

## SOLIDIFICAÇÃO DE GOTAS – UM MODELO MATEMÁTICO.

**Jorge Alexandre Onoda Pessanha** – [jonoda@uol.com.br](mailto:jonoda@uol.com.br)

Universidade Cruzeiro do Sul

Rua Dr. Ussiell Cirilo 225, CEP 08060-070, São Paulo , SP, Brasil

**RESUMO** *Este artigo apresenta o desenvolvimento de um modelo matemático para o processo de solidificação de uma gota que movimenta-se sobre uma superfície inclinada. O modelo foi validado através da comparação de resultados previstos pelo modelo com resultados experimentais.*

**Palavras-Chave:** Solidificação, Gotas, Métodos Integrais.

### 1-INTRODUÇÃO

O processo de solidificação de gotas, principalmente de materiais metálicos, tem recebido grande atenção na última década devido à novos processos de fabricação que utilizam a deposição de material em forma de pequenas gotas de aerossol. Estas gotas ao se solidificarem acabam fornecendo as características físicas, propriedades e a forma final, das peças metálicas em processos de fabricação especiais, como o *Shape Deposition Manufacturing (SDM)* (Amon e Schmaltz, 1995). Trabalhos, tanto experimentais como o de Curreri e Kaukler, 1996) ou teóricos como os de (Amon e Schmaltz, 1995), (Rangel et al. 1997) e (Waldvogel e Poulikakos, 1997), tem sido dedicados à descrição destes processos. Devido à complexidade da solidificação de ligas metálicas assim como a descrição do impacto entre as gotas e a superfície, os modelos acima mencionados são complexos e, mesmo os que tratam o fenômeno de forma unidimensional, dependem de soluções numéricas complexas.

Este trabalho apresenta um modelo simplificado para descrever o fenômeno conhecido como *candling*, que é o processo de solidificação de gotas à medida que estas escorrem sobre superfícies sólidas frias. O objetivo do modelo é prever a distância percorrida pela gota antes que esta se solidifique totalmente assim como estimar a camada de material depositado sobre a superfície sólida.

### 2- MODELO TEÓRICO

A modelagem do processo de solidificação de gotas líquuefeitas envolve a solução combinada das equações de quantidade de movimento e energia para uma massa, líquida, que solidifica à medida que se desloca no espaço. No aspecto geral, o modelo apresentado neste trabalho é formado pela combinação da equação de condução unidimensional transiente com a solução do problema de “linha de contato móvel. A equação de energia foi aplicada no domínio da gota para determinação de sua taxa de solidificação. A equação da quantidade de

movimento foi utilizada para determinar as características: geométricas e cinemáticas do movimento da gota.

Uma avaliação rigorosa do processo de solidificação é obtida através da solução simultânea das equações de energia e quantidade de movimento. No modelo proposto neste trabalho, o acoplamento entre as equações foi discretizado. Em outras palavras, as equações de balanço foram resolvidas alternativamente, i.e, após a solidificação de uma fração da massa instantânea da gota (cerca de 5 %), a velocidade da gota era recalculada. Esta nova velocidade seria então utilizada para obter a nova posição da gota assim como um novo intervalo de tempo para a integração das equações. Este processo é repetido até que a massa da gota seja inferior a um valor específico. Neste ponto, a gota não mais se move e o processo de solidificação acontece com um corpo estacionário.

## 2.1 Modelo Térmico – Equação da Energia

O modelo de troca de calor entre a gota e sua vizinhança, i.e. a parede sólida e a atmosfera em redor foi baseado nas seguintes hipóteses: o processo de solidificação é dominado por difusão molecular, ou seja, o efeito de circulação interna do material da gota foi desprezado; a temperatura da superfície sólida permanece constante durante o contato com a gota; a espessura da gota, para o processo de troca de calor foi considerada uniforme.

Utilizando as hipóteses acima listadas, a distribuição de temperatura no interior da gota, incluindo as regiões sólida e líquida é dada por:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (1)$$

para  $0 < x < \delta(t)$ , e  $\delta(t) < x < L$ , sujeito as seguintes condições de contorno,

$$T(t,0) = T_0 \quad (2)$$

$$T(t, \delta(t)) = T \quad (3)$$

$$\rho\lambda \frac{d\delta}{dt} = k \left\{ \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\delta^-} - \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\delta^+} \right\} \quad (4)$$

$$k \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=L} = q''_{ox} - H[T(t,L) - T_B] \equiv q''_{ext} \quad (5)$$

Foram consideradas as seguintes condições iniciais:

$$T(0,x) = T_{in} > T_{melt} \quad (6)$$

$$\delta(t) = 0 \quad (7)$$

onde:  $T_0$  é a temperatura da interface (parede/gota),  $\delta$  é a espessura da camada solidificada,  $L$  é o comprimento equivalente da gota,  $k$ ,  $\lambda$ ,  $\alpha$  são a condutividade térmica, o calor latente de fusão e a difusividade térmica (do material da gota) respectivamente,  $T_{in}$  é a temperatura inicial da gota,  $q''_{ox}$  é o fluxo de calor na superfície da gota devido a reações químicas,  $T_B$  é a temperatura do meio ambiente,  $T_{melt}$  é a temperatura de fusão do material da gota e  $H$  representa o coeficiente efetivo de troca de calor entre a gota e o ambiente. Este coeficiente engloba troca de calor por radiação e convecção.

Soluções exatas, para problemas envolvendo mudança de fase são restritas à configurações muito simples, tais como corpos semi-infinitos com distribuição de temperatura constante como apresentados por (Carslow e Jaeger, 1959). Formulações mais complexas dependem de soluções numéricas aproximadas (Babuska et al., 1983) ou métodos integrais (El-Genk, 1979). O presente trabalho propõe um refinamento do Método Integral que combina o Método Integral Duplo (DIM) (Volkov, 1965) e o Método Integral Simples (SIM) (Schlichting, 1979). As vantagens do DIM decorrem deste proporcionar uma maior acuidade com o mesmo perfil de temperaturas assumido e, não necessitar da diferenciação de um perfil aproximado.

A integração do problema de valor de contorno descrito pelas Eqs. (1) a (7) é conduzida em dois passos. O primeiro passo para a camada solidificada e o segundo para o restante da gota (parte líquida). Integrando duplamente a Eq. (1), primeiramente de 0 à  $x$  (onde  $0 < x < \delta$ ) e então entre 0 e  $\delta$ , obtém-se:

$$\int_0^{\delta} \left[ \int_0^x \left( \frac{\partial \theta_s}{\partial x} \right) dx' \right] dx = \alpha_s \left[ -\theta_0 - \delta \frac{\partial \theta_s}{\partial x} \Big|_{x=0} \right] \quad (8)$$

Onde,  $\theta_s = T_s - T_{melt}$  ( $T_s$  é a temperatura da camada solidificada) e  $\theta_0 = T_0 - T_{melt}$ , e ,

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial \theta_s}{\partial x} \Big|_{x=\delta-} - \frac{1}{\alpha_s} \int_0^{\delta} \frac{\partial \theta_s}{\partial t} dx \quad (9)$$

A condição de salto na interface sólido/líquido é dada por:

$$k_s \frac{\partial \theta_s}{\partial x} \Big|_{x=\delta-} = \rho_l \lambda \frac{d\delta}{dt} + k_l \frac{\partial \theta_l}{\partial x} \Big|_{x=\delta+} \quad (10)$$

Onde  $\theta_l = T_l - T_{melt}$  ( $T_l$  é a temperatura do líquido). Após alguma álgebra e utilizando a Eq. (9) obtém-se,

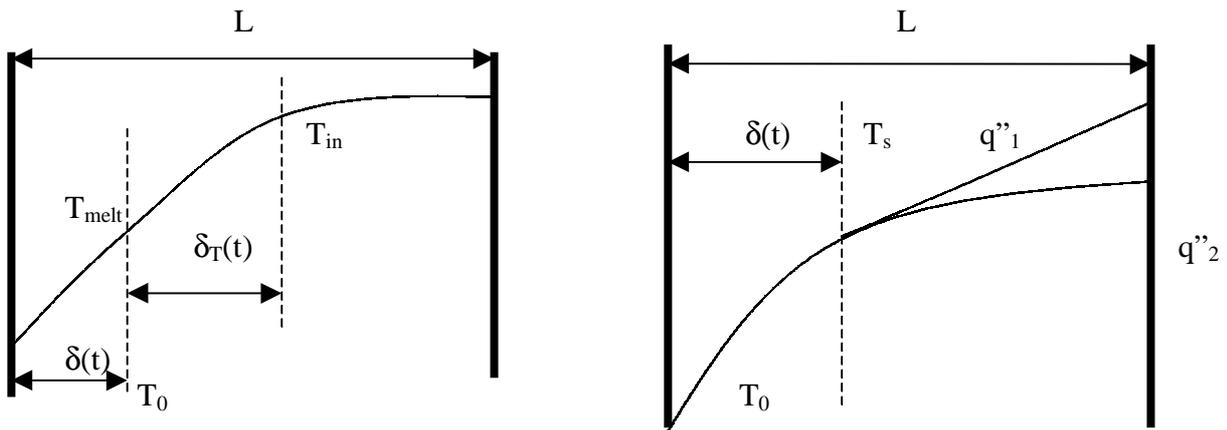
$$\int_0^{\delta} \left[ \int_0^x \frac{\partial \theta_s}{\partial t} dx' \right] dx = \alpha_s \left[ -\theta_0 + \frac{1}{\alpha_s} \int_0^{\delta} \frac{\partial \theta_s}{\partial t} dx' - \frac{\rho_l \lambda}{k_s} \frac{d\delta}{dt} - \frac{k_l}{k_s} \frac{\partial \theta_l}{\partial x} \Big|_{x=\delta+} \right] \quad (11)$$

Definido,  $\bar{\epsilon}_m^s = \left[ \int_0^{\bar{a}} \epsilon_s x dx \right] / \int_0^{\bar{a}} x dx$

A Eq. (11) pode ser escrita como,

$$\frac{\delta^2}{2} \frac{d\theta_s^m}{dt} + \theta_s^m \left\{ \delta \frac{d\delta}{dt} \right\} = \alpha_s \frac{\rho_l \lambda}{k_s} \delta \frac{d\delta}{dt} + \alpha_s \frac{k_l}{k_s} \frac{\partial \theta_l}{\partial x} \Big|_{x=\delta+} + \alpha_s \theta_0 \quad (12)$$

Como as variações temporais em  $\theta_s^m$  são lentas quando comparadas com as alterações experimentadas por  $\delta(t)$ , foi assumido que o primeiro termo da Eq. (12) é desprezível quando comparado com o segundo termo da mesma equação. Assim sendo, a Eq. (12) pode ser utilizada para avaliar  $\delta(t)$  uma vez que  $\theta_s^m$  e  $\partial \theta_l / \partial x$  passam a ser conhecidos. Este último termo é obtido integrando-se a Eq. (1) em toda a região líquida. Dois casos serão tratados neste trabalho são eles:



a)  $\delta_T(t) < L - \delta$  e  $q''_{ext} = 0$

b)  $\delta_T(t) > L - \delta$  e/ou  $q'' > 0$

Figura 1. Um diagrama do processo de solidificação de uma gota em contato com uma parede fria onde: L representa a espessura equivalente da gota,  $\delta$  é a espessura da camada solidificada e  $\delta_T$  é a espessura de penetração.

Caso a) Se  $q''_{ext} \approx 0$  e a espessura de penetração ainda não alcançou a superfície externa da gota (i.e.,  $\delta_T(t) < L - \delta(t)$  ver Figura(1)). O DIM é usado para a região líquida da gota. A equação resultante pode ser expressa como :

$$\int_{\delta}^{\delta+\delta_T} \left[ \int_{\delta}^x \frac{\partial \theta_l}{\partial t} dx' \right] dx = \alpha_l \left[ \theta_{in} - \delta_T \frac{\partial \theta_l}{\partial x} \Big|_{x=\delta+} \right] \quad (13)$$

Onde  $\theta_l = T_{in} - T_{melt}$ . De maneira similar ao tratamento da camada solidificada, a equação final para a espessura de penetração pode ser obtida como:

$$-\frac{d\theta_l^m}{dt} \frac{\delta_T^2}{2} - \theta_l^m \frac{1}{2} \frac{d\delta_T^2}{dt} = \alpha_l \left[ \theta_{in} - \frac{\delta_T}{\delta} \theta_{in} \frac{d\delta_T}{dt} \right] \quad (14)$$

Onde,  $\theta_m^l = \frac{\int_{\delta}^{\delta+\delta_T} \theta_l x dx}{\int_{\delta}^{\delta+\delta_T} x dx}$

Similarmente à hipótese utilizada para a camada solidificada, o primeiro termo à direita da Eq. (14) pode ser desprezado em presença dos outros termos. Desta forma, obtendo-se  $\delta_T(t)$  da Eq.(14), o termo  $\partial\theta_l/\partial x|_{x=\delta+}$  pode ser facilmente avaliado. Esta derivada, por sua vez, é utilizada na Eq. (12) para fechamento da equação diferencial que fornece a espessura da camada solidificada. Assumindo que as propriedades físicas dos materiais nas duas fases são iguais, esta equação pode ser expressa como:

$$\theta_l^m \left( \delta \frac{d\delta}{dt} \right) = \alpha \left[ \frac{\rho\lambda}{k} \delta \frac{d\delta}{dt} + \frac{\delta}{\delta_{in}} \theta_{in} + \theta_0 \right] \quad (15)$$

Como pode ser demonstrado, a Eq. (15) é satisfeita se,

$$\delta(t) = C\sqrt{\alpha t} \quad (16)$$

Substituindo a Eq. (16) na Eq. (15) obtêm-se o valor para o parâmetro C, dado por:

$$C = \frac{(\theta_{in}/\theta_0) \pm \sqrt{(\theta_{in}/\theta_0)^2 + (4 + 16/St)}}{(1 + 2/St)} \quad (17)$$

Onde  $St = -c_p \theta_0 / \lambda$  é conhecido como número de Stefan.

Caso b) Quando a espessura de penetração  $\delta_T$  alcança a superfície externa da gota ou, quando existe um fluxo de calor significativo na superfície da gota, de modo a afetar a distribuição de temperatura no seu interior, o sistema de equações completo, Eqs. (1) a (7), é integrado através do DIM no domínio da camada solidificada e o SIM é, então, utilizado para o restante da gota. Integrando-se a Eq. (1) através da camada solidificada obtém-se:

$$\frac{\partial\theta_l}{\partial x}\Big|_{x=\delta+} = \frac{\partial\theta_l}{\partial x}\Big|_{x=L} - \frac{1}{\alpha} \int_{\delta}^L \frac{\partial\theta_l}{\partial x} dx = \frac{q''_{est}}{k_l} - \frac{1}{\alpha} \frac{d}{dt} [(L - \delta(t))\theta_l^m] \quad (18)$$

Onde, para este caso,  $\theta_m^l = \int_{\delta}^L \theta_l dx / (L - \delta)$

O primeiro termo do lado esquerdo da Eq. (18), desprezado no caso anterior, é fornecido agora, pela condição de contorno expressa na Eq. (5). Para obtenção do segundo termo daquela equação, utiliza-se uma distribuição de temperatura parabólico cuja forma geral pode ser expressa como:

$$\theta_l = A(x-\delta) / L + B (x-\delta)^2 / L^2 \quad (19)$$

onde A e B são obtidos pela combinação das Eqs. (3) e (4) resultando em:

$$A = L \{ q''_{ext} / k - 6 \theta_m^l / L^2 \} / [1 - 3 (L-\delta)/L] \quad (20)$$

$$B = 3 \theta_m^l - 1,5 A \quad (21)$$

Nestas condições, a Eq. (18) pode ser reformulada como:

$$\left. \frac{\partial \theta_l}{\partial x} \right|_{x=\delta^+} = \frac{q''_{ext}}{k} + \frac{1}{\alpha} [B \eta_1^2 + A \eta_1] \quad (22)$$

Onde  $\eta_1 = (1-\delta) / L$ . Combinando as Eqs. (21) e (22), tem-se,

$$\frac{d\delta}{dt} = \frac{\alpha}{\delta} \frac{1 + q''_{ext} \delta / (k \theta_0)}{1/3 + 1/St - \theta_l^m / \theta_0} \quad (23)$$

## 2.2 Modelo Cinemático – Equação da Quantidade de Movimento

A velocidade de reposicionamento da gota foi obtida através de uma modificação da solução do problema da linha de contato móvel (*moving contact line problem*) primeiramente tratado em (Dussan et al., 1983). Originalmente, nesta referência, a solução apresentada se limita a gotas hidrodinâmicas ou seja., gotas com massa constante. No modelo apresentado neste trabalho, um esquema de integração alternativo foi utilizado para levar em consideração a redução de massa da gota devido ao processo de solidificação. No modelo proposto, assim como na referência acima mencionada, uma condição de contorno de não deslizamento foi adotada na interface líquido/sólido. A comprovação experimental desta hipótese encontra-se em (Dussan et al., 1974)

A velocidade da gota pode ser obtida através da seguinte equação de conservação da quantidade de movimento:

$$0 = -\nabla_h p + \mu \partial^2 \mathbf{u}_h / \partial x^2 + \rho \mathbf{g} \quad (24)$$

$$0 = -\partial p / \partial x + \rho g_x \quad (25)$$

Onde:  $p$  é a pressão,  $\mu$  a viscosidade dinâmica,  $\mathbf{u}$  o vetor velocidade e  $\mathbf{g}$  o vetor aceleração da gravidade. O subscrito  $h$  refere-se aos parâmetros ou variáveis projetadas na direção do plano de movimento da gota e  $x$  é a variável na direção normal ao movimento da gota. O sistema de coordenadas  $(x, y, z)$  nas Eqs. (24) e (25) move-se com a gota e sua origem é o centro de massa da gota.

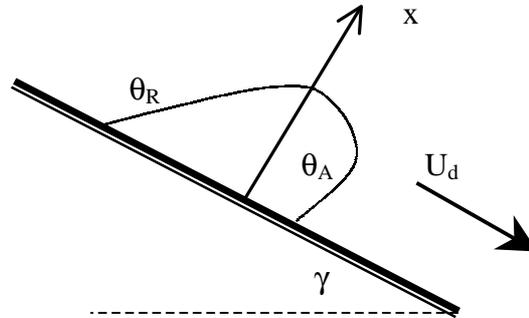


Fig.2 – Esquema da movimentação da gota sobre um plano inclinado.

As seguintes restrições e condições de contorno são utilizadas:

a) Conservação de massa da gota:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla_h (h \mathbf{u}_m) = 0 \quad (26)$$

onde  $h(x, y, t)$  representa a localização da superfície livre, contorno, da gota e:

$$\mathbf{u}_m(y, z) = \left[ \int_0^h \mathbf{u} \, dx \right] / h$$

é a velocidade média da gota para cada ponto no plano do movimento desta.

b) A superfície livre da gota é obtida a partir de:

$$p = -\sigma \nabla^2 h \quad \text{em } x = h \quad (27)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = 0 \quad \text{em } x = h \quad (28)$$

onde  $\sigma$  é a tensão superficial.

c) Na interface entre a gota e o plano inclinado, a condição de não deslizamento implica que:

$$\mathbf{u}_{h,y}(0, y, z) = \mathbf{u}_p, \quad \mathbf{u}_{h,z}(0, y, z) = 0 \quad (29)$$

onde  $\mathbf{u}_p$  é a velocidade do plano inclinado em relação ao centro de massa da gota. Resolvendo o sistema de equações acima obtém-se as seguintes expressões para o volume crítico da gota,  $V_d^c$ , definido como o volume da gota quando esta inicia seu movimento

devido à gravidade, para a área de contato entre a gota e a superfície sólida, representada por  $A_{cont}^c$ , e para a velocidade  $u_d$ .

$$V_d^c = \left( \frac{2\varepsilon\theta_A}{\pi \text{sen } \gamma} \right)^{3/2} \pi\theta_A \left( \frac{\sigma}{\rho g} \right)^{3/2} \quad (30)$$

$$A_{cont}^c = \left( \frac{8\pi\varepsilon\theta_A}{\text{sen } \gamma} \right) \frac{\sigma}{\rho g} \quad (31)$$

$$U_d = \frac{2V_d^c G(1-\varepsilon)}{\pi A_{cont}^{1/2} \theta_A (1/K_A + 1/K_r)} \left( \frac{\rho g}{\sigma} \right) \quad (32)$$

Onde:  $\theta_A$  é o ângulo de avanço,  $\varepsilon = 1 - \theta_A / \theta_R$ ,  $K_A = [du_d/d\theta]$  em  $\theta = \theta_A$  e  $K_B = [du_d/d\theta]$  em  $\theta = \theta_R$  e,  $\theta_R$  é o ângulo de recuo.

A razão entre o volume crítico da gota e a área de contato foi utilizada para determinar uma espessura equivalente da gota para o modelo de transferência de calor, esta razão é dada por:

$$L = \frac{1}{4\pi} \theta_A \left( \frac{2\varepsilon\theta_A}{\pi \text{sen } \gamma} \right)^{1/2} \left( \frac{\sigma}{\rho g} \right) \quad (33)$$

A Eq. (33) por sua vez foi utilizada para determinação da área de contato, agora, em função do volume da gota

$$A_{cont} = V_d/L \quad (34)$$

e da velocidade da gota através da Eq. (32).

O modelo matemático final para o fenômeno de solidificação de gotas que se deslocam sobre superfícies inclinadas é composto pelas Eqs. (32) e (33) e as Eqs. (16) e (23).

No modelo proposto, os efeitos da aceleração inicial e final da gota não foram incluídos no modelo físico, por serem consideradas insignificantes.. Esta hipótese foi confirmada posteriormente através de experimentos.

### 3- COMPROVAÇÃO EXPERIMENTAL

Para verificar a validade do modelo proposto neste trabalho os resultados de suas previsões foram comparados com valores obtidos experimentalmente. Nesta comparação foram estudadas, principalmente, as influências da massa inicial da gota, da inclinação do plano sobre o qual a gota se movimenta e, a temperatura inicial da gota na taxa de solidificação e na distância percorrida pela gota.

O experimentos foram conduzidos utilizando gotas de parafina que se moviam sobre superfícies inclinadas fabricadas com o mesmo material. No procedimento experimental os planos inclinados foram mantidos à temperatura ambiente (valor constante de 25° C).

Os seguintes valores foram utilizados para os outros parâmetros do problema:

- Condição 1 - massa inicial da gota de 0,033 g e ângulo de inclinação da parede de 31°, temperaturas iniciais, 55°, 60°, 65°, 70°, e 75°;
- Condição 2 - massa inicial da gota de 0,049g e ângulo de inclinação da parede de 45°, temperaturas iniciais, 55°, 60°, 65°, 70° e 75°.

A figura 3 apresenta o gráfico que resume os resultados da comparação. Os pontos agrupados em Exp.1 e Exp.2 representam, os valores experimentais das distâncias percorridas pelas gotas da condição 1 e da condição 2, respectivamente. As curvas denominadas de Teoria 1 e Teoria 2 representam as previsões do modelo para as gotas da condição 1 e condição 2 respectivamente.

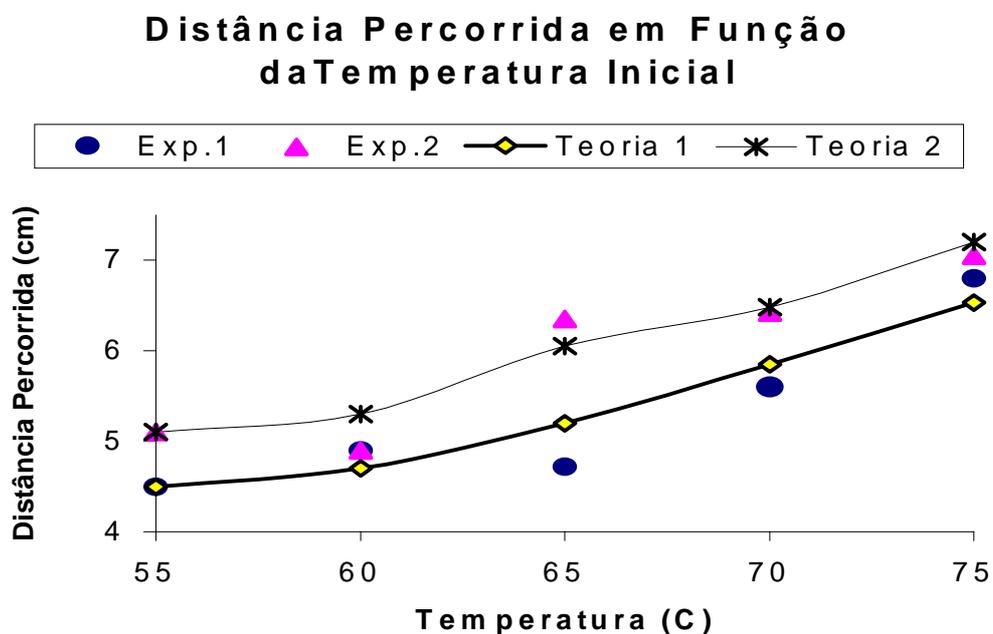


Figura 3- Comparação gráfica dos resultados previstos para a distância percorrida pela gota antes de sua parada e solidificação estática.

#### 4-CONCLUSÕES

A concordância entre os resultados teóricos e experimentais, comparação entre Exp.1e Teoria 1 assim como entre Exp.2 e Teoria 2, foi considerada suficiente para validar o modelo. Uma análise dos resultados, tanto teóricos quanto o experimentais mostrou que:

- A distância percorrida pela gota aumentou com um aumento na temperatura inicial e, com um aumento na inclinação da superfície plana;

- Um aumento na massa inicial da gota não necessariamente no aumento da distância percorrida em alguns casos, foi observado um redução na distância percorrida. Isto pode ser explicado pelo fato de que gotas mais pesadas tem uma área de contato maior o que tende a aumentar a taxa de solidificação e reduzir a distancia percorrida pela gota;
- A massa com a qual a gota interrompe seu movimento e completa o processo de solidificação, sem mover-se, dependeu mais fortemente do ângulo de inclinação da parede fria do que do superaquecimento inicial;

Apesar de intuitivas, as conclusões do modelo teórico, indicam que este, apesar de simples, consegue uma boa representação fenomenológica do processo de solidificação da gota.

## REFERENCIAS:

Amon, C.H. e Schmaltz, K.S. (1995) Experimental Verification of na Impinging Molten Metal Droplet Numerical Simulation. ASME International Mechanical Engineering Congress and Exhibition, Modeling of Heat Transfer in Multi-Phase Systems Session, San Francisco.

Babuska, I., Chandra, J., Flaherty, J.E. (1983) Adaptive Computational Methods for Partial Defferential Equations. SIAM, NY.

Carslow, H.S., Jaeger, J.C. (1959) Conduction of Heat in Solids. Clarendon Press, Oxford.

Curreri, P.A., e Kaukler (1996), Real Time X-Ray Transmission Microscopy of Solidifying Al-In Alloys, Metallurgical Transactions 27A, No.3 págs. 801-808.

Dussan, V.E.B., Davis, S.H. (1974) On the Motion of aFluid-Fluid Interface Along a Solid Surface . Journal of Fluid Mechanics , Vol. 65.

Dussan, V.E.B., Chow, R.T. (1983) On the Ability of Drops or Bubbles to Stick to Non-Horizontal Surfaces of Solids. Journal of Fluid Mechanics, Vol.137.

El-Genk, M.S. (1979) Some Improvements to the Solution os Stefan-Like Problems. International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol.32, no. 12.

Rangel, R.H., Delplanque, J-P e Lavernia, E.J. (1996) Solidification Model for the Description of Micropore Formation in Spray Deposition Process. Numerical Heat Transfer A, 30, págs. 1-18.

Volkov, N.V. (1965) A Refinement of the Karman-Polhausen Integral Method in Boudary Layer Theory. Journal of Engineering Physics, Vol.9, no.5.

Schlichting, H. (1979) Boundary Layer Theory. 7<sup>a</sup> ed., NY, McGraw-Hill Book Co..

Waldvogel, J.M. e Poulikakos, (1997) D. Solidification Phenomena in Picoliter Size Solder Droplets on a Composite Substrate. International Journal of Heat and Mass Transfer, vol. 40, págs. 295-309.