

VINICIUS BERTOLAZZI BISCUOLA

IMPLEMENTAÇÃO E ANÁLISE DE UM MODELO MATEMÁTICO BASEADO
NA TÉCNICA DE AUTÔMATO CELULAR PARA PREVISÃO DA
ESTRUTURA BRUTA DE SOLIDIFICAÇÃO

Trabalho de Formatura apresentado
à Escola Politécnica da Universidade
de São Paulo para obtenção do
Título de Engenheiro de Materiais

São Paulo
2004

VINICIUS BERTOLAZZI BISCUOLA

IMPLEMENTAÇÃO E ANÁLISE DE UM MODELO MATEMÁTICO BASEADO
NA TÉCNICA DE AUTÔMATO CELULAR PARA PREVISÃO DA
ESTRUTURA BRUTA DE SOLIDIFICAÇÃO

Trabalho de Formatura apresentado
à Escola Politécnica da Universidade
de São Paulo para obtenção do
Título de Engenheiro de Materiais

Área de Concentração:
Engenharia de Materiais

Orientador:
Marcelo de Aquino Martorano

São Paulo
2004

FICHA CATALOGRÁFICA

Biscuola, Vinicius Bertolazzi

Implementação e análise de um modelo matemático baseado na técnica de autômato celular para previsão da estrutura bruta de solidificação. São Paulo, 2004. 52p.

Trabalho de Formatura (Graduação) – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia de Materiais

1.Modelo Matemático 2.Solidificação

I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia de Materiais.

AGRADECIMENTOS

Ao professor e orientador Marcelo de Aquino Martorano pela oportunidade e pelo tempo dispendido.

À Fundação para o Desenvolvimento Tecnológico da Engenharia (FDTE) pela Bolsa de Iniciação Tecnológica (BIT).

RESUMO

O objetivo do presente trabalho é a implementação e análise de um modelo matemático estocástico bidimensional para prever a macroestrutura bruta de solidificação em ligas metálicas binárias. O modelo implementado é capaz de prever a fração de sólido local, o tamanho e forma dos grãos, a transição colunar-equiaxial (CET) e a transferência de calor durante a solidificação. Durante a implementação, o modelo foi dividido em dois submodelos: um submodelo macroscópico, que soluciona a equação diferencial de condução de calor através do método dos volumes finitos, e um submodelo microscópico, utilizado para prever o crescimento dos grãos através da técnica autômato celular. A estrutura de grãos e as curvas de resfriamento obtidas pelo modelo para uma determinada situação experimental foram comparadas com dados disponíveis na literatura. Os resultados calculados apresentaram uma boa aderência aos resultados experimentais, validando o modelo implementado. O modelo foi, então, utilizado para simular o efeito de algumas variáveis de processamento importantes no processo de fundição de ligas do sistema Al-Si. Os resultados mostram que: (1) um aumento no coeficiente de transferência de calor entre o metal e o molde aumenta o tamanho da zona colunar e diminui o tamanho médio dos grãos equiaxiais; (2) o aumento do superaquecimento inicial do metal líquido aumenta o tamanho da zona colunar e não altera significativamente o tamanho médio de grão equiaxial e (3) o aumento do teor de soluto médio da liga diminuiu o tamanho da zona colunar e também diminuiu o tamanho médio dos grãos equiaxiais. Os resultados também foram analisados criticamente frente ao comportamento físico esperado. Observa-se a presença de um líquido super-resfriado adjacente à frente de crescimento colunar, como mostrado em outros modelos da literatura. Entretanto, existem diversas inconsistências em relação ao perfil de fração de sólido calculado. Nota-se que estas inconsistências são resultantes do processo de acoplamento entre os submodelos micro e macroscópicos e que uma pequena modificação pode afetá-las.

ABSTRACT

The objective of the present work is to implement and critically analyze a two dimensional stochastic mathematical model to predict the as-cast macrostructure in binary alloys. The implemented model is capable of predicting the local solid fraction, the size and shape of grains, the columnar-to-equiaxed transition, and the heat transfer during solidification. At implementation, the complete model is divided into two submodels: a macroscopic submodel to solve the heat conduction equation by the finite volume method, and a microscopic submodel to predict the evolution of grains by the cellular automaton technique. Results from the complete model are first compared with available literature results, showing excellent agreement. Afterwards, the model is used to simulate the influence of some parameters on the solidification of Al-Si alloys. The model results showed that: (1) an increase in the heat transfer coefficient between metal and mold extends the columnar region and reduces the equiaxed grains size; (2) an increase in the initial metal superheat extends the columnar region and does not affect the equiaxed grains size; (3) a solute increase causes a decrease in the columnar region size and in the equiaxed grain size. Results from this simulation showed the existence of an undercooled liquid region ahead of the columnar grains, in agreement with results from the literature. There are, however, a few inconsistencies in the calculated solid fraction profile. These are understood to be the result of the specific methodology chosen to couple the micro and macroscopic submodels. A minor modification of the coupling method can eliminate one of the inconsistencies from the model.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

LISTA DE SÍMBOLOS

	Pág.
1 – INTRODUÇÃO	01
2 – REVISÃO DE LITERATURA	
2.1 – Transição Colunar-Equiaxial (CET)	02
2.2 – Mecanismos para Transição Colunar-Equiaxial (CET).....	02
2.2.1 – Nucleação Heterogênea na Zona de Super-resfriamento	03
Constitucional	03
2.2.2 – “Big Bang”	03
2.2.3 – Destacamento de Braços de Dendritas	04
2.3 – Modelos Estocásticos para Transição Colunar-Equiaxial	04
2.4 – Modelos Estocásticos Precursores	05
2.5 – Modelos Autômato Celular	06
2.6 – Modelos Autômato Celular Modificados	10
3 – MATERIAIS E MÉTODOS	
3.1 – Modelo Matemático	12
3.2 – Submodelo Macroscópico	12
3.3 – Submodelo Microscópico	14
3.3.1 – Velocidade de Crescimento	16
3.3.2 – Nucleação	17
3.4 – Acoplamento entre Submodelos Macroscópico e Microscópico	18
3.5– Sequência de Execução dos Passos do Modelo	19

4 – RESULTADOS E DISCUSSÃO	
4.1 – Aferição do Modelo	21
4.1.1 – Submodelo Macroscópico	21
4.1.2 – Submodelo Microscópico – Crescimento	24
4.1.3 – Submodelo Microscópico - Nucleação e Crescimento	26
4.1.4 – Comparação com Experimento	30
4.2 – Análise Paramétrica do Modelo	34
4.2.1 – Influência do Coeficiente de Transferência de Calor	35
4.2.2 – Influência do Superaquecimento Inicial do Líquido	37
4.2.3 – Influência da Concentração Média da Liga (C_0)	38
4.2.4 – Influência do Número de Células da Malha (CA)	40
4.3 – Análise Crítica do Modelo Autômato Celular	41
4.3.1 – Acoplamento Microscópico-Macroscópico na Solidificação	
Eutética	43
4.3.2 – Acoplamento Microscópico-Macroscópico na Solidificação	
Primária	45
5 – CONCLUSÕES	50
6 – LISTA DE REFERÊNCIAS	51

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Modelo de CA onde o crescimento é retangular	08
Figura 2 – Modelo de CA onde o núcleo não está centrado na célula	09
Figura 3 – Representação esquemática de um Volume Finito	14
Figura 4 – Representação do crescimento celular descentrado. A célula inicial (v) ativou a sua vizinha (μ), e esta tem o seu envelope descentrado em relação à sua célula	15
Figura 5 – Domínio e sistema de coordenadas utilizados para simular a condução de calor	22
Figura 6 – Temperatura em função do tempo para três posições	23
Figura 7 – Erro quadrático entre as soluções numéricas e analíticas em função do passo de tempo utilizado no método numérico	24
Figura 8 – Formatos do envelope dendrítico obtidos por Rappaz e Gandin (1994) para diversos instantes de tempo (indicados em segundos) durante o crescimento	25
Figura 9 – Formatos do envelope dendrítico durante o crescimento obtidos pelo modelo implementado para os mesmos instantes de tempo indicados na Fig. 8	26
Figura 10 – Micrografias referentes ao Teste 1. Simulações realizadas pelo presente modelo nos instantes (a) 3.5s; (b) 4.5s e (c) 5.5s. Simulações realizadas por Rappaz e Gandin (1993): (d), (e) e (f).....	28
Figura 11 – Micrografias referentes ao Teste 2. Simulações realizadas pelo presente modelo nos instantes (a) 3.5s; (b) 4.0s e (c) 4.5s. Simulações realizadas por Rappaz e Gandin (1993): (d), (e) e (f)	29
Figura 12 – Micrografias referentes ao Teste 3. Simulações realizadas pelo presente modelo nos instantes (a) 3.0s; (b) 3.2s e (c) 3.7s. Simulações realizadas por Rappaz e Gandin (1993): (d), (e) e (f)	30
Figura 13 – Fluxo de calor na base do cilindro em função do tempo obtido através da solução inversa da equação de condução de calor a partir das curvas de temperatura medidas	32

Figura 14 – Comparação entre a simulação (a), e a micrografia resultante do experimento (b) realizado por Rappaz e Gandin (1994)	33
Figura 15 – Comparação entre as temperaturas medidas experimentalmente (linhas pontilhadas) e os dados resultantes da simulação (linhas cheias).....	34
Figura 16 – Simulações realizadas com três coeficientes de transferência de calor diferentes (h). (a) $h=100 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$; (b) $h=250 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$; (c) $h=1000 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$	36
Figura 17 – Simulações realizadas com diferentes superaquecimentos iniciais do líquido. (a) 50°K ; (b) 100°K ; (c) 150°K	37
Figura 18 – Simulações realizadas com três concentrações diferentes. (a) 3%Si; (b) 7%Si; (c) 11%Si	39
Figura 19 – Simulações realizadas com três malhas diferentes. (a) 50×5 ; (b) 100×11 ; (c) 150×16	40
Figura 20 – Macroestrutura de grãos, perfil de temperatura, perfil de fração de sólido e perfil de fração de sólido previsto pelo modelo de Scheil, obtidos quando a isoterma liquidus atingiu $Y = 0,1\text{m}$	42
Figura 21 – Representação esquemática da malha de volumes finitos (VF) e do celular autômato (CA)	44
Figura 22 – Macroestrutura de grãos, perfil de temperatura, perfil de fração de sólido e perfil de fração de sólido previsto pelo modelo de Scheil, obtidos quando a isoterma liquidus atingiu $Y = 0,1\text{m}$	45
Figura 23 – Macroestrutura de grãos, perfil de temperatura, perfil de fração de sólido e perfil de fração de sólido previsto pelo modelo de Scheil, obtidos quando a isoterma liquidus atingiu $Y = 0,1\text{m}$	47
Figura 24 – Macroestrutura de grãos, perfil de temperatura, perfil de fração de sólido e perfil de fração de sólido previsto pelo modelo de Scheil, obtidos quando a isoterma liquidus atingiu $Y = 0,1\text{m}$	49

LISTA DE TABELAS

Tabela I – Dados utilizados no problema de condução	23
Tabela II – Dados referentes ao testes de crescimento realizados por Rappaz e Gandin (1994)	25
Tabela III – Dados utilizados na simulação isotérmica: são apresentados os parâmetros utilizados para a nucleação no contorno (S) e no interior do domínio (V), a composição média (C_0) e a malha de células do método CA	27
Tabela IV – Dados de nucleação utilizados para o caso padrão; são apresentados os parâmetros utilizados para a nucleação no contorno (S) e no interior do domínio (V)	35
Tabela V – Propriedades do material utilizado no caso padrão (Al-7%Si)	35
Tabela VI – Parâmetros de simulação para o caso padrão	35
Tabela VII – Dados para a verificação da influência da concentração	38

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CA	Autômato Celular
CET	Transição Colunar-Equiaxial
DFD	Diferenças Finitas Diretas
EF	Elementos Finitos
MC	Monte Carlo
VF	Volume Finito
Fig.	Figura
Eq.	Equação

LISTA DE SÍMBOLOS

δn	Densidade de núcleos (m^{-2})
ΔT	Super-resfriamento (K)
δf_S	Variação da fração de sólido
ΔH_f	Calor latente de fusão (J/Kg)
ρ	Densidade (Kg/m ³)
C_p	Calor específico (J/Kg*K)
n_{max}	Densidade máxima de núcleos (m^{-2})
ΔT_σ	Desvio padrão do super-resfriamento (K)
ΔT_{nuc}	Super-resfriamento médio para nucleação (K)
Δx e Δy	Dimensões de um volume finito (m)
H	Entalpia (J/m ³)
h	Coefficiente de transferência de calor na interface metal-molde (W/m ² *K)
K	Condutividade térmica (W/m*K)
δx e δy	Distância entre os centros dos volumes finitos (m)
Δt	Passo de tempo (s)
L	Dimensão do lado da célula (m)
v	Velocidade de crescimento da ponta da dendrita (m/s)
$L_{i[1]}$	Distância entre o centro da célula e o lado do envelope dendritico (m)
k	Coefficiente de partição (-)
T_L	Temperatura liquidus (K)
T_{eut}	Tempertaura do ponto eutético (K)

1 – INTRODUÇÃO

A previsão da estrutura bruta de solidificação é de extrema importância, pois esta possui uma forte relação com as propriedades de um material. E por sua vez, a estrutura bruta de solidificação é determinada por variáveis do processo de fundição, como o superaquecimento inicial do metal, o coeficiente de transferência de calor entre o metal e molde e a concentração média de soluto da liga.

A influência destes parâmetros pode ser determinada por métodos empíricos ou por modelos matemáticos, sendo que os modelos matemáticos podem apresentar uma melhor relação custo-benefício. Entretanto, os modelos matemáticos para a previsão da estrutura bruta de solidificação estão ainda em desenvolvimento e apenas alguns casos relativamente simples podem ser simulados (Martorano e Capocchi, 2000).

Os modelos matemáticos podem prever variáveis macroscópicas como a temperatura, a concentração média de soluto na liga, a velocidade superficial e outros, ou prever aspectos microestruturais, como a velocidade de crescimento das estruturas dendríticas. Dentre os modelos, os de maior interesse tecnológico são os micro-macroscópicos (Rappaz, 1989). Estes modelos são, na verdade, uma combinação dos modelos microscópicos e macroscópicos, unidos por um acoplamento.

O objetivo do presente trabalho é a implementação de um modelo matemático estocástico bidimensional para prever a macroestrutura bruta de solidificação em ligas metálicas binárias. Os resultados do modelo implementado são comparados com dados disponíveis na literatura e utilizados para prever a influência de certos parâmetros na macroestrutura final.

2 – REVISÃO DE LITERATURA

2.1– Transição Colunar-Equiaxial (CET) - (Flood and Hunt,1998)

A estrutura bruta de solidificação das ligas metálicas geralmente possui uma combinação de três zonas distintas, que estão descritas a seguir:

- Uma zona coquilhada próxima à superfície do molde, composta por grãos equiaxiais relativamente pequenos, originados a partir do rápido resfriamento do líquido junto à superfície do molde;
- Uma zona colunar composta por grãos de formato alongado, alinhados na direção de maior extração de calor, com início na zona coquilhada;
- Uma zona equiaxial formada por grãos equiaxiais com um tamanho médio maior do que os grãos equiaxiais formados junto à superfície do molde.

Nem sempre todas estas zonas estão presentes mas, se o metal contiver grãos colunares e equiaxiais, a região de transição entre eles, chamada de transição colunar-equiaxial (CET), é geralmente estreita.

As propriedades de um metal estão intrinsecamente ligadas à sua macroestrutura, particularmente à estrutura de grãos. Logo, existe uma grande motivação para se predizer estas macroestruturas e a transição colunar-equiaxial.

2.2– Mecanismos para Transição Colunar-Equiaxial (CET) - (Flood and Hunt,1998)

Durante a solidificação, a transição colunar-equiaxial ocorre quando os grãos equiaxiais, crescendo à frente da zona de crescimento colunar, impõem certas condições que impedem o crescimento desta frente. A aparição da zona equiaxial é dependente da nucleação e do crescimento de pequenos núcleos de grãos durante o resfriamento. Muitos autores propuseram mecanismos que tentam explicar a aparição desta zona. Os mecanismos propostos concordam no aspecto de que o crescimento

dos núcleos dos grãos equiaxiais ocorre na região super-resfriada constitucionalmente, à frente da zona colunar. Entretanto, existem diferenças em relação aos mecanismos para a nucleação dos grãos. Estes podem ser divididos em (Flood and Hunt,1998):

- Nucleação heterogênea na zona de super-resfriamento constitucional;
- “Big bang”;
- Destacamento de braços de dendritas.

Estes mecanismos estão apresentados a seguir.

2.2.1 – Nucleação Heterogênea na Zona de Super-resfriamento Constitucional

No mecanismo de super-resfriamento constitucional, propõe-se que exista um super-resfriamento constitucional à frente da zona de crescimento colunar suficiente para que ocorra a nucleação heterogênea de grãos. Este mecanismo tem sido criticado, pois o super-resfriamento constitucional à frente da zona colunar se estabelece em um estágio inicial do resfriamento, mas a transição colunar-equiaxial somente ocorre em um estágio posterior. Chalmers (1962), citado por Flood e Hunt (1998), demonstrou por um método de isolamento mecânico do centro de um molde durante a fundição, que este mecanismo não é o único responsável pelo crescimento equiaxial.

2.2.2 – “Big Bang”

No modelo proposto por Chalmers (1962), chamado de “big bang”, a presença de grãos equiaxiais é explicada pela formação de núcleos durante o vazamento do metal em seu molde. A nucleação ocorre no líquido que é super-resfriado bruscamente junto à parede do molde. Após a formação, estes núcleos são carregados para o interior do molde pelas correntes de convecção no metal líquido e podem sobreviver até que o superaquecimento do metal líquido desapareça. A sobrevivência destes núcleos é mais provável com superaquecimentos menores.

Diferentemente da teoria do super-resfriamento constitucional, a teoria do "big-bang" utiliza os efeitos de superaquecimento e da convecção nos primeiros estágios da solidificação para explicar a formação dos grãos equiaxiais. Variações no superaquecimento e na convecção não alteram significativamente o início e a extensão do super-resfriamento constitucional, mas exercem uma considerável influência na estrutura do metal (Flood and Hunt,1998). Ao aumentar a temperatura de vazamento, há uma redução do tamanho da zona equiaxial, e ao reduzir a convecção através da introdução de um campo magnético estático, pode-se eliminar a zona equiaxial (Flood and Hunt,1998).

2.2.3 – Destacamento de Braços de Dendritas

Observou-se em soluções orgânicas que as correntes de convecção do líquido produziam um grande número de núcleos (Flood and Hunt,1998). Com isto, foi postulado que flutuações de temperatura e concentrações, causadas pelas correntes de convecção, geram flutuações na taxa de crescimento e fazem com que os braços de dendritas se destaquem do tronco dendrítico, rumando para o interior do líquido. A recalescência, tanto localmente ou por todo o molde, era tida como o principal mecanismo de destacamento de braços de dendritas. A refusão era promovida pelo aumento local da quantidade de soluto, causando uma diminuição no ponto de fusão do sólido .

O destacamento de braços de dendritas é consistente com a influência da convecção. Ao reduzir-se a convecção mediante a aplicação de um campo magnético estático, reduz-se ou elimina-se a zona equiaxial. Contrariamente, ao se aumentar a convecção pela imposição de um campo magnético alternado, promove-se a zona equiaxial, reduzindo a extensão da zona colunar.

2.3 – Modelos Estocásticos para Transição Colunar-Equiaxial

Atualmente, é muito importante que se tenha um controle da estrutura metalúrgica dos materiais fundidos. Geralmente, a presença de pequenos grãos

equiaxiais resulta em ligas de grande qualidade, com boas propriedades mecânicas. Os modelos matemáticos podem auxiliar na previsão e controle da formação da estrutura bruta de solidificação, fornecendo as condições de processamento necessárias à obtenção da estrutura desejada.

Os modelos desenvolvidos para preverem a CET são classificados em estocásticos ou determinísticos. Os modelos determinísticos são completamente baseados em equações determinísticas e não procuram simular os grãos individualmente, mas sim, de forma média. Nestes modelos, uma grande dificuldade é a escolha de um critério para determinar o bloqueio da frente colunar pelos grãos equiaxiais.

Os modelos estocásticos diferenciam-se dos determinísticos por possuírem algum tipo de variável aleatória em alguma de suas etapas de cálculo. Estes modelos acompanham a nucleação e crescimento de cada grão, simulando a macroestrutura e conseqüentemente a CET. Entretanto, o problema envolvido na criação destes modelos reside na necessidade de uma grande capacidade computacional. A primeira tentativa da criação dos modelos estocásticos baseados no método de Monte Carlo (MC) foi feita por Spittle e Brown (1989) e será descrita a seguir.

2.4 – Modelos Estocásticos Precursores

Spittle e Brown (1989) foram os precursores na criação de um modelo estocástico baseado no método de Monte Carlo (MC). Neste modelo, dividiu-se a peça fundida em pequenos triângulos eqüilaterais, os quais os autores denominaram sítios. Estes sítios representavam locais possíveis para formação dos núcleos da fase sólida. Neste modelo não se levou em conta as orientações cristalográficas, e o único mecanismo de nucleação considerado foi o “big bang”. O modelo também simulou aproximadamente o efeito de convecção no líquido. Após a verificação da condição de solidificação de um sítio, que foi selecionado de forma aleatória entre todos, o modelo realocava este sítio aleatoriamente pela peça, simulando a convecção. Na etapa de crescimento, os autores associaram uma energia à interface entre dois sítios.

O crescimento era simulado alterando o estado de um sítio de líquido para sólido com base nesta energia de interface. Entretanto, o método não permitiu a simulação de estruturas que pudessem ser comparadas com estruturas reais devido à ausência de uma relação clara entre o processo de alteração no estado de cada sítio e o tempo real. Rappaz e Gandin (1993), no intuito de sanar este problema, propuseram um novo modelo baseado na técnica de autômato celular (CA - “Cellular Automaton”).

2.5 – Modelos Autômato Celular

Rappaz e Gandin (1993) propuseram um modelo estocástico onde a peça a ser simulada era dividida em pequenos quadrados, chamados de células (CA). Os autores assumiram que cada sítio para nucleação heterogênea era formado por um tipo de substrato que possuía um super-resfriamento crítico para nucleação. Quando este super-resfriamento era ultrapassado, ocorria a formação de um núcleo. Considerando a existência de diversos tipos de substratos, foi assumido que o super-resfriamento crítico estava distribuído de acordo com uma distribuição normal em função do número de substratos. A distribuição normal é construída a partir de três valores: super-resfriamento médio (ΔT_{nuc}), desvio padrão (ΔT_σ) e densidade máxima do número de núcleos (n_{max}). Duas distribuições diferentes foram utilizadas: uma para o interior da cavidade do molde e outra para a superfície. De acordo com este modelo, o número de novos núcleos formados por unidade do volume (δn) após um decréscimo de temperatura (ΔT) é dado por:

$$\delta n = \int_{\Delta T}^{\Delta T + \delta(\Delta T)} \left[\frac{dn}{d(\Delta T)} \right] \cdot d(\Delta T) \quad [1]$$

onde o termo $dn/d(\Delta T)$ é dado pela distribuição normal abaixo

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

Desta forma, a partir do super-resfriamento, (ΔT), é possível calcular o aumento da densidade de núcleos, (δn), que multiplicado pelo volume da peça, resulta no número de núcleos que devem ser distribuídos no passo de tempo em questão. Esta distribuição ocorre de forma aleatória: primeiramente ocorre o sorteio de uma célula, depois se calcula a probabilidade desta nuclear e, em seguida, é feita uma comparação com um número aleatório para decidir se há nucleação, ou não. A orientação cristalográfica associada ao grão nucleado em uma célula é escolhida aleatoriamente entre 48 classes englobando orientações de -45° a 45° .

Os núcleos considerados sólidos crescem a cada passo de tempo e, conseqüentemente, encontram as células ao seu redor. Quando isto ocorre, estas são ativadas e crescem com a mesma orientação da célula inicial. Mas o processo não é totalmente determinístico, um núcleo pode ativar uma célula ao seu redor sem mesmo tocá-la. A cada passo de tempo, há uma probabilidade de um núcleo ativar uma célula vizinha; esta probabilidade é comparada com um número aleatório e assim, a célula pode ser ativada ou não. O processo de crescimento envolveu ainda uma correção no tamanho das células para evitar que artefatos numéricos alterassem a orientação original.

Em um trabalho posterior, Rappaz e Gandin (1994) apresentaram um modelo que consistia de uma parte macroscópica responsável pelo cálculo da transferência de calor e uma microscópica para o cálculo do crescimento, da nucleação e da liberação do calor latente de solidificação. A nucleação foi simulada através de uma distribuição gaussiana, como no modelo anterior.

A transferência de calor foi tratada através da solução numérica da equação diferencial de transferência de calor pelo método dos elementos finitos (EF), utilizando-se uma malha triangular de elementos. As etapas de crescimento e de nucleação foram tratadas por um método autômato celular (CA) semelhante ao utilizado no modelo anterior.

Neste trabalho, os autores melhoraram o método CA para modelar situações que envolviam gradientes de temperatura. Neste CA, o núcleo inicial foi um quadrado, mas as células por ele ativadas foram assumidas retangulares, como mostrado na Fig. 1. Observa-se que este processo mantém a orientação original do grão sem a necessidade de constantes correções, como era o caso do modelo anterior (Rappaz e Gandin, 1993).

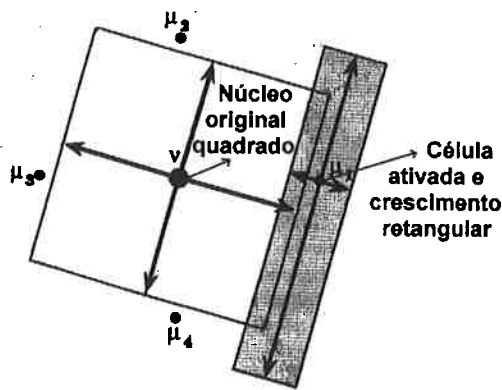


Figura 1 – Modelo de CA onde o crescimento é retangular.

Neste tipo de modelo, deve haver um acoplamento onde a parte microscópica (CA) recebe informações da parte macroscópica (EF). A parte microscópica utiliza a variação de entalpia calculada pela parte macroscópica para calcular a variação na fração de sólido. Esta variação na fração de sólido é retornada para a parte macroscópica para que a liberação de calor latente e a temperatura possam ser calculadas. A equação abaixo mostra a equação utilizada na parte macroscópica para o cálculo da temperatura (T_{FE}) a partir da variação de entalpia (δH_{FE}) e da variação na fração de sólido (δf_s):

$$\delta H_{FE} = \rho \cdot Cp \cdot \delta T_{FE} - \Delta H_f \cdot \rho \cdot \delta f_s \quad [3]$$

onde ΔH_f é o calor latente de fusão, ρ é a densidade e Cp é o calor específico.

Primeiramente, o novo modelo foi testado e certificado quanto a sua capacidade de simular o crescimento de um envelope dendrítico; posteriormente, foram feitas algumas simulações e, ao compará-las com experimentos realizados, os autores obtiveram uma boa aderência.

Rappaz e Gandin (1997) estenderam este modelo, implementado em duas dimensões, para simulações em três dimensões. As características deste modelo são iguais às do anterior; somente há uma modificação na técnica de autômato celular. Neste CA, todos os núcleos crescem em forma de quadrado, mas somente o núcleo inicial possui o seu centro localizado no centro de sua célula. As células vão sendo ativadas e os quadrados são arranjados para manter a orientação do núcleo inicial (Fig. 2). O modelo foi testado em condições de temperaturas uniformes para examinar e validar o novo método de crescimento.

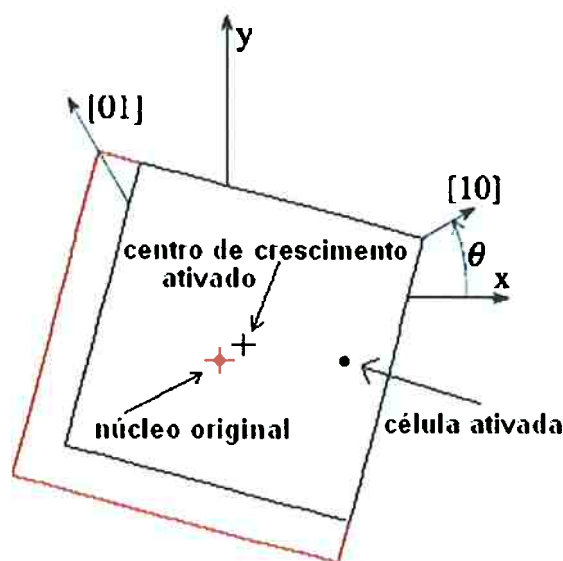


Figura 2 – Modelo de CA onde o núcleo não está centrado na célula.

No modelo criado por Cho, Okane e Umeda (2001), a nucleação também segue uma distribuição gaussiana, que apresenta parâmetros diferentes para regiões adjacentes à parede do molde e no interior de sua cavidade. A transferência de calor (parte macroscópica) foi simulada pelo método das diferenças finitas "diretas" (DFD) e o crescimento dos grãos pela técnica autômato celular, como conduzido por Rappaz

e Gandin (1994). Os autores (2001) denominam o modelo de CA-DFD. Diversos testes foram feitos mediante a variação dos parâmetros de nucleação para se analisar a influência na estrutura final.

Através das simulações foram analisados os efeitos dos seguintes parâmetros que definem a distribuição normal para a nucleação: (a) a densidade de núcleos n_{\max} ; (b) o desvio padrão do super-resfriamento ΔT_{σ} e (c) o super-resfriamento médio ΔT_{nuc} . Os resultados indicaram que:

- Um aumento na densidade de núcleos na superfície aumenta o número de grãos colunares, porém não afeta os grãos equiaxiais;
- Um aumento na densidade de núcleos no interior do molde aumenta o número de grãos e, conseqüentemente, menor será o tamanho destes;
- Os grãos colunares são formados na superfície, mas também no interior do molde, evidenciado pelo parâmetro de super-resfriamento médio na superfície;
- Um aumento no super-resfriamento médio no interior do molde torna a transição colunar-equiaxial mais rápida;
- O desvio padrão do super-resfriamento na superfície não realiza grande influência sobre a microestrutura;
- O desvio padrão do super-resfriamento no interior do molde exerce influências no comprimento da zona equiaxial, no tamanho dos grãos equiaxiais e na homogeneidade destes.

2.6 – Modelos Autômato Celular Modificados

Nos últimos anos, diversos modelos baseados na técnica do autômato celular foram propostos. No entanto, estes modelos apresentaram algumas características em comum, porém distintas dos modelos mais antigos. Nos modelos mais recentes, simularam-se fenômenos que ocorrem na escala de tamanho da distância entre os braços de dendrita, enquanto nos modelos antigos simulavam-se fenômenos com escalas de tamanho da ordem do tamanho de grão.

Zhu e Hong (2001) propuseram um modelo do tipo autômato celular modificado onde a redistribuição de soluto foi considerada, simulando-se a difusão de soluto no líquido e no sólido. Não há considerações quanto à transferência convectiva de massa. O super-resfriamento, diferentemente de Cho, Okane e Umeda (2001), não foi calculado no centro da célula, e sim, na ponta da dendrita, levando-se em conta sua curvatura.

A parte macroscópica, ou seja, a parte responsável pela transferência de calor, foi calculada através do método dos volumes finitos (volumes quadrados). Este modelo é tão refinado que consegue reproduzir o aparecimento de braços de dendritas juntamente com a previsão dos grãos, que são normalmente previstos pelos modelos antigos. Testes foram realizados para comparar as estruturas simuladas com as estruturas obtidas experimentalmente, apresentando uma boa aderência.

3 – MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 – Modelo Matemático

O modelo implementado no presente trabalho foi baseado no modelo proposto por Rappaz e Gandin (1997). A principal modificação introduzida foi a utilização do método dos volumes finitos, em lugar do método dos elementos finitos, para resolução numérica da equação de condução de calor, como será descrito posteriormente. Analogamente a Rappaz e Gandin (1997), o modelo foi dividido em duas partes: um submodelo macroscópico, responsável pelo cálculo da transferência de calor, e um submodelo microscópico, responsável pelo cálculo da microestrutura, havendo assim a necessidade de um acoplamento posterior entre os submodelos.

3.2 – Submodelo Macroscópico

No submodelo macroscópico, utilizado para a transferência de calor, foi solucionada a equação de conservação de energia em coordenadas retangulares, considerando o fluxo de calor nas duas dimensões (x;y), como mostrado abaixo:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad [4]$$

Esta equação diferencial foi solucionado em um domínio retangular que estava em contato com paredes isolantes em suas laterais e no contorno superior e com uma base refrigerada a água no contorno inferior. As seguintes condições de contorno podem ser utilizadas para simular esta situação :

$$q=0 \quad \text{condições adiabáticas} \quad [5]$$

$$q=h(T_{\text{molde}}-T) \quad \text{molde/metal} \quad [6]$$

onde q é o fluxo de calor saindo através dos contornos do domínio; h é o coeficiente de transferência de calor na interface metal-molde; T_{molde} é a temperatura do molde e T é a temperatura da superfície do domínio.

A condição de contorno representada pela Eq. [5] foi utilizada nas duas paredes laterais e na superfície superior do domínio (interface metal-parede lateral e metal-ambiente), enquanto a condição representada na Eq. [6] foi utilizada na superfície inferior (interface metal-base refrigerada).

A equação [4] foi discretizada utilizando-se o método numérico dos volumes finitos, com uma formulação explícita (Patankar,1980), resultando na equação algébrica a seguir:

$$\delta H_{VF}^{t+\delta t} = \left(a_E T_E^t + a_W T_W^t + a_N T_N^t + a_S T_S^t + [-a_E - a_W - a_S - a_N] \cdot T_P^t \right) \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x \cdot \Delta y} \quad [7]$$

onde

$$\begin{aligned} a_E &= \frac{K_E \Delta y}{(\delta x)_E} & a_W &= \frac{K_W \Delta y}{(\delta x)_W} \\ a_N &= \frac{K_N \Delta x}{(\delta y)_N} & a_S &= \frac{K_S \Delta x}{(\delta y)_S} \end{aligned}$$

sendo que, Δx e Δy representam as dimensões de um volume finito, K a condutividade térmica, δx e δy as distâncias entre os centros dos volumes finitos e Δt o passo de tempo.

Ao se utilizar o método explícito, deve-se obedecer a um critério de estabilidade, que impõe um limite máximo para o passo de tempo utilizado, como mostrado abaixo:

$$\Delta t < \frac{\rho C p (\Delta x)^2}{K_E + K_W + K_N + K_S} \quad \text{para} \quad \Delta x = \Delta y = \delta x = \delta y$$

Isto limita o passo de tempo (Δt) que poderá ser usado na simulação. Neste caso, utilizou-se um volume de controle quadrado e, com isso, as dimensões Δx e Δy são iguais, como mostra a Fig. 3.

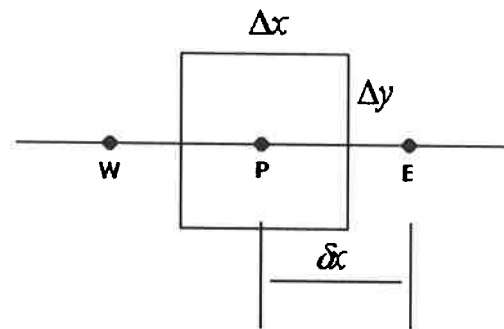


Figura 3 – Representação esquemática de um Volume Finito.

Através do método dos volumes finitos (VF), calculou-se a entalpia no instante $t + \delta t$ a partir das temperaturas no instante t através da equação [7], escrita para cada volume da malha.

3.3 – Submodelo Microscópico

No submodelo microscópico, o domínio foi subdividido em pequenas células quadradas com o intuito de simular a macroestrutura, a nucleação heterogênea e o crescimento de grão. Primeiramente, ocorre a nucleação da célula e esta passa a simular o crescimento do envelope dendrítico. Este primeiro envelope tem o seu centro coincidente com o da célula. Cada célula nucleada possui uma orientação que é dada pelo ângulo entre as direções cristalográficas [10] e [01] e o eixo x. Este ângulo pode variar entre -45° e 45° .

Após a nucleação, as células são atualizadas passo a passo, a fim de simular o crescimento do envelope. O crescimento da metade do lado de cada envelope (direção [11]) é calculado de acordo com:

$$L_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \int_t^{t+\delta t} v[\Delta T_i(\tau)] d\tau \quad [8]$$

onde L representa o lado da célula, indicado na Fig. 4 e, v , a velocidade de crescimento da ponta da dendrita, que é função do super-resfriamento local, ΔT , calculado no centro da célula em questão. Este, por sua vez, também é dependente do tempo.

Inevitavelmente esta célula encontrará uma de suas quatro vizinhas, podendo ocorrer entre um passo de tempo e outro. Quando isto acontece, a célula que foi tocada é então ativada e recebe a orientação da célula que lhe ativou. Esta nova célula passa a crescer com o super-resfriamento calculado no seu centro (Fig. 4).

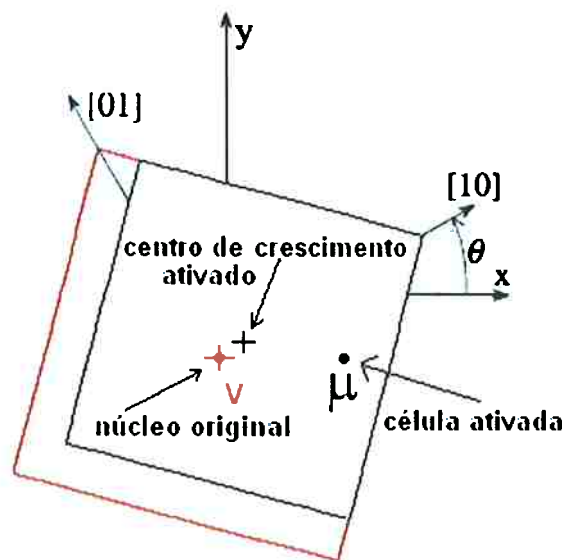


Figura 4 – Representação do crescimento celular descentrado. A célula inicial (v) ativou a sua vizinha (μ), e esta tem o seu envelope descentrado em relação à sua célula.

Ao se utilizar este modo de crescimento, todos os novos envelopes teriam o seu centro na primeira célula nucleada e seriam cada vez maiores. Isto traria um problema, pois por estes envelopes serem tão grandes, poderiam ativar células que seriam capturadas por outras. Para se evitar este problema, Rappaz e Gandin (1997) resolveram truncar as células; com isso, o máximo valor que o meio lado de um envelope pode assumir é dado por:

$$L_i = \frac{1}{2} \left[\text{Min}(L_{i[11]}, \sqrt{2} \cdot l) + \text{Min}(L_{i[11]}, \sqrt{2} \cdot l) \right] \quad [9]$$

sendo $L_{i[11]}$ e $L_{i[11]}$ distâncias, definidas no tempo da captura, entre o centro da célula e o lado do envelope dendrítico.

Uma vez que se conheça a distância definida por L_i , um envelope com um tamanho de $2L_i$ é posicionado na nova célula, de forma que a aresta do novo envelope coincida com a aresta mais próxima do envelope que a ativou (Fig. 4). Deste modo, o centro do novo envelope não terá necessariamente o seu centro coincidente com o centro de sua célula. Assim, as células são atualizadas a cada passo de tempo, até que uma célula tenha ativado as quatro células ao seu redor ativadas. Nesta situação, esta célula será desativada e seu crescimento não mais será atualizado.

3.3.1 – Velocidade de Crescimento

A velocidade de crescimento da ponta da dendrita, v , utilizada no subitem anterior foi calculada utilizando-se equações semelhantes às empregadas por Rappaz e Gandin (1994). Esta velocidade foi calculada por:

$$v(\Delta T) = a_2 \times \Delta T^2 + a_3 \times \Delta T^3 \quad [10]$$

onde $v(\Delta T)$ representa a velocidade de crescimento da ponta da dendrita ou da parede do grão; ΔT é o super-resfriamento calculado no centro da célula.

3.3.2 – Nucleação

A nucleação é do tipo heterogênea e é tratada utilizando-se duas distribuições normais: uma para a parede interna do molde e outra para a sua cavidade. A seguinte equação foi utilizada para calcular a formação de núcleos (n) com o aumento do super-resfriamento do líquido (ΔT):

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

onde n_{\max} representa o número máximo de substratos, ΔT_{nuc} define o valor médio do super-resfriamento para nucleações e ΔT_{σ} define o desvio padrão. Portanto, a nucleação foi definida por seis valores, sendo três para a superfície e três para o interior do molde.

Logo, a densidade de núcleos presente para um líquido com um super-resfriamento ΔT foi dada por:

$$n_s(\Delta T) = \int_0^{\Delta T} \left[\frac{dn}{d(\Delta T')} \right] \cdot d(\Delta T') \quad [12]$$

No início da simulação foi escolhida uma célula aleatoriamente e foi sorteado um super-resfriamento para nucleação, segundo a distribuição normal. Este passo foi repetido até que o número de máximo de núcleos fosse atingido. Se durante este procedimento a célula escolhida já contivesse um valor de super-resfriamento para nucleação, comparava-se com o atual e o de menor valor seria atribuído.

Durante a simulação, as células eram verificadas quanto à nucleação; se o super-resfriamento no centro de uma célula fosse maior do que o seu super-resfriamento para nucleação, esta deveria ser ativada. Para isso, atribuiu-se uma orientação escolhida aleatoriamente entre 48 classes na faixa de -45° a 45° .

3.4 – Acoplamento entre Submodelos Macroscópico e Microscópico

Um acoplamento entre os submodelos macroscópico e microscópico foi realizado para possibilitar o cálculo do campo de temperaturas e do crescimento dos envelopes dendríticos. Neste acoplamento, o submodelo macroscópico forneceu a variação de entalpia do volume finito (obtida através da resolução da Eq. [7]) para o submodelo microscópico. Como existiam diversas células do submodelo microscópico no interior de um volume finito, a variação de entalpia foi interpolada para cada célula a partir das variações nos volumes finitos. A fração de sólido no próximo instante de tempo do método numérico ($f_s^{t+\delta t}$) foi calculada para cada célula utilizando-se a variação de entalpia (δH_{CA}) interpolada anteriormente. Este cálculo foi realizado através da equação abaixo:

$$\delta H_{CA} = \rho \cdot Cp [T^{t+\delta t} - T^t] - \Delta H_f \cdot \rho [f_s^{t+\delta t} - f_s^t] \quad [13]$$

Como a temperatura no instante de tempo $t + \delta t$ ($T^{t+\delta t}$) era desconhecida, uma relação entre $T^{t+\delta t}$ e $f_s^{t+\delta t}$ foi fornecida para que se pudesse solucionar a equação [13]. Esta relação foi obtida através do modelo de Scheil (1989), apresentado abaixo:

$$f_s = 1 - \left(\frac{T_f - T}{T_f - T_{liq}} \right)^{\frac{1}{(k-1)}} \quad [14]$$

Substituindo-se esta relação na Eq. [13], finalmente obteve-se a equação para o cálculo da variação da fração de sólido indicada abaixo:

$$\delta f_{s,CA}^{t+\Delta t} = \frac{-\delta H_{CA}^{t+\Delta t}}{\rho \cdot Cp \cdot (T_L - T_f) \cdot (k-1) \cdot \left[1 - f_{s,CA}^t\right]^{(k-2)} + \Delta H_f \cdot \rho} \quad [15]$$

onde $\delta f_{s,CA}^{t+\Delta t}$ representa a variação na fração de sólido, $\delta H_{CA}^{t+\Delta t}$ a variação da entalpia e k o coeficiente de partição.

A fração de sólido foi atualizada após cada passo de tempo até que se atingiu a temperatura do eutético. Se neste ponto a fração de sólido ainda fosse menor que 1, fazia-se uma transformação isotérmica, ($\Delta T_{CA} = 0$), utilizando-se a Eq. [13], até que a fração de sólido se igualasse a 1. Com isso obteve-se:

$$\delta f_{s,CA}^{t+\Delta t} = \frac{\delta H_{CA}^{t+\Delta t}}{\Delta H_f \rho} \quad [16]$$

A contribuição de calor latente de todas as células associadas a um volume finito foi calculada pela Eq. [17], e este valor foi utilizado no submodelo macroscópico (VF) para o cálculo das temperaturas.

$$\delta f_{s,VF} = \frac{\sum \delta f_{s,CA}}{n_{CA}} \quad [17]$$

3.5 – Seqüência de Execução dos Passos do Modelo

O modelo é executado através da seguinte seqüência de passos, que é descrita abaixo:

- a) Todos os substratos são distribuídos aleatoriamente pelas células segundo os parâmetros de nucleação;
- b) Os volumes finitos têm a sua temperatura inicial igualada à temperatura de vazamento do metal líquido;
- c) A fração de sólido de todas as células é igualada a zero;

- d) Calcula-se, através do submodelo macroscópico, a variação de entalpia de todos os volumes finitos;
- e) Atualiza-se o crescimento de todas as células, através do submodelo microscópico;
- f) Verifica-se a nucleação e atualiza-se a fração de sólido;
- g) Calcula-se a variação da entalpia de cada célula por interpolação linear a partir da variação de entalpia dos volumes finitos;
- h) A partir da variação da fração de sólido de cada célula, calcula-se a variação da fração de sólido do volume finito;
- i) Tendo a variação da fração de sólido para cada volume finito, atualiza-se a temperatura no instante posterior para todos os volumes finitos;
- j) Considera-se a temperatura do instante posterior como sendo a atual e começa-se um novo passo de tempo com o submodelo macroscópico, calculando a variação de entalpia;
- k) Retorna-se ao subitem d) se o tempo de simulação for menor do que o tempo total desejado.

4 – RESULTADOS E DISCUSSÃO

O modelo implementado no presente trabalho foi utilizado para quatro tipos de simulações, a saber: (1) simulações para aferição; (2) simulações para análise paramétrica e (3) simulações para análise do acoplamento entre os modelos micro e macroscópicos. Nas simulações para aferição foram inicialmente tratados casos para os quais existem resultados de outros modelos disponíveis na literatura. Posteriormente, simulou-se uma situação para a qual os dados experimentais estavam disponíveis. Na análise paramétrica, algumas situações hipotéticas foram simuladas para mostrar como certas variáveis importantes de processamento afetam a macroestrutura de grãos fornecida pelo modelo. Finalmente, na análise do acoplamento, examinou-se o perfil de fração de sólido fornecido pelo modelo em diversas situações.

4.1 – Aferição do Modelo

4.1.1 – Aferição do Submodelo Macroscópico

O submodelo macroscópico consistiu basicamente da resolução da equação diferencial para a condução de calor, Eq. [4]. Para a sua aferição, simulou-se a condução de calor no domínio bidimensional apresentado na Fig. 5. Este problema foi modelado pela equação diferencial e condições de contorno e inicial a seguir:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad [18]$$

onde $\alpha = K/\rho C_p$

Condição inicial:

$$\text{para } t=0 \quad \rightarrow \quad T = T_i$$

Condições de Contorno:

$$\text{para } x = L \rightarrow -K \frac{\partial T}{\partial x} = h(T - T_{\infty})$$

$$\text{para } x = 0 \rightarrow \frac{\partial T}{\partial x} = 0$$

$$\text{para } y = L \rightarrow -K \frac{\partial T}{\partial y} = h(T - T_{\infty})$$

$$\text{para } y = 0 \rightarrow \frac{\partial T}{\partial y} = 0$$

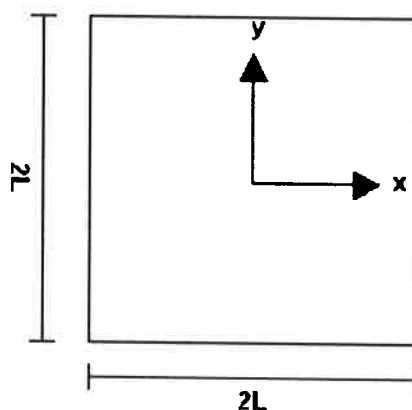


Figura 5 – Domínio e sistema de coordenadas utilizados para simular a condução de calor.

As propriedades termofísicas e parâmetros empregados no método numérico e condições de contorno estão apresentados na Tabela I.

Tabela I –Dados utilizados no problema de condução.

Parâmetro		Propriedade	
Número de Nós da Malha Numérica	101x101	ρ (Kg/m ³)	2452
Lado do Domínio Quadrado - L (m)	0.10	K (W/m.K)	176
Passo de tempo - δt (s)	0.001	H (W/m ² .K)	1000
Temperatura inicial - Ti (K)	1019	Cp (J/Kg.K)	1126
Temperatura do molde - T_{∞} (K)	298		

Foram examinados os resultados do modelo relativos às temperaturas de três posições distintas, sendo elas: $0.05 \times 0.05\text{m}$, $0.05 \times 0.00\text{m}$ e $0.10 \times 0.10\text{m}$, onde o primeiro número indica a coordenada x e o segundo, a coordenada y . As curvas de temperatura estão apresentadas em função do tempo na Fig. 6.

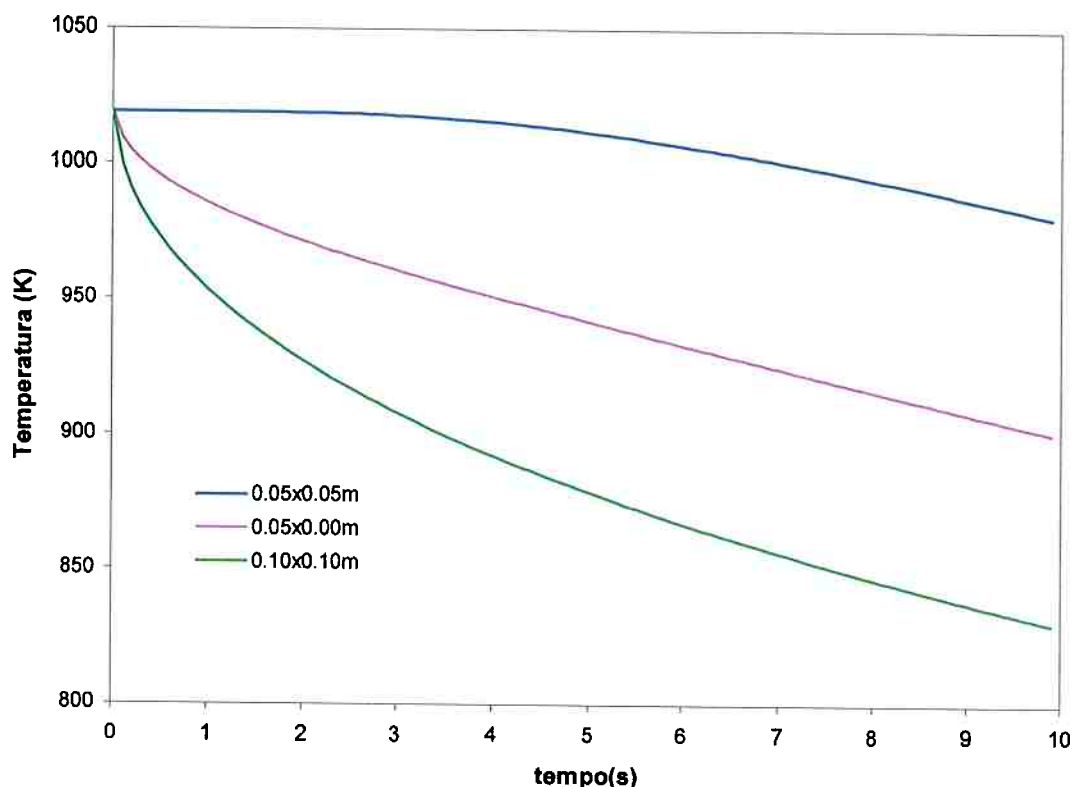


Figura 6 – Temperatura em função do tempo para três posições.

Os dados da Fig. 6 foram comparados com os resultados de uma solução analítica obtida na literatura para o mesmo problema (Poirier e Geiger, 1994).

Para verificar se a solução numérica apresentava convergência para a solução analítica, foram feitas três simulações com passos de tempo cada vez menores: 0.001, 0.0001 e 0.00001s. Em cada caso, foram calculados os erros quadráticos entre as curvas de temperatura calculadas pelo modelo e aquelas calculadas pela solução analítica. O erro quadrático total em função do passo de tempo do método numérico está apresentado na Fig. 7.

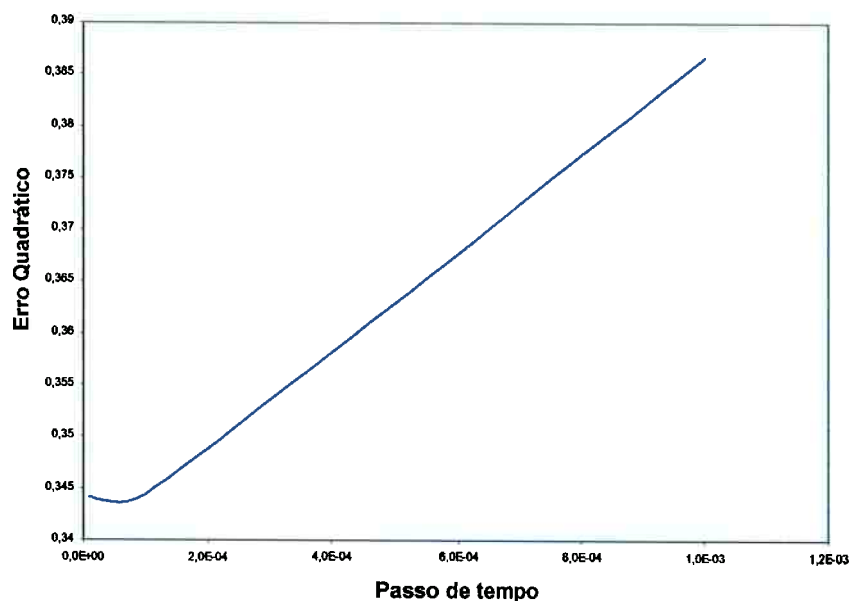


Figura 7 – Erro quadrático entre as soluções numéricas e analíticas em função do passo de tempo utilizado no método numérico.

Como se pode observar, o erro quadrático decresceu monotonicamente com a diminuição do passo de tempo, indicando que a solução numérica está convergindo para a solução analítica. Nota-se uma pequena tendência à ascensão do erro quadrático abaixo de um dado passo de tempo, o que provavelmente resulta do aumento nos erros de arredondamento devido ao aumento do número de operações necessárias com menores passos de tempo. Após estas comparações, o modelo de transferência de calor foi aceito como correto, pois apresentou-se muito próximo à solução analítica.

4.1.2 – Aferição do Submodelo Microscópico - Crescimento

O algoritmo de crescimento dos envelopes dendríticos, implementado no submodelo microscópico, foi examinado separadamente. Este algoritmo deve simular o crescimento de um envelope dendrítico sem que ocorra sua rotação no decorrer do tempo. Para verificar esta condição, foram refeitos os testes realizados por Rappaz e Gandin (1994). Estes testes consistem em colocar um núcleo quadrado (envelope

dendrítico) no centro de um domínio bidimensional quadrado e verificar o seu crescimento em um campo de temperaturas dado pela equação abaixo:

$$|v_L| = \left| \dot{T} \right| \cdot G^{-1} \quad [19]$$

onde v_L representa a velocidade da isoterma líquida, \dot{T} a taxa de resfriamento e G o gradiente de temperatura. Os valores utilizados na Eq. [20] estão apresentados na Tabela II.

Tabela II – Dados referentes aos testes de crescimento realizados por Rappaz e Gandin (1994).

Parâmetro	Teste A	Teste B	Teste C
G (G/m)	0	250	500
\dot{T} (K/s)	-0.01	-0.01	-0.01
v_L (m/s)	0.0001	0.0001	0.0001

Comparando-se os resultados obtidos por Rappaz e Gandin (1994) e os dados resultantes da simulação, representados nas Fig. 8 e 9 respectivamente, é possível concluir que os modelos tiveram o mesmo comportamento sob as circunstâncias descritas anteriormente.

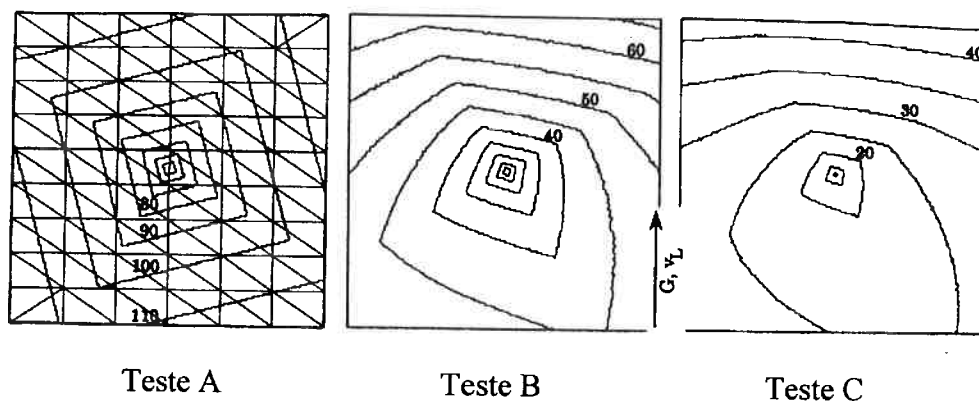


Figura 8 – Formatos do envelope dendrítico obtidos por Rappaz e Gandin (1994) para diversos instantes de tempo (indicados em segundos) durante o crescimento.

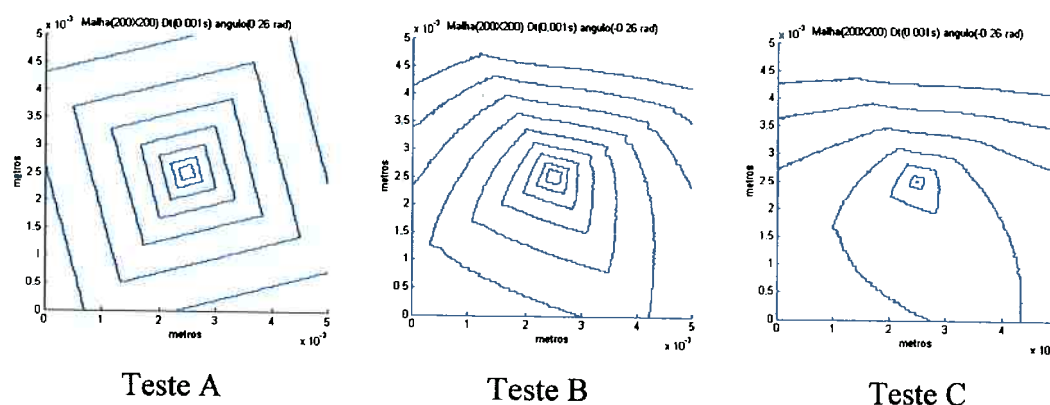


Figura 9 – Formatos do envelope dendrítico durante o crescimento obtidos pelo modelo implementado para os mesmos instantes de tempo indicados na Fig. 8.

Pode-se observar que o crescimento em um campo uniforme (Teste A) é simétrico, e não há nenhuma alteração na orientação do envelope. Na presença de um gradiente de temperatura, o envelope cresce mais rapidamente nas regiões onde a diminuição de temperatura é maior. Estes resultados mostram que o algoritmo implementado para o crescimento dos envelopes está funcionando corretamente.

4.1.3 – Aferição do Submodelo Microscópico - Nucleação e Crescimento

Após a aferição dos aspectos de crescimento, o próximo passo foi a validação do modelo quanto à nucleação. Esta aferição foi feita mediante a comparação com os resultados apresentados no trabalho realizado por Rappaz e Gandin (1993). O teste consistiu em variar os parâmetros de nucleação, definindo-se diversos casos, e verificar a evolução dos grãos com o tempo em cada caso, observando-se a transição colunar-equiaxial.

Nos testes, primeiramente os substratos para a nucleação heterogênea foram distribuídos por todo o domínio. Como descrito na metodologia, a cada substrato foi associado um super-resfriamento crítico para a nucleação através de uma distribuição normal caracterizada por três parâmetros. Estes parâmetros estão apresentados na Tabela III para a nucleação no contorno (S) e para a nucleação no interior do domínio (V). O contorno do domínio pode ser entendido como a superfície interna da cavidade de um molde de fundição. Após distribuir os substratos, o campo de

temperaturas foi assumido isotérmico, porém variável com o tempo, segundo as taxas de resfriamento mostrados na Tabela III. A partir daí, simulou-se o crescimento dos grãos e verificou-se a influência dos parâmetros de nucleação na transição colunar-equiaxial. As simulações foram feitas para tempos diferentes e, deste modo, pôde-se acompanhar a evolução destas estruturas com relação ao tempo.

Tabela III – Dados utilizados na simulação isotérmica: são apresentados os parâmetros utilizados para a nucleação no contorno (S) e no interior do domínio (V), a composição média (C_0) e a malha de células do método CA.

	$\Delta T_{S,nuc}$ [K]	$\Delta T_{S,\sigma}$ [K]	$n_{S,max}$ [m ⁻²]	$\Delta T_{V,nuc}$ [K]	$\Delta T_{V,\sigma}$ [K]	$n_{V,max}$ [m ⁻³]	\dot{T} [K/s]	C_0 [%Si]	Malha
Teste 1	0.5	0.1	2.5×10^8	10.5	0.1	5.5×10^{10}	-2.3	7	300x300
Teste 2	0.5	0.1	2.5×10^8	8.0	0.1	5.5×10^{10}	-2.3	7	300x300
Teste 3	0.5	0.1	2.5×10^8	6.0	0.1	5.5×10^{10}	-2.3	7	300x300

Os resultados simulados no presente trabalho e os fornecidos por Rappaz e Gandin (1993) estão apresentados nas Figuras 10, 11 e 12. Rappaz e Gandin (1993) não informaram os instantes de tempo durante a solidificação associados a cada macrografia fornecida. Portanto, há uma pequena diferença entre as macrografias que mostram a evolução dos grãos simuladas por estes autores e aquelas simuladas no presente trabalho. Entretanto, as macrografias finais podem ser comparadas pois são independentes do tempo.

No teste 1, apresentado na Fig. 10, as micrografias representam uma solidificação após 3.5, 5.0 e 5.5s, respectivamente.

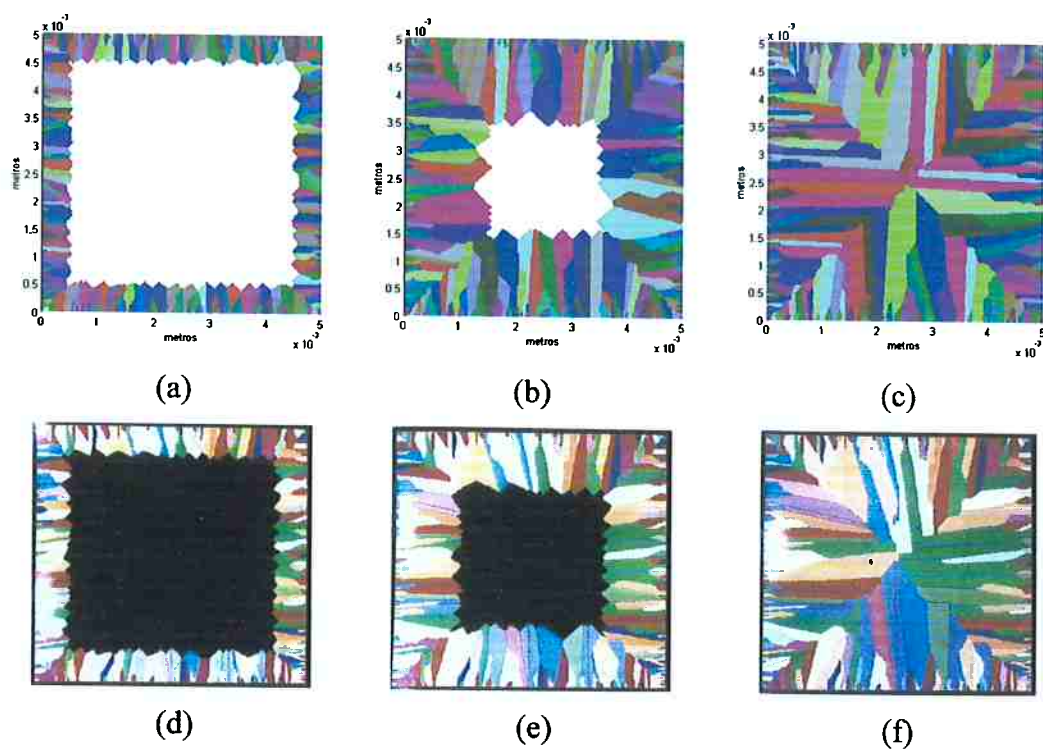


Figura 10 – Micrografias referentes ao Teste 1. Simulações realizadas pelo presente modelo nos instantes (a) 3.5s; (b) 4.5s e (c) 5.5s. Simulações realizadas por Rappaz e Gandin (1993): (d), (e) e (f).

Neste primeiro teste, há somente grãos colunares. Para a realização do segundo teste, os parâmetros de nucleação foram alterados de forma a apresentar uma transição colunar-equiaxial (CET). O resultado está representado na Fig. 11.

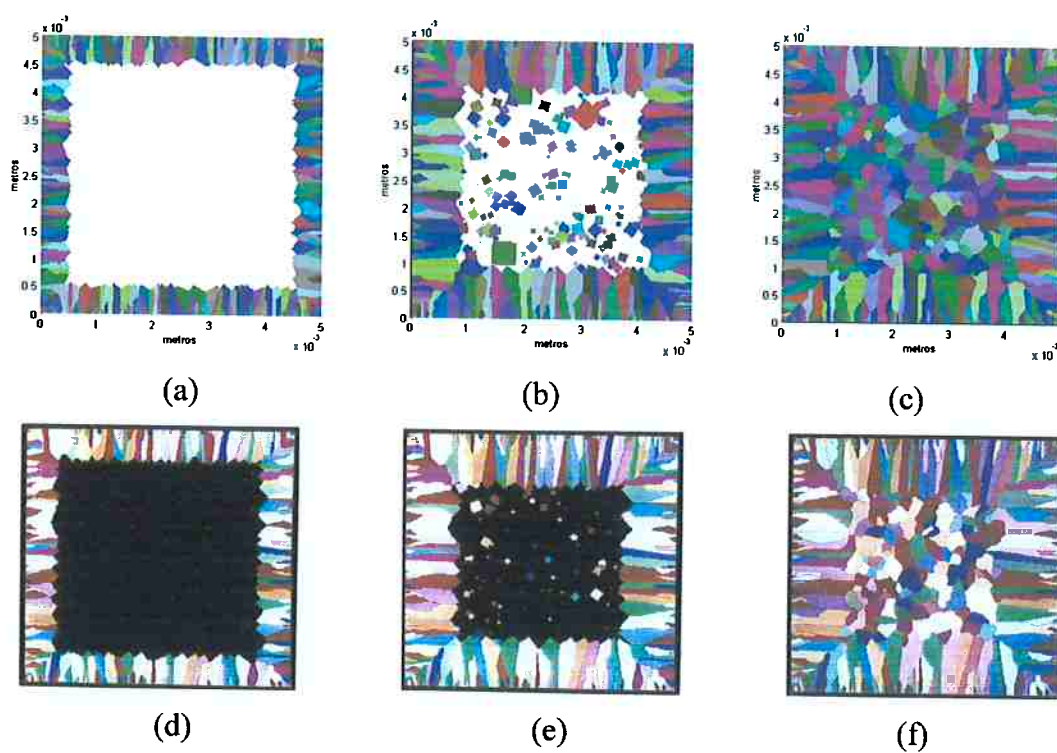


Figura 11 – Micrografias referentes ao Teste 2. Simulações realizadas pelo presente modelo nos instantes (a) 3.5s; (b) 4.0s e (c) 4.5s. Simulações realizadas por Rappaz e Gandin (1993): (d), (e) e (f).

No último teste (Teste 3) a posição da CET foi alterada, observando-se uma diminuição da extensão da zona colunar; o que pode ser visto na Fig. 12.

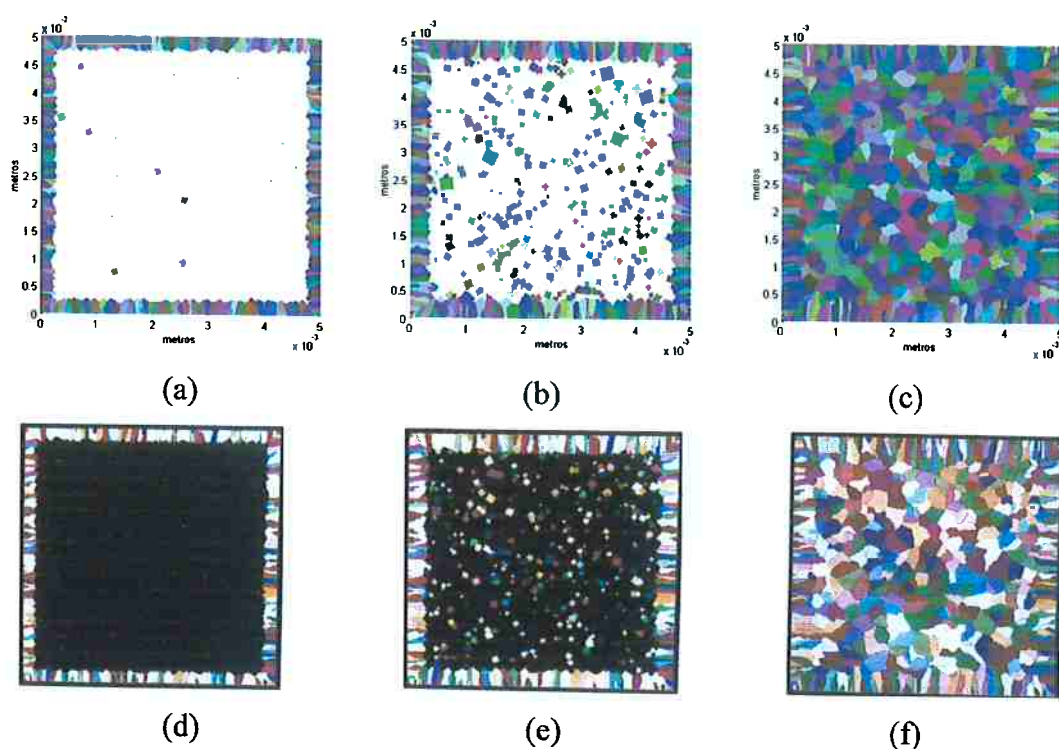


Figura 12 – Micrografias referentes ao Teste 3. Simulações realizadas pelo presente modelo nos instantes (a) 3.0s; (b) 3.2s e (c) 3.7s. Simulações realizadas por Rappaz e Gandin (1993): (d), (e) e (f).

A macroestrutura mostrou-se muito sensível às variações do $(\Delta T_{V,nuc})$ super-resfriamento médio para nucleação no interior do volume. Com a diminuição deste parâmetro, diminuiu-se o super-resfriamento crítico para nucleação dos substratos, o que resultou em um aumento na taxa de nucleação. Com o aumento desta, houve uma conseqüente diminuição da zona colunar.

O teste comprovou a funcionalidade do submodelo microscópico de nucleação e crescimento, pois as estruturas mostraram-se semelhantes às simuladas por Rappaz e A. Gandin (1993).

4.1.4 – Aferição com Resultados Experimentais

Após a validação individual dos submodelos micro e macroscópicos, o último passo foi a validação do modelo completo mediante a comparação de seus

resultados com dados de um experimento realizado por Rappaz e Gandin (1994). Este experimento consistiu na fundição de um cilindro metálico com composição Al-7wt% Si. As condições de fundição foram muito bem controladas, ocorrendo extração de calor somente pela parte inferior do molde e minimizando-se a convecção. A evolução das temperaturas em função do tempo, medida por sete termopares inseridos no interior do metal, foi fornecida pelos autores (Rappaz e Gandin, 1994). Estas curvas serão utilizadas para comparação com os resultados do presente modelo.

Para a simulação e posterior comparação com este experimento, foi necessário estimar a condição de extração de calor na parte inferior do molde, pois esta informação não foi fornecida por Rappaz e Gandin (1994). Desta forma, utilizando as curvas experimentais dos autores, o fluxo de calor extraído no contorno inferior foi ajustado no modelo para que as curvas calculadas fossem aproximadas das curvas medidas. Esta técnica é conhecida como solução inversa da equação de condução de calor.

Segundo a técnica de solução inversa, a partir das curvas de temperaturas medidas, calculou-se o fluxo entre o metal e o molde da seguinte maneira: primeiramente utilizaram-se os dados referentes a dois termopares mais próximos do contorno inferior (situados a 20 e 40 mm do contorno), e calculou-se o fluxo entre eles. A partir deste dado, extrapolou-se o fluxo para a superfície com a utilização de uma função dependente do tempo. Ajustou-se os coeficientes da função para que as curvas de temperaturas simuladas se aproximassem das curvas medidas e o resultado final foi a expressão apresentada a seguir:

$$\text{Para } t < 190\text{s} \quad q \text{ (W/m}^2\text{)} = -0.014 * t^3 + 1.75 * t^2 - 25.0 * t + 800.0 \quad [20]$$

$$\text{Para } t \geq 190\text{s} \quad q \text{ (W/m}^2\text{)} = \frac{5 * 10^{15}}{(t - 80)^5} - \frac{32667510}{(t - 80)} - 123600 \quad [21]$$

O fluxo entre o metal e o molde, saindo pelo contorno inferior, está apresentado na figura abaixo:

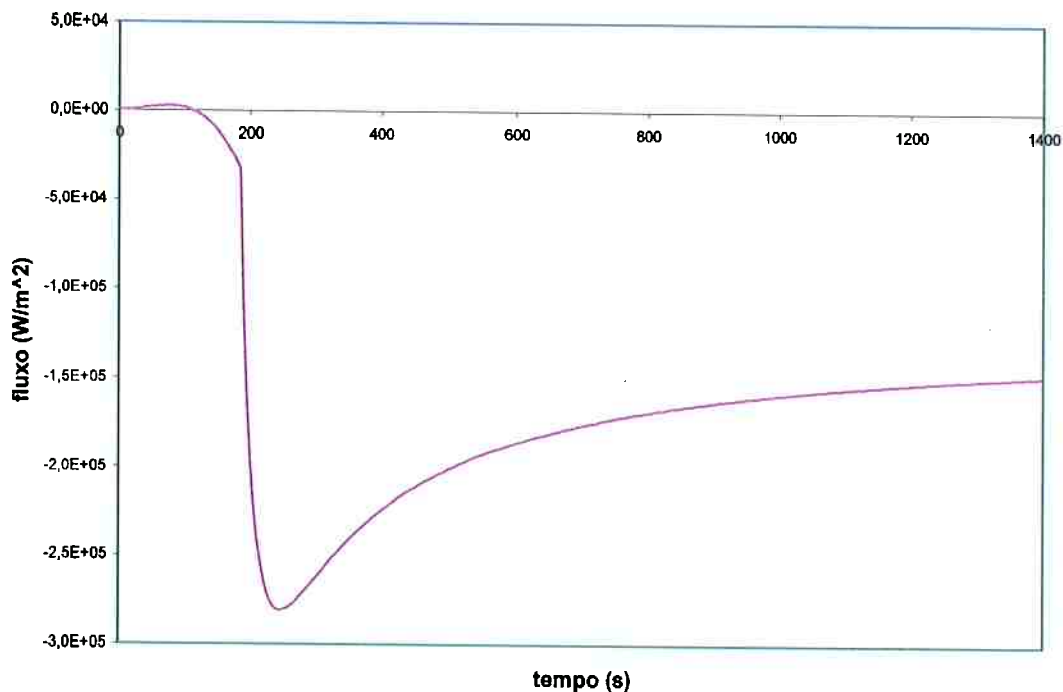


Figura 13 – Fluxo de calor na base do cilindro em função do tempo obtido através da solução inversa da equação de condução de calor.

A curva apresenta um aumento inicial do fluxo do molde para o metal (fluxo >0), situação que não deveria acontecer já que no experimento realizado por Gandin (2000) a base posicionada junto ao contorno inferior só poderia extrair calor. Este erro provavelmente está relacionado com a precisão dos termopares e com a parametrização deste fluxo. Após este aumento, há uma queda brusca e o fluxo se inverte (fluxo <0), ou seja, representando uma extração de calor do metal, como esperado.

Após a definição das equações que representam o fluxo, foi realizada a simulação da macroestrutura e a uma comparação com a macroestrutura experimental. Os resultados da estrutura estão apresentados na Fig. 14.

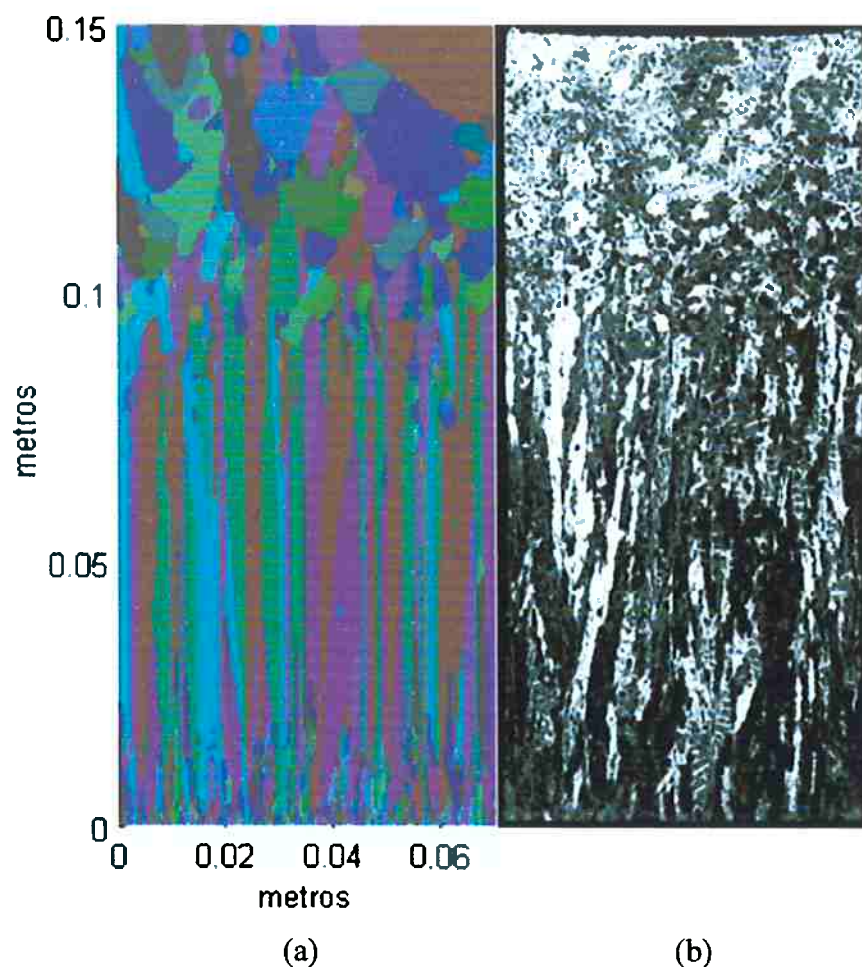


Figura 14 – Comparação entre a simulação (a), e a macrografia resultante do experimento (b) realizado por Rappaz e Gandin (1994).

Pode-se perceber pela Fig. 14, que o modelo consegue uma boa previsão da CET, que ocorreu por volta de 0,11m, tanto no modelo quanto no experimento.

Nesta mesma simulação, obtiveram-se as curvas de resfriamento nos mesmos locais onde as curvas experimentais foram medidas. Desta forma, comparou-se também a evolução das temperaturas calculadas pelo modelo com os dados do experimento, estando isso representado na Fig. 15.

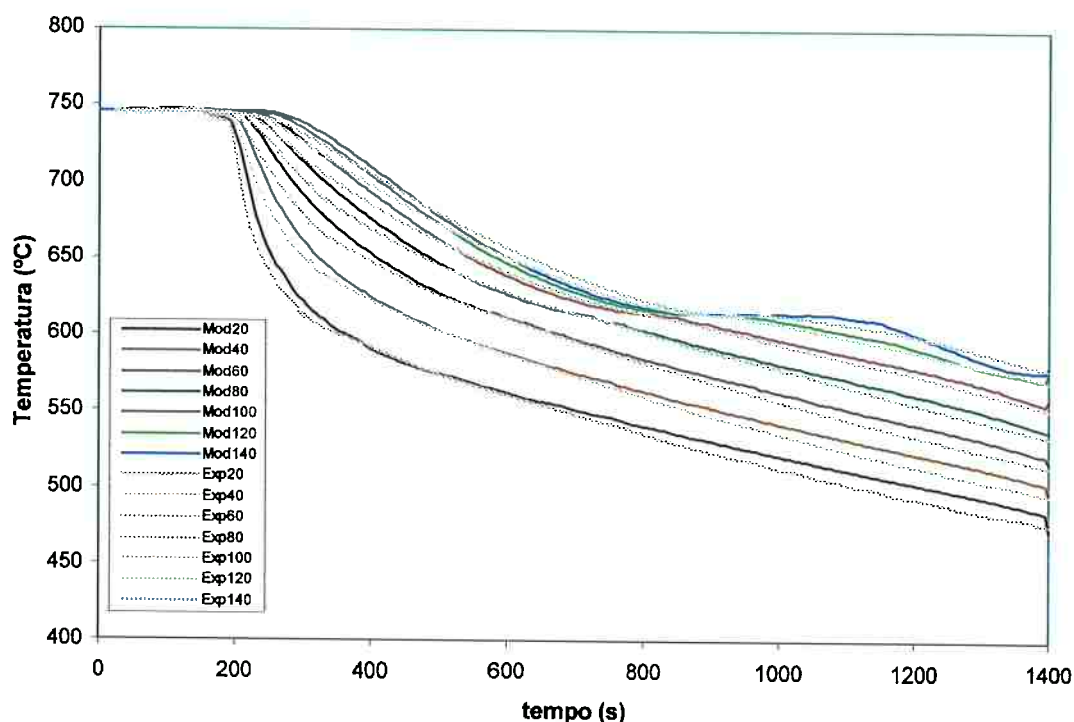


Figura 15 – Comparação entre as temperaturas medidas experimentalmente (linhas pontilhadas) e os dados resultantes da simulação (linhas cheias). Os números indicam a distância em mm do termopar à base refrigerada adjacente ao contorno inferior.

Pode-se verificar que as temperaturas calculadas pelo modelo não foram exatamente iguais às medidas experimentalmente. Esta discrepância ocorreu devido à ausência de dados com relação à extração de calor pela parte inferior do molde. Isso, porém, não é significativo, pois ao se realizar uma comparação entre as macroestruturas simulada e experimental, não é possível perceber diferenças importantes.

4.2 – Análise Paramétrica do Modelo

Após a validação do modelo, foram feitos alguns testes paramétricos com o intuito de verificar a influência de algumas variáveis de processamento na macroestrutura de grãos fornecida pelo modelo, analisando-se em detalhes a posição da CET. Para a realização dos testes, foi definido um caso padrão com as seguintes características e propriedades:

Tabela IV- Dados de nucleação utilizados para o caso padrão; são apresentados os parâmetros utilizados para a nucleação no contorno (S) e no interior do domínio (V).

$\Delta T_{S,nuc}$ [K]	$\Delta T_{S,\sigma}$ [K]	$n_{S,max}$ [m ⁻¹]	$\Delta T_{V,nuc}$ [K]	$\Delta T_{V,\sigma}$ [K]	$nV_{V,max}$ [m ⁻²]
0.5	0.1	583	4.5	0.5	267300

Tabela V – Propriedades do material utilizado no caso padrão (Al-7%Si).

ρ	2452.0 Kg/m ³	h	250 W/m ² *K
k	0.13	C_0	Al-7%Si
C_p	1126.0 J/Kg*K	T_L (K)	891°K
$a_2 = 2.9*10^{-6} \text{ ms}^{-1}\text{K}^{-2}$	$a_3 = 1.49*10^{-6} \text{ ms}^{-1}\text{K}^{-3}$	T_{eut} (K)	850°K
Kl	$36.5 + 0.028*T$	Ks	$233 - 0.110*T$

Tabela VI – Parâmetros de simulação para o caso padrão.

Dimensões da peça	0.07x0.15m
Passo de tempo	0.002s
Superaquecimento	100 K
Temperatura do molde	298 K
Malha para CA	100x11
Malha para VF	1x20

A partir do caso padrão, foram realizados testes para se analisar o efeito das seguintes variáveis na CET: (1) o coeficiente de transferência de calor entre o metal e o molde no contorno inferior, (2) o superaquecimento inicial do metal líquido, (3) a composição média da liga e (4) a quantidade de células utilizadas no submodelo microscópico (CA). Os resultados das simulações estão apresentados nos próximos subitens .

4.2.1 – Influência do Coeficiente de Transferência de Calor

Para a verificação da influência do coeficiente de transferência de calor na interface metal-molde (contorno inferior), realizaram-se três simulações. Destas

simulações, uma representava o caso padrão mencionado anteriormente e nas outras duas variou-se somente o coeficiente de transferência de calor (h). Desta forma, os três valores de coeficientes utilizados foram: 100, 250 (caso padrão) e $1000 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$. As macrografias resultantes estão apresentadas na Fig. 16.

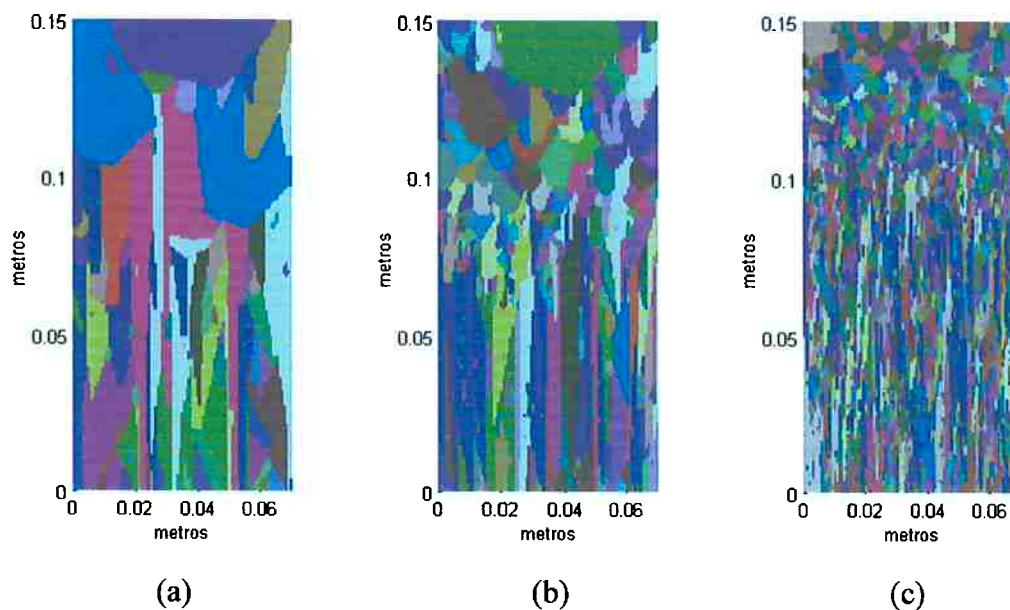


Figura 16 – Simulações realizadas com três coeficientes de transferência de calor diferentes (h): (a) $100 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$; (b) $250 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$; (c) $1000 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$.

Pode-se observar pela Fig. 16 que o aumento do valor de h (coeficiente de transferência de calor) causou as seguintes alterações:

- aumento da zona colunar e aumento do número de grãos colunares;
- diminuição do tamanho dos grãos equiaxiais.

O fenômeno observado na Fig. 16 pode ser explicado pelo aumento no gradiente de temperatura, ocasionado pelo aumento do fluxo de calor extraído devido ao maior coeficiente de transferência de calor. Quando o gradiente de temperatura aumenta, o tamanho da zona super-resfriada constitucionalmente diminui, dificultando a sobrevivência dos grãos equiaxiais e portanto aumentando o tamanho da zona colunar. Este mesmo fenômeno foi observado por Wang e Beckermann (1994), em seu modelo determinístico.

4.2.2 – Influência do Superaquecimento Inicial do Líquido

Analogamente à análise anterior, foram feitas três simulações. Destas simulações, uma representava o caso padrão já mencionado, e nas outras, variou-se somente o superaquecimento inicial do líquido. Assim, os valores utilizados foram: 50°K; 100°K (caso padrão) e 150°K. As macrografias simuladas encontram-se na Fig. 17.

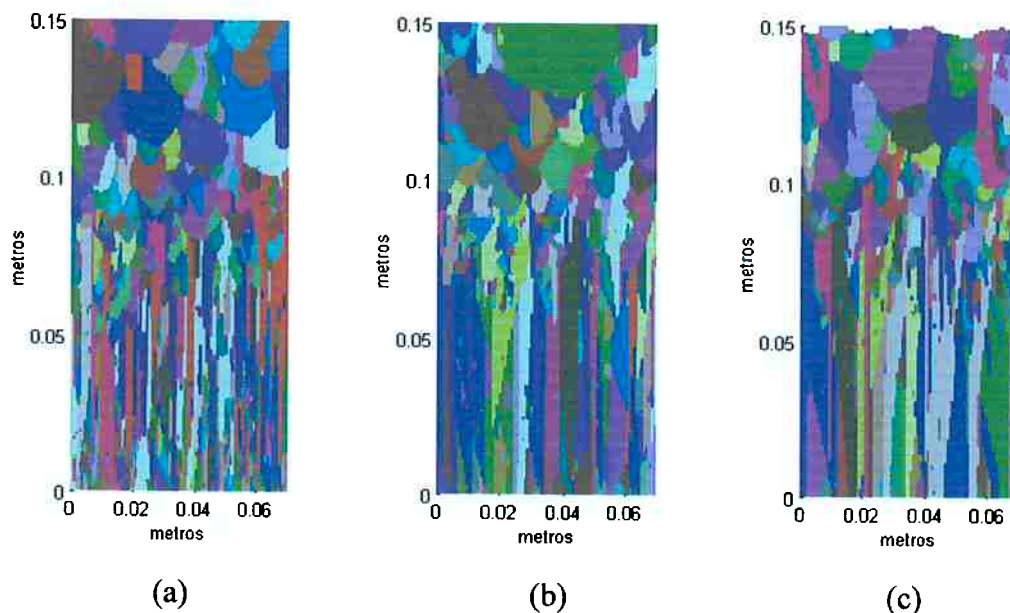


Figura 17 – Simulações realizadas com diferentes superaquecimentos iniciais do líquido: (a) 50°K; (b) 100°K; (c) 150°K.

Pode-se observar pela Fig. 17, que o aumento do valor do superaquecimento inicial do líquido causou as seguintes alterações:

- aumento da zona colunar e diminuição do número de grãos colunares;
- não houve uma alteração significativa no tamanho dos grãos equiaxiais.

Um aumento no superaquecimento do metal líquido aumenta o gradiente de temperatura no sistema, diminuindo o tamanho da zona super-resfriada constitucionalmente e, como no caso anterior, aumentando o tamanho da zona colunar.

4.2.3 – Influência da Concentração Média da Liga (C_0)

Três simulações foram feitas com concentrações iguais a: 3%Si, 7%Si (caso padrão e 11%Si. As propriedades das ligas Al-3%Si e Al-11%Si estão indicadas na Tabela VII .

Tabela VII - Propriedades das ligas Al-3%Si e Al-11%Si.

Propriedades	Al-3%Si	Al-11%Si
K_s (W/m*K)	$253-0.11*T$	$191-0.0671*T$
K_l (W/m*K)	$41.5-0.0312*T$	$27.6+0.0333*T$
H_f (J/Kg)	387.4×10^3	387.4×10^3
C_p (J/Kg*K)	1126	1126
ρ (Kg/m ³)	2452	2452
k (-)	0.12	0.14
T_L (K)	913	863
T_{eut} (K)	850	850
h (W/m ² *K)	250	250
A (m/s*K ⁿ)	1.7×10^{-5}	1×10^{-6}
n (-)	2.7	2.7

Diferentemente dos casos examinados até agora, a velocidade de crescimento dos grãos para as ligas Al-3%Si e Al-11%Si não foi calculada pela Eq. [10], pois os coeficientes não estão disponíveis na literatura. Por isso, nestes casos foi utilizada a equação a seguir:

$$v = A \cdot \Delta T^n \quad [22]$$

onde v é a velocidade de crescimento dos grãos; ΔT é o super-resfriamento calculado no centro da célula e A e n são os parâmetros de crescimento listados na Tabela VII.

A influência da alteração na concentração média nas macrografias simuladas pode ser verificada na Fig. 18.

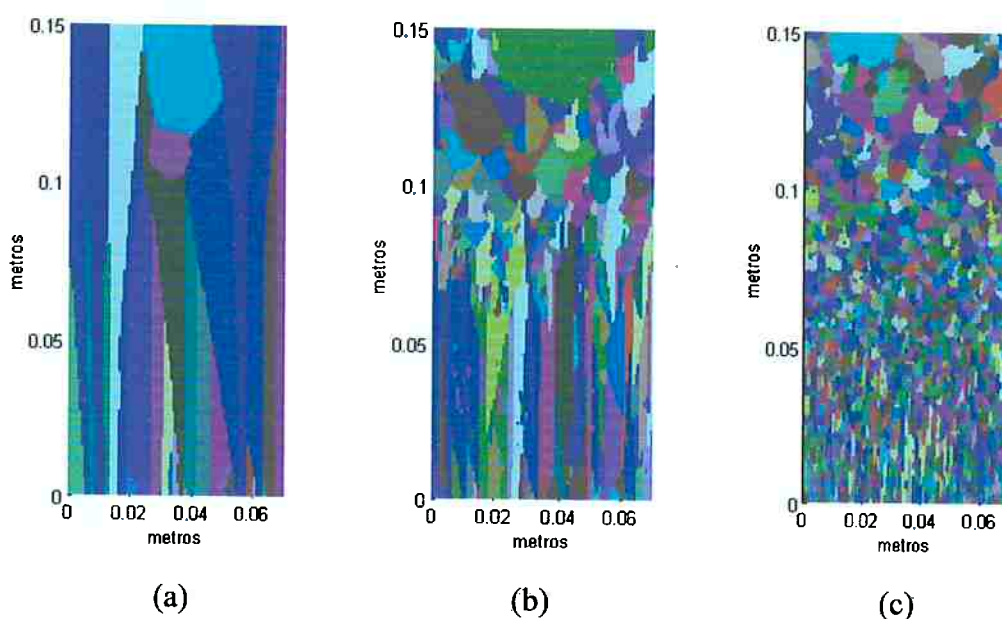


Figura 18 - Simulações realizadas com três concentrações diferentes. (a) 3%Si; (b) 7%Si; (c) 11%Si.

O aumento da concentração do soluto causou uma diminuição no tamanho da zona colunar e um aumento no número de grãos, tanto colunares quanto equiaxiais. O tamanho da zona super-resfriada constitucionalmente aumenta com a diminuição do gradiente de temperatura real e com o aumento do gradiente de temperatura liquidus do líquido à frente dos grãos colunares. O aumento de teor de soluto não deve afetar significativamente o gradiente de temperatura real, porém aumenta o gradiente de temperatura liquidus, resultando em aumento da zona super-resfriada. Como nos casos anteriores, um aumento desta região super-resfriada resulta na diminuição do tamanho da zona colunar.

4.2.4 – Influência do Número de Células da Malha (CA)

Neste item, foi realizada uma análise da influência do número de células da malha do submodelo microscópico (autômato celular - CA) na macrografia simulada. Nesta análise, , além do caso padrão (Tabelas IV a VI) examinaram-se outras duas malhas. Deste modo, mantendo-se o número de volumes finitos (VF) constante (1x20), foram utilizadas malhas para CA com: 50x5 células; 100x11 células (caso padrão) e 150x16 células, onde o primeiro número indica o número de células na direção x e o segundo, na direção y. Estes números indicam a malha de células no interior de cada VF. O cálculo da malha total de células pode ser deduzido fazendo-se uma simples multiplicação entre a malha de VF e a malha de CA. No exemplo do caso padrão, ter-se-ia uma malha de VF de 1x20 e uma malha de CA de 100x11, resultando em uma malha total de CA de 100x220 ou em um total de 22000 células.

As simulações estão apresentadas na Fig. 19.

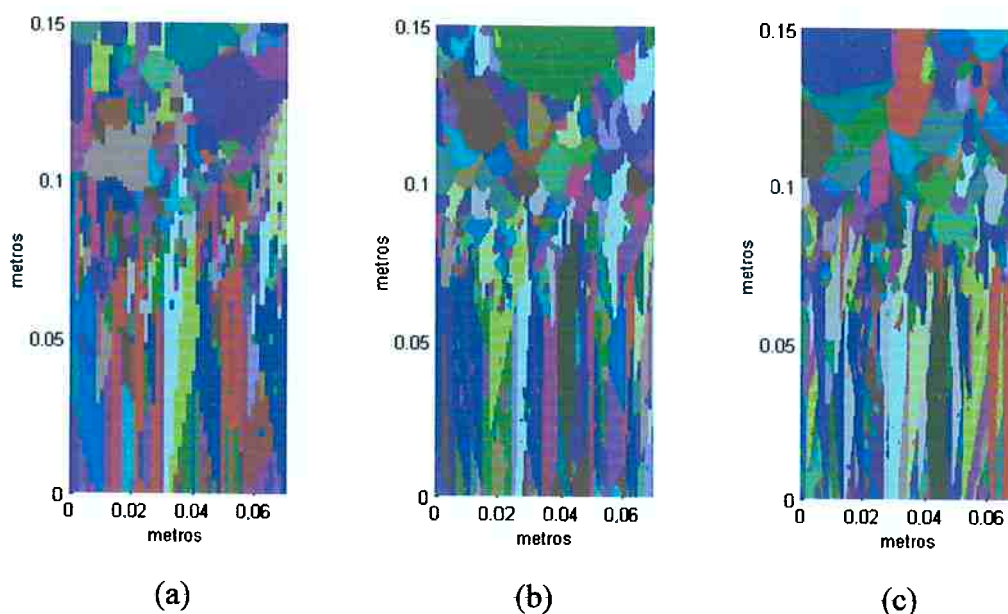


Figura 19 - Simulações realizadas com três malhas diferentes. (a) 50x5; (b) 100x11; (c) 150x16.

Mesmo com o refino da malha de células (CA), não houve nenhuma alteração significativa nas macroestruturas simuladas. O aumento do número de células resulta em tempos maiores de execução, porém tem-se uma melhor resolução dos grãos formados, enquanto um número pequeno resulta em uma macrografia grosseira e em simulações mais rápidas. Deve-se notar que há um número mínimo de células necessário, que é dado pela quantidade de substratos para a nucleação heterogênea a serem distribuídos pela peça. A existência deste número mínimo está relacionada à impossibilidade de se inserir mais de um substrato em uma mesma célula.

4.3 – Análise do Acoplamento Micro-Macroscópico

No intuito de analisar detalhadamente o comportamento do modelo autômato celular implementado, a simulação da solidificação da liga Al-7%Si foi interrompida quando a isoterma liquidus atingiu a coordenada $Y = 0,1\text{m}$. A Fig. 20 apresenta a macroestrutura de grãos, o perfil de temperatura e o perfil de fração de sólido neste instante. Os pontos distribuídos ao longo do perfil indicam as posições de cada nó localizado no centro dos volumes finitos (malha do submodelo macroscópico). O perfil de temperatura fornecido pelo modelo foi utilizado para calcular a fração de sólido através da equação de Scheil (Kurz, & Fisher, 1989). Na Fig. 20, esta fração está sobreposta à fração de sólido calculada pelo modelo implementado.

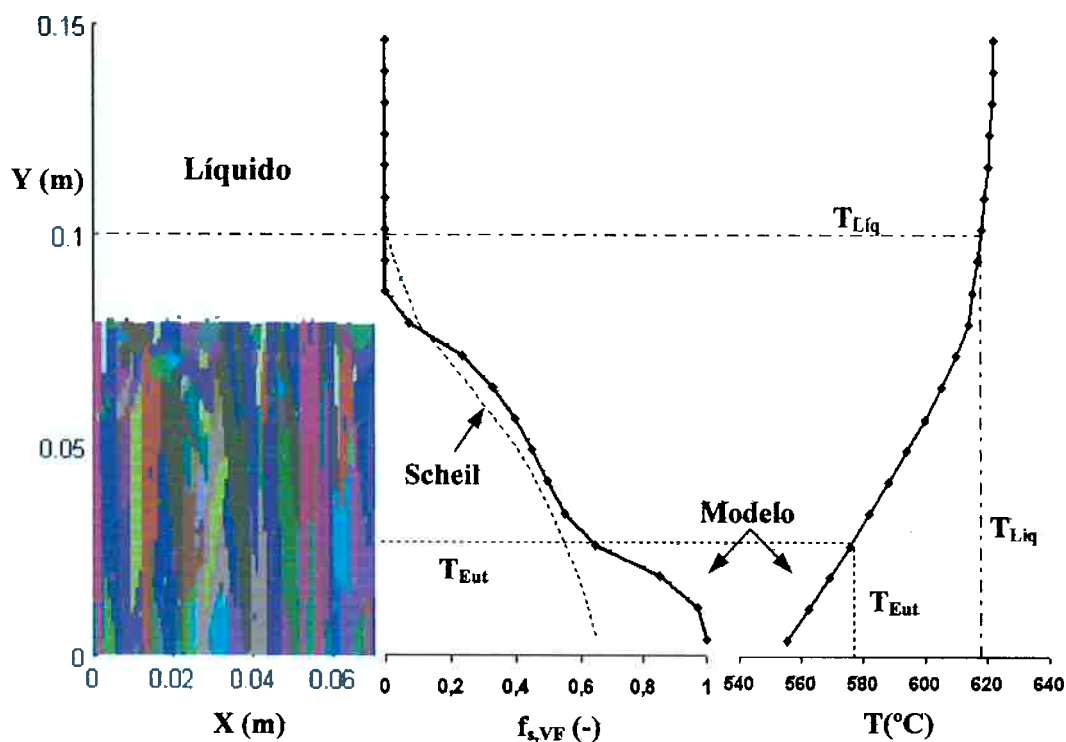


Figura 20 - Macroestrutura de grãos, perfil de temperatura, perfil de fração de sólido e perfil de fração de sólido previsto pelo modelo de Scheil, obtidos quando a isoterma liquidus atingiu $Y = 0,1\text{m}$.

A macroestrutura apresentada na Fig. 20 consiste basicamente de grãos colunares crescendo na direção do fluxo de calor, porém em sentido oposto. Nota-se que a frente de crescimento colunar está super-resfriada em relação à temperatura liquidus (T_{Liq}), resultando em uma região de aproximadamente $0,025\text{m}$ contendo líquido super-resfriado constitucionalmente. Este super-resfriamento também foi observado nos resultados de modelos determinísticos (Martorano, Beckermann & Gandin, 2003).

A Fig. 20 apresenta dois aspectos que não retratam o comportamento físico esperado. O primeiro aspecto é a presença de líquido em regiões da estrutura com temperaturas abaixo da temperatura da reação eutética (T_{Eut}), ou seja, $f_s < 1$ nestes locais. Esta situação somente poderia existir caso o super-resfriamento para o crescimento eutético tivesse sido considerado no modelo. Os resultados da simulação mostram que a fração de sólido atinge a unidade, indicando o final da solidificação,

apenas cerca de 20°C abaixo da temperatura do eutético. Este aspecto representa uma inconsistência em relação ao comportamento físico esperado, ou seja, a presença de uma fração de sólido unitária abaixo da temperatura do eutético.

O segundo aspecto que não retrata o comportamento físico esperado é notado ao se comparar a fração de sólido fornecida pelo modelo com aquela calculada pela equação de Scheil (Kurz, & Fisher, 1989). Logo abaixo de T_{Liq} , a fração de sólido dada pelo modelo é nula, entretanto, a fração fornecida pela equação de Scheil é diferente de zero. Como será discutido posteriormente, este comportamento não está incorreto, pois no modelo autômato celular consideram-se envelopes dendríticos e o seu super-resfriamento para nucleação e crescimento. No modelo de Scheil, por outro lado, assume-se que todos os super-resfriamentos são nulos. No entanto, a principal inconsistência aparece na região contendo envelopes dendríticos em solidificação, onde a fração de sólido deveria ser exatamente igual àquela fornecida pela equação de Scheil. Este comportamento, chamado de Scheil "truncado" (Flood & Hunt, 1987), não foi reproduzido pelo modelo autômato celular (Fig. 20), apesar de ser observado nos resultados de modelos determinísticos propostos na literatura (Gandin, 2000). Estas duas inconsistências entre os resultados do modelo autômato celular e o comportamento físico esperado serão discutidas nos próximos itens.

4.3.1 – Acoplamento Microscópico-Macroscópico na Solidificação Eutética

Após exame do modelo autômato celular, concluiu-se que as inconsistências apresentadas anteriormente resultaram basicamente da metodologia empregada no acoplamento entre os submodelos micro e macroscópicos. No acoplamento, a temperatura de uma célula do submodelo microscópico foi obtida através da interpolação linear das temperaturas calculadas em cada nó dos volumes finitos do submodelo macroscópico, como mostrado na Fig. 21. No momento em que a temperatura interpolada na posição central da célula atingiu T_{Eut} , assumiu-se que a reação eutética iniciaria no interior da célula. A partir deste instante, a Eq. [16] substituiu a Eq. [15] no cálculo da variação da fração de sólido da célula.

A Equação [16] foi obtida assumindo-se que nenhum calor sensível era extraído, ou seja, todo calor era extraído da célula na forma de calor latente, representando uma transformação de fase isotérmica. Devido ao processo de interpolação no interior de um dado volume finito, existiam células que apresentavam temperaturas acima, igual ou abaixo de T_{Eut} , mesmo quando a temperatura do nó do volume (T_P) era menor do que T_{Eut} . Portanto, a variação de fração de sólido nestas células foi calculada pela Equação [15] ou [16], dependendo das condições. Após o cálculo das variações das frações de todas as células presentes em um volume finito, obteve-se a variação da fração total para este volume através da Equação [17]. Desta forma, uma parte da variação da fração total $\delta f_{s,VF}^{t+\Delta t}$ foi calculada através de uma equação que considerou $T = T_{Eut}$ e uma outra parte foi calculada através de uma equação que considerou $T > T_{Eut}$. Finalmente, a variação na fração de sólido do volume, $\delta f_{s,VF}^{t+\Delta t}$, foi utilizada na Equação [13] para o cálculo da temperatura do volume finito (T_P). Em diversos casos, esta equação forneceu valores de T_P inferiores a T_{Eut} , mesmo quando $\delta f_{s,VF}^{t+\Delta t} < 1$, pois as temperaturas de algumas de suas células ainda eram maiores do que T_{Eut} , explicando a primeira inconsistência observada.

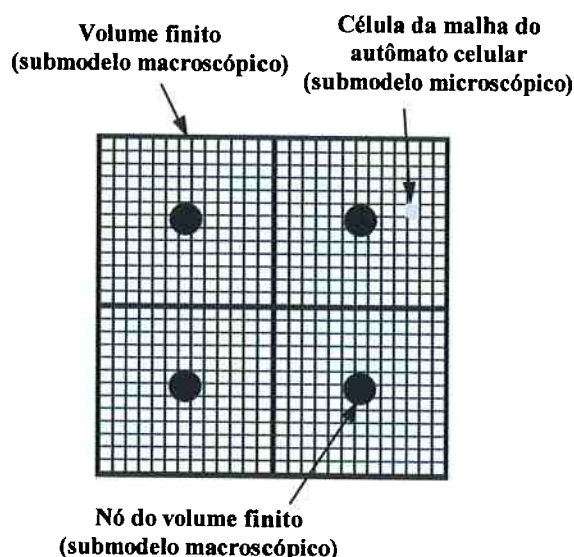


Figura 21 – Representação esquemática da malha de volumes finitos (VF) e do celular autômato (CA).

O submodelo microscópico, baseado no modelo autômato celular proposto originalmente por Rappaz e Gandin (1997), foi modificado para eliminar a inconsistência discutida. Quando a temperatura do volume finito, TP (malha do submodelo macroscópico), atingisse T_{Eut} , esta era mantida constante e igual a T_{Eut} até que $f_{s,VF} = 1$, em lugar de ser calculada através da Eq. [13]. O resultado da simulação através do modelo modificado está apresentado na Fig. 22. Observa-se que $f_{s,VF}$ aumenta bruscamente com a distância quando a temperatura do volume atinge T_{Eut} , e que o primeiro nó na região onde a temperatura está abaixo de T_{Eut} apresenta $f_{s,VF} = 1$, reproduzindo o resultado físico esperado.

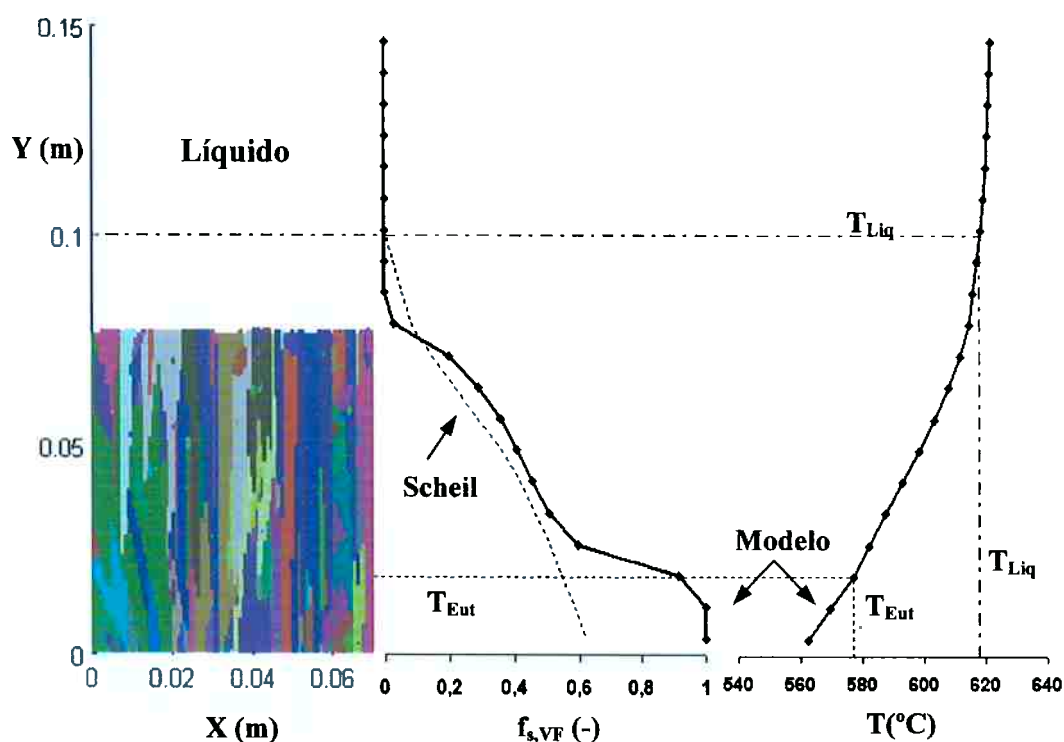


Figura 22 - Macroestrutura de grãos, perfil de temperatura, perfil de fração de sólido e perfil de fração de sólido previsto pelo modelo de Scheil, obtidos quando a isoterma liquidus atingiu $Y = 0,1m$.

4.3.2 – Acoplamento Microscópico-Macroscópico na Solidificação Primária

A segunda inconsistência do modelo autômato celular discutida anteriormente estava associada à diferença entre a fração de sólido fornecida pelo

modelo e aquela calculada através da equação de Scheil (Kurz, & Fisher, 1989) na região com temperatura acima de T_{Eut} . Após investigações, concluiu-se que esta diferença (Fig. 22) era causada por dois efeitos: (1) o super-resfriamento necessário para a nucleação e o crescimento dos envelopes dendríticos e (2) a interpolação dos valores de variação de entalpia dos volumes finitos (submodelo macroscópico).

Em relação ao primeiro efeito, deve-se entender que o modelo autômato celular implementado considera os super-resfriamentos para a nucleação e crescimento dos grãos, enquanto que a equação de Scheil, não. Segundo o modelo de Scheil, a fração de sólido será maior do que zero em temperaturas imediatamente abaixo da temperatura liquidus da liga. Por outro lado, o modelo autômato celular considera que a fase sólida se formará no interior da célula apenas quando esta já tiver sido ativada. Esta ativação pode ocorrer através da nucleação ou do crescimento de envelopes dendríticos vizinhos. Logo, quando o super-resfriamento para a nucleação for diferente de zero e quando os envelopes necessitam de algum super-resfriamento para crescerem, esta célula poderá não estar **ativada** em regiões com temperaturas abaixo da temperatura liquidus. Portanto, o modelo autômato celular indicará $f_s = 0$ nesta região, enquanto a equação de Scheil indicará $f_s > 0$. Estes dois comportamentos são observados na região entre a frente de crescimento colunar e a temperatura liquidus apresentada na Fig. 20.

Uma simulação especial foi conduzida com o objetivo de analisar o efeito dos super-resfriamentos para a nucleação e para o crescimento. Nesta simulação, um substrato para nucleação heterogênea com super-resfriamento crítico nulo foi posicionado em cada célula (malha do submodelo microscópico). Desta forma, eliminaram-se os dois tipos de super-resfriamentos, pois no instante em que a temperatura da célula decrescia abaixo da temperatura liquidus, a célula era ativada imediatamente. O resultado desta simulação está apresentado na Fig. 23, mostrando que a frente dendrítica de crescimento não está super-resfriada, ou seja, acompanha a isoterma liquidus. Pode-se observar também que a fração de sólido fornecida pelo modelo autômato celular torna-se maior do que zero no momento em que a

temperatura decresce abaixo da temperatura liquidus, confirmando o mecanismo sugerido anteriormente.

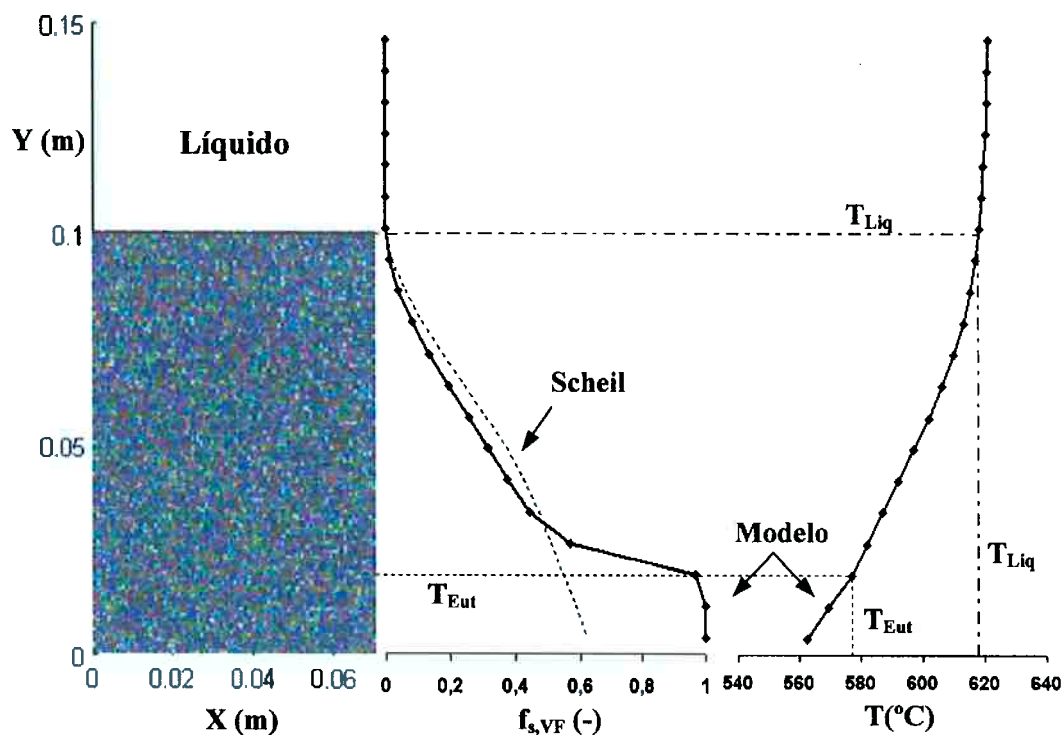


Figura 23 - Macroestrutura de grãos, perfil de temperatura, perfil de fração de sólido e perfil de fração de sólido previsto pelo modelo de Scheil, obtidos quando a isoterma liquidus atingiu $Y = 0,1\text{m}$

A Fig. 23 mostra que a fração de sólido calculada pelo modelo está muito próxima daquela fornecida pela equação de Scheil. No entanto, ainda existe uma diferença que não deveria estar presente, já que o modelo de Scheil foi utilizado na obtenção das equações de acoplamento do modelo automático celular. Acredita-se que esta diferença esteja associada à interpolação linear da variação de entalpia (δH). Como descrito na metodologia, a Eq. [7] é utilizada para o cálculo da variação de entalpia do volume finito ($\delta H_p^{t+\Delta t}$), que faz parte da malha do submodelo macroscópico. Este valor foi assumido estar concentrado na posição do nó do volume. A variação de entalpia da célula, $\delta H_{CA}^{t+\Delta t}$, por outro lado, é obtida através da interpolação dos valores calculados para os volumes finitos mais próximos.

Posteriormente, o valor $\delta H_{CA}^{t+\Delta t}$ interpolado é introduzido na Eq. [15], que fornecerá a variação de fração de sólido na célula do submodelo microscópico. Apesar da Eq. [15] representar uma relação entre $\delta H_{CA}^{t+\Delta t}$ e $\delta f_{s,CA}^{t+\Delta t}$ que reflete exatamente o modelo de Scheil, o valor de $\delta H_{CA}^{t+\Delta t}$ utilizado foi interpolado. Este não satisfaz exatamente o balanço de calor no volume finito. Desta forma, o valor de $\delta f_{s,vf}^{t+\Delta t}$, calculado a partir de $\delta f_{s,CA}^{t+\Delta t}$ (Eq. [17]), e a variação de entalpia do volume finito, $\delta H_{vf}^{t+\Delta t}$, não refletem o modelo de Scheil. Em uma tentativa de confirmar esta hipótese, o número de volumes finitos (malha do submodelo macroscópico) foi definido igual ao número de células (submodelo microscópico), ou seja, existe uma célula para cada volume finito. Esta modificação não é vantajosa do ponto de vista computacional, pois o número de volumes finitos é desnecessariamente elevado, aumentando o tempo de processamento. Entretanto, ela será utilizada para testar a hipótese formulada. O resultado deste modelo modificado está apresentado na Fig. 24. Nesta figura, nota-se que o perfil de fração de sólido fornecido pelo modelo autômato celular é exatamente igual àquele fornecido pela equação de Scheil, confirmando a hipótese apresentada.

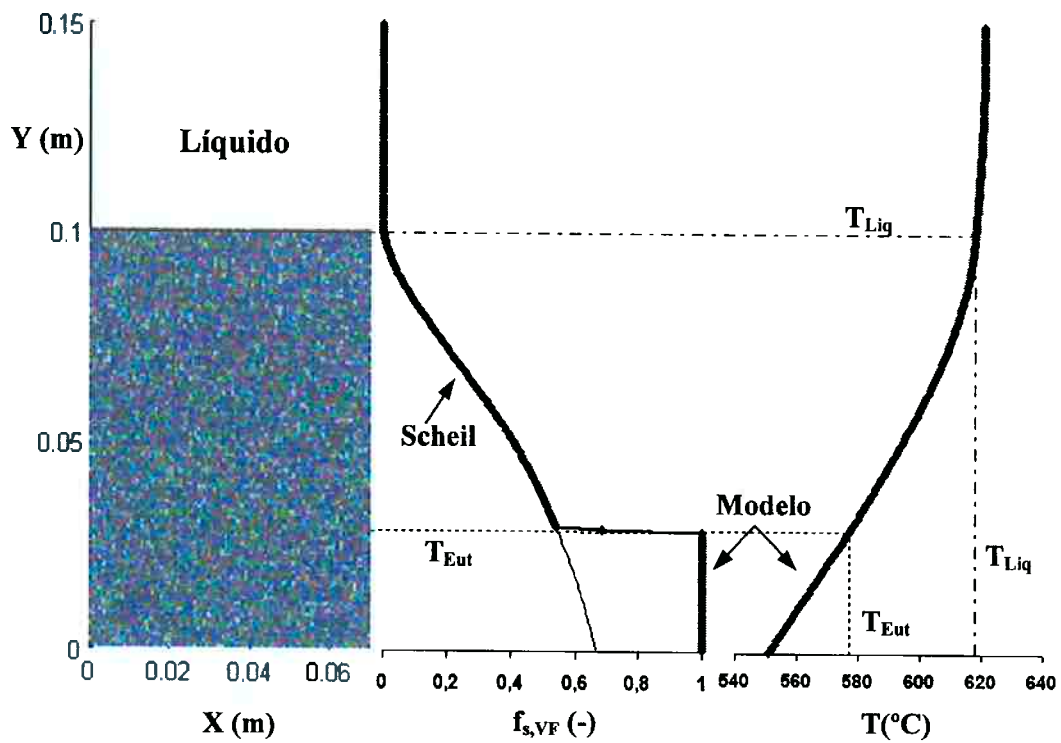


Figura 24 - Macroestrutura de grãos, perfil de temperatura, perfil de fração de sólido e perfil de fração de sólido previsto pelo modelo de Scheil, obtidos quando a isoterma liquidus atingiu $Y = 0,1$ m.

5 – CONCLUSÕES

As seguintes conclusões podem ser obtidas a partir dos resultados do presente trabalho:

- 1) O modelo de autômato celular originalmente proposto por Gandin e Rappaz (1997) é capaz de prever um super-resfriamento da frente de crescimento colunar consistente com modelos determinísticos;
- 2) Apesar do modelo de autômato celular utilizar a hipótese de Scheil na definição de suas equações, o perfil de fração de sólido calculado não corresponde ao perfil fornecido pela equação de Scheil;
- 3) O modelo de autômato celular fornece um perfil de fração de sólido que mostra a presença de fase líquida mesmo abaixo da temperatura da reação eutética em uma liga binária, contrariando o comportamento físico esperado;
- 4) A diferença entre o perfil de fração de sólido calculado pelo modelo de autômato celular na região de solidificação primária e o perfil calculado pela equação de Scheil é resultante do esquema de acoplamento entre os submodelos micro e macroscópicos e, também, da consideração dos super-resfriamentos para a nucleação e crescimento dos envelopes dendríticos;
- 5) O modelo de autômato celular pode ser modificado para que não se obtenha a presença da fase líquida abaixo da temperatura da reação eutética em ligas binárias.

6 – LISTA DE REFERÊNCIAS

1. CHALMERS, B. J. Aust. Inst. Met., v. 8, p. 225, 1962.
2. CHO, S.-h.; OKANE, T.; UMEDA, T. CA-DFD Analysis of Nucleation Parameter Effects on the Grain Structures of Castings. International Journal of Cast Metals Research, v. 13, p. 327-35, 2001.
3. FLOOD, S.C.; HUNT, J.D. Columnar and Equiaxed Growth I. Journal of Crystal Growth, v. 82, p. 543-551, 1987.
4. FLOOD, S.C.; HUNT, J.D. ASM Handbook, ASM, Materials Park, Oh, v. 15, p. 130-36, 1998.
5. GANDIN, Ch.-A. From Constrained to Unconstrained Growth during Directional Solidification. Acta Materialia, v. 48, p. 2483-501, 2000.
6. GANDIN, Ch.-A.; RAPPAZ, M. Probabilistic Modelling of Microstructure Formation in Solidification Processes. Acta Metallurgica, v. 41, p. 345-60, 1993.
7. GANDIN, Ch.-A.; RAPPAZ, M. A Coupled Finite Element-Cellular Automaton Model for the Prediction of Dendritic Grain Structures in Solidification Processes. Acta Metallurgica, v. 42, p. 2233-46, 1994.
8. GANDIN, Ch.-A.; RAPPAZ, M. A 3D Cellular Automaton Algorithm for the Prediction of Dendritic Grain Growth. Acta Materialia, v. 45, p. 2187-95, 1997.
9. GARCIA, A. Solidificação - Fundamentos e Aplicações. Campinas: Editora da Unicamp, 2001.
10. KURZ, W.; FISHER, D.J. Fundamentals of solidification. Aedermannsdorf, Trans Tech Publications Ltd., 1989.

11. MARTORANO, M.A.; BECKERMANN, C; GANDIN, Ch.-A. A solutal interaction mechanism for the columnar-to-equiaxed transition in alloy solidification. *Metallurgical and Materials Transactions A*, v. 34A, p. 1657-74, 2003.
12. PATANKAR, S.V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. New York: Publishing Corp., 1981.
13. SPITTLE, J.A.; BROWN, S.G.R. Computer Simulation of the Effects of Alloy Variables on the Grain Structures of Castings. *Acta Metallurgica*, v. 37, p. 1803-10, 1989.
14. SPITTLE, J.A.; DELAMORE G.W.; SMITH R.W. *The Solidification of Metals*, Publication 110, Iron and Steel Institute, p. 318, 1968.
15. WINEGARD, W.C.; CHALMERS, B. Supercooling and Dendritic Freezing in Alloys, *Transactions of the ASM*, v. 46, p. 1214-23, 1954.