

MODELO MATEMÁTICO DETERMINÍSTICO-ESTOCÁSTICO PARA PREVISÃO DA MACROESTRUTURA BRUTA DE SOLIDIFICAÇÃO SOB EFEITO DA DECANTAÇÃO DE GRÃOS

Pierre D'Amelio Briquet Caradec ¹

Marcelo Aquino Martorano ²

Resumo

Propõe-se um modelo matemático para prever a macroestrutura bruta de solidificação sob efeito da decantação de grãos. Combinam-se as equações macroscópicas de conservação de massa, energia e espécies químicas com a técnica do autômato celular para simular a nucleação, o crescimento e a decantação de grãos no metal líquido. O modelo é aplicado à solidificação de um grão isolado decantando em um líquido super-resfriado, mostrando um aumento de temperatura e da concentração de soluto nas regiões inferiores do domínio devido à rejeição de calor latente e de soluto para o líquido externo durante a decantação. O modelo também é aplicado à solidificação unidirecional ascendente ou descendente. Na solidificação ascendente, a decantação de grãos resulta em uma macroestrutura completamente de grãos colunares onde, sem o efeito de decantação, existiriam grãos colunares e equiaxiais. Na solidificação descendente, a zona colunar é bloqueada pela camada de grãos que sedimentaram na base do molde.

Palavras-chave: Solidificação; Autômato celular; Decantação; Modelo matemático.

HYBRID STOCHASTIC-DETERMINISTIC MODEL FOR THE PREDICTION OF THE AS CAST GRAIN STRUCTURE UNDER GRAIN SETTLING

Abstract

A mathematical model is proposed to predict the as-cast macrostructure formation under the effect of grain settling. This model combines the macroscopic conservation equations for mass, energy, and chemical species with the cellular automaton technique to simulate the nucleation, growth, and settling of grains within the liquid metal. The model is applied to the solidification of a single grain settling in an undercooled liquid and showed an increase in temperature and solute concentration in the lower regions of the domain owing to the latent heat release and solute transfer from the grain envelopes to the liquid. The model is also applied to the upwards or downwards unidirectional solidification. In the upwards solidification, the settling of grains results in a completely columnar grain structure which otherwise, in the absence of settling, gives a mixed columnar and equiaxed grain structure. In the downwards solidification, the columnar grains growing downwards are blocked by a layer of equiaxed grains that settle and grow upwards at the ingot base.

Key words: Solidification; Cellular automaton; Settling; Mathematical model.

I INTRODUÇÃO

Diversos modelos matemáticos são apresentados na literatura desde a década de 1960 com tentativas de prever as microestruturas e macroestruturas brutas de solidificação. Os modelos denominados determinísticos⁽¹⁻³⁾ utilizam um conjunto de equações diferenciais determinísticas, ou seja, sem variáveis aleatórias. Por outro lado, os modelos chamados de estocásticos apresentam variáveis aleatórias em alguns de seus cálculos. Entre os modelos

estocásticos, destacam-se os baseados em adaptações da técnica do autômato celular para a solidificação.⁽⁴⁻⁶⁾ Neste tipo de modelo, as etapas de nucleação e crescimento são modeladas para cada grão e não de forma média, como nos modelos determinísticos. Como um de seus principais resultados, os modelos estocásticos apresentam uma imagem completa da macroestrutura de grãos. Extensões para considerar a decantação de grãos nestas abordagens (determinística ou estocástica) já foram propostas. Para a técnica do autômato celular (CA),⁽⁵⁾ os modelos preveem

¹Engenheiro de Materiais, Aluno de doutorado, Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais, Escola Politécnica, Universidade de São Paulo – USP, Av. Prof. Mello Moraes, 2463, Cep 05508-900, São Paulo, SP, Brasil. E-mail: pierre.caradec@gmail.com

²Professor, Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais, Escola Politécnica, Universidade de São Paulo – USP, Av. Prof. Mello Moraes, 2463, Cep 05508-900, São Paulo, SP, Brasil. E-mail: martoran@usp.br

a macroestrutura de grãos, mas carecem de equacionamentos completos para a movimentação do sólido nas equações de conservação. Modelos determinísticos que consideram a movimentação de grãos^(3,7,8) são vantajosos do ponto de vista computacional, mas não possuem um cálculo eficiente da macroestrutura de grãos como o fornecido pela técnica do autômato celular. O presente trabalho tem como objetivo a proposta de um modelo matemático para prever a macroestrutura de grãos bruta de solidificação a partir de uma combinação das vantagens dos modelos determinísticos e estocásticos.

1.1 Metodologia

O modelo matemático proposto no presente trabalho é implementado em três partes: (a) algoritmo baseado na técnica do autômato celular para simular a nucleação, crescimento e translação dos grãos; (b) submodelo microscópico baseado nos princípios de conservação aplicados no interior de cada grão (escala microscópica) e (c) submodelo macroscópico baseado nos princípios de conservação aplicados em todo o domínio (escala macroscópica).

1.2 Equações de Conservação

O domínio do submodelo microscópico é definido como a região interna dos grãos, enquanto o do submodelo macroscópico consiste de toda a região contendo o metal (equivalente à cavidade de um molde de fundição) como seu domínio. A Figura 1 ilustra estes dois domínios. O submodelo microscópico, utilizando a técnica do autômato celular, simula fenômenos como a nucleação,⁽⁶⁾ o crescimento⁽⁴⁾ e a translação de grãos,⁽⁵⁾ enquanto seu conjunto de equações diferenciais fornece a fração de sólido e a concentração de soluto internamente aos grãos. No submodelo macroscópico, por outro lado, calculam-se os campos de temperatura e de concentração de soluto no líquido extradendrítico.

Cada um dos submodelos (microscópico e macroscópico) possui um conjunto de equações diferenciais específico, baseadas nos princípios de conservação de massa, energia e espécies químicas. Além disso, devido às escalas de tamanho dos fenômenos que são tratados em cada um dos submodelos serem diferentes, definiram-se dois volumes elementares representativos (VER) de tamanhos diferentes para definir as variáveis médias:⁽⁹⁾ um volume microscópico ($V_{0,m}$) e um macroscópico ($V_{0,M}$). As variáveis médias dos submodelos microscópicos e macroscópicos são definidas, respectivamente, por meio das médias volumétricas apresentadas nas Equações 1 e 2:

$$\langle \psi_k \rangle_m^k = \frac{1}{V_{k,m}} \int_{V_{k,m}} \psi_k dV_k \quad (1)$$

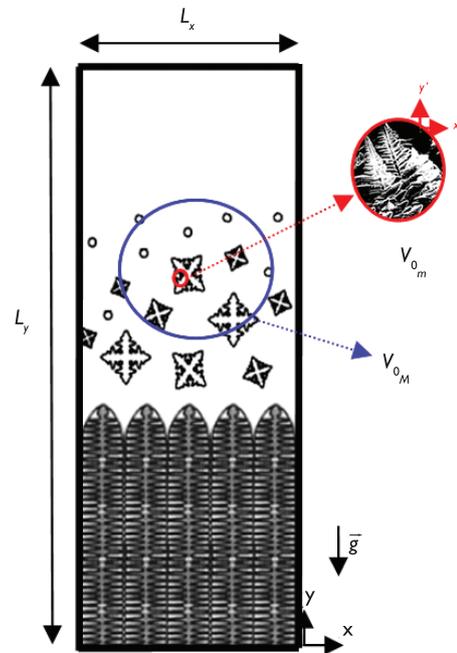


Figura 1. Definição dos domínios de cada submodelo: (1) o contorno do molde delimita o domínio do submodelo macroscópico, e em azul é definido o seu volume representativo que contém um conjunto de grãos e líquido; (2) os grãos ilustrados definem o domínio do submodelo microscópico, onde, destacado em vermelho, está um exemplo de seu volume representativo. São utilizados dois sistemas de referências: um fixo na cavidade do molde (x, y), utilizado pelo submodelo macroscópico, e outro fixo no grão a ser simulado (x', y') pelo submodelo microscópico. Também estão indicados o vetor aceleração gravitacional e as dimensões do domínio macroscópico.

$$\langle \psi_k \rangle_M^k = \frac{1}{V_{k,M}} \int_{V_{k,M}} \psi_k dV_k \quad (2)$$

onde $\langle \psi_k \rangle_m^k$ é a média intrínseca da grandeza ψ no VER microscópico e $\langle \psi_k \rangle_M^k$ no VER macroscópico; $V_{k,m}$ e $V_{k,M}$ são os volumes da fase k no interior do VER microscópicos e macroscópicos, respectivamente.

No desenvolvimento das equações de conservação para cada submodelo, são utilizadas hipóteses gerais que se aplicam aos dois submodelos. Estas hipóteses são: (a) a liga metálica é binária e sofre reação eutética; (b) as massas específicas e calores específicos de todas as fases são iguais e constantes; (c) os grãos apresentam apenas o movimento de decantação; (d) a convecção natural do líquido é desprezada, porém, é considerada aquela induzida pela decantação de grãos; (e) as velocidades médias de todas pseudofases líquidas e sólidas nos dois submodelos apresentam direção paralela à da aceleração gravitacional; (f) o eutético apresenta velocidade igual à da fase primária; (g) não há difusão de soluto nas fases sólidas e eutético; (h) despreza-se a difusão de soluto macroscópica; (i) existe equilíbrio termodinâmico local nas interfaces

sólido-líquido. As equações do submodelo microscópico são obtidas utilizando este conjunto de hipóteses e considerando um sistema de referências fixo no grão (x', y'), resultando nas Equações 3-6:

$$\varepsilon_d \langle v'_d \rangle^d = -\frac{\kappa_v \langle v_s \rangle^s}{\varepsilon_{gm}} \quad (3)$$

$$\rho C_p \left[\frac{\partial T}{\partial t} + \varepsilon_d \langle v'_d \rangle^d \frac{\partial \langle T \rangle_M}{\partial y} \right] = \quad (4)$$

$$L_f (\Gamma_s + \Gamma_e) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\bar{K} \frac{\partial \langle T \rangle_M}{\partial y} \right)$$

$$\frac{\partial (\varepsilon_d \langle C_d \rangle^d)}{\partial t} + \varepsilon_d \langle v'_d \rangle^d \frac{\partial \langle C_d \rangle^d}{\partial y} = \quad (5)$$

$$\bar{V} \cdot (\varepsilon_d D \bar{V} \langle C_d \rangle^d) - \frac{k \langle C_d \rangle^d}{\rho} \Gamma_s - \frac{C_e}{\rho} \Gamma_e$$

$$T = T_f + m_1 \langle C_d \rangle^d,$$

$$\varepsilon_s + \varepsilon_e + \varepsilon_d = 1 \quad \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \Gamma_s \quad \frac{\partial \varepsilon_e}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \Gamma_e \quad (6)$$

onde $\langle \vec{v}_d \rangle^d$ é a velocidade do líquido interdendrítico relativa ao referencial do grão; κ_v é o coeficiente de partição de escoamento;⁽¹⁰⁾ $\langle v_s \rangle^s$ é a velocidade média das fases sólidas no VER macroscópico; ε_{gm} é a fração de grão no VER macroscópico; $\langle T \rangle_M$ é a temperatura do VER macroscópico; T é a temperatura no interior do grão; Γ_s e Γ_e são as taxas de transformação de fase de sólido primário e de eutético, respectivamente; L_f é o calor latente de fusão; ρ é a massa específica; \bar{K} é a condutividade térmica média das fases; ε_d é a fração de líquido interdendrítico dentro do VER microscópico; $\langle C_d \rangle^d$ é a concentração de soluto na fase líquida interdendrítica; D o coeficiente de difusão na fase líquida interdendrítica; k o coeficiente de partição; T_f é a temperatura de fusão do metal puro; m_1 e C_e são a inclinação da curva *liquidus* e a concentração eutética, ambas obtidas a partir do diagrama de fases; ε_s e ε_e são as frações das fases sólidas primária e eutética, respectivamente.

Utilizando um sistema de referência fixo no molde (x, y) e considerando as hipóteses apresentadas anteriormente, são obtidas as Equações 7 a 10 para o submodelo macroscópico:

$$\rho C_p \frac{\partial \langle T \rangle_M}{\partial t} = L_f (\Gamma_{sm} + \Gamma_{em}) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\bar{K} \frac{\partial \langle T \rangle_M}{\partial y} \right) \quad (7)$$

$$\varepsilon_{lm} \frac{\partial \langle C_l \rangle_M^l}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} (\varepsilon_{lm} \langle C_l \rangle_M^l \langle v_l \rangle_M^l) = \quad (8)$$

$$\frac{1}{V_{0M}} \int_{A_{id}} \langle C_d \rangle^d \left(\frac{\kappa_v \langle \vec{v}_s \rangle^s}{(1 - \varepsilon_{lm})} - \vec{v}_s \right) \cdot \bar{n}_l dA +$$

$$\frac{1}{V_{0M}} \int_{A_{id}} (\langle C_d \rangle^d - \langle C_l \rangle_M^l) \left(\bar{w}'_g + \vec{v}_s + \frac{D}{\delta_{id}} \bar{n}_l \right) \cdot \bar{n}_l dA$$

$$\frac{\partial}{\partial y} (\varepsilon_{lm} \langle v_l \rangle_M^l) = \frac{1}{V_{0M}} \int_{A_{id}} \frac{\kappa_v \langle \vec{v}_s \rangle^s}{(1 - \varepsilon_{lm})} \cdot \bar{n}_l dA \quad (9)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_{sm}}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \Gamma_{sm} \quad \frac{\partial \varepsilon_{em}}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \Gamma_{em} \quad (10)$$

onde Γ_{sm} e Γ_{em} são as taxas de transformação das fases sólido primário e eutético, respectivamente; $\langle v_l \rangle_M^l$ é a velocidade média da fase líquida extradendrítica (direção vertical); ε_{lm} é a fração de fase líquida extradendrítica, \vec{v}_s é a velocidade do grão (direção vertical); \bar{n}_l é o versor normal à interface A_{id} , orientado para dentro do grão; $\langle C_l \rangle_M^l$ é a concentração de soluto na fase líquida extradendrítica; \bar{w}'_g é a velocidade de crescimento da interface dos grãos; \vec{v}_s é a velocidade de translação da interface dos grãos; δ_{id} é a espessura efetiva de difusão junto ao líquido extradendrítico adjacente ao grão; ε_{sm} e ε_{em} são as frações das pseudofases sólidas primária e eutética, respectivamente, para o submodelo macroscópico.

1.3 Modelo para a Nucleação de Grãos

Considera-se que a nucleação de um novo grão ocorre heterogeneamente sobre uma partícula de substrato, cada um apresentando um super-resfriamento crítico distinto para nucleação. Considera-se que a população de super-resfriamentos críticos associados a estes substratos obedece a uma distribuição gaussiana (normal). São definidas duas distribuições gaussianas de super-resfriamentos: uma para os substratos distribuídos na base do molde e outra para os substratos distribuídos no interior do líquido. A Equação 11 define a distribuição de super-resfriamentos para nucleação entre os substratos:⁽⁶⁾

$$\frac{dn}{d(\Delta T)} = \left(\frac{n_{max}}{\sqrt{2\pi\Delta T_\sigma}} \right) \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta T - \overline{\Delta T_N}}{\Delta T_\sigma} \right)^2 \right] \quad (11)$$

onde n é massa específica de núcleos formados; ΔT é o super-resfriamento; n_{max} é a massa específica máxima de número de núcleos, ou seja, a massa específica de partículas de substratos sobre as quais a nucleação pode ocorrer; $\overline{\Delta T_N}$ é o super-resfriamento médio da distribuição; e ΔT_σ é o seu desvio-padrão. Por se tratar de um

modelo bidimensional, é necessário converter as massas específicas indicadas na distribuição para serem utilizadas no presente modelo. Esta conversão estereológica é indicada nas Equações 12:⁽⁶⁾

$$n_s^* = \frac{\pi}{4} (n_L)^2 \quad n_v^* = \sqrt{\frac{\pi}{6}} (n_L)^{3/2} \quad (12)$$

onde n_L é a quantidade de substratos por unidade de comprimento da borda do domínio; n_s^* é a quantidade de substratos por unidade de superfície do molde; n_A é a quantidade de substratos por unidade de área do domínio e n_v^* é a quantidade de substratos por unidade de volume.

1.4 Modelo para a Cinética de Crescimento de Grão

A velocidade de crescimento de um grão é calculada pela Equação 13:⁽¹⁾

$$\left| \bar{w}'_g \right| = \frac{D_l (k-1) (\langle T \rangle_M - T_f)}{\pi^2 \Gamma} \left[0,4567 \left(\frac{\Omega_c}{1-\Omega_c} \right)^{1,95} \right]^2 \quad (13)$$

onde D_l é a difusividade de soluto no líquido; k é coeficiente de partição de soluto; Γ é o coeficiente de Gibbs-Thompson; e Ω_c é um super-resfriamento adimensional de soluto dado pela Equação 14:

$$\Omega_c = \frac{(\langle T \rangle_M - T_{liq})}{(\langle T \rangle_M - T_f)(1-k)} \quad (14)$$

onde T_{liq} é a temperatura *liquidus* para a concentração média da liga, C_0 .

1.5 Técnica do Autômato Celular

No submodelo microscópico utiliza-se a técnica do autômato celular (CA) para simular a nucleação, o crescimento e a decantação dos grãos. Na técnica do CA, o domínio do molde é subdividido em uma malha de células quadradas de lado Δx_{CA} que pode apresentar três estados: ativa, inativa ou líquida. Cada célula ativa contém uma mistura de sólido e líquido interdendrítico, e possui um polígono de crescimento definido como um quadrilátero de diagonais ortogonais conforme apresentado em Guillemot, Gandin e Combeau.⁽⁵⁾ Na célula ativa, armazenam-se as dimensões de um polígono de crescimento que, ao atingir o centro de células líquidas vizinhas, causam a sua ativação. Estas células ativas tornam-se novamente inativas quando todas as células vizinhas mais próximas estiverem ativas ou foram ativadas em algum momento, não havendo mais crescimento de seus polígonos. Uma célula líquida pode

conter apenas líquido, ou pode conter também um substrato para nucleação heterogênea de um novo grão. Cada célula líquida que contém uma partícula de substrato para nucleação torna-se uma célula ativa originando um novo grão através do processo de nucleação.

1.6 Algoritmo de Translação

A modelagem do processo de decantação consiste de um conjunto de procedimentos e equações. Quando um grão ou aglomerado de grãos (*cluster*) não estiver fixado na borda do domínio, sua velocidade de decantação é considerada igual à velocidade terminal de decantação, calculada pelo modelo de Haider e Levenspiel.⁽¹¹⁾ Segundo este modelo, que considera o formato do corpo, a velocidade de terminal de decantação adimensional é dada pela Equação 15:

$$u_* = \left[\left(\frac{18}{d_*^2} \right)^{K_2} + \left(\frac{2K_1}{4d_*^{0,5}} \right)^{K_2} \right]^{-1/K_1} \quad (15)$$

onde K_1 e K_2 são parâmetros que dependem do formato do corpo em decantação. Para este modelo apresentam valores de 1,1272 e 0,9677 (considerando formato de um octaedro regular), respectivamente; v_* e d_* são adimensionais calculados por (Equações 16 e 17):

$$v_* = |\bar{v}_s| \left[\frac{\rho_l^2}{|\bar{g}| \mu_l (\rho_c - \rho_l)} \right]^{1/3} \quad (16)$$

$$d_* = d_g \left[\frac{|\bar{g}| \rho (\rho_c - \rho_l)}{\mu_l^2} \right]^{1/3} \quad (17)$$

onde \bar{v}_s é a velocidade terminal; \bar{g} é o vetor aceleração gravitacional; μ_l é a viscosidade do líquido; e ρ_c é a massa específica média do grão ou *cluster*, dado por (Equação 18):

$$\rho_c = \varepsilon_{s,c} \rho_s + (1 - \varepsilon_{s,c}) \rho_l \quad (18)$$

onde ρ_s e ρ_l são as massas específicas da fase sólida e líquida, respectivamente, e $\varepsilon_{s,c}$ é a fração de sólido média do *cluster*, obtida como auxílio do submodelo microscópico.

2 RESULTADOS E DISCUSSÃO

2.1 Decantação de um Grão Dendrítico em Líquido Super-resfriado

Os resultados de simulação utilizando o modelo proposto para a decantação de um único grão dendrítico em um líquido super-resfriado são discutidos neste item. Um grão dendrítico com formato de losango de lado

muito pequeno ($70 \mu\text{m}$) da liga Al-7%Si foi posicionado no topo da cavidade de um molde, que está preenchido com líquido a uma temperatura uniforme de 881 K (608°C), representando um super-resfriamento de 10 K abaixo da temperatura *liquidus*. Durante sua queda no líquido super-resfriado, o grão cresce, libera calor latente e troca soluto com o líquido ao seu redor. A Figura 2 mostra a macroestrutura calculada pelo modelo em três instantes de tempo diferentes e seus respectivos perfis de temperatura e concentração de soluto na fase líquida extradendrítica.

Na Figura 2a, observa-se o crescimento de um envelope com formato inicial de losango simétrico, mas que se torna assimétrico durante a queda devido ao crescimento um pouco mais acentuado na sua parte inferior. Este aspecto é explicado pelo perfil de temperatura da Figura 2 (b). Na Figura 2c, verifica-se o aumento da concentração de soluto onde o grão está localizado.

Na Figura 3, são ilustrados os cálculos de fração de sólido, velocidade do líquido interdendrítico e concentração de soluto dentro do grão em decantação, que é maior nas regiões inferiores com maior super-resfriamento. Nesta

simulação, a malha de volumes para obtenção da solução numérica do submodelo microscópico pelo método dos volumes finitos explícito foi de 100×400 volumes, adotando-se um número igual de células para a técnica do CA. A malha para o submodelo macroscópico foi de 1×4 volumes. As propriedades utilizadas para a liga Al-7%Si são:⁽¹⁰⁾ $C_0 = 7\%$; $\rho_s = 2452,0 \text{ kg m}^{-3}$; $\rho_l = 2370,0 \text{ kg m}^{-3}$; $T_{\text{liq}} = 891,0 \text{ K}$; $T_f = 933,0 \text{ K}$; $T_e = 850,0 \text{ K}$; $L_f = 387 \times 10^3 \text{ J kg}^{-1}$; $C_p = 1126,0 \text{ J K}^{-1} \text{ kg}^{-1}$; $m_1 = -6,5 \text{ K (\% peso)}^{-1}$; $k = 0,13$; $D = 6,45 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$; $K_s = 137,5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$; $k_1 = 60,5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$; $\mu = 0,001 \text{ Pa s}$; $\Gamma = 1,96 \times 10^{-7} \text{ m K}$; $\lambda_2 = 10^{-5} \text{ m}$.

2.2 Solidificação Unidirecional Ascendente e Descendente

A solidificação unidirecional ascendente e descendente da liga Al-3%Cu é simulada utilizando o modelo proposto aplicado a um domínio unidimensional, com extração de calor a partir de uma das duas extremidades do domínio. A malha do submodelo microscópico e utilizada

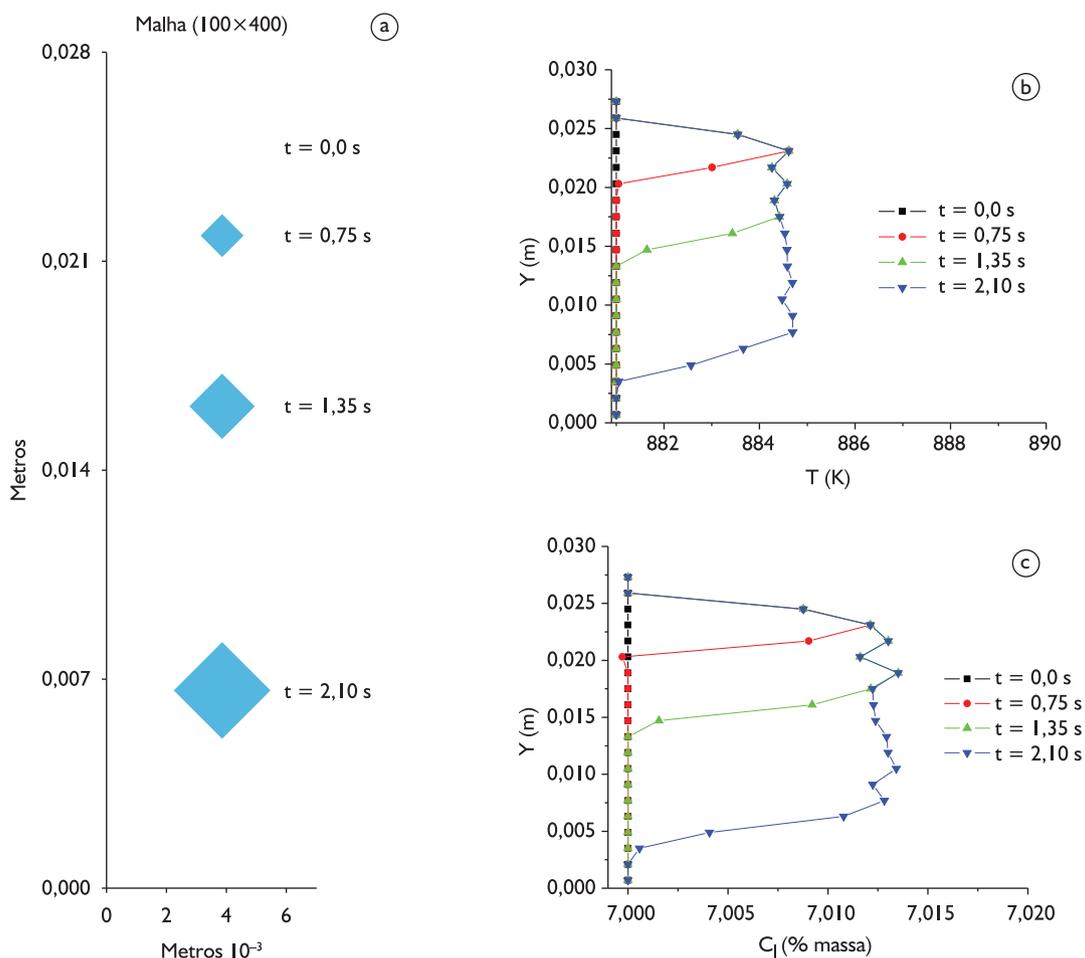


Figura 2. (a) Macroestrutura de um grão dendrítico decantando em um líquido super-resfriado em 10 K em relação à temperatura *liquidus* para diferentes tempos; (b) perfil de temperatura; e (c) concentração de silício na fase líquida extradendrítica para os mesmos tempos das macroestruturas apresentadas.

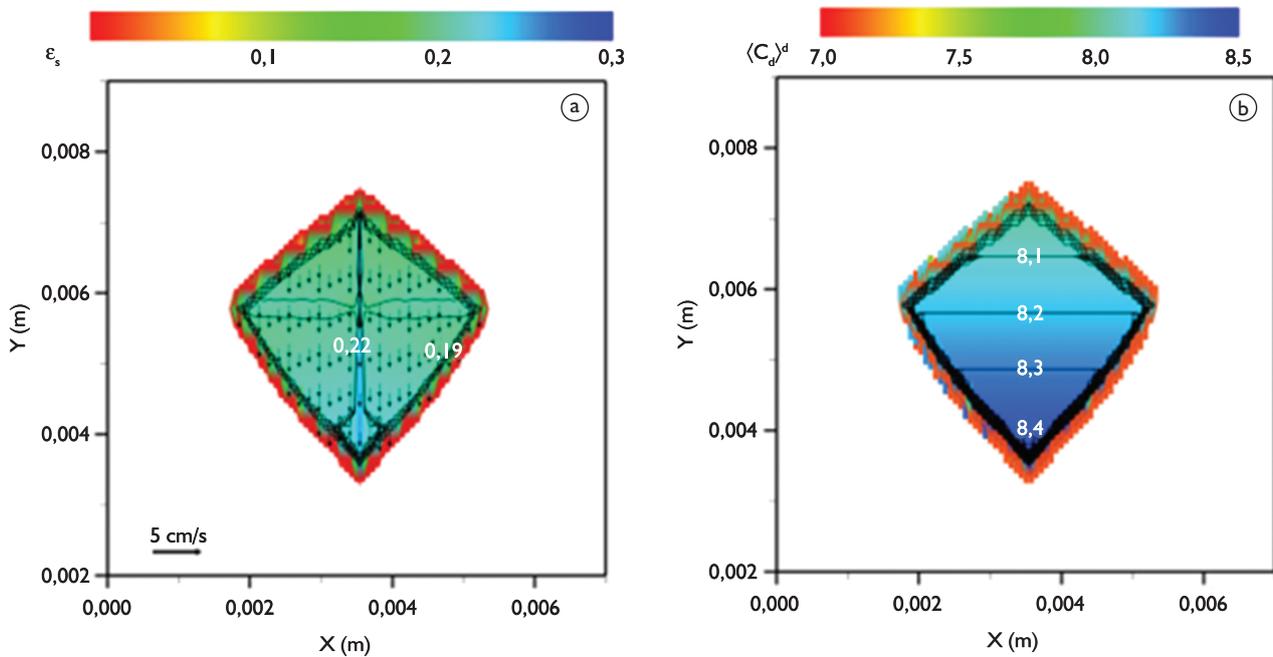


Figura 3. Campos obtidos pelo submodelo microscópico internamente ao grão dendrítico em decantação apresentado na Figura 2 para o instante de tempo 2,1 s: (a) campo de fração de sólido e velocidade do líquido interdendrítico; (b) campo de concentração de silício no líquido interdendrítico.

no CA foi de 110×220 volumes (ou células) e a macroscópica foi de 1×20 volumes. Os parâmetros utilizados para simular a solidificação da liga Al-3%Cu são semelhantes aos empregados por Wang e Beckermann.⁽²⁾ No modelo de decantação e nucleação, utilizam-se: $\mu_1 = 0,001 \text{ Pa s}$; $\lambda_2 = 10^{-5} \text{ m}$; $n_A^* = 3,0 \times 10^6 \text{ m}^{-2}$; $n_V^* = 10^5 \text{ m}^{-3}$. As macroestruturas finais de grãos fornecidas pelo modelo estão apresentadas na Figura 4.

Na solidificação ascendente (extração de calor pela extremidade inferior) considerando o efeito de decan-

tação (Figura 4a), observam-se apenas grãos colunares que cresceram a partir da base e atingiram o topo, passando pelo bem conhecido período de competição entre grãos. Não há transição colunar-equiaxial (CET). No caso da solidificação descendente (extração de calor pela extremidade superior), também considerando a decantação dos grãos (Figura 4b), a CET ocorre como o resultado de uma disputa entre os grãos colunares crescendo em direção à região inferior e os grãos equiaxiais decantando. No final, os grãos equiaxiais formam uma camada na base do molde

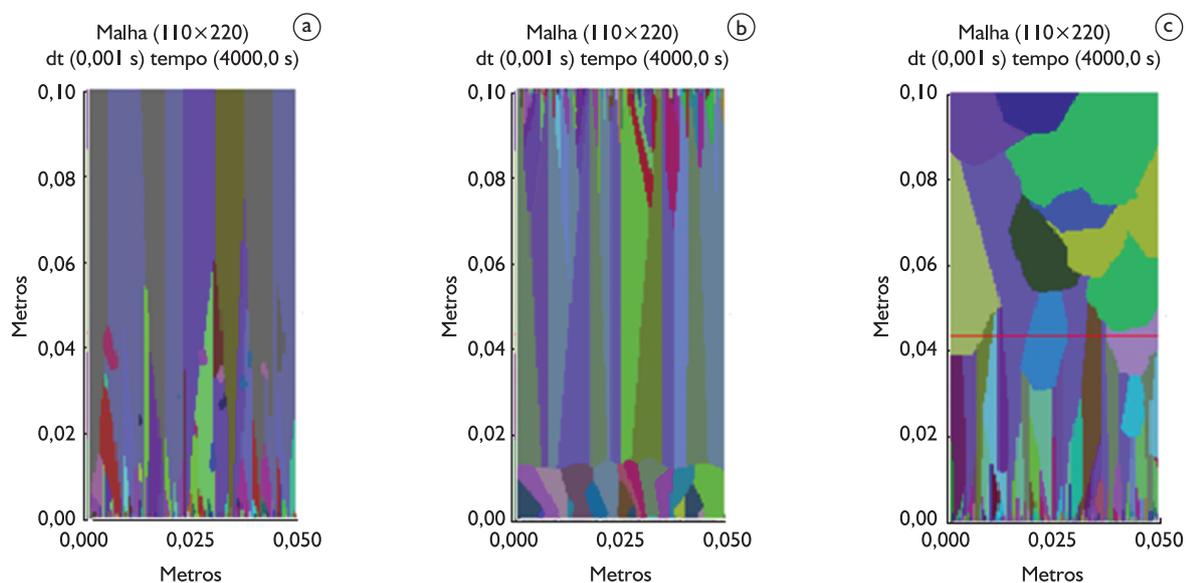


Figura 4. Macroestruturas de grãos calculadas para a solidificação unidirecional da liga Al-3%Cu: considerando o efeito de decantação de grãos no caso (a) ascendente e (b) descendente; e (c) sem efeito de decantação dos grãos.

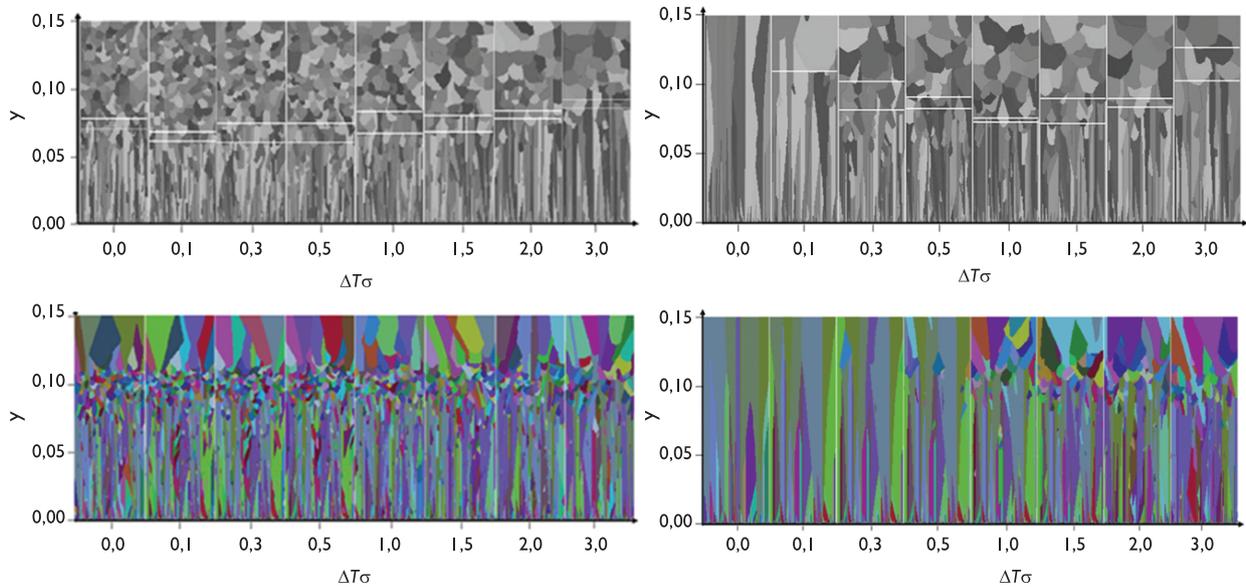


Figura 5. Macroestruturas fornecidas no trabalho de Martorano e Bisciola⁽¹²⁾ (acima) e as calculadas pelo presente modelo (abaixo) para $\overline{\Delta T_N} = 2\text{ K}$ (à esquerda) e $\overline{\Delta T_N} = 5\text{ K}$ (à direita), com ΔT_σ entre 0 e 3,0 K.

que bloqueia o crescimento dos grãos colunares, causando a CET. Outra simulação foi conduzida eliminando-se a decantação dos grãos, resultando na macroestrutura apresentada na Figura 4c, cuja linha horizontal vermelha traçada mostra a posição da transição colunar-equiaxial calculada por Wang e Beckermann⁽²⁾, por meio de um modelo completamente determinístico, onde não é considerada a decantação dos grãos. Nota-se que a previsão da posição da CET obtida pelo presente modelo apresenta uma boa aderência à posição prevista por esses autores.

2.3 Efeito da Distribuição de Super-resfriamentos

Examina-se o efeito dos diferentes parâmetros da distribuição de super-resfriamentos para a nucleação na macroestrutura final calculada pelo presente modelo. Com este objetivo, comparam-se os resultados obtidos, considerando o efeito de decantação dos grãos, com as simulações apresentadas por Martorano e Bisciola⁽¹²⁾ que não consideram o efeito de decantação. Os parâmetros utilizados nas simulações são: $\overline{\Delta T_N} = 2,0\text{ K}$ ou $\overline{\Delta T_N} = 5,0\text{ K}$ e $0 \leq \Delta T_\sigma \leq 3\text{ K}$. A malha para o submodelo microscópico foi de 100×300 volumes (e células) e a malha para o submodelo macroscópico de 1×30 volumes. As propriedades consideradas para a liga Al-7%Si estão descritas no item 3.1. Adotam-se, ainda, $L_x = 0,05\text{ m}$; $L_y = 0,15\text{ m}$; $h = 250,0\text{ W m}^{-2}\text{ K}^{-1}$; $T_0 = 991,0\text{ K}$; $n_A^* = 3,0 \times 10^6\text{ m}^{-2}$; $n_V^* = 5,0 \times 10^6\text{ m}^{-3}$.

Utiliza-se a Equação 19 para o cálculo da velocidade do crescimento dendrítico também empregada por Martorano e Bisciola⁽¹²⁾

$$\left| \vec{w}'_g \right| = A_{C_0} \Delta T^m \quad (19)$$

com $A_{C_0} = 3 \times 10^{-6}\text{ m s}^{-1}\text{ K}^{-2,7}$ e $m = 2,7$, para a liga Al-7%Si.

Quando $\overline{\Delta T_N} = 2,0\text{ K}$, as macroestruturas calculadas pelo modelo (Figura 5) praticamente não são afetadas pela largura da distribuição de super-resfriamentos ΔT_σ . Porém, no modelo sem decantação⁽¹²⁾, a macroestrutura é sensivelmente alterada, indicando uma modificação da posição da CET. Quando $\overline{\Delta T_N} = 5,0\text{ K}$, no trabalho de Martorano e Bisciola⁽¹²⁾ há CET logo para o caso de ΔT_σ próximo de 0,1, enquanto que, para o presente modelo, só há uma zona equiaxial distinta para $\Delta T_\sigma \geq 1,0\text{ K}$ (Figura 5).

3 CONCLUSÕES

Podem ser formuladas as seguintes conclusões:

- As macroestruturas obtidas pelo modelo aplicado à solidificação unidirecional nas condições simuladas diferem significativamente dos resultados obtidos pelo modelo determinístico quando é considerada a decantação de grãos;
- Na simulação da solidificação unidirecional ascendente, no presente modelo os grãos equiaxiais decantam e não atingem tamanho suficiente para bloquear o crescimento colunar, resultando em uma macroestrutura de grãos colunares. Sem o efeito de decantação, a macroestrutura calculada apresenta uma transição colunar-equiaxial

próxima à prevista por um modelo determinístico;

- Na simulação da solidificação unidirecional descendente, observam-se grãos equiaxiais que sedimentam na base e originam uma nova zona colunar inferior que se encontra com os grãos colunares originários no topo do molde;
- O presente modelo mostra que a decantação de grãos altera o efeito da largura da distribuição de

super-resfriamentos de nucleação na macroestrutura de grãos.

Agradecimentos

Os autores agradecem à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (Fapesp) pelo financiamento (Processo nº 03/08576-7).

REFERÊNCIAS

- 1 WANG, C. Y.; BECKERMANN, C. A multiphase solute diffusion model for dendritic alloy solidification. *Metallurgical Transactions A*, v. 24, n. 12, p. 2787-802, Dec. 1993. <http://dx.doi.org/10.1007/BF02659502>
- 2 WANG, C. Y.; BECKERMANN, C. Prediction of columnar to equiaxed transition during diffusion-controlled dendritic alloy solidification. *Metallurgical and Materials Transactions A*, v. 25, n. 5, p. 1081-93, May 1994. <http://dx.doi.org/10.1007/BF02652282>
- 3 WANG, C. Y.; BECKERMANN, C. Equiaxed dendritic solidification with convection. Part I: multiscale/multiphase modeling. *Metallurgical and Materials Transactions A*, v. 27, n. 9, p. 2754-64, Sep. 1996. <http://dx.doi.org/10.1007/BF02652369>
- 4 GANDIN, C. A.; RAPPAZ, M. A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes. *Acta Metallurgica et Materialia*, v. 42, n. 7, p. 2233-46, July 1994. [http://dx.doi.org/10.1016/0956-7151\(94\)90302-6](http://dx.doi.org/10.1016/0956-7151(94)90302-6)
- 5 GUILLEMOT, G.; GANDIN, C.A.; COMBEAU, H. Modeling of macrosegregation and solidification grain structures with a coupled cellular automaton-finite element model. *ISIJ Internacional*, v. 46, n. 6, p. 880-95, 2006. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.46.880>
- 6 RAPPAZ, M.; GANDIN, C. A. Probabilistic modeling of microstructure formation in solidification processes. *Acta Metallurgica*, v. 41, n. 2, p. 345-60, 1993. [http://dx.doi.org/10.1016/0956-7151\(93\)90065-Z](http://dx.doi.org/10.1016/0956-7151(93)90065-Z)
- 7 WU, M. LUDWIG, A. Modeling equiaxed solidification with melt convection and grain sedimentation I: model description. *Acta Materialia*, v. 57, n. 19, p. 5621-31, Nov. 2009. <http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2009.07.056>
- 8 COMBEAU, H. et al. Prediction of macrosegregation in steel ingots: influence of the motion and the morphology of equiaxed grains. *Metallurgical and Materials Transaction B*, v. 40, n. 3, p. 289-304, June 2009. <http://dx.doi.org/10.1007/s11663-008-9178-y>
- 9 WHITAKER, S. Advances in theory of fluid flow motion in porous media. *Industrial and Engineering Chemistry*, v. 61, n. 12, p. 14-28, Dec. 1969. <http://dx.doi.org/10.1021/ie50720a004>
- 10 WANG, C.Y. et al. Multiparticulate interfacial drag in equiaxed solidification. *Metallurgical and Materials Transactions B*, v. 26, n. 1, p. 111-9, Feb. 1995. <http://dx.doi.org/10.1007/BF02648984>
- 11 HAIDER, A.; LEVENSPIEL, O. Drag coefficient and terminal velocity of spherical and nonspherical particles. *Powder Technology*, v. 58, n. 1, p. 63-70, May 1989. [http://dx.doi.org/10.1016/0032-5910\(89\)80008-7](http://dx.doi.org/10.1016/0032-5910(89)80008-7)
- 12 MARTORANO, M. A.; BISCOLOLA, V. B. Predicting the columnar-to-equiaxed transition for a distribution of nucleation undercoolings. *Acta Materialia*, v. 57, n. 2, p. 607-15, Jan. 2009. <http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2008.10.001>

Recebido em: 04/10/2011

Aceito em: 06/03/2012