

**PEDRO GUILHERME ALVES DE SOUSA**

**UTILIZAÇÃO DO MODELO DE NUCLEAÇÃO GAUSSIANO  
NA PREVISÃO DA MACROESTRUTURA DE GRÃOS**

Trabalho de Formatura apresentado à  
Escola Politécnica da Universidade de  
São Paulo, no âmbito do Curso de  
Engenharia de Materiais

São Paulo  
2010

**PEDRO GUILHERME ALVES DE SOUSA**

**UTILIZAÇÃO DO MODELO DE NUCLEAÇÃO GAUSSIANO  
NA PREVISÃO DA MACROESTRUTURA DE GRÃOS**

Trabalho de Formatura apresentado à  
Escola Politécnica da Universidade de  
São Paulo, no âmbito do Curso de  
Engenharia de Materiais

Orientador: Prof. Dr. Marcelo de Aquino  
Martorano

São Paulo  
2010

## **Agradecimentos**

Agradeço imensamente aos meus pais, que me apoiaram e facilitaram meu processo de formatura e ao professor Marcelo de Aquino Martorano pelo tempo, confiança, dedicação e paciência para comigo.

## Sumário

1	Introdução .....	1
2	Objetivos .....	2
3	Revisão Bibliográfica.....	3
3.1	Transição Colunar-Equiaxial (CET).....	3
3.2	Parâmetros de Solidificação e sua Influência na Macroestrutura.....	5
3.3	Mecanismos pra a Transição Colunar-Equiaxial .....	6
3.3.1	Nucleação Heterogênea na Zona de Super-Resfriamento Constitucional 6	
3.3.2	Mecanismo “Big Bang” .....	7
3.3.3	Mecanismo de Destacamento Dendrítico .....	9
3.4	Modelos Estocásticos para a Transição Colunar-Equiaxial.....	10
4	Materiais e Metodologia .....	14
4.1	Modelo Matemático Estocástico Utilizado .....	14
4.1.1	Submodelo Macroscópico .....	14
4.1.2	Submodelo Microscópico.....	16
4.1.3	Acoplamento entre os Submodelos Macroscópicos e Microscópicos....	19
4.1.4	Sequência de Execução dos Passos do Modelo Implementado .....	20
4.2	Métodos de Quantificação.....	21
4.2.1	Quantificação do Limite Superior e Inferior da CET.....	22
4.2.2	Quantificação da Largura Média dos Grãos Colunares .....	23
4.2.3	Quantificação do Diâmetro Médio dos grãos equiaxiais .....	24
4.3	Método Utilizado na Análise Paramétrica.....	26
5	Resultados e discussão .....	28
5.1	Análise Paramétrica .....	28
5.1.1	Análise da Influência da Densidade Máxima do Número de Núcleos ( $n_{max}$ ) 28	
5.1.2	Análise da Influência da Posição Média da Gaussiana para o Super- Resfriamento médio ( $\Delta T_{nuc}$ ) .....	31
5.1.3	Análise da Influência do Desvio Padrão para o Super-resfriamento ( $\Delta T_{\sigma}$ ) 34	
5.2	Repetição de um Resultado Experimental .....	37

6	Conclusões .....	41
7	Referências Bibliográficas.....	42
8	Anexos .....	44
8.1	Tabela resumo das simulações da análise paramétrica.....	44

## Resumo

O presente trabalho tem por objetivo analisar um modelo matemático estocástico bidimensional que prevê a macroestrutura bruta de solidificação para ligas metálicas binárias. As respostas de saída geradas por este modelo implementado em trabalho anterior, são tratadas com novos códigos computacionais, que permitem extrair dados como a região da CET, a largura média dos grãos colunares e o diâmetro médio de grãos equiaxiais. Estas respostas de simulação são analisadas através de uma análise paramétrica que permite observar a influência dos parâmetros de distribuição gaussiana nas respostas obtidas na simulação. A densidade máxima do número de núcleos ( $n_{max}$ ), a posição média da gaussiana para o super-resfriamento médio ( $\Delta T_{nuc}$ ) e o desvio padrão para o super-resfriamento ( $\Delta T_{\sigma}$ ). O resultado da análise paramétrica é discutida frente ao comportamento teórico esperado. Posteriormente, simula-se um resultado experimental real, ajustando as variáveis estudadas com base na análise paramétrica.

## Abstract

The present work aims to analyze a stochastic two-dimensional mathematical model that predict the as-cast macrostructure in binary alloys. The output responses, generated by a model implemented in previous work, are treated with new computer codes, which allow extracting data such as the CET region, the average width of columnar grains and average equiaxed grain diameter. These simulated responses are analyzed through a parametric analysis that allows observing the influence of the parameters of Gaussian distribution in the responses obtained in the simulation. The maximum density of number of nuclei ( $n_{\max}$ ), the middle position of the Gaussian for the average undercooling's ( $\Delta T_{\text{nuc}}$ ) and standard deviation for undercooling ( $\Delta T_{\sigma}$ ). The result of the parametric analysis is discussed against the expected theoretical behavior. Later, a real experimental result is simulated, adjusting the studied variables based on parametric analysis.

## Lista de Figuras

<b>Figura 1:</b> Representação esquemática das três zonas macroestruturais.[1] .....	3
<b>Figura 2:</b> Representação esquemática do crescimento retangular do envelope dendrítico, inicialmente quadrado, defasado de um ângulo $\theta$ , em relação ao eixo da malha do autômato celular [11]. .....	12
<b>Figura 3:</b> Representação esquemática do crescimento do autômato celular quadrado descentralizado para a célula de nucleação (a) e uma célula arbitrária (b) [12]. .....	13
<b>Figura 4:</b> Representação esquemática de um volume finito bidimensional. No caso particular, tem-se $\Delta x$ e $\Delta y$ possuindo valores iguais, gerando um volume quadrático .....	16
<b>Figura 5:</b> Representação esquemática do crescimento celular onde o centro de crescimento ativado não coincide com o centro do núcleo original. A célula inicial ( $v$ ) tocou e ativou a sua vizinha ( $\mu$ ), que por sua vez tem o seu envelope descentrado em relação à sua célula. ....	17
<b>Figura 6:</b> Perfil do fator de forma para um dos testes realizados. Nota-se claramente o Limite Inferior e Superior da CET, ao atingir o valor de 0,3 e 0,4 , respectivamente. ....	23
<b>Figura 7:</b> Representação esquemática da macroestrutura gerada pelo arquivo de texto. Podemos notar a existência de 3 grãos, coloridos de forma a explicitar .....	24
<b>Figura 8:</b> Gráfico representando a relação entre $n^{2d}$ e a região da CET, através de correlação logarítmica. ....	28
<b>Figura 9:</b> Gráfico representando a relação entre $n^{2d}$ e a largura média dos grãos colunares. ....	29
<b>Figura 10:</b> Gráfico representando a relação entre $n^{2d}$ e o diâmetro médio de grãos equiaxiais. ....	30
<b>Figura 11:</b> Diferentes macroestruturas para diferentes valores de $n_{max}$ . ....	30
<b>Figura 12:</b> Gráfico representando a relação entre $\Delta T_{nuc}$ e a região da CET. Observa-se o limite para a região inferior da CET, quando atinge a altura total do molde. ....	31
<b>Figura 13:</b> Gráfico representando a relação entre a largura média dos grãos colunares e $\Delta T_{nuc}$ . Observa-se uma clara correlação positiva. ....	32



<b>Figura 14:</b> Gráfico representando a relação entre $\Delta T_{nuc}$ e o tamanho médio de grãos equiaxiais. Observa-se uma clara correlação negativa. ....	33
<b>Figura 15:</b> Diferentes macroestruturas para diferentes valores de $\Delta T_{nuc}$ . ....	34
<b>Figura 16:</b> Gráfico representando a relação entre $\Delta T_{\sigma}$ e a altura da região da CET. Observa-se uma clara correlação negativa. ....	35
<b>Figura 17:</b> Gráfico representando a relação entre a largura média dos grãos colunares e $\Delta T_{\sigma}$ . Observa-se uma certa correlação positiva. ....	36
<b>Figura 18:</b> Gráfico representando a relação entre o tamanho médio dos grãos equiaxiais e $\Delta T_{\sigma}$ . ....	36
<b>Figura 19:</b> Diferentes macroestruturas para diferentes valores de $\Delta T_{\sigma}$ . ....	37
<b>Figura 20:</b> Curvas de resfriamento para o experimento de Arango e para a simulação, utilizando $h=900$ ( $W/m^2 \cdot K$ ) ....	38
<b>Figura 21:</b> Macroestruturas da liga Al-7%Si sem adição de inoculante obtida experimentalmente: (a) no trabalho de Arango;(b) na simulação realizada. ....	39

## Lista de Tabelas

<b>Tabela 1:</b> Variáveis de fundição e seus efeitos na macroestrutura.....	5
<b>Tabela 2:</b> Parâmetros constantes de simulação nas análises paramétricas .....	27
<b>Tabela 3:</b> Parâmetros da Gaussiana utilizados na repetição do resultado experimental de Arango. ....	39
<b>Tabela 4:</b> Tabela resumo das simulações da análise paramétrica. ....	44

## **Lista de Siglas e Abreviaturas**

CA	Autômato Celular
CET	Transição Colunar-Equiaxial
VF	Volume Finito
Fig.	Figura
Eq.	Equação

## Lista de Símbolos

$G_L$	Gradiente de Temperatura no líquido
$\Delta T$	Super-resfriamento (K)
$\Delta H_f$	Calor latente de fusão (J/Kg)
$\rho$	Densidade (Kg/m <sup>3</sup> )
$C_p$	Calor específico (J/Kg*K)
$n_{max}$	Densidade máxima de núcleos (m <sup>-2</sup> )
$\Delta T_\sigma$	Desvio padrão do super-resfriamento (K)
$\Delta T_{nuc}$	Super-resfriamento médio para nucleação (K)
$\Delta x$ e $\Delta y$	Dimensões de um volume finito (m)
$H$	Entalpia (J/m <sup>3</sup> )
$T_{metal}$	Temperatura de vazamento do metal líquido
$T_{molde}$	Temperatura do molde
$h$	Coeficiente de transferência de calor na interface metal-molde (W/m <sup>2</sup> *K)
$VF_i$	Malha para o volume finito no eixo x
$VF_j$	Malha para o volume finito no eixo y
$CA_i$	Malha para a célula no eixo x
$CA_j$	Malha para a célula no eixo y
$K$	Condutividade térmica (W/m*K)
$\delta x$ e $\delta y$	Distância entre os centros dos volumes finitos (m)
$\Delta t$	Passo de tempo (s)
$L$	Dimensão do lado da célula (m)
$v$	Velocidade de crescimento da ponta da dendrita (m/s)
$L_i[11]$	Distância entre o centro da célula e o lado do envelope dendritico (m)
$k$	Coeficiente de partição (-)
$T_L$	Temperatura liquidus (K)
$T_{eut}$	Temperatura do ponto eutético (K)

## 1 Introdução

A macroestrutura de grãos de uma peça produzida pelo processo de fundição afeta fortemente as suas propriedades. Sabe-se que o limite de resistência, o alongamento e a tenacidade melhoram com a diminuição do tamanho de grão e a eliminação de grãos colunares.

Os modelos matemáticos têm auxiliado na definição de condições dos processos de fundição para alterar a macroestrutura da forma desejada e melhorar as propriedades das peças fundidas. Nos modelos de previsão macroestrutural propostos até o momento, é necessário geralmente adotar um submodelo para a nucleação de grãos. Entre os modelos, aquele que emprega uma distribuição Gaussiana de super-resfriamentos para a nucleação heterogênea tem sido muito utilizado. Este modelo é baseado numa distribuição Gaussiana ou normal, sendo completamente definido pela média, desvio padrão e pela densidade de substratos para nucleação heterogênea. Estes parâmetros são usualmente assumidos ou ajustados para que a macroestrutura calculada corresponda à macroestrutura medida. No entanto, nenhum estudo sistemático foi realizado para levantar esta distribuição em diversas situações experimentais.

## 2 Objetivos

O presente trabalho tem como objetivo obter as distribuições de super-resfriamentos para diversos casos para os quais existem dados disponíveis na literatura. As distribuições serão obtidas através do ajuste dos três parâmetros mencionados até que a macroestrutura de grãos, especificamente a posição da transição colunar-equiaxial e o tamanho de grão médio equiaxial, sejam reproduzidos por um modelo matemático. Este modelo já foi implementado em um trabalho anterior e está baseado na técnica do autômato celular.

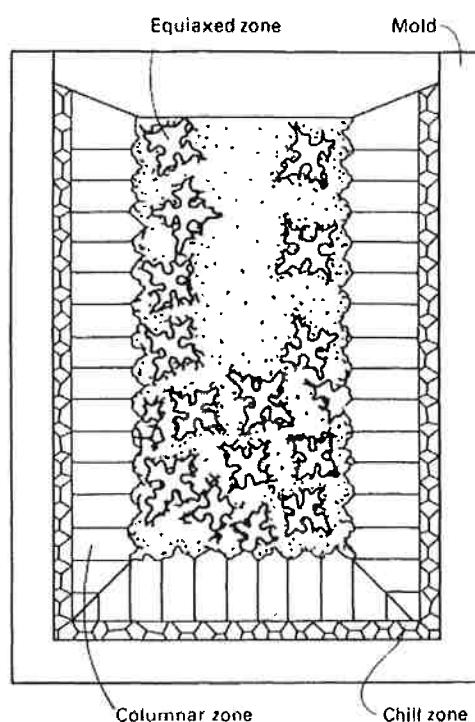
### 3 Revisão Bibliográfica

#### 3.1 Transição Colunar-Equiaxial (CET)

Geralmente três zonas distintas de estruturas de grãos são observadas na macroestrutura bruta de solidificação de liga metálicas [1]:

- Uma zona denominada coquilhada formada por vários pequenos cristais, provenientes de uma rápida extração de calor junto à interface metal molde;
- Uma zona denominada colunar, formada por grãos alongados na direção aproximadamente paralela a do fluxo de calor, estendendo-se à frente da zona coquilhada.
- Uma região equiaxial de cristais aproximadamente esféricos, no centro do fundido.

As três zonas descritas estão representadas na Fig. 1.



**Figura 1:** Representação esquemática das três zonas macroestruturais.[1]

Todas as três zonas descritas podem não estar presentes em um mesmo caso. Porém, se tivermos a presença das zonas colunares e equiaxiais em um metal fundido, a transição entre essas duas morfologias (a transição colunar-equiaxial ou CET) é geralmente estreita, com as zonas colunares e equiaxiais bastante distintas.

Um grande esforço tem sido dedicado a fim de compreendermos os mecanismos de formação das macroestruturas durante a solidificação, pois a estrutura de grãos influencia nas propriedades do fundido, que passa suas características ao futuro metal a ser trabalhado.

Na ausência de grãos equiaxiais, o fundido apresentará somente cristais colunares. Grãos equiaxiais crescem à frente das dendritas colunares e a transição colunar-equiaxial ocorrerá quando estes grãos equiaxiais forem suficientemente grandes e numerosos para impedir o avanço da frente colunar. A extensão da zona equiaxial é o resultado da concorrência entre os grãos colunares e equiaxiais. Logo, a formação da zona equiaxial requer a presença de núcleos no metal líquido e condições que promovam o crescimento destes núcleos em relação às dendritas colunares.

Nas décadas de 60 e 70, o escopo dos estudos era explicar tendências na transição colunar-equiaxial somente em função de diferentes mecanismos para o fornecimento de núcleos equiaxiais. Supunha-se que os núcleos eram desenvolvidos dentro da zona equiaxial, se presentes. A tendência e a capacidade dos grãos crescerem não eram consideradas. Entretanto, se o crescimento equiaxial é relativamente mais lento que o colunar ou restrito a uma pequena região super-resfriada à frente da frente colunar, temos que, embora os núcleos equiaxiais existam, o crescimento colunar ainda pode predominar na macroestrutura. Esta frente de crescimento, por sua vez, absorve os pequenos grãos equiaxiais enquanto avança.

Até recentemente, o crescimento de grãos não era estudado nos mecanismos de formação da transição colunar equiaxial, mas ao longo dos últimos anos, muitos trabalhos têm considerado este aspecto. Os importantes processos de sedimentação e movimento convectivo de grãos ainda devem ser cobertos de forma satisfatória.



### 3.2 Parâmetros de Solidificação e sua Influência na Macroestrutura

A macroestrutura é afetada por fatores como: superaquecimento, tipo de liga, composição, escoamento do fluido, perturbações e vibrações mecânicas, adição de refinadores de grãos e o tamanho do fundido. Estes fatores estão resumidos na tabela 1. Os vários mecanismos e modelos para a transição colunar-equiaxial precisam ser discutidos e avaliados com referência a estas observações experimentais.

**Tabela 1:** Variáveis de fundição e seus efeitos na macroestrutura

<b>Variáveis de Fundição</b>	<b>Efeitos</b>
Superaquecimento	Aumentando o superaquecimento, aumenta-se a extensão do crescimento colunar. A tendência é menos notada em grandes fundidos.
Parâmetros do sistema da liga	Baixos valores de $-m_L(1 - k)C_0/k$ favorece estruturas colunares. Altos valores, favorecem estruturas equiaxiais.
Composição	Aumentando a quantidade de elemento de liga $C_0$ , favorecemos a diminuição da extensão da região colunar. Alguns pesquisadores descrevem que a região colunar não é uma simples função da concentração da liga.
Escoamento de Fluido (natural ou forçado)	Aumentando-se o escoamento do fluido, diminui-se a extensão da região colunar.
Refinadores de grãos inoculadores	Adições de refinadores de grão podem reduzir a extensão do crescimento colunar

Vibração Mecânica	Vibração mecânica promove o refinamento de grão e pode estender a zona equiaxial.
Geometria do fundido	Superaquecimento tem menos efeito na estrutura de grãos de grandes fundidos. Aumentando a seção transversal, aumenta a proporção de grãos equiaxiais. Há maior sensibilidade variando-se a altura dos fundidos.

### 3.3 Mecanismos pra a Transição Colunar-Equiaxial

A transição colunar-equiaxial ocorre na solidificação quando os grãos equiaxiais impedem o crescimento da frente colunar [2]. A origem da zona equiaxial depende da nucleação e crescimento de pequenos núcleos de grãos durante a solidificação. Muitos mecanismos foram propostos pelos autores, que tentam explicar o aparecimento da zona equiaxial. Três mecanismos propostos concordam que é na região super-resfriada constitucionalmente, à frente da zona colunar, que ocorre o crescimento dos núcleos dos grãos equiaxiais. No entanto, existem diferenças nos mecanismos propostos para a nucleação destes grãos e eles são usados para formar a base para a discussão dos efeitos dos parâmetros de fundição na transição colunar-equiaxial. Os mecanismos estão apresentados abaixo:

- Nucleação Heterogênea na Zona de Super-Resfriamento Constitucional
- Mecanismo “Big Bang”
- Mecanismo de Destacamento Dendrítico

#### 3.3.1 Nucleação Heterogênea na Zona de Super-Resfriamento Constitucional

Neste mecanismo considera-se que um super-resfriamento constitucional forma-se à frente da interface de crescimento, promovendo a nucleação heterogênea de

grãos equiaxiais [3]. Pesquisadores previram que o super-resfriamento constitucional existe à frente da interface planar quando [4]:

$$\frac{G_L D}{v} < \frac{-m_L C_0 (1 - k)}{k} \quad [1]$$

onde  $G_L$  é o gradiente de temperatura no líquido,  $v$  é a velocidade de deslocamento da frente de crescimento do sólido,  $m_L$  é o valor da inclinação da linha liquidus,  $C_0$  é a composição inicial da liga,  $k$  é o coeficiente de distribuição do soluto e  $D$  é o coeficiente de difusão de soluto no líquido.

Este mecanismo tem sido criticado, pois o super-resfriamento constitucional, em uma liga, deve existir à frente da frente colunar na fase inicial do resfriamento, pois o gradiente de temperatura no líquido cai rapidamente e a camada de soluto é então estabilizada. Entretanto, a transição colunar equiaxial só ocorre algum tempo depois [5].

Chalmers [5] mostrou, através de um mecanismo de isolamento do centro de um fundido com um metal cilíndrico, que o modelo de nucleação heterogênea na zona de super-resfriamento constitucional não é o único responsável pelo crescimento da região equiaxial. O centro solidificado apresentou grãos equiaxiais sem o cilindro, mas quando o centro foi mecanicamente isolado, estes grãos foram substituídos por grãos em pequena quantidade e menos refinados, mesmo que o centro estivesse constitucionalmente super-resfriado [5]. Além disso, outro pesquisador [1] mostrou que grãos equiaxiais podem ser produzidos em uma fusão, na ausência de núcleos heterogêneos pré-existentes à solidificação.

### 3.3.2 Mecanismo “Big Bang”

Segundo o mecanismo do “big-bang”, os grãos equiaxiais resultam da nucleação pré-dendrítica durante o vazamento do metal líquido pela ação de um resfriamento inicial provocado no contato com a parede do molde. Os grãos são então levados em sua maior parte pelo fluxo de fluido em um movimento convectivo e sobrevivem até o superaquecimento ser removido [5]. A sobrevivência de núcleos resfriados até

o superaquecimento se dissipar é bastante provável para superaquecimentos moderados, por causa do relativamente alto calor latente de solidificação dos metais.

Diferentemente do mecanismo de nucleação heterogênea na zona de super-resfriamento constitucional, este mecanismo pode explicar os efeitos do superaquecimento e convecção nos estágios iniciais da fundição. Variações no superaquecimento e convecção não alteram significativamente o início e o grau do super-resfriamento do fundido, mas exerce considerável influência na estrutura do fundido [6]. Aumentando a temperatura de vazamento, reduz-se o tamanho da região equiaxial e aumenta-se o tamanho de grãos. Reduzindo a convecção pela introdução de um campo magnético estático, podemos eliminar totalmente a região equiaxial [1]. Este mecanismo proposto fornece duas explicações viáveis:

- Aumentando o superaquecimento, diminui-se o resfriamento do fundido ao longo do vazamento e aumenta-se o tempo levado para dissipar o superaquecimento. Conseqüentemente, menos núcleos são produzidos ao longo do vazamento e menos sobreviverão para crescerem como grãos equiaxiais.
- Diminuindo a convecção, reduz-se o número de núcleos formados no contato com o molde de fundição que chegam ao centro.

Chalmers [5] sugeriu que, isolando mecanicamente o centro dos fundidos, altera-se a macroestrutura pela obstrução do fluxo de núcleos resfriados [5]. Entretanto, outro pesquisador [7] modificou o experimento de Chalmers, deixando uma lacuna na base do cilindro central. Com isso, a estrutura de grãos no centro mostrou ser a mesma, seja com a fundição sendo preenchida por um vazamento no tubo central ou na parte externa. Isto causou dúvidas na interpretação do mecanismo “big bang” descrito por Chalmers, pois as duas condições de fundição (através do tubo central ou na parte externa) deveriam ter apresentado diferentes números de núcleos resfriados na parte central se o mecanismo fosse válido. Outro ponto fraco da teoria do “big bang” é a sua incapacidade para explicar a formação da zona equiaxial na ausência de um molde refrigerado [1].

### 3.3.3 Mecanismo de Destacamento Dendrítico

Outros pesquisadores [1] relatam que misturando convecção e agitação durante a solidificação de compostos orgânicos análogos a metais, produz-se um grande número de núcleos no líquido [1]. Assim, foi postulado que flutuações na taxa de crescimento fazem com que os braços de dendritas se refundam e migrem para o interior do líquido. A refusão é devida à energia de superfície, sob condições isotérmicas, mas a recalescência é tida como o principal mecanismo para o destacamento de braços de dendritas. A refusão é promovida pela presença suficiente de soluto para alterar consideravelmente o ponto de fusão do solvente. Foi proposto que a convecção poderia causar destacamento dendrítico, pois o limite de escoamento do material é muito baixo perto do seu ponto de fusão [1]. Também foi demonstrado que a refusão dos braços de dendritas laterais pode ocorrer a velocidades de fluxo interdendríticos muito baixas.

A camada de superfície dendrítica no topo do molde é uma importante fonte de grãos equiaxiais [1]. Outros pesquisadores acreditam que a estrutura equiaxial menos refinada produzida em grandes fundidos com altos superaquecimentos e aplicação de um campo magnético constante originou-se de grãos nucleados no topo do molde. O superaquecimento e a falta de convecção prejudicariam a criação e sobrevivência de núcleos provenientes do big bang e do destacamento de braços de dendritas. Fragmentos de dendritas rejeitadas à frente da interface colunar, causados por um fluxo interdendrítico orientado pelo gradiente de densidade e subsequente canalização são uma fonte adicional de grãos equiaxiais [1].

O destacamento de dendritas é coerente com a influência da convecção. Com a redução da convecção no líquido através da aplicação de um campo magnético estático[6] ou através da força de Coriolis, reduz-se a extensão da zona equiaxial e os grãos tornam-se maiores [1], até eliminar-se a zona equiaxial completamente. A convecção pode favorecer o destacamento de dendritas por meios mecânicos ou refusão local e então transportar os fragmentos de dendritas à frente da interface de crescimento.

Em experiências, pesquisadores têm relatado que os mecanismos de “big bang” e destacamento de dendritas operam em conjunto [8]. Entretanto, na ausência de turbulência no vazamento, a remoção do campo magnético estático quando a

temperatura central alcançar um patamar durante resfriamento faz com que não tenhamos zona equiaxial [6]. Isso indica que o mecanismo de destacamento dendrítico não ocorre. Entretanto, dos três mecanismos de nucleação, somente o destacamento dendrítico pode explicar a formação de uma zona equiaxial em que há ausência de núcleos heterogêneos e o molde não tenha exercido efeitos de resfriamento [1].

### **3.4 Modelos Estocásticos para a Transição Colunar-Equiaxial**

O controle e previsão da estrutura de solidificação são fundamentais para que se obtenham ligas com elevada resistência mecânica. Geralmente, uma estrutura com a presença de uma região refinada de grãos equiaxiais fornece uma liga com qualidade desejável. Para tanto, a modelagem matemática torna-se uma ferramenta essencial para esta previsão e controle da estrutura almejada, relacionando a estrutura requerida com as condições de processamento. Diversos estudos foram desenvolvidos com este escopo.

A previsão da CET é de extrema importante para inferirmos as propriedades da liga estudada. Foram desenvolvidos modelos a fim de se prever esta região, bem como a estrutura de grãos. Os modelos matemáticos estocásticos possuem uma ou mais variáveis aleatórias, diferentemente dos modelos determinísticos. Estes modelos simulam a nucleação e crescimento de cada grão, prevendo a macroestrutura bruta de solidificação e, com isso, a CET. O inconveniente deste tipo de simulação é a necessidade de uma grande capacidade computacional.

Pode-se traçar uma tendência da transição colunar-equiaxial através da análise qualitativa dos fatores que influenciam esta transição. Porém, uma análise quantitativa mais acurada requer uma compreensão de todos os mecanismos envolvidos no fenômeno. Como exemplo, o crescimento competitivo das regiões colunar e equiaxial afeta o campo térmico, visto que o crescimento colunar é afetado pelas isothermas liquidus e solidus. Por outro lado, o crescimento à frente da interface colunar altera o campo de temperaturas, através da liberação de calor latente desta etapa de crescimento. Estes mecanismos com vários fenômenos envolvidos ocorrendo simultaneamente dificultam a modelagem matemática, devido ao seu alto grau de complexidade.

Spittle e Brown [9] desenvolveram os modelos estocásticos precursores, utilizando o método de Monte Carlo. Esta modelagem divide-se o domínio contendo sólido e líquido em diversas células e a interface entre elas contém um nível de energia associado. A simulação do crescimento de grãos envolveu o conceito de minimização de energia total das células. Com isso, o modelo forneceu macroestruturas simuladas comparáveis às reais, porém o modelo era incapaz de associar o tempo ao fenômeno.

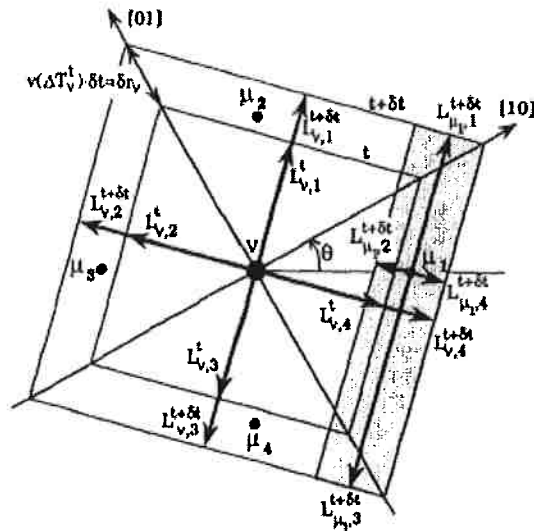
Um novo modelo estocástico foi proposto por Gandin e Rappaz [10], eliminando-se o problema referente à escala de tempo, descrita anteriormente. Eles utilizaram uma técnica conhecida como “Autômato Celular” (CA), onde foi associado o tempo às equações de crescimento dendrítico. Cada sítio de nucleação heterogênea compreendia um substrato diferente, com um super-resfriamento crítico característico associado a cada substrato. Foi considerada uma distribuição normal estatística para os super-resfriamentos associados aos substratos. Esta distribuição normal é construída a partir das seguintes variáveis:

- super-resfriamento médio para nucleação ( $\Delta T_{nuc}$ ).
- desvio padrão ( $\Delta T_{\sigma}$ ).
- densidade máxima do número de núcleos ( $n_{max}$ ).

Foram utilizadas duas distribuições normais, uma para a fronteira do domínio (superfície do molde) e outra para o interior da cavidade do molde. Após a nucleação, o crescimento do núcleo era simulado pela técnica do “Autômato Celular”. Neste método, um quadrado era associado a cada célula e seu crescimento era guiado pelas equações de crescimento dendrítico. Ao crescer, este quadrado acaba por tocar o centro de uma célula vizinha, ativando-a e passando características da célula anterior, gerando um novo quadrado. Com isto, tem-se a simulação do crescimento de um envelope dendrítico.

Posteriormente, Gandin e Rappaz associaram este modelo, denominado microscópico, a um outro modelo, denominado macroscópico, baseado na transferência de calor, utilizando o método dos elementos finitos [11]. O crescimento e nucleação de grãos foram modelados de modo semelhante ao modelo apresentado anteriormente, porém com melhorias significativas. Neste modelo, o núcleo inicial era um quadrado, porém as células ativadas tinham aspecto

retangular. A seguir uma representação do crescimento de grãos do modelo em questão (Fig. 2).



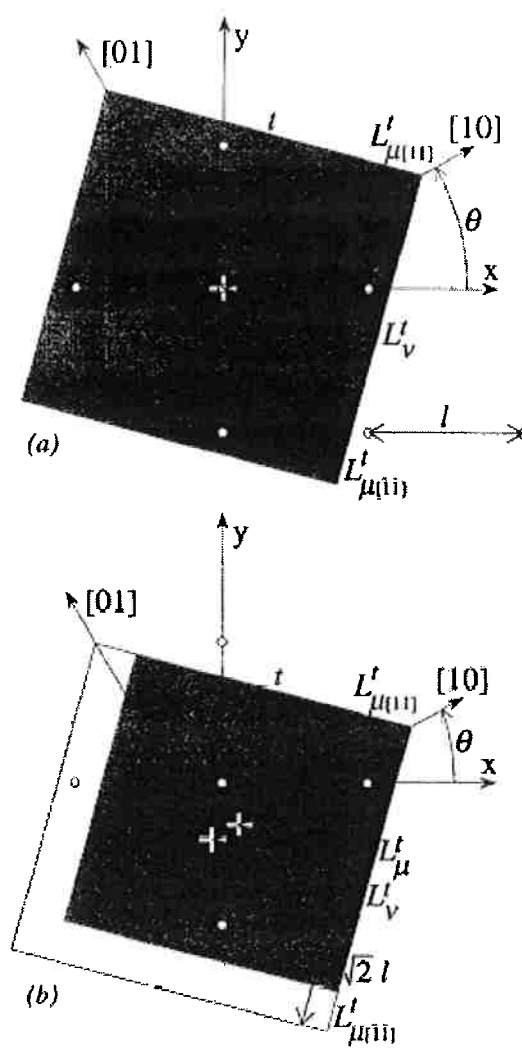
**Figura 2:** Representação esquemática do crescimento retangular do envelope dendrítico, inicialmente quadrado, defasado de um ângulo  $\theta$ , em relação ao eixo da malha do autômato celular [11].

Este modelo descrito foi testado e validado perante sua capacidade de simular o crescimento dos envelopes dendríticos e a capacidade de gerar uma estrutura bruta de solidificação similar a experimentos reais realizados, obtendo uma boa aderência de resultados entre os casos simulados e reais.

Posteriormente, Gandin e Rappaz [12] extrapolaram o modelo, passando de duas para três dimensões. Somente uma modificação técnica do autômato celular foi feita. Todos os envelopes crescem em forma quadrática, mas apenas o núcleo inicial possui o centro coincidindo com o centro da sua célula. À medida que o tempo passa, as células vão sendo ativadas e os quadrados são arranjados para manter a orientação do núcleo inicial. Este modelo foi simulado em condições de temperaturas uniformes, a fim de obter a aferição e validação do novo método de crescimento das células.

A seguir, uma representação do crescimento de células (Fig. 3). Salienta-se a observação em que em (a) temos o centro do núcleo inicial coincidindo com o centro da célula. Em (b) isto não é uma condição necessária.





**Figura 3:** Representação esquemática do crescimento do autômato celular quadrado descentralizado para a célula de nucleação (a) e uma célula arbitrária (b) [12].

Posteriormente foi desenvolvido um modelo por Biscuola [13], baseado no modelo de Rappaz e Gandin [12], onde se utiliza o método dos volumes finitos para os cálculos de transferência de calor.

## 4 MATERIAIS E METODOLOGIA

### 4.1 Modelo Matemático Estocástico Utilizado

No presente trabalho, foi utilizado um modelo desenvolvido por Biscuola [13], baseado no modelo de Rappaz e Gandin [12]. A principal alteração consiste na utilização do método dos volumes finitos, ao invés do método dos elementos finitos, a fim de se solucionar numericamente a equação de condução de calor.

Foi realizado o acoplamento de dois modelos para gerar o modelo final: um modelo responsável pela transferência de calor, denominado submodelo macroscópico e um modelo responsável por gerar o nucleamento e crescimento de grãos, denominado modelo microscópico. Desse modelo houve a necessidade de acoplar esses dois submodelos e gerar o modelo matemático em questão.

#### 4.1.1 Submodelo Macroscópico

Este modelo tem como escopo solucionar a equação de conservação de energia em coordenadas retangulares, a fim de simular a transferência de calor, considerando seu fluxo nas direções (x;y), como mostrado a seguir:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K \frac{\partial T}{\partial y} \right) [2]$$

O domínio retangular utilizado definiu os contornos norte, leste e oeste do molde contendo condições adiabáticas. A extração de calor de-se no contorno sul do molde (base do molde). Essa situação descrita permite a utilização das seguintes condições de contorno:

$q=0$	condições adiabáticas [3]
$q=h(T_{\text{molde}}-T)$	interface molde/metal [4]

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;  $T_{\text{molde}}$  é a temperatura do molde e  $T$  é a temperatura do contorno do domínio.

A condição adiabática da Eq. [3] foi utilizada nas paredes laterais e no topo do molde, onde existe interface metal/molde e molde/ambiente, onde foi definido que a transferência de calor é nula. A condição de transferência de calor por condução apresentada pela Eq. [4] foi utilizada na superfície inferior, onde tem-se uma base de molde refrigerado.

Para obter-se a resolução numérica da equação [4], foi utilizado o método dos volumes finitos, resultando na seguinte equação algébrica, com formulação explícita, definida por Patankar [14]:

$$\delta H_{VF}^{t+\delta t} = (a_E T_E' + a_W T_W' + a_N T_N' + a_S T_S') + [-a_E - a_W - a_S - a_N] \cdot T_P' \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta y} \quad [5]$$

onde

$$a_E = \frac{K_E \Delta y}{(\delta x)_E} \quad a_W = \frac{K_W \Delta y}{(\delta x)_W}$$

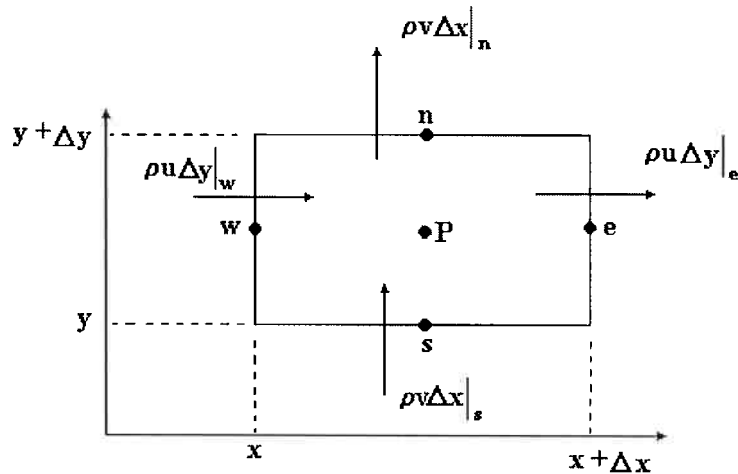
$$a_N = \frac{K_N \Delta x}{(\delta y)_N} \quad a_S = \frac{K_S \Delta x}{(\delta y)_S}$$

onde  $\Delta x$  e  $\Delta y$  representam as dimensões de um volume finito,  $K$  a condutividade térmica,  $\delta x$  e  $\delta y$  a distância entre os centros dos volumes finitos e  $\Delta t$  o passo de tempo.

Utilizando este método explícito, deve-se atentar ao critério de estabilidade do método, que impõe um limite superior para o passo de tempo utilizado na simulação, como mostrado abaixo:

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

Neste caso, tem-se uma malha quadrada, onde  $\Delta x$  e  $\Delta y$  possuem mesmo valor. A seguir uma representação de um volume finito (Fig. 4).



**Figura 4:** Representação esquemática de um volume finito bidimensional. No caso particular, tem-se  $\Delta x$  e  $\Delta y$  possuindo valores iguais, gerando um volume quadrático

Com este método, calcula-se a entalpia no instante  $t + \delta t$  a partir das temperaturas no instante  $t$  utilizando a equação [5] em cada volume da malha pré-definida.

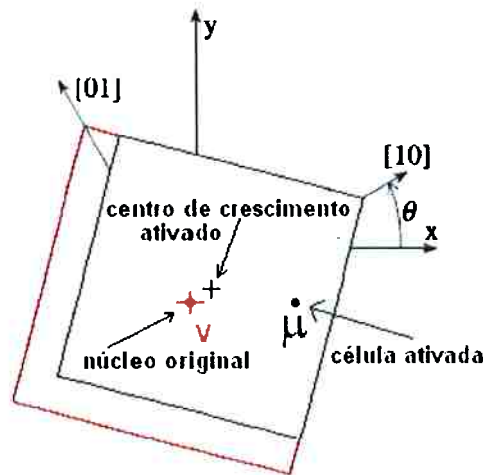
#### 4.1.2 Submodelo Microscópico

No submodelo microscópico, foram feitas subdivisões no domínio dos volumes finitos, a fim de serem obtidas células quadradas para simular a nucleação heterogênea e o crescimento de grão, bem como a macroestrutura. Em um primeiro instante, ocorre a nucleação heterogênea da célula e esta passa a simular o crescimento do envelope dendrítico. O primeiro envelope criado possui o centro coincidente com o centro da célula. As células nucleadas irão incorporar uma orientação específica a cada uma, definida por um ângulo formado entre as direções cristalográficas  $[1\ 0]$  e  $[0\ 1]$ , com o eixo  $x$ , variando de  $-45^\circ$  a  $+45^\circ$ .

Após nuclear, as células são atualizadas a cada passo de tempo, simulando assim o crescimento do envelope dendrítico. O cálculo do crescimento da metade do lado do envelope dendrítico é calculado por:

$$L_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \int_t^{t+\delta t} v[\Delta T_i(\tau)] d\tau \quad [6]$$

Onde L representa o lado da célula, v é a velocidade de crescimento da ponta da dendrita e  $\Delta T$  o super-resfriamento local dependente do tempo t, no centro da célula em questão. Esta célula irá encontrar uma célula vizinha e, ao tocá-la, ela ativará esta nova célula, que receberá a orientação da célula que a tocou. A célula nova passa então a crescer com o super-resfriamento calculado em seu centro, como mostrado a seguir (Fig. 5).



**Figura 5:** Representação esquemática do crescimento celular onde o centro de crescimento ativado não coincide com o centro do núcleo original. A célula inicial (v) tocou e ativou a sua vizinha ( $\mu$ ), que por sua vez tem o seu envelope descentrado em relação à sua célula.

A fim de evitarem um crescimento muito grande indesejado de envelopes dendríticos, Rappaz e Gandin [12] resolveram truncar as células, limitando seu crescimento por um valor máximo, dado por:

$$L_i = \frac{1}{2} \cdot \left[ \text{Min}(L_{i[11]}, \sqrt{2} \cdot l) + \text{Min}(L_{i[\bar{1}\bar{1}]}, \sqrt{2} \cdot l) \right] [7]$$

onde  $L_{i[11]}$  e  $L_{i[\bar{1}\bar{1}]}$  são distâncias entre o centro da célula e o lado do envelope dendrítico.

Uma vez definida o  $L_i$ , um envelope de tamanho  $2L_i$  é posicionado na nova célula, com sua aresta coincidindo com a aresta mais próxima do envelope que a ativou (Fig. 5). Assim, o centro do novo envelope não coincidirá necessariamente com o centro de sua célula. Quando esta célula crescer e ativar as quatro células ao redor, ela desativará e seu crescimento não mais será atualizado a cada passo de tempo.

A ponta da dendrita cresce com velocidade  $v$ . Esta velocidade é calculada segundo as equações empregadas por Rappaz e Gandin [11], dada por:

$$v(\Delta T) = a_2 \times \Delta T^2 + a_3 \times \Delta T^3 [8]$$

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

A nucleação em questão é heterogênea. Utilizam-se duas distribuições gaussianas normais: uma para o contorno do domínio (parede interna do molde) e outra para o interior do molde. A seguinte equação foi utilizada a fim de se calcular a formação de núcleos ( $n$ ) com o aumento do super-resfriamento do líquido ( $\Delta T$ ):

$$\frac{dn}{d(\Delta T)} = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi} \cdot \Delta T} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\Delta T - \Delta T_{nuc}}{\Delta T_{\sigma}} \right)^2 \right] [9]$$

onde  $n_{\max}$  representa o número máximo de substratos,  $\Delta T_{nuc}$  representa o valor médio do super-resfriamento no líquido para nucleações e  $\Delta T_{\sigma}$  representa o desvio padrão. Deste modo definem-se seis parâmetros para a nucleação: três para a parede interna do molde e três para o interior do molde.

Deste modo, a densidade de núcleos em um líquido perante um super-resfriamento  $\Delta T$  é dada pela seguinte equação:

$$n_s(\Delta T) = \int_0^{\Delta T} \left[ \frac{dn}{d(\Delta T)} \right] \cdot d(\Delta T) \quad [10]$$

Inicialmente, escolhe-se uma célula de modo aleatório e um super-resfriamento sorteado segundo a distribuição gaussiana normal. Os super-resfriamentos são distribuídos nas células até que o número máximo de substratos seja atingido, tanto para a parede interna do molde quanto para o interior do mesmo. Caso a célula aleatória sorteada já contenha um valor de super-resfriamento, utiliza-se o maior valor dos dois números.

Na simulação, as células são verificadas quanto à nucleação. Se o super-resfriamento no centro de uma célula for maior do que o seu super-resfriamento para nucleação, a célula é ativada. Para tanto, atribui-se uma orientação escolhida de modo aleatório entre 48 classes na faixa de  $-45^\circ$  a  $45^\circ$ .

#### 4.1.3 Acoplamento entre os Submodelos Macroscópicos e Microscópicos

O acoplamento entre os modelos é necessário, a fim de simular simultaneamente o cálculo do campo de temperaturas e o crescimento dos envelopes dendríticos. Deste modo, a variação de entalpia do volume finito é fornecida pelo modelo macroscópico (através da resolução da Eq. [5]). Como no interior do volume finito temos várias células, a variação de entalpia foi interpolada para cada célula a partir das variações ocorridas nos volumes finitos. A fração de sólido no próximo passo de tempo do método numérico ( $f_s^{t+\delta t}$ ) foi calculada para cada célula, utilizando a variação de entalpia ( $\delta H_{CA}$ ) interpolada no passo de tempo anterior. O cálculo realizado é dado por:

$$\delta H_{CA} = \rho \cdot Cp [T^{t+\delta t} - T^t] - \Delta H_f \cdot \rho [f_s^{t+\delta} - f_s^t] \quad [11]$$

A temperatura no instante de tempo  $t + \delta t$  ( $T^{t+\delta t}$ ) era desconhecida, logo precisaria-se de uma relação entre  $T^{t+\delta t}$  e  $f_s^{t+\delta t}$  para que se pudesse solucionar a equação [11]. Obteve-se a relação através do modelo de Scheil [15], dada por:

$$f_s = 1 - \left( \frac{T_f - T}{T_f - T_{liq}} \right)^{\frac{1}{(k-1)}} \quad [12]$$

Substituindo-se esta relação na Eq. [11], obteve-se a equação para o cálculo da variação da fração de sólido, dada a seguir:

$$\delta f_{s,CA}^{t+\Delta t} = \left( \frac{-\delta H_{CA}^{t+\Delta t}}{\rho \cdot Cp \cdot (T_L - T_f) \cdot (k-1) \cdot [1 - f_{s,CA}^t]^{(k-2)} + \Delta H_f \cdot \rho} \right) \quad [13]$$

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

A fração de sólido foi atualizada após cada passo de tempo até que a temperatura do eutético fosse atingida. 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.[11], até que a fração de sólido se igualasse a 1. Com isso obteve-se:

$$\delta f_{s,CA}^{t+\Delta t} = -\frac{\delta H_{CA}^{t+\Delta t}}{\Delta H_f \cdot \rho} \quad [14]$$

O calor latente de todas as células associadas a um volume finito (VF) foi calculado, e este valor foi utilizado no submodelo macroscópico para o cálculo das temperaturas. A seguir, o cálculo mencionado:

$$\delta f_{s,VF} = \frac{\sum \delta f_{s,CA}}{n_{CA}} \quad [15]$$

#### 4.1.4 Sequência de Execução dos Passos do Modelo Implementado

O modelo em questão, implementado por Biscuola, apresenta uma seqüência de execução de passos descrita a seguir [13]:



- 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.

## 4.2 Métodos de Quantificação

A fim de realizar-se uma análise paramétrica do modelo, foram quantificados parâmetros a partir dos resultados da simulação, descritos a seguir:

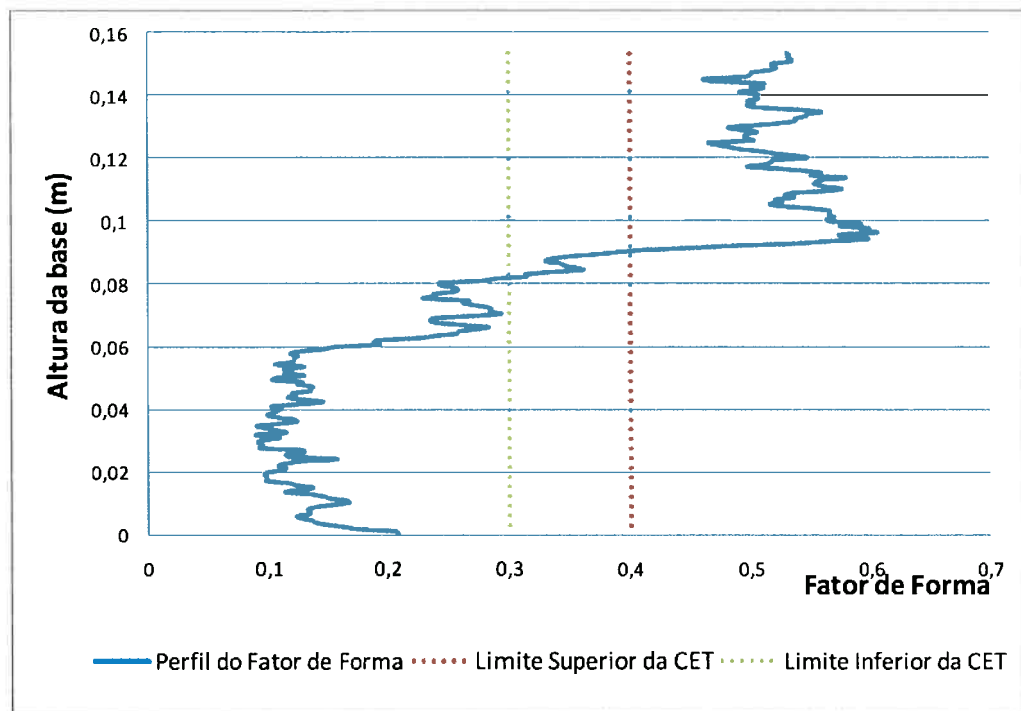
- Uma macroestrutura
- Perfis de temperatura em função do tempo para diferentes posições.
- O perfil do fator de forma dos grãos em questão em função da distância da base do molde.

A partir desses dados, foram definidos e implementados métodos em linguagem c de computação para quantificar as respostas dadas pela simulação. Estes códigos e métodos serão descritos a seguir.

#### **4.2.1 Quantificação do Limite Superior e Inferior da CET**

A fim de analisar a influência dos parâmetros descritos anteriormente na CET, deve-se primeiro defini-la. Não há como estabelecer perfeitamente a faixa da CET, porém pode-se razoavelmente definir uma faixa na qual ela ocorre. Ao estabelecer os fatores de forma para os grãos, consegue-se determinar uma faixa de fator de forma na qual a transição colunar-equiaxial ocorre. Esta faixa foi definida para valores de fator de forma entre 0,3 e 0,4. Quando o perfil do fator de forma começasse a assumir valores imediatamente acima de 0,3, assumiria-se esta altura correspondente como sendo o limite inferior da CET. Quando este perfil começasse a assumir valores acima de 0,4 assumiria-se a altura correspondente como sendo o limite superior da CET.

A seguir um perfil de fator de forma de uma das simulações realizadas, destacando seus aspectos importantes (Fig. 6):



**Figura 6:** Perfil do fator de forma para um dos testes realizados. Nota-se claramente o Limite Inferior e Superior da CET, ao atingir o valor de 0,3 e 0,4 , respectivamente.

#### 4.2.2 Quantificação da Largura Média dos Grãos Colunares

De posse do limite inferior da CET, consegue-se estabelecer um método para a quantificação da largura média do grão colunar. A macroestrutura gerada na simulação, primeiramente consiste de um arquivo de texto com diversos conjuntos de números. Esses números representam as 48 classes de orientação possíveis geradas no nucleamento e determinam os grãos simulados, em sua etapa de crescimento. Logo um grão é formado por diversos números de mesmo valor, dispostos ao redor, uns dos outros. A seguir, uma representação esquemática deste arquivo (Fig. 7):

3	3	3	46	46
3	3	3	46	46
3	3	3	46	46
3	3	3	46	46
25	25	3	3	3
25	25	3	3	3

**Figura 7:** Representação esquemática da macroestrutura gerada pelo arquivo de texto. Podemos notar a existência de 3 grãos, coloridos de forma a explicitar

De posse deste arquivo de texto e do limite inferior da CET, foi gerada uma rotina computacional a fim de se calcular a largura média do grão colunar. Esta rotina consiste nos seguintes passos:

- A partir do limite inferior da CET, varre-se esta linha, contando quantos grãos diferentes existem nesta linha.
- Repete-se o item anterior, guardando o número de grãos diferentes existentes em cada linha.
- Após varrerem-se todas as linhas, do limite inferior da CET até a base do molde, pode-se calcular a largura média dos grãos colunares. Para tanto, dividi-se a largura do molde pela somatória de grãos diferentes contados ao longo da varredura da região colunar. De posse deste número, multiplica-se pela quantidade de linhas varridas ao longo da região colunar, obtendo assim a largura média dos grãos colunares.

#### 4.2.3 Quantificação do Diâmetro Médio dos grãos equiaxiais

O refinamento de grãos da região equiaxial é um parâmetro muito importante, pois de certo modo indica o aspecto da qualidade mecânica da peça. Esta região apresenta isotropia de propriedades físicas e mecânicas. Caso obtenha-se para uma mesma área de região equiaxial um maior refinamento de grãos, ter-se-ia propriedades mecânicas, de um modo geral, superiores. Logo, um parâmetro importante a ser extraído da macroestrutura gerada, é o tamanho médio dos grãos equiaxiais.

De posse do limite superior da CET, desenvolveu-se um método para calcularmos a quantidade de grãos equiaxiais existentes na região equiaxial, definida anteriormente. Deste modo conseguiu-se extrair o número de grãos equiaxiais por unidade de área, transformando-o através de uma relação estereológica para o domínio em três dimensões. Após isso faz-se uma relação entre o número de grãos por unidade de volume e seu diâmetro médio. A seguir, os passos deste método:

- a) Gera-se um arquivo de texto anterior à etapa de solidificação, contendo apenas os núcleos que poderão crescer, promovendo o crescimento de grão.
- b) Compara-se este arquivo com o arquivo posterior à solidificação, contendo todos os grãos e nenhuma fração de líquido. Contam-se todos os núcleos da região equiaxial (entre o limite superior da CET e o topo do molde) que cresceram, originando grãos, excluindo aqueles que não cresceram, ou seja, os números isolados sem iguais ao redor no arquivo de texto.
- c) De posse do número de grãos equiaxiais, divide-se este número pela área da região equiaxial, gerando o número de grãos por unidade de área.
- d) O número calculado anteriormente é transformado para o domínio em três dimensões, através da seguinte relação:

$$n_T^{2D} = (n_T \sqrt{6/\pi})^{2/3}$$

onde  $n_T^{2D}$  é o número de grãos equiaxiais por unidade de área e  $n_T$  é o número de grãos por unidade de volume.

- e) Com o número de grãos por unidade de volume, calcula-se o diâmetro médio de grão equiaxial através da seguinte relação estereológica:

$$n_T = 0,5 / l^3$$

onde  $l$  é o diâmetro médio de grão equiaxial.

Com estes passos calculamos o diâmetro médio de grão equiaxial.

### 4.3 Método Utilizado na Análise Paramétrica

A análise paramétrica de modelos matemáticos é de extrema importância, pois mede a sensibilidade do modelo quanto às variáveis utilizadas. A técnica consiste em simular diversos casos, variando uma variável e mantendo as outras constantes. Desse modo consegue-se analisar como as respostas da simulação se comportam perante cada variável isoladamente, para os casos definidos previamente.

As variáveis que se mantiveram constante assumiram o valor do caso padrão do trabalho de Biscuola [13]. No presente estudo, analisa-se o comportamento do modelo perante as variáveis da distribuição normal gaussiana de super-resfriamento para o interior do molde, a seguir mencionadas:

- densidade máxima do número de núcleos (  $n_{\max}$  ).
- super-resfriamento médio (  $\Delta T_{\text{nuc}}$  ).
- desvio padrão (  $\Delta T_{\sigma}$  ).

Na presente análise não se estuda estas variáveis para a superfície do molde, apenas para o interior do mesmo.

A seguinte tabela irá resumir as propriedades comuns a todos os testes paramétricos.

**Tabela 2:** Parâmetros constantes de simulação nas análises paramétricas

Parâmetros de simulação	Valor utilizado
Base do molde	0,07m
Altura do molde	0,154m
$VF_i$	1
$VF_j$	20
$CA_i$	100 ou 200
$CA_j$	11 ou 22
Passo de tempo para o crescimento	0,002 s
Tempo máximo de simulação	1400 s
Temperatura do eutético	850K
Temperatura liquidus	891K
Temperatura de fusão do metal puro	933K
$\Delta T_{nuc}$ superficial	0,1 K
$\Delta T_\sigma$ superficial	0,1 K
$n_{max}$ superficial	0,5 m <sup>-2</sup>
$T_{molde}$	298 K
$T_{metal}$	991 K
$C_p$	1126 J/Kg.K
$\rho$	2452 Kg/m <sup>3</sup>
$H_f$	387400 J/Kg
$k$	0,13
$h$	250 W/m <sup>2</sup> K

Cabe observar que a malha da célula utilizada foi preferencialmente  $CA_i=100$  e  $CA_j=11$ . Só foi usado  $CA_i=200$  e  $CA_j=22$  quando a malha era insuficiente para suportar o número máximo de substratos. Demais parâmetros não mencionados podem ser encontrados no caso padrão apresentado por Biscuola [13].

## 5 Resultados e discussão

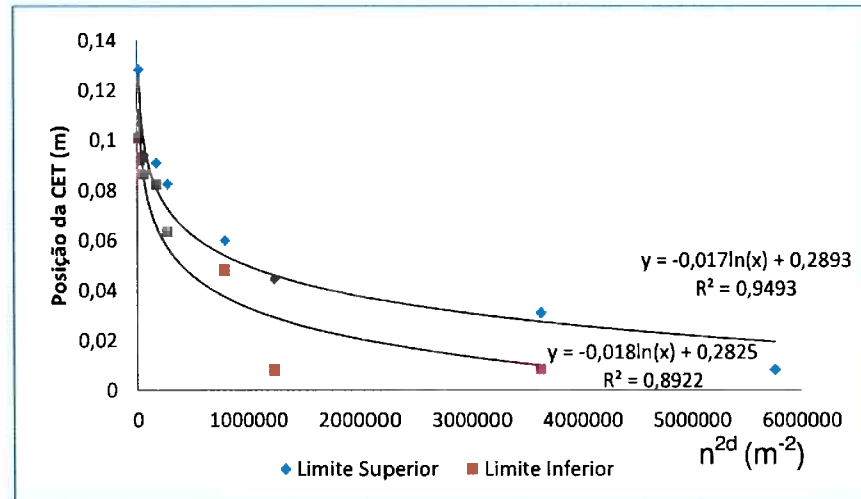
### 5.1 Análise Paramétrica

A seguir, serão discutidos os resultados apresentados pela análise paramétrica.

#### 5.1.1 Análise da Influência da Densidade Máxima do Número de Núcleos ( $n_{\max}$ )

A fim de estudarmos a influência de  $n_{\max}$ , foram realizadas diversas simulações, variando esta variável e mantendo as outras constantes. O valor utilizado de  $\Delta T_{\text{nuc}}$  foi 4,0 e o valor de  $\Delta T_{\sigma}$  foi 0,3.

Observou-se uma clara correlação negativa para os valores da altura da CET e a densidade máxima do número de núcleos. A correlação se ajusta com uma boa aderência para uma correlação logarítmica, apresentando valores de erros quadráticos próximos a 1, como mostrado a seguir (Fig. 8):



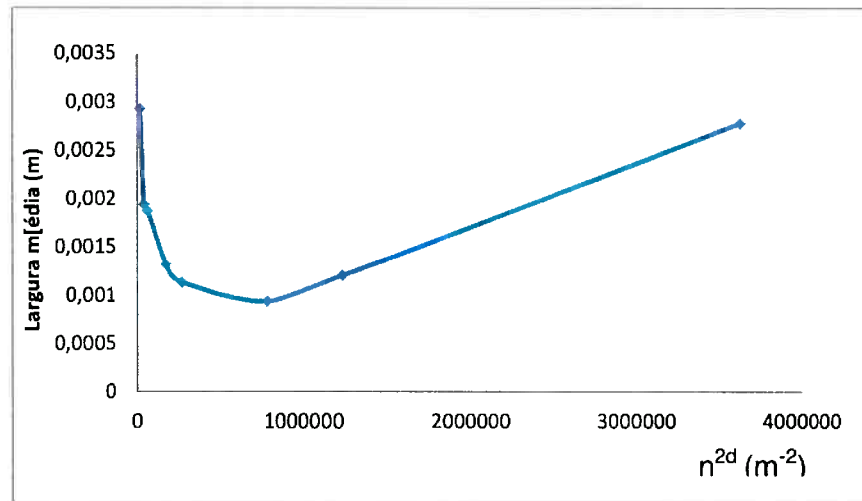
**Figura 8:** Gráfico representando a relação entre  $n^{2d}$  e a região da CET, através de correlação logarítmica.

Esta tendência é coerente com a teoria de solidificação, pois quanto mais substratos existem para a nucleação, maior a tendência destes barrarem a frente colunar.

A variação da largura média dos grãos colunares em função da variação de  $n_{\max}$  não forneceu uma correlação linear positiva ou negativa. Ela apresenta correlação negativa em seu início e depois passa a ter um aspecto correlacional positivo, como

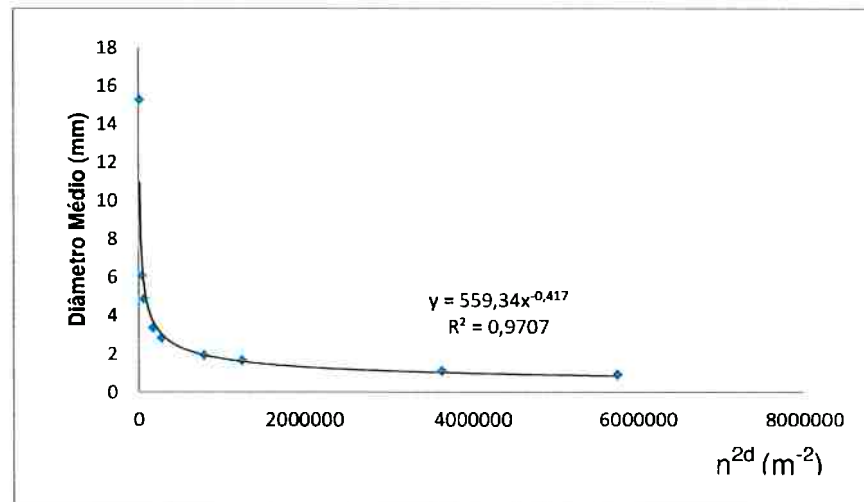


mostrado na Fig. 9. Não foi encontrada uma explicação para a tendência observada para o caso acima mencionado.



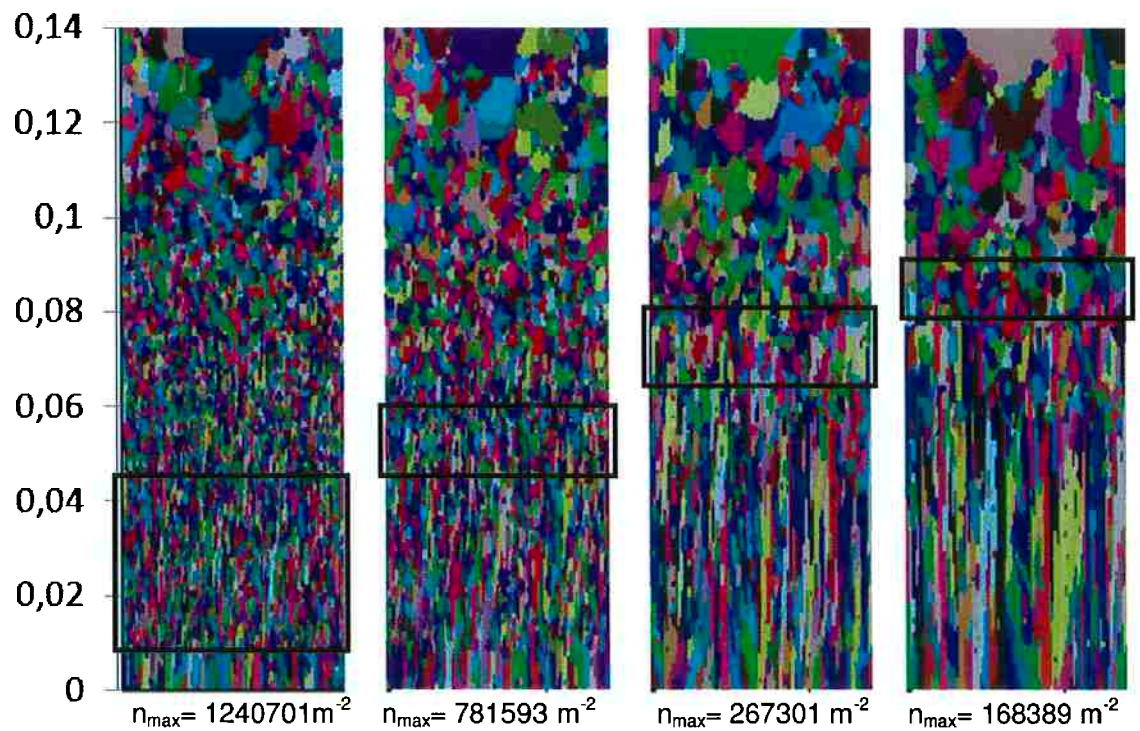
**Figura 9:** Gráfico representando a relação entre  $n^{2d}$  e a largura média dos grãos colunares.

O diâmetro médio de grãos colunares apresentou clara correlação negativa, se ajustando muito bem em uma regressão não linear de equação  $y = 559,34 \cdot x^{-0,417}$ . O valor do erro quadrático foi de aproximadamente 0,97 (Fig. 10). Esta correlação se deve ao fato de que, quanto mais substratos existirem para nucleação, mais grãos equiaxiais irão se formar e, com isso, menor o seu diâmetro médio, baseado no número de núcleos por unidade de área.



**Figura 10:** Gráfico representando a relação entre  $n^{2d}$  e o diâmetro médio de grãos equiaxiais.

Na Fig. 11, uma comparação de diferentes macroestruturas, para diferentes valores de  $n_{max}$  está sendo mostrada.

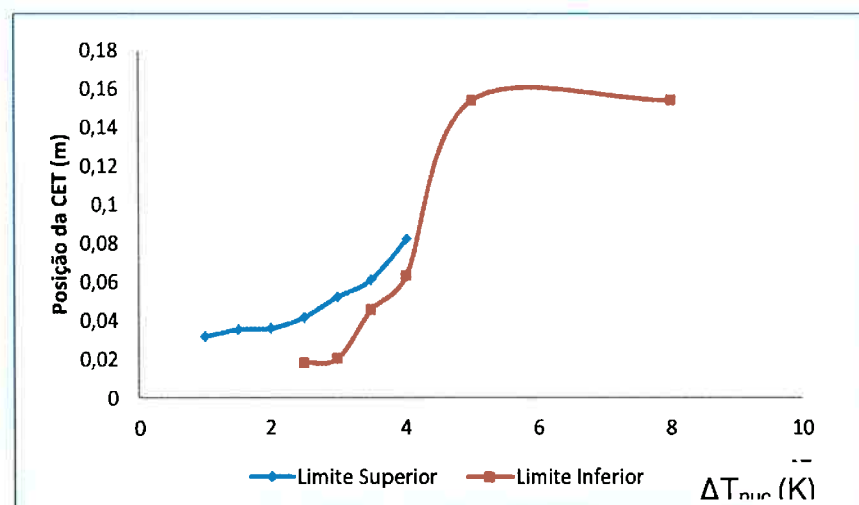


**Figura 11:** Diferentes macroestruturas para diferentes valores de  $n_{max}$ .

### 5.1.2 Análise da Influência da Posição Média da Gaussiana para o Super-Resfriamento médio ( $\Delta T_{nuc}$ )

A fim de estudarmos a influência de  $\Delta T_{nuc}$ , foram realizadas diversas simulações, variando esta variável e mantendo as outras constantes. O valor utilizado de  $n_{max}$  utilizado foi de 267.301 e o valor de  $\Delta T\sigma$  foi de 0,3.

Observou-se uma clara correlação positiva entre a altura da região da CET e  $\Delta T_{nuc}$ . Ao fazermos uma correlação polinomial quadrática encontramos um ótimo ajuste, com valores do erro quadrático de 0,9891 e 0,9953 para os limites superiores e inferiores da CET, respectivamente. O valor do erro quadrático para o limite inferior foi obtido excluindo-se o último ponto (do eixo x), pois ele entra em um platô, só exibindo região colunar. A seguir a nuvem de pontos para a correlação determinada (Fig. 11):

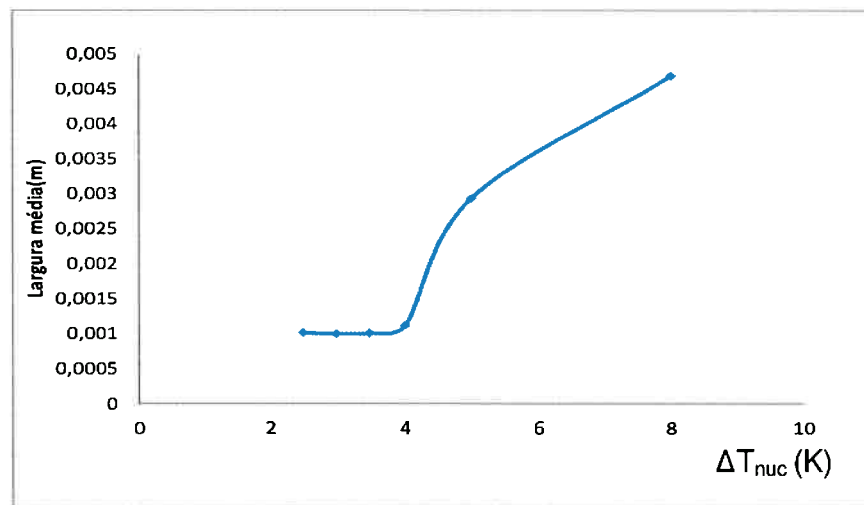


**Figura 12:** Gráfico representando a relação entre  $\Delta T_{nuc}$  e a região da CET. Observa-se o limite para a região inferior da CET, quando atinge a altura total do molde.

Esta correlação se deve ao fato de que, quanto maior o super-resfriamento necessário para a nucleação de grãos equiaxiais, menor será o número de grãos equiaxiais nucleados. Desta forma, estes grãos demoram mais tempo para bloquear a frente colunar, que acaba crescendo mais aumentando o tamanho desta zona na estrutura final. Assim, quanto maior o  $\Delta T_{nuc}$ , maior a altura da região colunar e

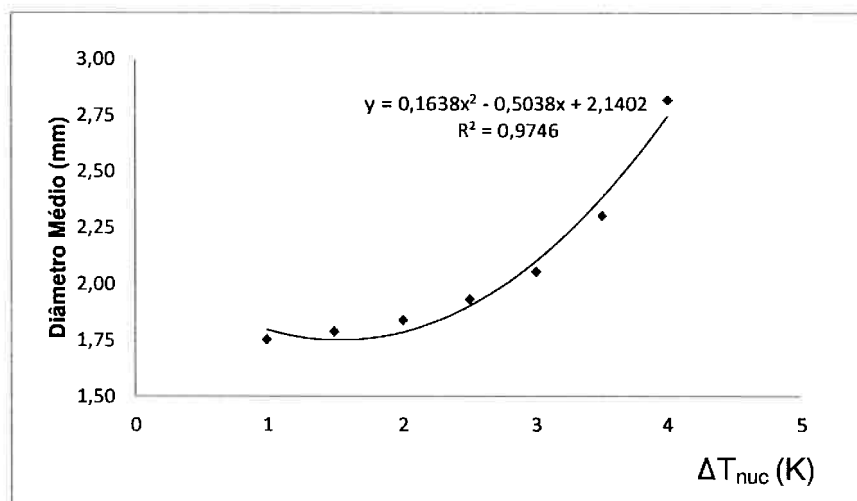
portanto, mais distante da base se encontrará a CET. Ao analisar a equação [9], chega-se à conclusão semelhante.

A relação entre a largura média dos grãos colunares e o  $\Delta T_{nuc}$  se apresenta com uma correlação claramente positiva para valores de  $\Delta T_{nuc}$  superiores a 4. Para valores de  $\Delta T_{nuc}$  entre 2 e 4 temos uma relação aproximadamente constante. Para valores de  $\Delta T_{nuc}$  menores e iguais a 2, não obtivemos região colunar (Fig. 12).



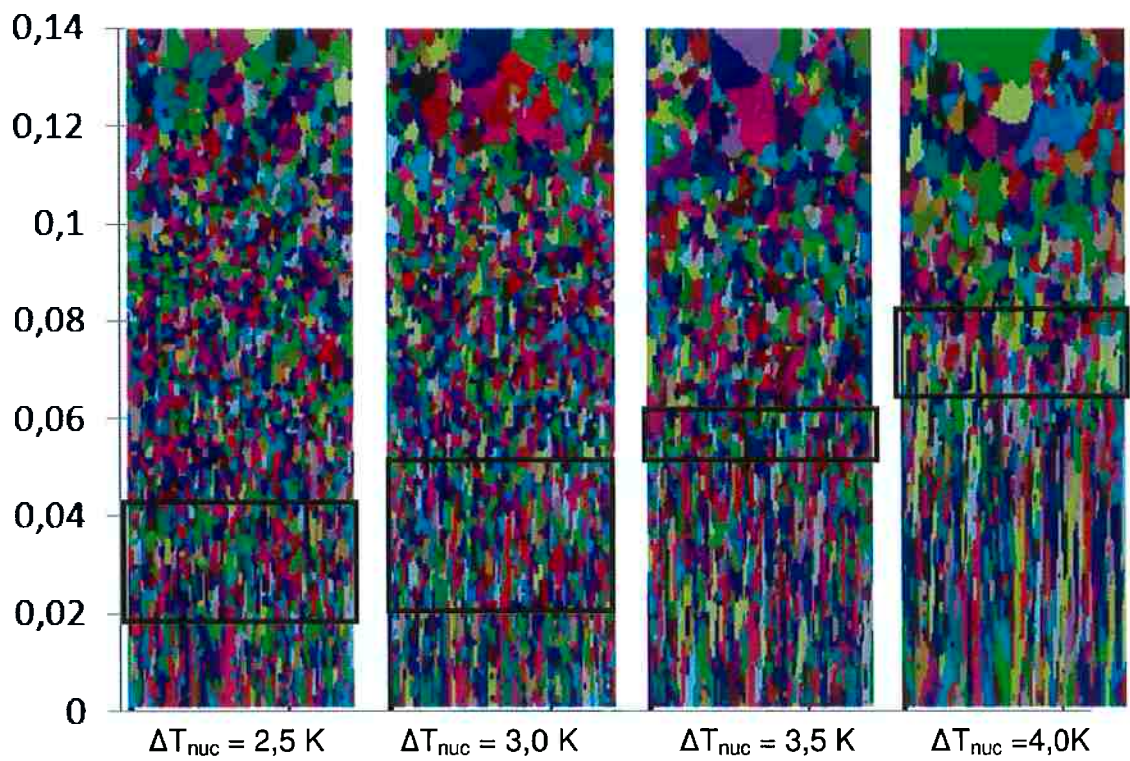
**Figura 13:** Gráfico representando a relação entre a largura média dos grãos colunares e  $\Delta T_{nuc}$ . Observa-se uma clara correlação positiva.

O diâmetro médio dos grãos equiaxiais mostrou clara correlação positiva com  $\Delta T_{nuc}$ . Para valores altos de  $\Delta T_{nuc}$  (5 e 8), não houve região equiaxial, apenas obteve-se região colunar. Ajustou-se a correlação por uma regressão polinomial do segundo grau, obtendo excelente aderência, com um valor de erro quadrático de 0,9975 (Fig. 13).



**Figura 14:** Gráfico representando a relação entre  $\Delta T_{nuc}$  e o tamanho médio de grãos equiaxiais. Observa-se uma clara correlação negativa.

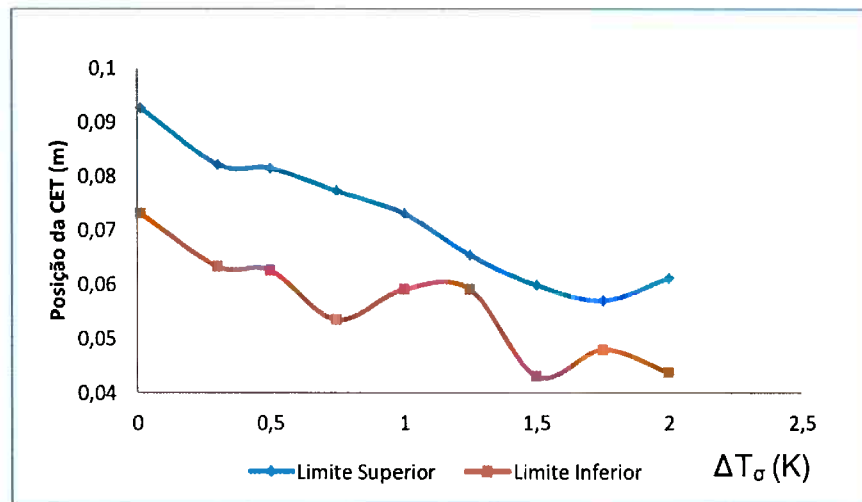
Esta correlação pode ser explicada pelo fato de que, quanto maior o super-resfriamento para a nucleação dos grãos equiaxiais, uma menor quantidade destes grãos acaba nucleando. Desta forma, o tamanho médio destes grãos deve aumentar. Na Fig. 15 está uma comparação de diferentes macroestruturas, para diferentes valores de  $\Delta T_{nuc}$ .



**Figura 15:** Diferentes macroestruturas para diferentes valores de  $\Delta T_{nuc}$ .

### 5.1.3 Análise da Influência do Desvio Padrão para o Super-resfriamento ( $\Delta T_\sigma$ )

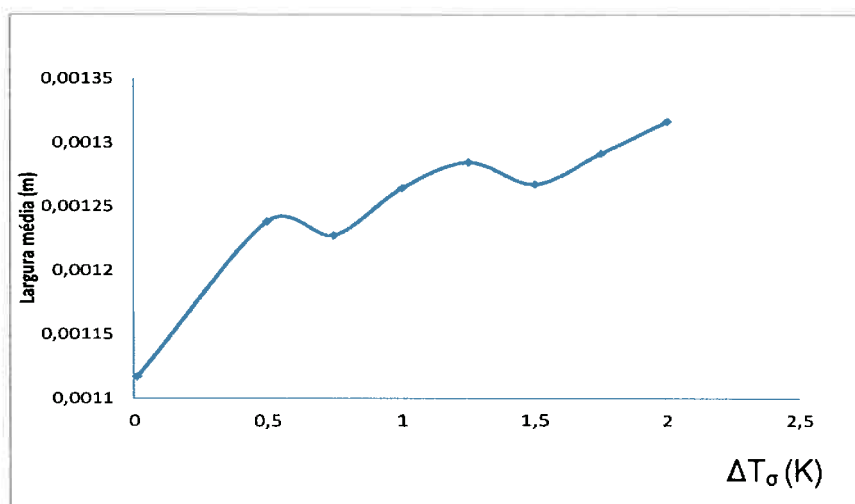
A fim de estudarmos a influência de  $\Delta T_\sigma$ , foram realizadas diversas simulações, variando esta variável e mantendo as outras constantes. O valor utilizado de  $n_{max}$  utilizado foi de 267.301 e o valor de  $\Delta T_{nuc}$  foi de 4,0. Observou-se uma clara correlação negativa entre a altura da CET e  $\Delta T_\sigma$ . Ajustou-se a correlação para uma regressão linear e polinomial de segundo grau, obtendo boa aderência dos resultados (Fig. 14).



**Figura 16:** Gráfico representando a relação entre  $\Delta T_{\sigma}$  e a altura da região da CET. Observa-se uma clara correlação negativa.

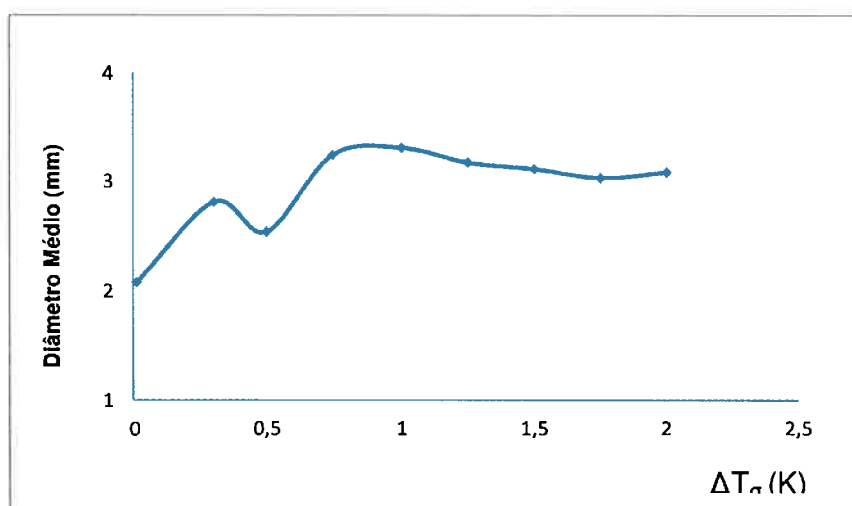
Esta correlação vai de acordo com a teoria, pois quanto maior o desvio padrão para o super-resfriamento, maior a probabilidade de grãos que estão na extremidade de menores super-resfriamentos da distribuição acabarem nucleando. Desta forma, a probabilidade de bloquear a frente colunar aumenta, diminuindo o seu tamanho [9].

A relação entre a largura média do grão colunar e  $\Delta T_{\sigma}$  mostrou uma correlação positiva, embora os pontos não oferecessem um ajuste de regressão tão aderente como nas outras correlações (Fig. 15).



**Figura 17:** Gráfico representando a relação entre a largura média dos grãos colunares e  $\Delta T_{\sigma}$ . Observa-se uma certa correlação positiva.

Por último, relacionou-se a relação do tamanho médio de grão equiaxial com  $\Delta T_{\sigma}$ . Não houve uma correlação clara entre as variáveis, porém observa-se um decaimento inicial seguida de uma possível ascensão do tamanho médio de grão equiaxial em função de  $\Delta T_{\sigma}$ . A nuvem de pontos da relação mencionada está mostrada na Fig. 16.

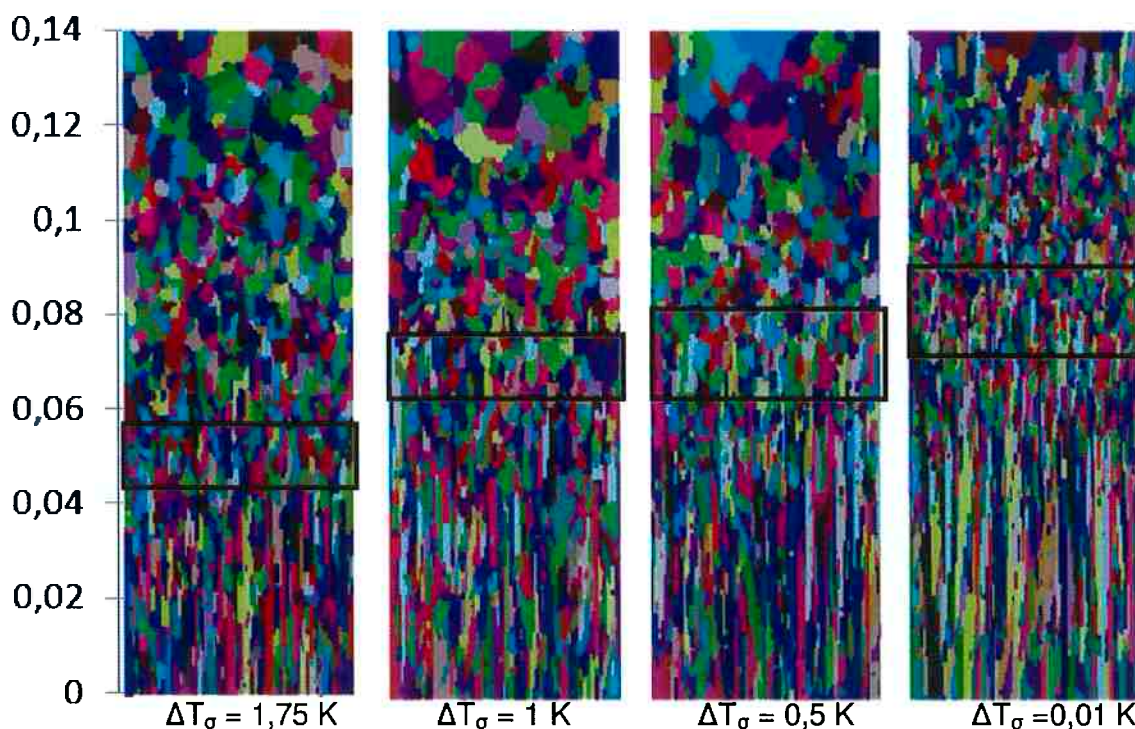


**Figura 18:** Gráfico representando a relação entre o tamanho médio dos grãos equiaxiais e  $\Delta T_{\sigma}$ .

Teoricamente, com um maior desvio padrão para o super-resfriamento, temos um maior número de núcleos formados através dos substratos. Isso aumentaria o



número de grãos equiaxiais, diminuído o tamanho médio de grão equiaxial. Em contrapartida, tem-se um aumento da região equiaxial, evidenciado pela diminuição da altura da CET. Logo o número maior de grãos equiaxiais fica distribuído em uma área maior para o cálculo do tamanho médio de grão equiaxial. Deste modo a curva se comporta entre a competição destes dois fenômenos. Na Fig. 19 estão as macroestruturas relativas a estas simulações.



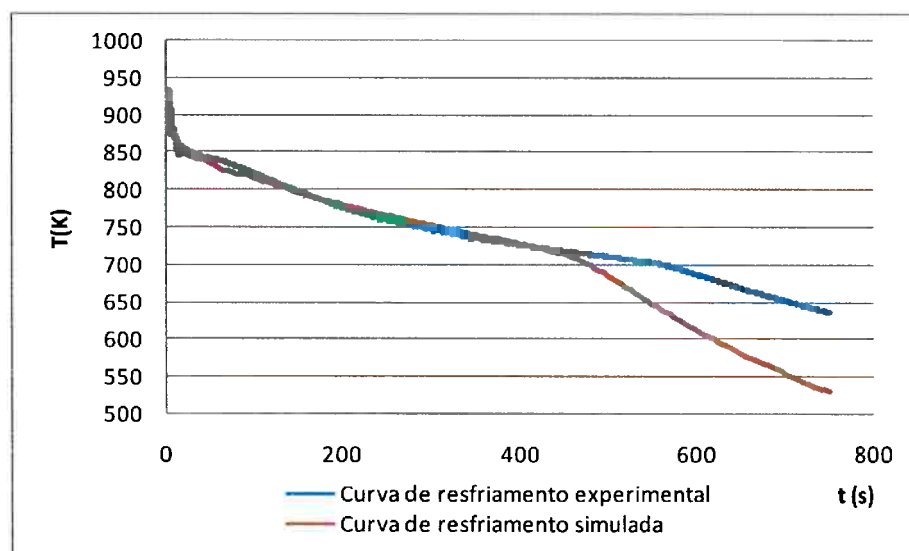
**Figura 19:** Diferentes macroestruturas para diferentes valores de  $\Delta T_\sigma$ .

## 5.2 Repetição de um Resultado Experimental

No presente trabalho, um caso experimental demonstrado na dissertação da tese de mestrado de Arango [16] será simulado. A liga simulada foi a Al-7%Si sem adição de inoculante. Em comparação com a análise paramétrica, poucos parâmetros foram alterados. A geometria do molde foi alterada, apresentando 0,14m de altura e 0,056m de largura da base. Em função disto, a malha teve que ser alterada, para continuar geométricamente quadrada. Foi usado  $VF_i=1$ ,  $VF_j=20$ ,  $CA_i=320$ ,  $CA_j=40$ .

Para encontrar o coeficiente de transferência de calor na interface metal-molde que melhor se ajustasse ao experimental, obteve-se iterativamente, através das

curvas de resfriamento experimentais de Arango [16], um valor de  $h$  que tivesse boa aderência com as curvas de resfriamento geradas pelo modelo. Foi encontrado um valor de  $h=900 \text{ (W/m}^2\text{K)}$ . Na Fig.17, as curvas de resfriamento em questão estão apresentadas.



**Figura 20:** Curvas de resfriamento para o experimento de Arango [16] e para a simulação, utilizando  $h=900 \text{ (W/m}^2\text{K)}$

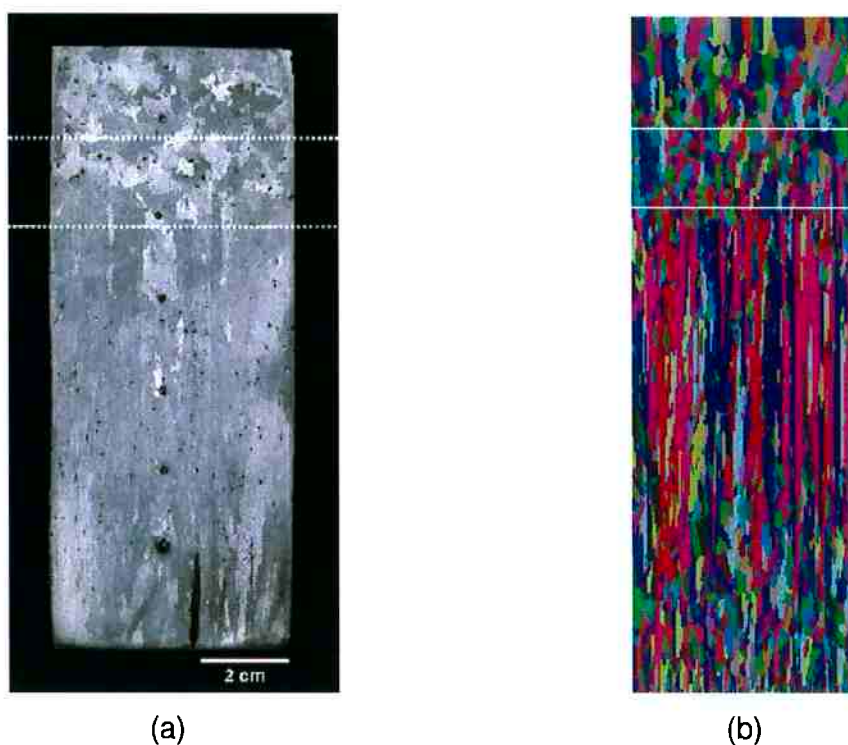
Outra alteração foi realizada para melhor simular a experiência em questão. Observou-se que no início da solidificação experimental os termopares apresentavam um gradiente de temperatura, apresentando um menor valor para a base e um maior valor para o topo. Usou-se os valores do topo e da base a fim de interpolar uma função do primeiro grau que contivesse esses dois pontos. Para a base foi utilizada uma temperatura inicial de 935,97 K e para o topo utilizamos uma temperatura de 949,84 K.

A fim de obter-se os parâmetros da Gaussiana que melhor representasse o resultado experimental em questão, foram feitas diversas simulações, usando como base a análise paramétrica para melhor orientar as tentativas. Na tabela a seguir, será explicitado os parâmetros encontrados.

**Tabela 3:** Parâmetros da Gaussiana utilizados na repetição do resultado experimental de Arango.

Parâmetros da Gaussiana	Valor
$n_{\max}$ superficial	$3412 \text{ m}^{-2}$
$\Delta T_{\text{nuc}}$ superficial	0,5 K
$\Delta T_{\sigma}$ superficial	0,1 K
$n_{\max}$ interno	$267301 \text{ m}^{-2}$
$\Delta T_{\text{nuc}}$ interno	5,5 K
$\Delta T_{\sigma}$ interno	0,01 K

A macroestrutura gerada foi analisada e obteve-se uma região da CET próxima da região encontrada por Arango [16]. A fig. 17 mostra estas posições.



**Figura 21:** Macroestruturas da liga Al-7%Si sem adição de inoculante obtida experimentalmente: (a) no trabalho de Arango;(b) na simulação realizada.

O limite superior e inferior da CET obtido por Arango foi de 0,118 e 0,097 respectivamente. Os mesmos limites simulados obtidos valem 0,116 e 0,101 para o limite superior e inferior da CET, respectivamente.

O tamanho de grão encontrado foi menor do que o obtido experimentalmente. O diâmetro médio de grão equiaxial apresentado experimentalmente vale 3,1 mm e o simulado vale 2,2 mm.

Assim, a análise paramétrica mostra-se fundamental para nortear simulações que buscam representar um resultado obtido experimentalmente, facilitando a busca pela macroestrutura.

## 6 Conclusões

No presente trabalho, através dos resultados obtidos, pode-se concluir que:

- a) o modelo matemático baseado na técnica do autômato celular mostrou que aumentando a densidade de número de grãos ( $n_{\max}$ ) reduz-se o tamanho da zona colunar e o diâmetro médio dos grãos equiaxiais;
- b) o modelo matemático mostrou que aumentando o super-resfriamento médio para a nucleação de grãos ( $\Delta T_{\text{nuc}}$ ), aumenta-se o tamanho da zona colunar, a largura média dos grãos colunares e o diâmetro médio dos grãos equiaxiais;
- c) o modelo matemático mostrou que um aumento no desvio padrão da distribuição de super-resfriamentos para a nucleação ( $\Delta T\sigma$ ) diminui o tamanho da zona colunar e aumenta a largura média dos grãos colunares e o diâmetro médio dos grãos equiaxiais;
- d) utilizando o modelo de autômato celular foi possível obter um coeficiente de transferência de calor entre o lingote e a base refrigerada igual a  $900 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$  que possibilita o cálculo das curvas de resfriamento de um experimento de solidificação direcional apresentado na literatura;
- e) utilizando este modelo, também foi possível reproduzir a macroestrutura de grãos obtida no experimento citado no item anterior.

## 7 Referências Bibliográficas

- [1] FLOOD, S.C.; HUNT, J.D. Columnar to equiaxed transition, ASM Handbook, v.15, p. 283-285, 1998.
- [2] FLOOD, S.C.; HUNT, J.D. Columnar and Equiaxed Growth I. Journal of Crystal Growth, v. 82, p. 543-551, 1987.
- [3] WINEGARD, W.C.; CHALMERS, B. Supercooling and Dendritic Freezing in Alloys, Transactions of the ASM, v. 46, p. 1214-23, 1954.
- [4] TILLER, W.A.; JACKSON, K.A.; RUTTER, J.; CHALMERS, B. Acta Metall., Vol 1, p. 428, 1953.
- [5] CHALMERS, B. J. Aust. Inst. Met., v. 8, p. 225, 1962.
- [6] SPITTLE, J.A.; DELAMORE G.W.; SMITH R.W. The Solidification of Metals, Publication 110, Iron and Steel Institute, p. 318, 1968.
- [7] SOUTHIN, R.T. The Solidification of Metals, Publication 110, Iron and Steel Institute, p. 305, 1968.
- [8] UHLMANN, T.P.; SEWARD, III; CHALMERS, B. Trans. AIME, Vol 236, p 527, 1966.
- [9] 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.
- [10] GANDIN, Ch.-A.; RAPPAZ, M. Probabilistic Modelling of Microstructure Formation in Solidification Processes. Acta Metallurgica, v. 41, p. 345-60, 1993
- [11] 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.
- [12] 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.

- [13] BISCUOLA, V.B. Implementação e Análise de um Modelo Matemático Baseado na Técnica de Autômato Celular para Previsão da Estrutura Bruta de Solidificação.
- [14] PATANKAR, S.V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. New York:Publishing Corp., 1981.
- [15] KURZ, W.; FISHER, D.J. Fundamentals of solidification. Aedermannsdorf, Trans Tech Publications Ltd., 1989.
- [16] ARANGO, D.A.P. Efeito da Inoculação na Macroestrutura De Grãos De Ligas Al-Si Obtidas Por Solidificação Unidirecional. São Paulo, 2009.

## 8 Anexos

### 8.1 Tabela resumo das simulações da análise paramétrica

Teste	$\Delta T_o$	$\Delta T_{nuc}$	$n_{max}$	Limite Superior (m)	Limite Inferior (m)	Largura Média (m)	Diâmetro médio (mm)
1	0,3	4	267301	0,0823	0,063	0,00114	2,82
2	0,3	4	12407	0,1285	0,101	0,00293	15,26
14	0,3	4	36278	0,0942	0,092	0,00194	6,07
8	0,3	4	57588	0,0942	0,086	0,00188	4,85
15	0,3	4	168389	0,0907	0,082	0,00132	3,35
9	0,3	4	1240701	0,0445	0,008	0,00121	1,66
3	0,3	4	5758824	0,0082	N/D	N/D	0,90
20	0,3	4	3627832	0,0310	0,008	0,00278	1,10
23	0,3	4	781593	0,0599	0,048	0,00094	1,92
4	0,3	1	267301	0,0319	N/D	N/D	1,75
25	0,3	1,5	267301	0,0354	N/D	N/D	1,79
16	0,3	2	267301	0,0361	N/D	N/D	1,84
21	0,3	2,5	267301	0,0417	0,019	0,00103	1,93
10	0,3	3	267301	0,0522	0,021	0,00101	2,05
17	0,3	3,5	267301	0,0613	0,046	0,00103	2,30
11	0,3	5	267301	N/D	0,154	0,00294	N/D
5	0,3	8	267301	N/D	0,154	0,00469	N/D
6	0,01	4	267301	0,0928	0,073	0,00112	2,08
12	0,5	4	267301	0,0816	0,063	0,00124	2,54
19	0,75	4	267301	0,0774	0,054	0,00123	3,25
18	1	4	267301	0,0732	0,059	0,00126	3,31
22	1,25	4	267301	0,0655	0,059	0,00128	3,18
13	1,5	4	267301	0,0599	0,043	0,00127	3,12
24	1,75	4	267301	0,0571	0,048	0,00129	3,04
7	2	4	267301	0,0613	0,044	0,00132	3,09