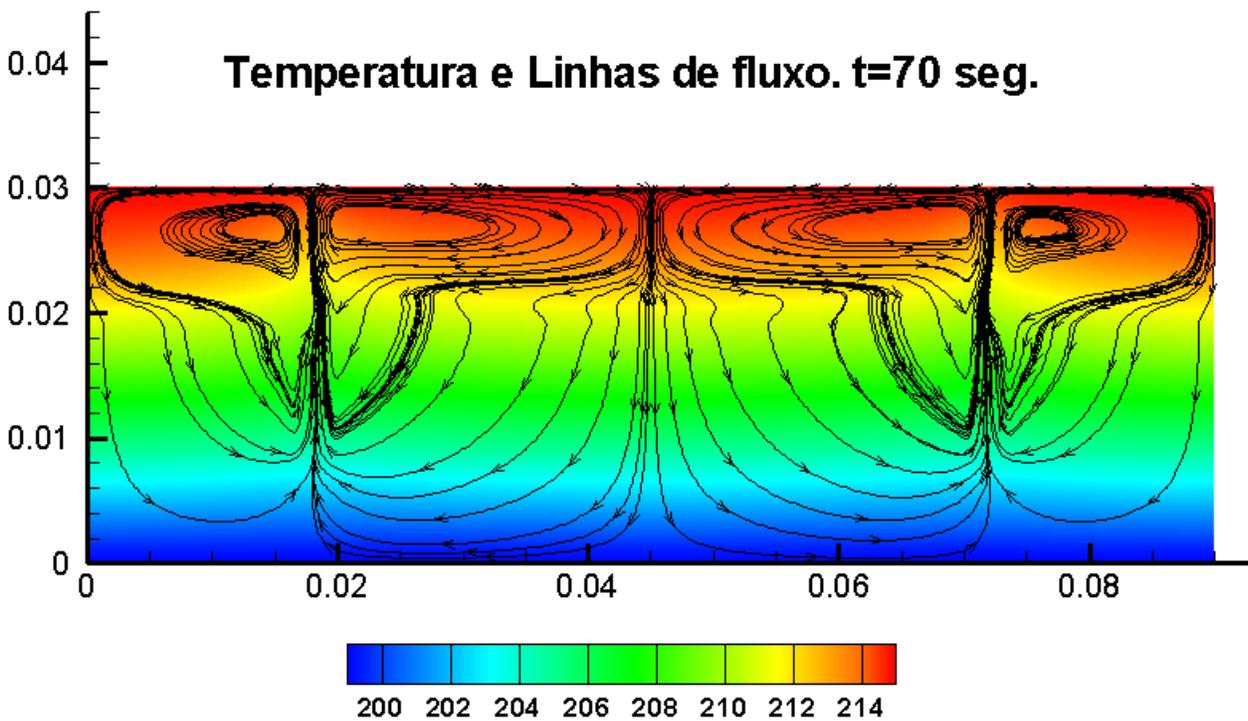


Figura 4.25: Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.

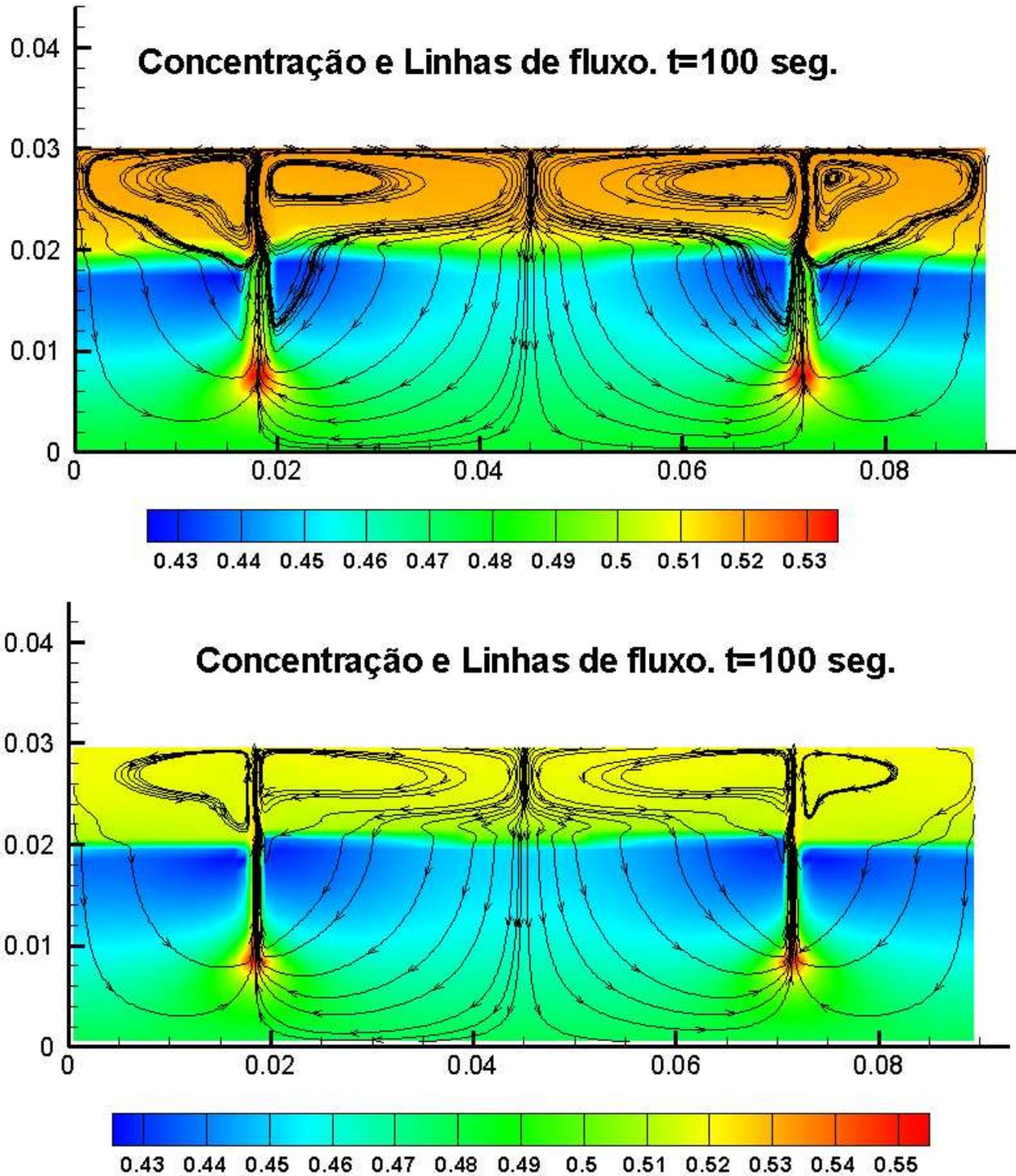


Figura 4.26: *Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.*

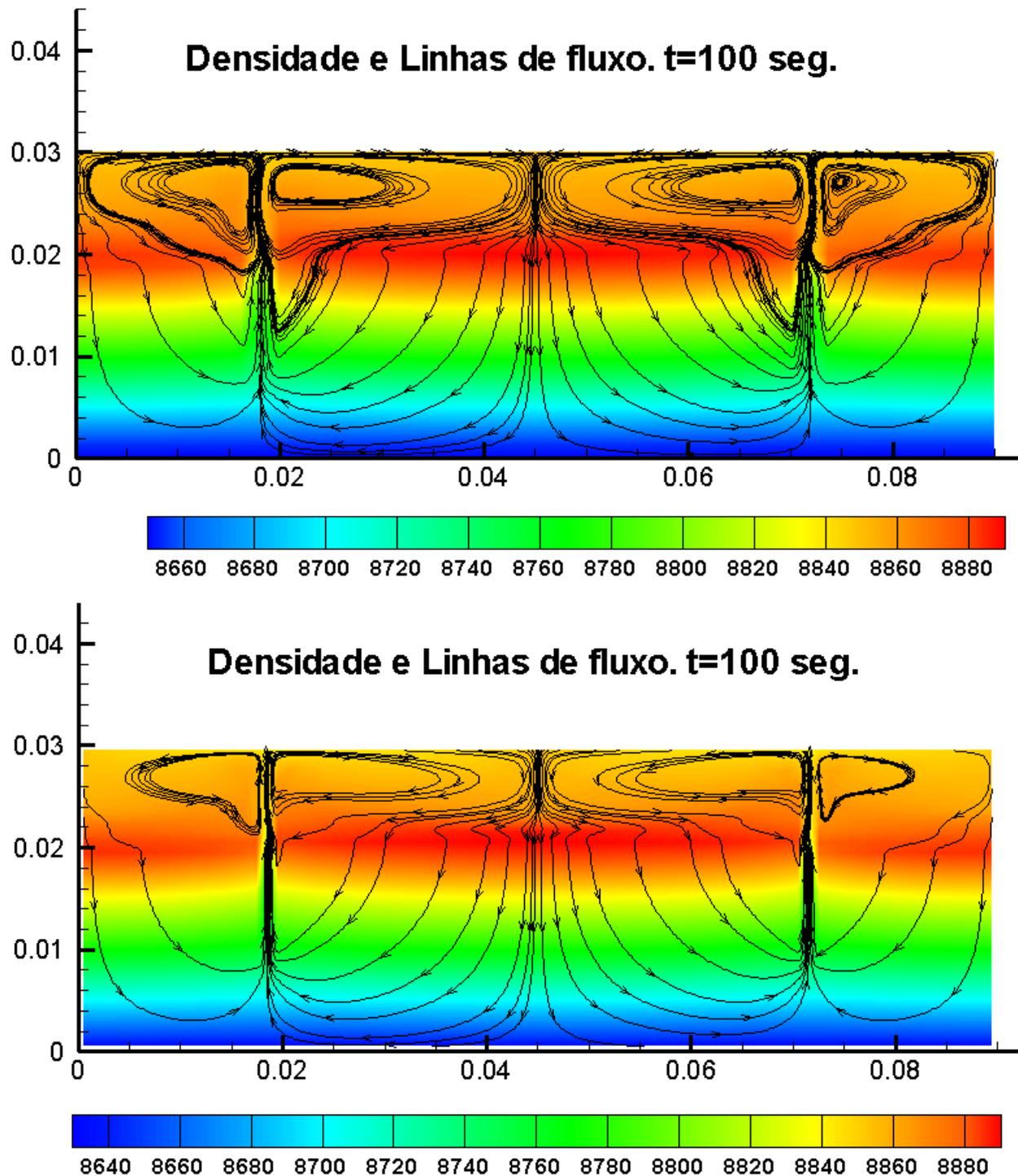


Figura 4.27: Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.

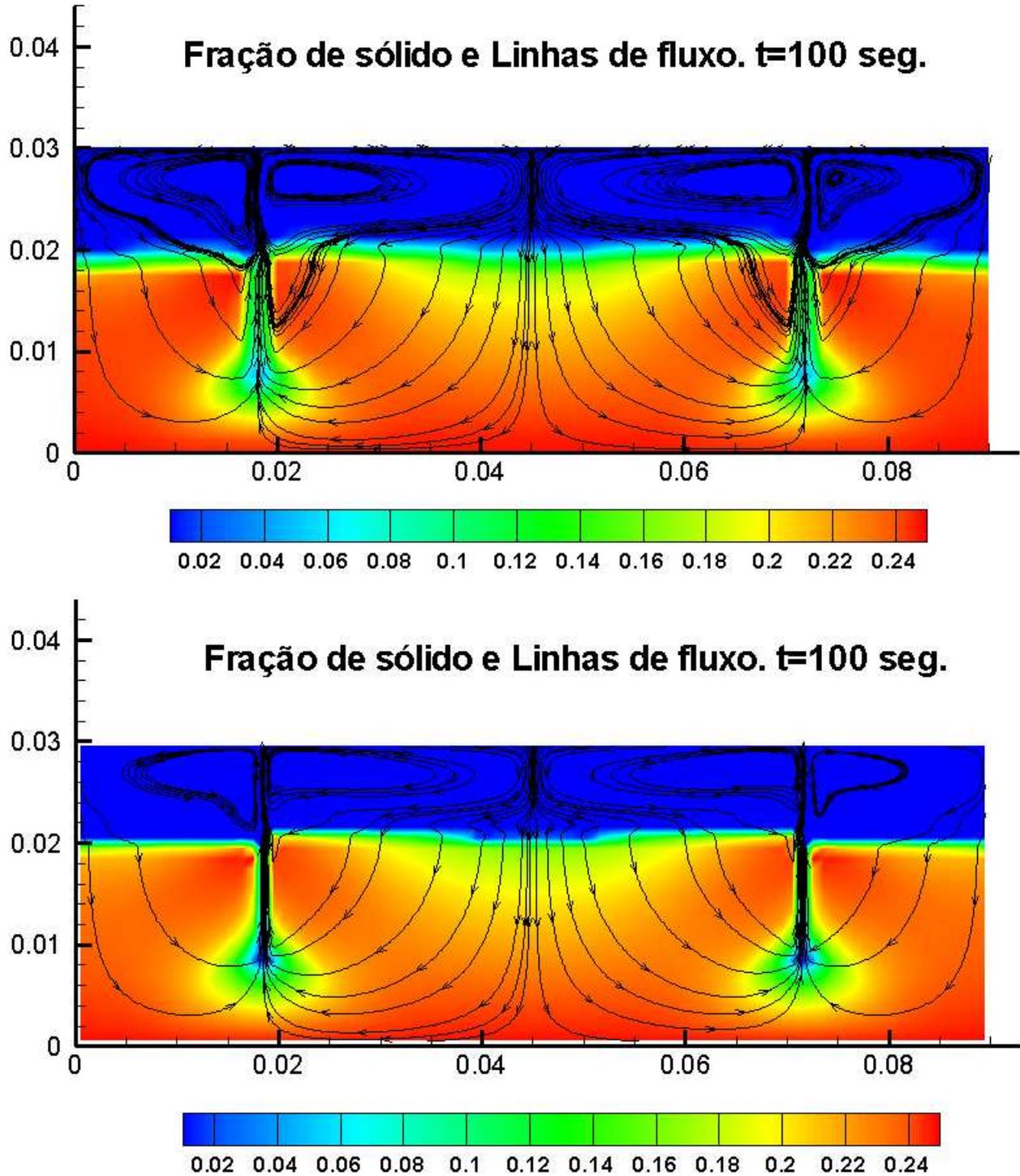


Figura 4.28: Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.

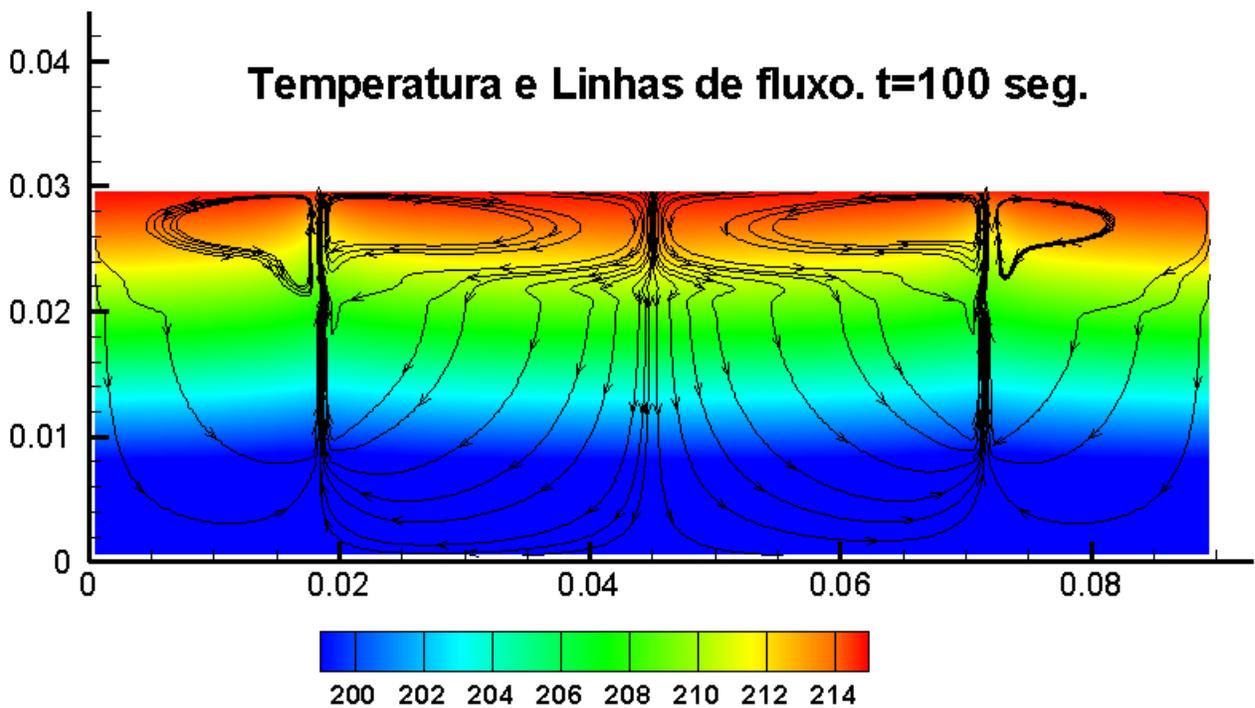
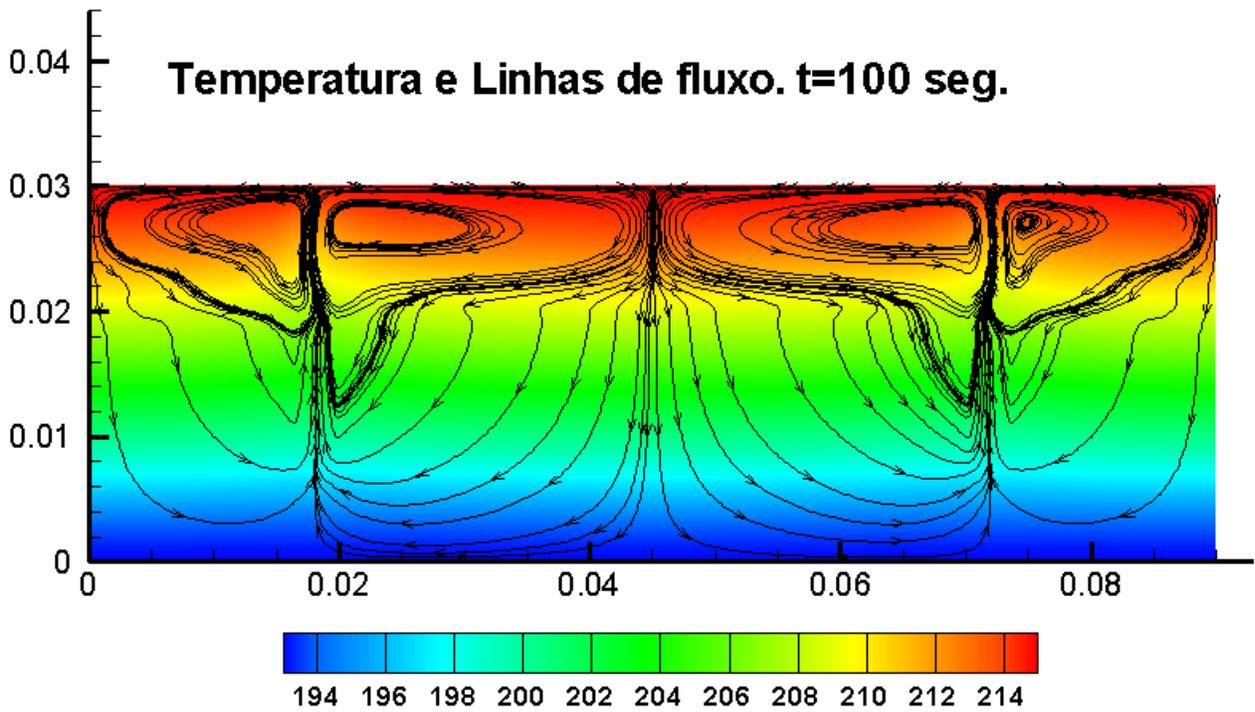


Figura 4.29: *Solidificação com velocidade nula em todo o contorno (figura de acima) e com velocidade nula somente nas paredes superior e inferior.*

---

---

# CAPÍTULO 5

---

## CONCLUSÕES

Neste trabalho consideramos o sistema de equações que modela a solidificação de ligas binárias. Para este sistema, usamos o método de volumes finitos baseado em malhas colocalizadas, combinado com um método de discretização temporal baseado no método de Euler implícito e usando idéias de splitting de operadores para desenhar um algoritmo para simular numericamente o processo de solidificação de uma liga de chumbo e estanho colocada numa cavidade retangular, inicialmente em estado líquido, em repouso e homogênea, onde não é permitida a entrada e saída de soluto. Duas situações foram consideradas:

- Na primeira delas, supomos que fluido é aderente as paredes da cavidade. Além disso, as paredes são isoladas térmicamente, exceto a parede esquerda onde a temperatura foi diminuída gradualmente. Vários gráficos da temperatura, da concentração, da fração de sólido e da densidade em diferentes tempos foram apresentados, ilustrando a mudança na quantidade de soluto nos diferentes lugares da cavidade.
- Na segunda delas, as paredes verticais da cavidade são supostas deslizantes e termicamente isoladas. Por outro lado, as paredes horizontais são supostas aderentes e submetidas a uma temperatura conhecida. Em particular, a parede superior é mantida a uma temperatura fixa (a inicial da liga) entretanto que a da parede inferior é diminuída gradualmente. Novamente foram apresentados vários gráficos da temperatura, da concentração, da fração de sólido e da densidade em diferentes tempos, ilustrando a aparição das chaminés de convecção as quais são apontadas como a origem dos freckles.

Também, usando um procedimento que permite modificar o problema original de solidificação e o método de Galerkin, demonstramos um resultado de existência de soluções fracas para um modelo evolutivo de solidificação não homogêneo, isto é, com os coeficientes de difusão dependendo das variáveis de concentração e temperatura.

### 5.1 Futuras Linhas de Pesquisa

A seguir enumeramos diversos problemas que podem ser atacados no futuro:

**Na análise matemática do problema de solidificação**

1. Estudar a unicidade e regularidade das soluções fracas do problema,
2. Demonstrar a existência de soluções fortes do problema,
3. Estudar a unicidade e regularidade das soluções fortes do problema.

**Na simulação numérica do problema de solidificação**

1. Implementar o algoritmo apresentado no trabalho usando os método de volumes de controle baseados em elementos, os quais permitem a grande flexibilidade geométrica dos elementos finitos e possuem a desejável propriedade de conservação dos volumes finitos.
2. Explorar o uso do software numérico obtido para aprofundar no entendimento e melhorar os processos industriais relacionados com a elaboração de partes metálicas.

## APÊNDICE A

# PARÂMETROS FÍSICOS DA LIGA PB-SN

Parâmetro	Unidades	Símbolo	Valor
<b>Parâmetros metalúrgicos</b>			
Densidade	$Kg m^{-3}$	$\rho$	9000
Calor específico	$J kg^{-1} K^{-1}$	$C_p$	200
Condutividade térmica	$W m^{-1} K^{-1}$	$\kappa_\theta$	30
Viscosidade dinâmica	$Pas$	$\mu$	0,01
Difusividade do soluto	$m^2 s^{-1}$	$D$	$3 \times 10^{-9}$
<b>Parâmetros do diagrama de fases</b>			
Temperatura de fusão	$^\circ C$	$\theta_M$	327,2
Temperatura eutética	$^\circ C$	$\theta_E$	183
Calor latente	$J m^3$	$L$	$4,8195 \times 10^8$
Concentração eutética	— — —	$c_E$	0,19
Declividade da curva de líquidus	— — —	$m$	-233,4
Rádio de segregação	— — —	$r$	0,307
<b>Aproximação de Boussinesq</b>			
Temperatura de referência	$^\circ C$	$\theta_r$	216
Coefficiente de expansão térmico	$^\circ C^{-1}$	$\beta_\theta$	$-10^{-4}$
Concentração de referência	— — —	$c_r$	concentração inicial
Coefficiente de expansão do soluto	— — —	$\beta_c$	-0.45
Aceleração da gravidade	$m s^{-2}$	$\mathbf{g}$	-9,81
<b>Termo de Carman-Kozeny</b>			
Espaçamento entre as ramas secundárias das dendritas	$m$	$\delta$	$2 \times 10^{-4}$

Tabela A.1: Propriedades Físicas da liga Pn-Sn

---

# BIBLIOGRAFIA

- [Ada75] R. A. Adams. *Sobolev Spaces*. Academic Press, New York, 1975.
- [Ahm95] N. Ahmad. *Numerical Simulation of Transport Processes in Multicomponent System related to Solidification Problems*. PhD thesis, Ph. D. Thesis DMS-EPFL 1349, 1995.
- [Bal97] R. Baliga. *Advances in numerical heat transfer*, 1997.
- [BB83] S. Patankar B.R. Baliga. A control volume finite element method for two-dimensional fluid flow and heat transfer. *Numer. Heat Transfer*, 6:245–262, 1983.
- [BDO] A. Badillo, M. Durán, and E. Ortega. Computation of instabilities of a solidification process in axisymmetric domains. part ii. numerical results. *Rev. Internac. Métod. Numér. Cál. Diseñ. Ingr.*
- [BGM<sup>+</sup>85] M. O. Bristeau, R. Glowinski, B. Mantel, J. Periaux, and P. Perrier. Numerical methods for incompressible and compressible navier-stokes problems. In J. T. Oden O. C. Zienkiewicz R. Gallagher, G. Carey, editor, *Finite Elements in Fluids*, volume 6, pages 1–40. Wiley, Chichester, 1985.
- [BGR95] Ph. Blanc, L. Gasser, and J. Rappaz. Existence for a stationary model of binary alloy solidification. *Mathematical modelling and numerical analysis*, 29:687–699, 1995.
- [BM81] J. T. Beale and A. Majda. Rates of convergence for viscous splitting methods. preprint svc 87-2, Konrad-Zuse-Zentrum preprint, 1981.
- [BP80] B.R. Baliga and S. Patankar. A new finite element formulation for convection–diffusion problems. *Numer. Heat Transfer*, 3:393–410, 1980.
- [Bre83] H. Brezis. *Analyse Fonctionnelle*. Masson, 1983.
- [Car39] P.C. Carman. Permeability of saturated sands, soils and clays. *J. Agr. Sci.*, 29:262–273, 1939.

- [CCV95] J. Planchard C. Conca and M. Vanninathan. *Fluids and Periodic Structures*. John Wiley & sons, New York, 1995.
- [CIR52] R. Courant, E. Isaacson, and M. Rees. On the solution of non-linear hyperbolic differential equations by finite differences. *Comm. Pure Appl. Math.*, 5:243, 1952.
- [Dan] J. A. Dantzig. Modelling liquid-solid phase changes with melt convection. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*
- [DGN97] Th. Donrseifer, M. Griebel, and T. Neunhoffer. *Numerical Simulation in Fluid Dynamics: A Practical Introduction*. SIAM Monographs on Mathematical Modelling and Computation 3, 1997.
- [DO06] M. Durán and E. Ortega. Existence of weak solutions for non-homogeneous solidification mathematical model. *Electronical Journal of diff. equations*, 2006(30), 2006.
- [DOR05] M. Durán, E. Ortega, and J. Rappaz. Weak solution of a stationary convection-difusion model describing binary alloy solidification processes. *Mathematical and computer modelling*, 42:1269–1286, 2005.
- [DOS01] M. Durán, E. Ortega, and R. Stein. Computation of instabilities of a solidification process in axisymmetric domains. part i. modelling. *Internac. Métod. Numér. Cálcl. Diseñ. Ingr.*, 17(2):127–148, 2001.
- [FP02] J.H. Ferziger and M. Perić. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 2002.
- [Gas95] L. Gasser. *Existence Analysis and Numerical Schemes for Models of Binary Alloy Solidification*. PhD thesis, EPFL, Lausanne, 1995.
- [GL89] R. Glowinski and P. LeTallec. Augmented lagrangian and operator splitting methods in nonlinear mechanics. In *SIAM Lecture Notes*. SIAM, Philadelphia, 1989.
- [Glo85] R. Glowinski. Viscous flow simulation by finite element methods and related numerical techniques. In S. S. Abarnel E. M. Murna, editor, *Progress and Supercomputing in Computational Fluid Dynamics*, pages 173–210. Birkhauser, 1985.
- [Glo86] R. Glowinski. Splitting methods for the numerical solution of the incompressible navier-stokes equations. In J. L. Lions A. V. Balakrishan, A. A. Doronitsynb, editor, *Vistas in Applied Mathematics*, pages 57–95, New York, 1986. Optimization Software.
- [GP] R Glowinski and O Pironneau. Finite element methods for navier-stokes equations. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 24.
- [GPR<sup>+</sup>] A. Gosman, W. Pun, A Runchal, D Spalding, and M. Wolfshtein. *Heat and Mass Transfer in REcirculating Flows*. Academic.
- [Hun74] D.J. Hebditch J.D. Hunt. Observations of ingot macrosegregation on model systems. *Methall. Trans.*, 5:1557–1564, 1974.

- [Kae02] Th. Kaempfer. *Modelling of Macrosegregation Using an Adaptive Domain Decomposition Method*. PhD thesis, EPFL, Lausanne, 2002.
- [Lad69] O. Ladyzhenskaya. *The Mathematical Theory of Viscous Incompressible Flow*. Gordon and Breach Science, New York, 1969.
- [LO83] R. LeVeque and J. Olinger. Numerical methods based on additive splitting for hyperbolic partial differential equations. *Math. Comput.*, 40:469–497, 1983.
- [Maj86] S. Majumdar. Development of a finite-volume procedure for prediction of fluid flow problems with complex irregular boundaries. Technical report, Rep. 210=T=29, SFB210, University of Karlsruhe, Germany, 1986.
- [Maj88] S. Majumdar. Role of underrelaxation in momentum interpolation for calculation of flow with nonstaggered grids. *Numer. Heat Transfer*, 13:125–132, 1988.
- [MS88] T. F. Miller and F. W. Schmidt. Use of a pressure-weighted interpolation method for the solution of incompressible navier-stokes equations on a non-staggered grid system. *Numer. Heat Transfer*, 14:213–233, 1988.
- [NA89] N.A. Hooke NA. *A CVFEM for two-dimensional viscous compressible fluid flow*. PhD thesis, Dept. of Mech. Eng., McGill University, Montreal, Quebec, 1989.
- [NB91] J. Ni and C. Beckermann. A volume-averaged two-phase model for solidification transport phenomena. *Metallurgical Transactions B*, 22B:349–361, 1991.
- [Pat80] S. V. Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Mc Graw Hill, 1980.
- [Pat81] S. V. Patankar. A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations. *Numerical Heat Transfer*, 4:409–425, December 1981.
- [Per85] M. Peric. *A Finite Volume Method for the Prediction of Three-Dimensional Fluid Flow in Complex Ducts*. PhD thesis, Ph.D. thesis, University of London, London, UK, 1985.
- [PP83] C. Prakash and S. Patankar. A control volume based finite-element method for solving the navier-stokes equations using equal-order interpolation. *Numer. Heat Transfer*, 8:259–280, 1983.
- [PR51] D. Peaceman and H. Rachford. The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations. *J. SIAM*, (3):28–41, 1951.
- [Pra86] C. Prakash. An improved control volume finite-element method for heat and mass transfer, and for fluid flow using equal-order velocity–pressure interpolation. *Numer. Heat Transfer*, 9:253–276, 1986.
- [QTH04] Z.G. Qu, W.Q. Tao, and Y.L. He. Implementation of clear algorithm on collocated grid system and application examples. *Numerical Heat Transfer: Part B: Fundamentals*, 47(1):65–96, 2004.

- [RC83] C. Rhie and W. Chow. Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. *AIAA Journal*(ISSN 0001-1452), 21:1525–1532, 1983.
- [SB94] H.J. Saabas and B.R. Baliga. Co-located equal-order controlvolume finite-element method for multidimensional, incompressible, fluid flow part i: formulation. *Numer. Heat Transfer, Part B*, 26:381–407, 1994.
- [Sch74] Adrian E. Scheidegger. *The physics of flow through porous media, chapter Hydraulic radius theories*, volume 29. University of Toronto Press, 3rd edition, 1974.
- [Spa72] DB Spalding. A novel finite-difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives. *Int. J. Numer. Methods Eng*, 4(4):551–559, 1972.
- [Str68] G. Strang. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM J. Num. Anal.*, 5:506–517, 1968.
- [TQH04] W.Q. Tao, Z.G. Qu, and Y.L. He. A novel segregated algorithm for incompressible fluid flow and heat transfer problems—clear (coupled and linked equations algorithm revised) part I: mathematical formulation and solution procedure. *Numerical Heat Transfer: Part B: Fundamentals*, 45(1):1–17, 2004.
- [Tur99] S. Turek. *Efficient Solvers For Incompressible Flow Problems An algorithmic approach in view of computational aspects*. Springer-Verlag, New York, 1999.
- [Vol91] V.R. Voller. *Recent Developments in the Modelling of Solidification Processes*, chapter Computational Modelling of Free and Moving Boundary Problems, vol. 2: Heat Transfer, pages 3–20. Walter de Gruyter, 1991.
- [Wes02] P. Wesseling. *Computational Fluid Dynamics*. Springer, 2002.