

MODELIZACIÓN NUMÉRICA DE LA INTERACCIÓN DE PARTÍCULAS CON UNA INTERFASE DE SOLIDIFICACIÓN

Mario R. Rosenberger, Eliana M. Agalotis, Carlos E. Schvezov

Prog. de Materiales., Modelización. y Metrología,
FCEQyN, Universidad Nacional de Misiones
Azara 1552 (3300) Posadas. Argentina
e-mail: rrmario@fceqyn.unam.edu.ar, schvezov@fceqyn.unam.edu.ar ,

Key words: Elementos Finitos, Solidificación, Materiales compuestos, Interacción Sólido-Fluido.

Abstract. *El campo térmico generado por el movimiento de una interfase de solidificación hacia una partícula esférica fue modelado dinámicamente para estudiar las deformaciones de la interfase en relación con las diferentes propiedades térmicas de la partícula en una matriz sólido-líquida. La simetría del sistema permitió emplear un modelo de simetría axial en dos dimensiones. La simulación se realizó empleando análisis por elementos finitos. Los resultados muestran una deformación cóncava de la interfase cuando la partícula presenta mayor conductividad térmica que la matriz, y una interfase convexa en el caso contrario. El caso límite, cuando matriz y partícula tienen el mismo valor de conductividad térmica la interfase de solidificación es plana. Además, se estudiaron las fuerzas de arrastre que actúan sobre la partícula cuando la interfase de solidificación es plana. Para ello se empleó un modelo de flujo de fluidos en estado estacionario con la partícula ubicada a diferentes distancias de la interfase y con diferentes velocidades de avance de la interfase de solidificación. Los valores obtenidos se compararon con los obtenidos por la ecuación de Stokes modificada. Se utiliza el modelo de Lifshitz-Van der Waals para calcular las fuerzas de repulsión y se observa que, a bajos valores de la fuerza de repulsión la separación de equilibrio para que se produzca el estado estacionario de pushing es menor en el modelo simulado que el modelo de Stokes, en cambio a mayores valores de la fuerza de repulsión ambos modelos son indicados una separación de equilibrio aproximadamente iguales, independientemente de la velocidad de la interfase.*

1 INTRODUCCION

La interacción entre una partícula y una interfase sólido-líquido es un fenómeno general que se produce durante la solidificación de diversos materiales como las aleaciones metálicas con partículas nativas, los materiales compuestos con refuerzos cerámicos en forma particulada o fibrosa; cristalización de materiales semiconductores, ópticos, optoelectrónicos y biológicos. En todos ellos el fenómeno incide en la distribución de las partículas, lo que a su vez determina las características del mismo, en particular las propiedades mecánicas y físico-químicas.

En algunos de estos sistemas se ha observado, durante la solidificación, un estado estacionario de repulsión de la partícula (*pushing*) delante de la interfase. Además, en estos casos, existe una velocidad crítica a partir de la cual el sólido atrapa a la partícula¹⁻⁷. Para predecir el valor de esta velocidad crítica se han elaborado diferentes modelos^{2,3,6}. Sin embargo, experiencias de solidificación realizadas con diferentes matrices y partículas, solidificados a velocidades menores que la crítica se comportan de maneras diferente a dichos modelos^{1,4,5}.

En modelos desarrollados por Schvezov^{8,9}, considerando interfases no-planas donde intervienen fuerzas de Casimir-Lifshitz-Van der Waals como de repulsión y fuerzas de arrastre como la componente de atracción, se obtuvieron resultados que logran alcanzar un estado estacionario de repulsión (*pushing*) e indican el caso límite donde se produce el atrapado de la partícula.

El objetivo de este trabajo es avanzar sobre el modelo desarrollado por Schvezov, definiendo un límite preciso que permita determinar la transición entre repulsión estacionaria y atrapado de la partícula, el cual puede establecerse por una separación mínima entre partícula e interfase para la cual la película que los separa pueda considerarse como un fluido. Además, se deben considerar las propiedades térmicas del sistema Partícula e Interfase Líquido-Sólido, las cuales definen la morfología de la interfase.

1.1 Interacción de partículas con una interfase plana

Predicciones del *pushing* en un sistema partícula interfase líquido-sólido particular requieren de valores de energías superficiales entre la partícula sólida y la matriz sólida, la cual es difícil de conseguir. En los casos donde las teorías muestran concordancia, no está claro cuales son las fuerzas microscópicas que evitan o producen el *pushing*. Ya sea que se trate de repulsión o atrapado, se requiere incluir estas interacciones durante el proceso transitorio que conduce al estado estacionario de repulsión o atrapado. Estas fuerzas deben ser de corto alcance e involucrar tres elementos: la partícula, una película de fluido y el sólido. En cualquier caso, está claro que hay más de un mecanismo o interacción que pueden crear una fuerza de repulsión entre la partícula y el sólido que conduzcan al *pushing*.

Los efectos térmicos no son muy importantes. La importancia de los efectos térmicos ha sido planteada pero no resuelta. Si ellos fueran determinantes óxidos o materiales cerámicos con una baja conductividad serán empujados en casi cualquier metal y cualquier partícula metálica tenderá a ser atrapada. Esto ciertamente no ocurre en todos los sistemas.

1.2 Interacción de partículas con una interfase no-plana

Las estructuras de solidificación usuales en las aleaciones son celulares o dendríticas. Las partículas presentes en el fundido durante la solidificación usualmente terminan en el espacio intercelular o interdendrítico. En estos casos la velocidad de solidificación es usualmente mucho más grande que las velocidades críticas para pushing. En aleaciones hay observaciones que sugieren la existencia de mecanismos más eficientes que conducen a la segregación de partículas durante la colada y solidificación. De los cuales algunos casos se estudiaron.

Una serie de experimentos fueron realizados en plomo y aleaciones plomo-antimonio conteniendo partículas de hierro esféricas¹⁰⁻¹², los resultados indican que las partículas no fueron repelidas por la interfase. Sin embargo para interfase no-plana muchas partículas de hierro aparecieron en los espacios interdendríticos. El pushing de partículas fue descartado ya que muchas de las partículas grandes fueron segregadas y mientras que las pequeñas partículas eran atrapadas. El mecanismo propuesto que conduce a la segregación consiste de colisiones sucesivas con las puntas y paredes de dendritas o células hasta que las partículas más grandes y con mayor movilidad son atrapadas en el líquido remanente. Las partículas más pequeñas, que tienen menos movilidad y momentum son fácilmente atrapadas por las células o dendritas. El mecanismo es consistente con resultados y observaciones hechas en modelos físicos a escala. En materiales compuestos de matriz metálica basados en aleaciones de aluminio como matriz y partículas cerámicas como refuerzos, las partículas aparecen principalmente en regiones interdendríticas. Este resultado es atribuido al pushing. Sin embargo, basados en argumentos similares, es posible proponer que las partículas son segregadas por colisiones entre partículas y la interfase¹³.

Los últimos trabajos que se publicaron sobre el tema introducen interacciones más complejas, fuerzas convectivas, forma de la interfase y experimentos en gravedad cero¹⁷⁻³⁰.

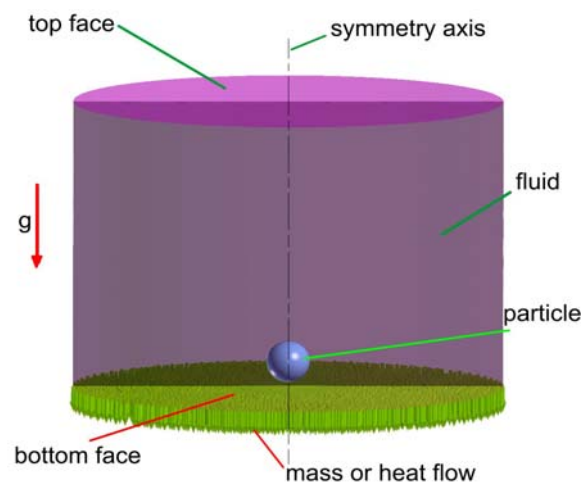


Figura 1: Esquema del sistema a modelar.

2 MÉTODOS

2.1 Descripción del sistema

El sistema a estudiar consta de una matriz solidificándose conteniendo una partícula esférica inmersa en la fase líquida, dispuestas como se muestra en la Figura 1. A medida que la interfase se acerca a la partícula, en el ámbito de influencia y predominio de la fuerza de repulsión, la partícula tenderá a retirarse de la interfase y en algún caso a moverse con ella, como resultado de esto se establece una circulación de fluido desde detrás de la partícula para reponer con líquido el espacio entre ella y la interfase. Esta circulación introduce el efecto de arrastre sobre la partícula. El arrastre tiende a acercar a la partícula hacia la interfase. Por lo tanto, el equilibrio atracción-repulsión en la solidificación influye en el movimiento de la partícula que se acerca o aleja de la interfase. Si la distancia interfase partícula es grande el proceso es independiente de la presencia de la misma.

Las fuerzas de repulsión (**Fr**) son del tipo de Casimir-Van der Waals, de muy corto alcance entre la partícula y la interfase. Las fuerzas de arrastre (**Fa**) son debidas al flujo viscoso del fluido. Ambas fuerzas son de tal magnitud que hacen despreciable la fuerza de gravedad.

Para la resolución del problema se descompone en dos etapas. La primera diatérmica, considerando solamente el campo térmico, donde se estudia dinámicamente la deformación de la interfase ante una partícula inmóvil. La segunda isotérmica, se toma el caso más simple donde la interfase de solidificación no se deforma y se estudia la interacción entre interfase y partícula.

2.2 Etapa diatérmica

Esta etapa considera una extracción calórica, desde abajo en la figura 1, la cual produce la solidificación de la matriz. Las demás fronteras se encuentran aisladas. Además en todas las fronteras se impusieron velocidad igual a cero.

Para esta etapa, el sistema se simplificó usando un modelo bidimensional, lo cual brinda resultados cualitativos con bajo esfuerzo computacional. La resolución del problema incluye las ecuaciones de conservación de la masa, momento y energía en forma dinámica.

Se consideró una partícula de la misma densidad que la matriz, condición que junto con la imposición de contornos inmóviles de la matriz y la partícula no produce circulación dentro del fluido. Se simuló al sólido a través de un fluido de viscosidad elevada, igual a 10^6 veces la viscosidad del líquido. Las restantes propiedades fueron independientes de la temperatura y fueron adoptadas las correspondientes al Aluminio puro para la matriz.

Para realizar el estudio de la deformación de la interfase se consideraron tres relaciones entre la conductividad térmica de la partícula y la matriz, que se detallan a continuación:

$$k_p / k_m = 1.0$$

$$k_p / k_m = 0.1$$

$$k_p / k_m = 10.0$$

Donde **kp** y **km** son las conductividades térmicas de la partícula y la matriz respectivamente.

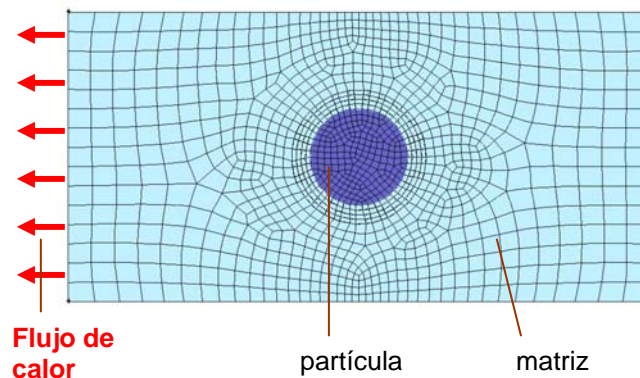


Figura 2: Malla del modelo bidimensional empleada en la etapa diatérmica.

En la resolución se empleó el método de elementos finitos a través de una formulación de residuos ponderados de Galerkin. Se emplearon elementos cuadriláteros con funciones de interpolación de segundo orden para la temperatura y la velocidad, y de primer orden para la presión.

En la simulación se empleó una malla no estructurada estática de 1000 elementos para la matriz y 300 elementos para la partícula. Refinando la malla en las inmediaciones de la partícula, ver la figura 2. La forma y posición de la interfase se determinó siguiendo la isoterma de solidificación del aluminio puro: 933 K.

Para la resolución numérica del sistema de ecuaciones se empleó el método de Newton-Raphson, con una tolerancia del 0.01%. El cálculo dinámico se resolvió mediante Crank-Nicholson con un paso de tiempo variable ajustado mediante Adams-Bashforth¹⁴⁻¹⁶.

2.3 Etapa isotérmica

Para resolver la etapa isotérmica se implementó un modelo de simetría axial, ver figura 3, el cual fue inicialmente probado contra un modelo tridimensional, ver Figura 4. Los resultados de la comparación se presentan más adelante en el acápite correspondiente.

El objetivo está centrado en calcular las fuerzas de arrastre sobre la partícula debida a la circulación del fluido hacia la interfase. En este caso se está imponiendo la condición de estado estacionario de pushing, es decir, la partícula se mueve junto con la interfase manteniendo una separación constante. Por lo tanto, esta etapa se simula en estado estacionario, y se contemplan solamente las ecuaciones de balance de masa y momentum.

Debe imponerse una velocidad de fluido constante en la interfase, perpendicular a la misma, dejando sin imposición los demás contornos de la fase fluida. Sobre la superficie de la esfera se impone la condición de no deslizamiento.

El fluido se considera Newtoniano y en flujo laminar, ya que el número de Reynolds (Re) respecto al diámetro de la partícula, es mucho menor a 1.

En la malla del modelo tridimensional se emplearon elementos tetraédricos con funciones

de interpolación lineales para la velocidad y para la presión, utilizando el método de Petrov-Galerkin. En total se emplearon aprox. 200000 elementos, refinando en la zona cercana a la partícula.

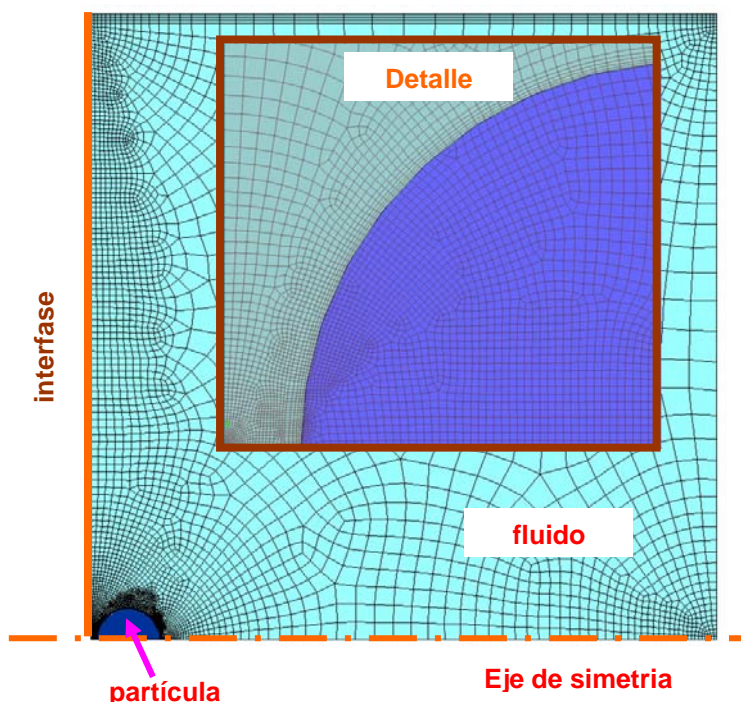


Figura 3: Malla del modelo de simetría axial. Detalle: ampliación de la región de la partícula.

Para el modelo de simetría axial se emplean entre 30000 y 50000 elementos cuadriláteros, con funciones de interpolación de segundo orden para la velocidad y de primer orden para la presión, por lo tanto el método de Galerkin es empleado.

La resolución del sistema fue a través del método de Picard, para los modelos de simetría axial y mediante un método desacoplado para el modelo tridimensional, donde las variables se resuelven individual y secuencialmente, mediante eliminación gaussiana, alcanzando la solución en forma iterativa.

En el diseño del modelo se utilizó un sólo diámetro de partícula, 0,050 mm, posicionada a seis distancias diferentes desde la interfase (h), variando entre $h_{mín}$ y $2R$. Siendo $h_{mín}$ la mínima distancia que se puede considerar para que el fluido mantenga las propiedades que lo definen, 10^{-8} m, y R el radio de la partícula. Para cada posición se construyó una malla diferente.

En cada posición se modelaron 6 velocidades de interfase. Se calcularon las velocidades para $15.V_c/1000$, $15.V_c/10000$, $15.V_c/100000$, $\frac{1}{2}.V_c$, V_c y $2.V_c$ considerando flujo laminar y la velocidad crítica (V_c) igual a $2,22 \times 10^{-6}$ m/s. Siendo V_c la velocidad en la que la repulsión crítica no se produce, por encima de la cual no se observa pushing.

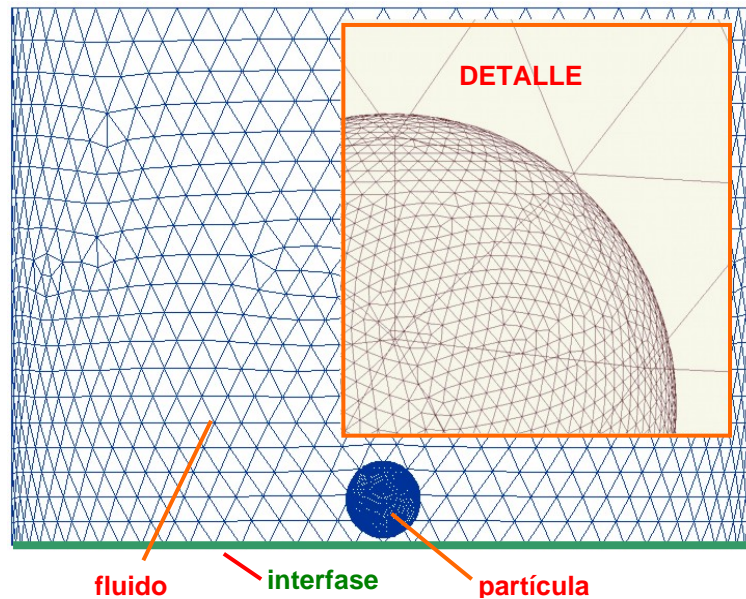


Figura 4: Malla sobre la superficie externa utilizada para el modelo en tres dimensiones con interfase plana. Detalle: ampliación sobre la superficie de la partícula.

2.4 Modelos analíticos

Se emplea una modificación de la fórmula de Stokes para la fuerza de arrastre, sobre una esfera, para estimar los valores de la fuerza de arrastre², cuya expresión es:

$$F_a = 6 \pi \mu v_p \frac{R^2}{h} \quad (1)$$

Donde **F_a**: es la Fuerza de arrastre, **μ**: es la viscosidad, **v_p**: velocidad de la interfase, **R**: radio de la partícula, **h**: distancia interfase-partícula.

Se emplea la fórmula de Casimir-Lifshitz-Van der Waals para calcular los valores de la fuerza de repulsión, cuya expresión para una interfase plana⁹ es:

$$F_r = \pi B_3 \frac{R}{h^3} \quad (2)$$

Donde **F_r**: es la fuerza de repulsión, **B₃**: es la constante de Lifshitz-Van der Waals, **R**: radio de la partícula, **h**: distancia interfase-partícula

3 RESULTADOS Y DICUSIÓN

3.1 Campo térmico

Mediante el análisis del campo térmico generado por el movimiento de una interfase de solidificación hacia una partícula esférica sólida se aprecian deformaciones de la interfase en

relación con las propiedades térmicas de la partícula en una matriz sólido-líquida.

Situándonos en la partícula se observa, en la fig5(a) una deformación convexa de la interfase cuando la conductividad térmica de la partícula es menor que la matriz, y en la fig5(b) una interfase cóncava cuando la conductividad térmica de la partícula es mayor que la matriz.

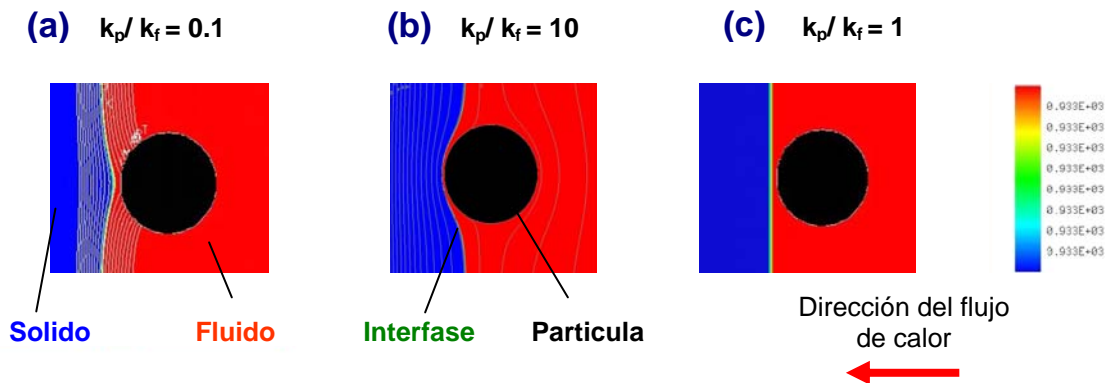


Figura 5: Campo térmico generado por el movimiento de una interfase de solidificación

En cambio, en la fig5(c) se observa que la interfase no sufre deformación, se mantiene plana. Esto ocurre cuando la conductividad térmica de la partícula y la matriz son iguales.

3.2 Validación del modelo de simetría axial

Se realizaron las simulaciones de un modelo tridimensional y un modelo de simetría axial de dimensiones similares y comparables

En la figura 6(a) se muestra el campo de velocidades en un plano radial del modelo tridimensional y en la figura 6(b) el campo de velocidades en el modelo de simetría axial.

En ambas figuras se observa que la máxima velocidad se encuentra a la derecha de la esfera, desplazado del sector de la línea central de simetría. Esto es debido a que el fluido que circula por esa zona debe alimentar además la región central.

El flujo es similar en ambos modelos. A la izquierda de la partícula se desacelera y no presenta zonas de recirculación

Mirando con más detalle a la izquierda de la partícula se puede observar en las figuras 7(a) y 7(b) una ligera diferencia en el campo de velocidades. En el modelo tridimensional se observa una desaceleración gradual en el sector de la línea central, mientras que en el modelo de simetría axial se observa una ligera alteración del flujo cerca de la partícula. Esto se debe al modelo matemático utilizado en el diseño de simetría axial que asigna una componente no nula de la velocidad en la línea central. La máxima velocidad en ambos modelos coinciden en magnitud, dirección y posición.

En las figuras 6(a) y 6(b) se puede observar que la perturbación radial que ocasiona la partícula en el campo de velocidades es mínima. Las componentes radiales de la velocidad son similares en los dos modelos

Se calcularon los valores de la velocidad radial en el extremo superior axial del modelo en tres dimensiones y, en las mismas coordenadas, en el modelo de simetría axial los cuales resultaron coincidentes.

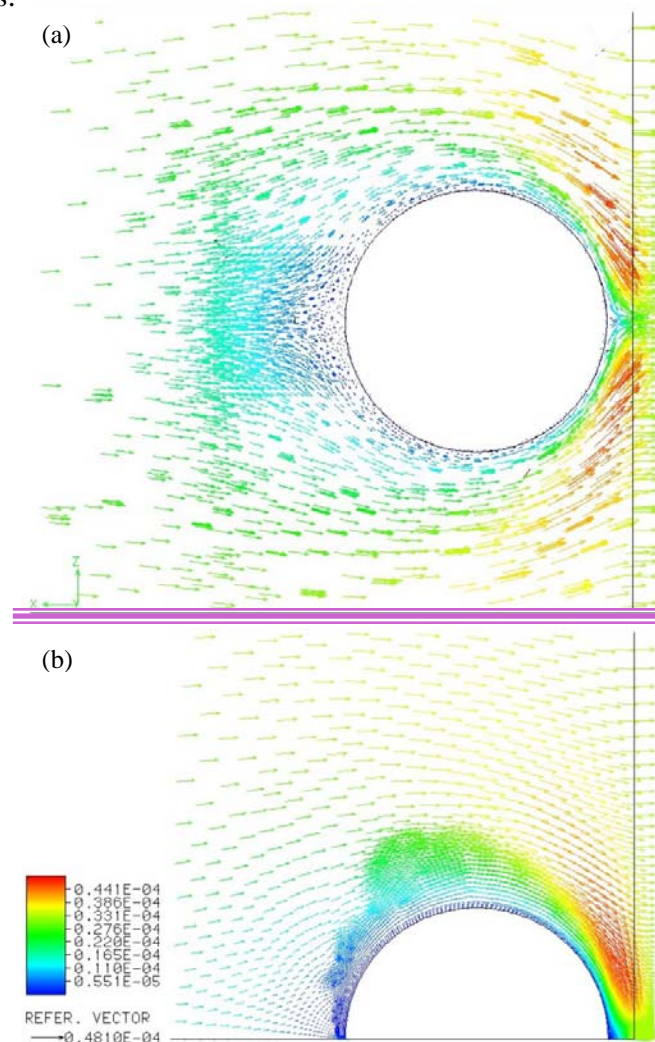


Figura 6: Campo de velocidades en el plano radial. Modelos: (a) Tridimensional (b) Simetría axial. La interface esta ubicada a la derecha en ambas figuras.

Estos dos últimos resultados justifican los valores extremos axial y radial usados en el modelo tridimensional.

Las similitudes de los flujos en ambos modelos pueden confirmarse calculando la fuerza de arrastre sobre la partícula, así se obtienen: $2,952 \times 10^{-13}$ N en el modelo en tridimensional y $2,956 \times 10^{-13}$ N en el modelo de simetría axial. Mostrando una diferencia de 0,13%

Los tiempos de cálculo demandado en la resolución del problema fueron de: aprox. 5 horas para el modelo tridimensional y de 20 minutos para el modelo de simetría axial, en una computadora PC estándar.

Por lo tanto, se elige, en virtud de la exactitud y reducida demanda de tiempo, el modelo de

simetría axial para la simulación y cálculo de las fuerzas de arrastre que actúan sobre una partícula que se utilizará en la continuación del trabajo.

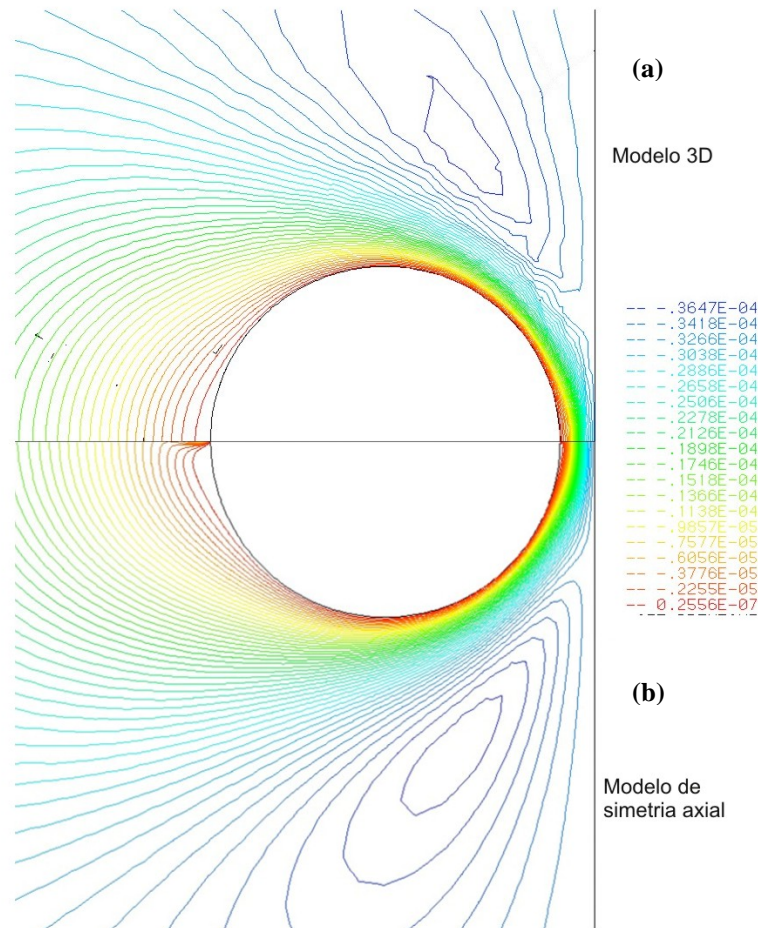


Figura 7: Componente axial de la velocidad. Modelos: (a) Tridimensional (b) Simetría axial. La interface esta ubicada a la derecha en ambas figuras.

3.3 Fuerzas de arrastre

Empleando el modelo de simetría axial se calcularon mediante elementos finitos las fuerzas de arrastre (F_{aFEM}) sobre la partícula y los valores de la fuerza de arrastre según la formula de Stokes modificada (F_{aSM}). Los valores de F_a simuladas se compararon con los valores obtenidos a partir de la ecuación de Stokes. De las dos variables de diseño, h y v , se encontró dependencia con h . Los resultados de la comparación se muestran en la tabla 1 donde el error es calculado a partir de esta relación a diferentes velocidades.

Se observa en la tabla 1, que a medida que h disminuye la relación entre las fuerzas de arrastre tiende a 1, es decir, la simulación y los valores obtenidos de modo analítico son

coincidentes. De esta manera se puede detectar ámbito de validez de la aproximación de Stokes para predecir la Fuerza de arrastre En general de una buena predicción para valores de h/R tendiendo a cero.

Tabla 1: Relación de fuerzas de arrastre en función de la separación interfase partícula h . R = Radio de la partícula

| Separación h | F_{aFEM} / F_{aSM} | Error (95%) |
|----------------|----------------------|-------------|
| 2 x R | 3.1453 | 0.0040 |
| 1 x R | 2.1362 | 0.0015 |
| 0.2 x R | 1.2676 | 0.0006 |
| 0.1 x R | 1.1497 | 0.0034 |
| 0.05 x R | 1.0844 | 0.0015 |
| 0.0002 x R | 1.0015 | 0.0003 |

De las relaciones entre las fuerzas de arrastre: F_{aFEM} / F_{aSM} se puede observar que la F_{aFEM} es mayor que la F_{aSM} , acercándose a 1 cuando el valor de h se hace pequeño, como se observa en las Figura 8.

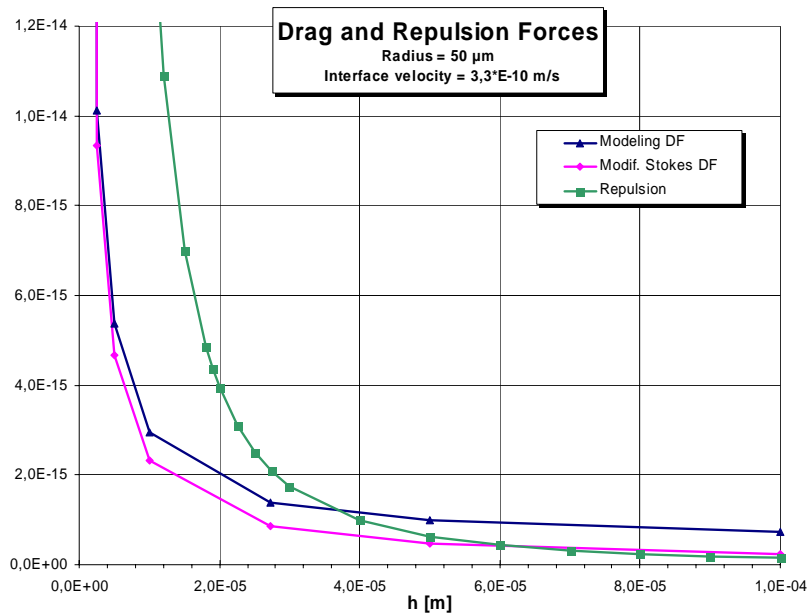


Figura 8: Fuerzas de arrastre y de repulsión para una velocidad de interfase de $3,3 \times 10^{-10}$ m/s

Al comparar las F_{aSM} y F_{aFEM} con la F_r , como en la figura 8, se encontró que la separación de equilibrio (h_e) es menor cuando se emplea las F_{aFEM} , independientemente de la velocidad de la interfase de solidificación. Los valores de h_e para distintas condiciones de velocidad de

la interfase son calculados y mostrados en la tabla 2.

Se correlacionaron los datos de h_e obtenidos a partir de la simulación con la velocidad de la interfase, obteniéndose la siguiente relación:

$$h_e = 4.965 \times 10^{-14} \frac{1}{v_p^{0.9445}} \quad (3)$$

similar a la que surge de igualar las expresiones (1) y (2), que se detalla a continuación.

$$h_e = 2,22 \times 10^{-13} \frac{1}{v_p} \quad (4)$$

Tabla 2: Separaciones de equilibrio calculadas por simulación (h_{eFEM}) y por Stokes-Modificado (h_{eSM})

| v_i [m/s] | h_{eFEM} [m] | h_{eSM} [m] | Fa_{FEM} [N] | Fa_{SM} [N] | Fa_{FEM} / Fa_{SM} |
|-------------|----------------|---------------|----------------|---------------|----------------------|
| 3,300E-10 | 2,732E-05 | 6,734E-05 | 1,380E-15 | 3,464E-16 | 3,9839 |
| 3,300E-09 | 5,540E-06 | 6,734E-06 | 4,510E-14 | 3,464E-14 | 1,3020 |
| 3,300E-08 | 6,734E-07 | 6,734E-07 | 3,540E-12 | 3,464E-12 | 1,0220 |
| 1,110E-06 | 2,000E-08 | 2,002E-08 | 3,930E-09 | 3,919E-09 | 1,0028 |
| 2,220E-06 | 1,000E-08 | 1,001E-08 | 1,570E-08 | 1,568E-08 | 1,0015 |

Al graficar los valores obtenidos a partir de la simulación y la regresión mostrados en la figura 9, se observa un buen ajuste en el rango de velocidades considerado.

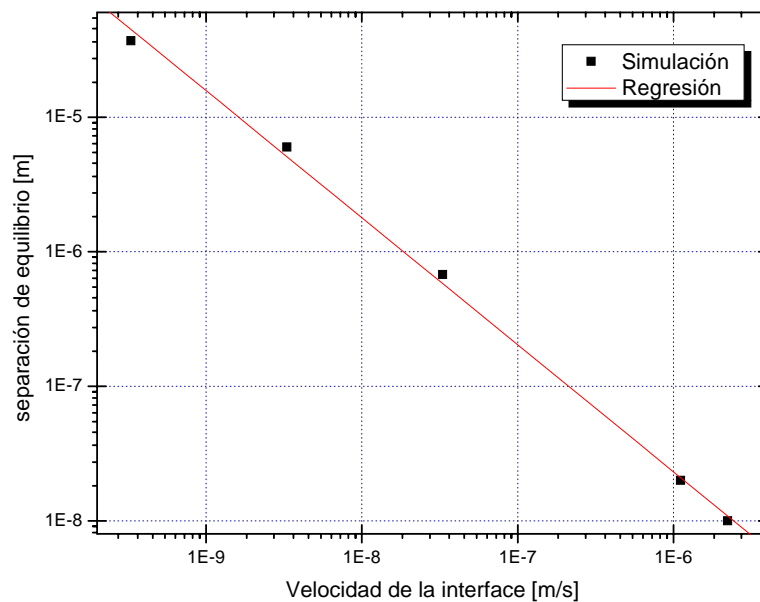


Figura 9: Separación de equilibrio calculados por simulación y resultados de la regresión

4 CONCLUSIONES

Utilizando los modelos bidimensionales para el análisis del campo térmico se puede concluir que, la forma de la interfase depende de las conductividades térmicas de la partícula y la matriz. La interfase es plana cuando las conductividades son iguales, cóncava cuando la conductividad de la partícula es mayor y convexa en el caso opuesto.

Modelando el flujo de fluidos alrededor de una partícula esférica mediante un modelo tridimensional y un modelo de simetría axial, se encontró concordancia en el campo de velocidades y las fuerzas de arrastre para ambos modelos. Por lo tanto, el modelo de simetría axial resulta adecuado para simular las fuerzas de arrastre que actúan sobre una partícula.

Comparando la fuerza de arrastre obtenida a partir de la simulación del flujo alrededor de una partícula con la fuerza de arrastre obtenida de la expresión de Stokes-Modificada se observa que, la fuerza simulada es siempre mayor que la de Stokes-Modificada. La relación entre ambas tiende a 1 cuando los valores de distancia desde la interfase disminuyen. Esta relación es independiente de la velocidad de la interfase.

A partir de la simulación se obtuvo una expresión para el separación de equilibrio inversamente proporcional a la velocidad de la interfase, similar a la que surge de igualar las expresiones analíticas de fuerzas de repulsión y fuerzas de arrastre.

5 REFERENCIAS

- [1] M. K. Pikunov, Metallurgizdat, Moscow, 56-67 (1957).
- [2] D. R. Uhlmann, B. Chalmers and K. A. Jackson, *J. of Ap. Phys.*, **35**, 2986 (1964).
- [3] G. F. Bolling and J. Cisse, *J. Crystal Growth*, **10**, 56-66 (1971).
- [4] A.W. Neumann, D.J. van Oss, J. Szekely, *Kolloid Z.U.Z. polymere*, **251**, 415-423 (1973).
- [5] S.N. Omenyi, A.W. Neumann, *J. of Ap. Phys*, **47**, 3956-3962 (1976).
- [6] A. A. Chernov, D. E. Temkin, S. M. Mel'nikova. *Sov. Phys. Crystallogr.*, **21**, 4 (1976).
- [7] J. Cisse and G. F., Bolling, *J. of Crystal Growth*, **10**, 67-76 (1971).
- [8] C. Schvezov, *Modelización dinámica de la interacción de partículas con interfases sólido líquido durante la solidificación*. Anales de la SAM'98-IBEROMET V. Tomo I. Pp. 57-60. 14-18 Septiembre 1998. Rosario. Argentina.
- [9] C.E. Schvezov, *Dynamic Calculations for Particle Pushing*. Solidification 1999. Edited by W. H. Hofmeister, J. R. Rogers, N. B. Singh, S. P. Marsh and P. W. Vorhes, pags. 251-261 . TMS (USA). 1999.
- [10] A. A. Chernov and D. E. Temkin 1976 *Crystal Growth and Materials*. Ed. by E. Kaldis and H. J. Sheel. (North Holland, Amsterdam, 1977) 3-77.
- [11] D. Shanguan, S. Ahuja and D. M. Stefanescu, *Met. Trans. A*, **23A**, 669-680 (1992).
- [12] C. E. Schvezov and F. Weinberg. Interaction of Iron Particles with a Solid-Liquid Interface in Lead and Lead-Alloys. *Met. Trans. B*, **16**, 367-375 (1985).
- [13] Y. Fasoyinu and C. E. Schvezov. F. Weinberg, *Int. Sol. Proc.* Pergamon. 243 (1990).
- [14] Fidap 8. Fidap User's Manual. Fluent Inc. Lebanon New Hampshire. 1998
- [15] S.C. Chapra, R.P. Canale, *Numerical methods for engineers*, McGraw-Hill, 2002.

- [16] A. Nieves Hurtado, F.C. Dominguez Sanchez, Métodos numéricos aplicados a la Ingeniería. Editorial C.E.C.S.A, 2002.
- [17] Q. Han, J.D. Hunt, Particle pushing: critical flow rate required to put particles into motion, *J. Crystal Growth*, **152**, 221-227 (1995)
- [18] S. Chang and D. M. Stefanescu, A model for inverse segregation: The case of directionally solidified Al-Cu alloys, *Acta Materialia*, **44**, 2227-2235 (1996).
- [19] S. Sen, B. K. Dhindaw, D. M. Stefanescu, A. Catalina and P. A. Curreri, Melt convection effects on the critical velocity of particle engulfment, *J. Crystal Growth*, **173**, 574-584 (1997).
- [20] J. K. Kim and P. K. Rohatgi, The effect of the diffusion of solute between the particle and the interphase on the particle pushing phenomena, *Acta mater.* **46**, 1115-1123 (1998).
- [21] S. Sen, F. Juretzko, D. M. Stefanescu, B. K. Dhindaw, P. Curreri, In situ observations of interaction between particulate agglomerates and an advancing planar solid/liquid interphase microgravity experiments, *J. Crystal Growth*, **204**, 238-242 (1999).
- [22] A.V. Catalina, S. Mukherjee, D. Stefanescu, *Metall. Mater. Trans. A*, **31**, 2559. (2000).
- [23] V. Andris V. Bune, S. Sen, S. Mukherjee, A. Catalina and D. M. Stefanescu, Effect of melt convection at various gravity levels and orientations on the forces acting on a large spherical particle in the vicinity of a solidification interphase, *J. Crystal Growth*, **211**, 446-451 (2000).
- [24] A.W. Rempela, M.G. Worster, Particle trapping at an advancing solidification front with interfacial-curvature effects, *J. Crystal Growth*, **223**, 420-432 (2001).
- [25] H.S. Udaykumar, L. Mao, Sharp-Interphase Simulations of Dendritic Solidification of Solution, *Int. J. Heat, Mass Transfer*, **45**, 4793 (2002).
- [26] L. Hadji, Modelling and Asymptotic Analysis of Particle-Interphase Interaction *Mathematical and Computer Modelling*, **36**, 147-156 (2002).
- [27] J.W. Garvin, H.S. Udaykumar, Particle-solidification front dynamics using a fully coupled approach, Part I: methodology, *J. Crystal Growth*, **252**, 451-466 (2003).
- [28] J.W. Garvin, H.S. Udaykumar, Particle-solidification front dynamics using a fully coupled approach, part II: comparison of drag expressions, *J. Crystal Growth*, **252**, 467-479 (2003).
- [29] M. Kolbe, X.R. Liu, T. Volkman, R. Röstel, P.K. Galenko, G. Eggeler, B. Wei, D.M. Herlach, Interaction of solid ceramic particles with a dendritic solidification front, *Materials Science and Engineering A*, **375-377**, 524-527 (2004).
- [30] J.W. Garvin, H.S. Udaykumar, Drag on a particle being pushed by a solidification front and its dependence on thermal conductivities, *J. Crystal Growth*, **267**, 724-737 (2004).