



Universidade de São Paulo
Escola Politécnica

Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais

TRABALHO DE FORMATURA

“ MODELAGEM MATEMÁTICA DE SOLIDIFICAÇÃO E FORMAÇÃO DE MACROESTRUTURAS BRUTAS DE SOLIDIFICAÇÃO DE LIGAS BINÁRIAS ”

Autor: José Antonio Silvestre Curti Júnior

Número USP:744150

Carreira: Engenharia Metalúrgica

**Professor orientador: Marcelo de Aquino
Martorano**

ÍNDICE

1. Resumo	2
2. Introdução	3
3. Revisão de Literatura	3
3.1 Modelagem macroscópica da solidificação de ligas binárias	6
3.1.1 Modelos determinísticos de determinação da variação da fração de sólido com o tempo durante o processo de solidificação	10
3.1.2 Método da entalpia e do calor específico equivalente aplicados à abordagem de um domínio	15
3.1.3 Métodos numéricos utilizados para a implementação de modelos macroscópicos	17
3.2 Modelos microscópicos	25
3.2.1 Modelos microscópicos probabilísticos ou estocásticos	26
3.2.2 Modelos microscópicos determinísticos utilizados em métodos estocásticos	33
3.2.2.1 Nucleação	34
3.2.2.2 Crescimento	37
4. Materiais e métodos	40
4.1 Considerações Gerais	40
4.2 Descrição do modelo	49
4.3 Modelo microscópico	63
4.3.1 Função nucleação	65
4.3.2 Função crescimento	68
5. Resultados obtidos e discussão	76
6. Conclusões	102
7. Referências bibliográficas	104

1. RESUMO

Desenvolveu-se um modelo matemático que simula a formação e a evolução da macroestrutura bruta de fundição num sistema cilíndrico que se solidifica unidirecionalmente.

O modelo é baseado no acoplamento entre uma rotina macroscópica de cálculo do campo de temperaturas e uma rotina microscópica que, além de simular a evolução macro e microestrutural, fornece ao modelo térmico a forma pela qual o calor latente vai sendo liberado ao longo do tempo.

O modelo macroscópico implementado utilizou o método de diferenças finitas, explícito, já o modelo microscópico desenvolvido foi baseado nos modelos probabilísticos propostos por Spittle e Brown [10,11,12] .

Não só as curvas de resfriamento de determinadas regiões no interior do metal mas também as macroestruturas obtidas nos ensaios realizados por Martorano [20] , foram simuladas, obtendo-se uma aderência satisfatória entre as simulações e os resultados experimentais.

O modelo matemático possibilitou a previsão da ocorrência da transição entre as zonas colunar e equiaxial presente nas macroestruturas obtidas experimentalmente.

A utilização de técnicas probabilísticas de Monte Carlo, resultou em dados de variação da fração de sólido com a temperatura muito próximos aos da teoria de redistribuição de soluto, proposta por Brody - Flemings - Clyne - Kurz [9] .

2. INTRODUÇÃO

O processo de solidificação é de extrema importância, já que qualquer componente metálico com aplicação em engenharia, para ser fabricado, deve ter passado por uma etapa de solidificação, mesmo que posteriormente deva ser conformado mecanicamente.

Tendo isto em mente, o conhecimento dos conceitos básicos dos fenômenos que regem a solidificação pode ser de extrema utilidade para o desenvolvimento de um modelo matemático que auxilia na previsão de aspectos importantes.

Um modelo matemático que visa a simulação da evolução da macroestrutura bruta de solidificação e do campo térmico pode ser útil tanto para prever as propriedades mecânicas do componente fundido através da macroestrutura simulada, como para prever antecipadamente, através da simulação do campo térmico, falhas no projeto de alimentação.

O objetivo do presente trabalho é o de desenvolver um modelo matemático, a fim de se obter a evolução da macroestrutura bruta de solidificação e do campo de temperaturas durante a solidificação de peças com formatos cilíndricos submetidas a diferentes condições de resfriamento. Os resultados do modelo são comparados com alguns dados disponíveis na literatura.

3. REVISÃO DE LITERATURA

O modelo matemático de um determinado fenômeno natural deve levar em conta, na sua implementação, a maior gama possível de conhecimentos empíricos, teóricos e de mecanismos apresentados pela comunidade científica especializada.

Três grandes grupos de fenômenos básicos ao processo de solidificação têm sido considerados nos modelos até hoje propostos. O primeiro relaciona-se aos fenômenos térmicos que ocorrem durante a solidificação, sem considerar detalhes da evolução macro e microestrutural. Os modelos assim propostos têm sido denominados [1,3,4,5,6,18] de modelos macroscópicos e serão explicitados mais adiante. O segundo grande grupo de fenômenos normalmente considerados nos modelos de solidificação abrange os que simulam a formação macroestrutural resultante do fenômeno de solidificação. A esse grupo, pertencem os fenômenos de redistribuição de soluto na solidificação de ligas, de nucleação e de crescimento da fase sólida. Os modelos pertencentes a este grupo são intitulados, genericamente, de modelos microscópicos, conforme se verificará posteriormente.

Um terceiro grupo é o dos fenômenos de fluido-dinâmica que ocorrem durante a solidificação. Tais fenômenos caracterizam a movimentação convectiva da massa ainda líquida. Eles se tornam importantes, tanto para o estudo de macrossegregação em estruturas brutas de solidificação, quanto para a previsão da macroestrutura bruta de solidificação de lingotes [15].

Ao utilizar uma simulação apenas macroscópica do fenômeno de solidificação (modelo do campo térmico), deve-se conhecer como o calor latente é liberado no decorrer do processo, ou seja, é preciso saber como evolui a fase sólida com o tempo.

A consideração de interdependência entre o campo de temperaturas e a evolução da macroestrutura num processo de solidificação tem sido feita através da variação da fração da fase sólida com o tempo no decorrer da solidificação [3,4,5,6].

Nesse sentido, o modelo microscópico calculará uma determinada variação temporal da fração de sólido, que servirá, como informação necessária para a obtenção do campo de temperaturas através dos modelos macroscópicos.

Duas são as formas existentes e propostas para a obtenção da variação da fração de sólido com o tempo durante o processo de solidificação. A primeira considera teorias de redistribuição de soluto ^[9], muito utilizadas em estudos sobre microsegregação. Tal abordagem, embora utilizada com sucesso ^[3,4,5,6] na obtenção do campo de temperaturas, falha ao tentar prever a macroestrutura resultante. A segunda forma de se obter a variação da fração de fase sólida com o tempo simula fenômenos de nucleação e crescimento de forma probabilística.

O acoplamento entre os modelos microscópicos e macroscópicos ^[1,2,18,21] vem sendo freqüentemente utilizado em processos de solidificação, tais como, fundição, soldagem e purificação ^[21], entre outros, e tem previsto, com sucesso, características macroestruturais.

Entre os aspectos macroestruturais passíveis de previsão ^[1,2,10,11,12,16,17,18], estão o grau de refino macroestrutural, o tamanho das zonas colunar e equiaxial ^[10,11,12], a transição entre as zonas coquilhada/colunar ^[10,11,12,16,17,18] e colunar/equiaxial ^[10,11,12,18], a dependência da macroestrutura ao grau de inoculação e a dependência da macroestrutura aos parâmetros de processo (temperatura de vazamento e temperatura do molde) ^[11] e da liga (composição) ^[12].

Seguem-se duas pequenas revisões sobre alguns modelos macroscópicos e microscópicos já propostos.

3.1 MODELAGEM MACROSCÓPICA DA SOLIDIFICAÇÃO DE LIGAS BINÁRIAS

Kurz e Fisher [9] mostram algumas dificuldades de se simular o fenômeno térmico durante a solidificação. Tal dificuldade reside no fato de que o modelo macroscópico deve não só simular o transporte de calor, mas também a liberação de calor latente.

A equação 1, abaixo mostra que a taxa de resfriamento de um corpo que se solidifica depende de três fatores, a saber:

- 1) como o calor é extraído para fora do sistema (primeiro termo ao lado direito da equação 1);
- 2) como o calor latente é liberado com o decorrer do tempo (segundo termo o lado direito da equação 1);

$$\frac{dT}{dt} = - qe \cdot \frac{A}{V \cdot c} + \left(\frac{dfs}{dt} \right) \cdot \left(\frac{\Delta H_{fv}}{c} \right)$$

(1)

Onde

T é a temperatura do sistema;

t é o tempo;

qe é o fluxo de calor que é extraído do sistema;

A é a área de troca de calor entre o sistema e o meio;

V é o volume do sistema;

c é o calor específico do material que se solidifica;

f_s é a fração de sólido presente no sistema;

ΔH_{fv} é o calor de solidificação liberado por unidade de volume;

Pela equação 1 tiram-se algumas conclusões que serão de grande valia para o entendimento de modelos macroscópicos de solidificação. O primeiro termo do lado direito da igualdade reflete a presença de um fluxo externo (q_e) de calor que age sobre o sistema.

O segundo termo do mesmo lado da equação revela-nos a evolução do calor latente que é liberado pelo material durante a transformação de fase. Se este segundo termo da equação for maior que o primeiro, tem-se um aquecimento do sistema. Este fenômeno é chamado de recalescência [10].

A análise da equação acima mostra claramente a interdependência entre os modelos de formação macroestrutural e de cálculos térmicos.

Neste caso fica claro que a forma com que a fração de sólido evolui com o tempo dentro do sistema é a chave para o correto entendimento do acoplamento entre os dois modelos.

Prosseguindo com tal raciocínio, percebe-se, através da equação 2, que a variação temporal da fração de sólido (df_s/dt) pode ser obtida diretamente, dos modelos microscópicos, ou do conhecimento da variação da fração de sólido com a temperatura [1,9].

$$\frac{dfs}{dt} = \frac{dfs}{dT} \cdot \frac{dT}{dt}$$

(2)

Onde

f_s é a fração de sólido do sistema;

T é a temperatura;

t é o tempo;

Uma das formas de acoplamento mais difundidas [3,4,5,6] até o presente momento é a de se obter, por meio de modelos de segregação [9], a variação da fração de sólido com a temperatura.

Grandes esforços foram realizados [6] no sentido de simular de forma analítica o fluxo térmico presente num processo real de solidificação.

Porém as complexidades do processo de solidificação, tornam a solução numérica importante, senão a única ferramenta para abordagem do problema.

Foi relatada por Rappaz [1] a existência de duas metodologias distintas para se obter numericamente o campo de temperaturas de uma peça que se solidifica, a saber:

- 1) método de dois domínios;
- 2) método de um domínio.

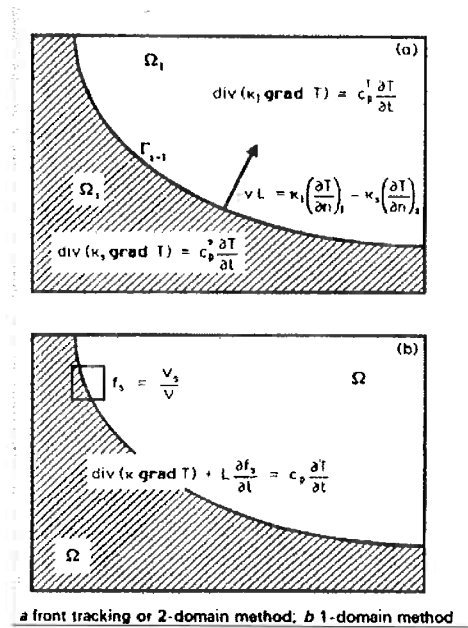


Figura 1: Método de dois domínios (a); Método de um domínio.(b) ; [1]

Será descrito, nesta revisão, apenas o método de um domínio, não só por ser o mais utilizado nos modelos de solidificação propostos, mas também por ser a linha adotada no modelo proposto no presente trabalho.

Como observa Clyne [3,4,5,6] , um modelo numérico macroscópico de um domínio possui três aspectos básicos para a sua implementação:

- 1) a interação entre a formulação do problema e como este será implementado (método numérico, por exemplo cenário implícito ou explícito, no caso da ferramenta de diferenças finitas, armazenamento de dados ,em memória ou em disco, e tempo de execução);
- 2) a adoção de condições de contorno apropriadas ao problema físico a ser simulado;
- 3) finalmente, a elaboração de uma teoria real de como o material dará resposta a uma mudança do campo de temperaturas e de

como essa mudança afetará o campo de temperaturas. Esta abordagem pode ser : ou através da determinação da variação da fração de sólido com a temperatura, utilizando-se para isso modelos [9] de difusão de soluto que serão mostrados no próximo item, ou através da determinação de variação da fração de sólido com o tempo, obtido através do acoplamento do modelo térmico e do modelo de formação estrutural.

3.1.1) MODELOS DETERMINÍSTICOS DE DETERMINAÇÃO DA VARIAÇÃO DA FRAÇÃO DE SÓLIDO COM A TEMPERATURA DURANTE PROCESSOS DE SOLIDIFICAÇÃO

O terceiro aspecto básico indicado acima depende do conhecimento de como se dá a solidificação no sistema, ou seja, de como varia a fração de sólido formada na zona pastosa.

A forma pela qual os modelo macroscópicos tratam da zona pastosa, onde efetivamente ocorre a liberação de calor latente durante a solidificação, é simplificada. Pode-se obter a variação da fração de sólido, quer através de dados empíricos, quer através da utilização de teorias de redistribuição de soluto [9] durante a solidificação de ligas, ou, até mesmo, através de modelos determinísticos [2,18,21] ou estocásticos [10,11,12,16,17] .

Os fenômenos de redistribuição de soluto, que são extensivamente aplicados em estudos de microsegregação [9,20] , são utilizados também nos modelos macroscópicos.

Alguns modelos propostos ^[9] de difusão de soluto na zona pastosa consideram que não há gradiente de soluto na fase líquida, como mostra a figura 2.

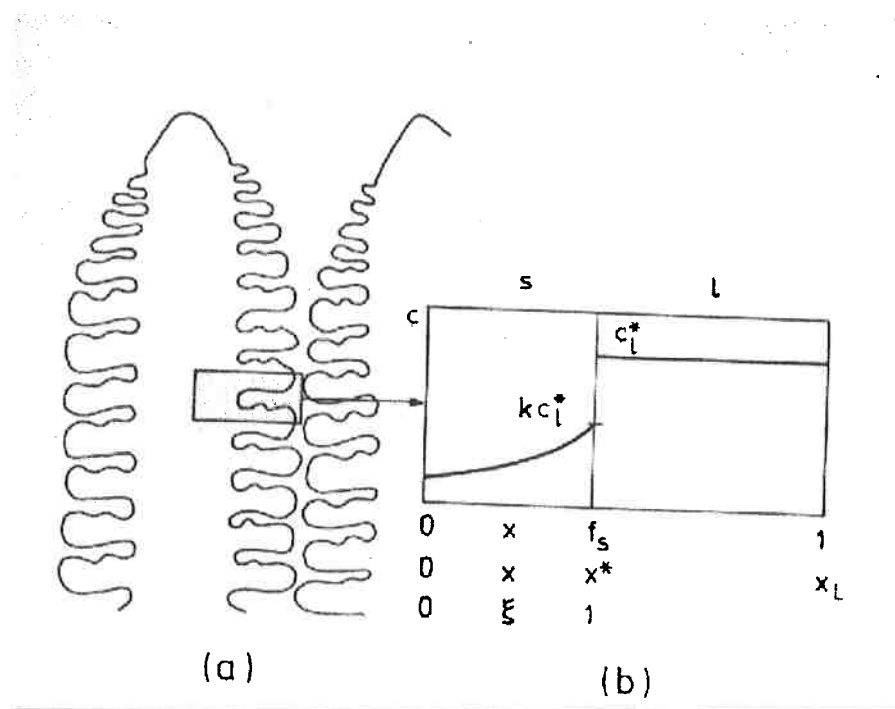


Figura 2: Condições de campo de soluto, junto à interface de solidificação, consideradas para o balanço de massa que irá deduzir a variação térmica da fração de sólido. ^[9]

Portanto, a concentração de soluto no líquido é constante em relação à distância da interface e igual à concentração da interface CL^* . Sob essas hipóteses, três diferentes situações de difusão no sólido podem ser consideradas:

- 1) Completa homogeneização na fase sólida, o que implicaria num coeficiente de difusão de soluto na fase sólida tendendo ao infinito. Tal situação é a conhecida regra das alavancas ^[9];
- 2) Não há difusão de soluto na fase sólida, ou seja, o coeficiente de difusão de soluto na fase sólida tende a zero. Tal situação é conhecida por modelo de Scheil ^[9];

- 3) Parcial difusão de soluto na fase sólida, o que se obtém considerando-se um valor finito para o coeficiente de difusão de soluto na fase sólida.

Brody e Flemings ^[9] propuseram um modelo simplificado para o terceiro caso acima, onde a difusão no estado sólido é considerada de forma aproximada.

Para isso, Brody e Flemings ^[9] definiram um parâmetro adimensional equivalente ao número de Fourier:

$$\alpha = \frac{D_s \cdot t_f}{L}$$

(3)

Onde

D_s é o coeficiente de difusão na fase sólida;

t_f é o tempo local de solidificação;

L é o comprimento total do sistema por onde o soluto será transportado;

Dessa forma, quando $\alpha = 0.5$, a expressão matemática da fração de sólido encontrada por Brody e Flemings reduz-se àquela dada pela regra das alavancas.

Por outro lado, quando não há difusão no estado sólido, o adimensional seria nulo e outra situação, conhecida como regra de Scheil, determinaria a fração de sólido para esta condição.

Qualquer valor do adimensional entre 0 e 0.5, pela regra demonstrada por Brody e Flemings, retrataria uma situação intermediária entre difusão total e difusão nula do soluto na fase sólida. A figura 3 abaixo relata o descrito

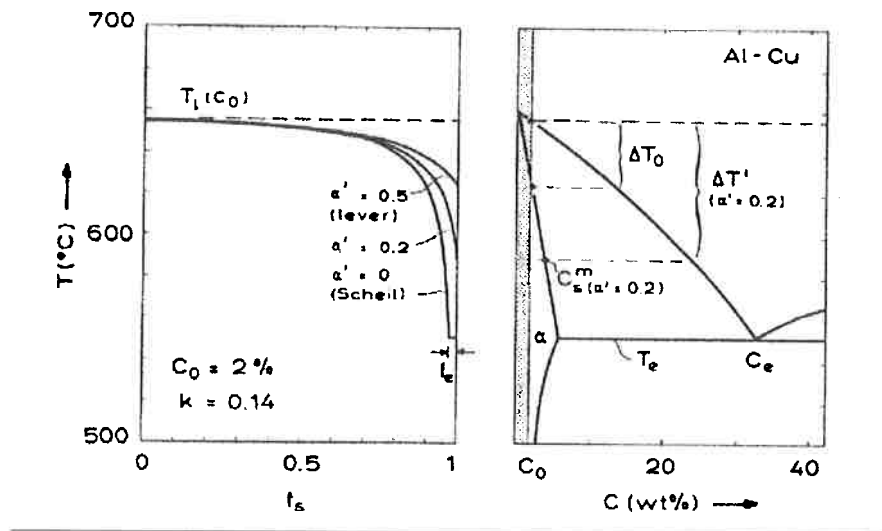


Figura 3: Variação térmica de fração de sólido deduzida por Brody e Flemings. [9]

Kurz e Clyne [9] propuseram uma modificação no parâmetro adimensional original, colocado por Brody e Flemings [9], após observarem algumas inconsistências.

A equação final [9], proposta por Brody e Flemings e modificada por Clyne e Kurz, é a seguinte:

$$f_s(T) = \frac{1}{1 - \alpha'} \cdot \left\{ 1 - \left[\frac{T_f - T}{T_f - T_l} \right]^{\frac{1 - 2 \cdot \alpha' \cdot k}{k}} \right\} \quad (4)$$

Onde:

K é o coeficiente de partição de equilíbrio;

T_f é a temperatura de fusão do metal puro;

T_l é a temperatura liquidus da liga;

α' é o adimensional modificado proposto por Clyne e Kurz [9] ,

onde,

$$\alpha' = \alpha \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{1}{\alpha} \right) \right] - \frac{1}{2} \exp\left(\frac{-1}{2\alpha} \right)$$

(5)

Onde

α é o adimensional proposto Brody e Flemings [10,31];

α' é o adimensional modificado proposto por Clyne e Kurz [9] ;

~

Tais teorias de distribuição de soluto durante a solidificação fornecem como a fração de sólido varia com a temperatura como mostra a figura 3.

Não existem apenas as teorias determinísticas [1,2,18,21] , relatadas anteriormente, para o cálculo da variação da fração de sólido no decorrer da solidificação. Existem, também, métodos estocásticos [10,11,12,16,17] de variação de fração de sólido com o tempo. Esses modelos [10,11,12,16,17] , apresentados na seção “modelos microscópicos” utilizam técnicas probabilísticas de Monte Carlo, para simular fenômenos de nucleação e crescimento. Tais modelos terão atenção especial, já que o presente trabalho também se utiliza desse tipo de acoplamento.

O próximo item apresentará como o calor latente liberado durante a solidificação e a interface sólido-líquido são tratados nos modelos macroscópicos de transferência de calor.

3.1.2) MÉTODO DA ENTALPIA E DO CALOR ESPECÍFICO EQUIVALENTE APLICADOS À ABORDAGEM DE UM DOMÍNIO

Ao implementar o método de um domínio, deve-se criar uma metodologia eficiente para possibilitar a distinção entre as fases sólida, líquida e zona pastosa no domínio considerado [3,4,5].

Existem, basicamente, duas formas de se realizar tal função: com o uso do método do calor específico equivalente [1], ou com o uso do método da entalpia [1,3,5].

O método do calor específico equivalente calcula diretamente a temperatura de um elemento de volume e o método da entalpia calcula a sua entalpia. Ambos são similares, mas o método do calor específico equivalente tem sido descrito [1] como o de maior facilidade de implementação.

Tais métodos (da entalpia e do calor específico equivalente) são necessários quando se adota a abordagem de um domínio, pois deve-se diferenciar as possíveis três regiões existentes: fases líquida, sólida e zona pastosa.

Um fator a ser levado em conta no cálculo do calor específico equivalente, na hipótese do volume de controle pertencer, no instante analisado, à zona pastosa, seria a liberação de calor latente de solidificação. Com este conceito, de calor específico equivalente, para um dado volume de controle que está sofrendo solidificação, haverá um aumento de energia disponível, devido à disponibilidade de

calor latente liberado pela fração de sólido solidificada dentro dele. Isso faz com que, sob tais condições, o calor específico equivalente do material seja incrementado.

Rappaz ^[1] alerta que o volume de controle térmico no método de um domínio, deve representar um tamanho físico suficientemente pequeno para que valores intermediários entre 0 e 100% de fração de sólido, sejam quantificados dentro do mesmo.

Por outro lado perdem-se informações macroestruturais ao se dividir o domínio a ser analisado numa malha de vários volumes de controles térmicos, justapostos, e ao tratar tais volumes como sendo pontuais.

Desejando, então, predizer a macroestrutura bruta de solidificação, deve-se ter volumes de controle térmicos de tamanhos inferiores ao tamanho do maior grão presente na macroestrutura simulada.

Embora, como foi dito antes, o método do calor específico equivalente seja de implementação mais fácil, ele possui duas desvantagens intrínsecas em relação ao método da entalpia.

Metais puros na sua temperatura de fusão ou ligas binárias que possuem líquido eutético ou peritético solidificam isotermicamente, ou seja, um determinado calor é liberado sem que haja mudança de temperatura.

Esse fato acarreta um incômodo durante a implementação do método do calor específico equivalente, pois nessas temperaturas tem-se uma descontinuidade no valor do calor específico equivalente e também na variação de fração de sólido com a temperatura. Isto pode ser visualizado com a curva abaixo.

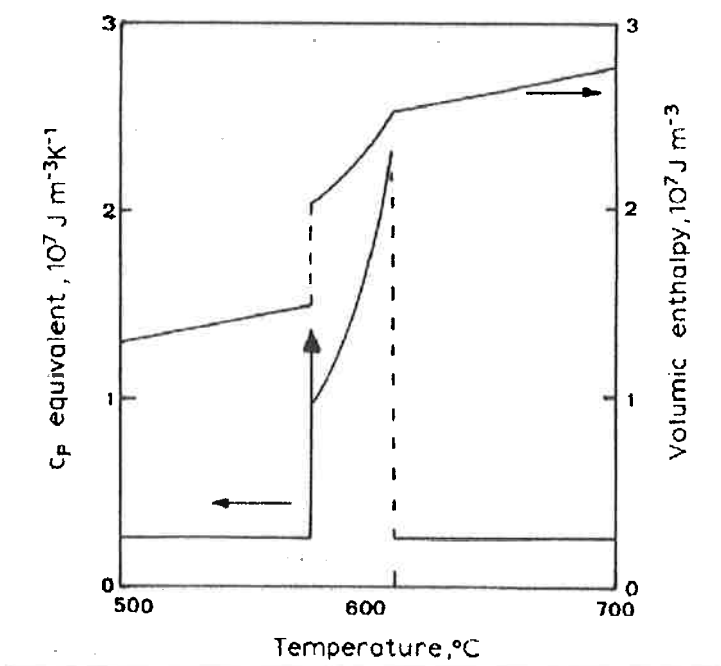


Figura 4: Descontinuidade na determinação do calor específico volumétrico equivalente. [1]

O problema pode ser contornado durante a implementação, considerando-se um intervalo de temperatura artificial no qual tal solidificação (metal puro, eutética ou peritética) estará ocorrendo. Faz-se, com isso, um remanejamento de tipos de calor liberado, antes latente, (patamar em sistemas binários), para calor sensível.

O item seguinte mostra o método numérico utilizado para a modelagem matemática do campo de temperaturas.

3.1.3) MÉTODOS NÚMERICOS UTILIZADOS PARA A IMPLEMENTAÇÃO DE MODELOS MACROSCÓPICOS

Como vem sendo relatado [1,2,16,17], o método macroscópico consiste, quase sempre, no método numérico de volumes finitos ou diferenças finitas [7] para

calcular o perfil de temperatura com o tempo durante o processo de solidificação da liga especificada.

Conforme extensivamente discutido na literatura técnica [7,8] , o método numérico dos volumes finitos divide o domínio considerado em volumes de controle, sendo que tais volumes possuem pontos no seu interior, formando uma malha.

Dois tipos [7,8] de métodos de diferenças finitas ou volumes finitos, podem ser considerados: o método explícito e o método implícito. No método explícito, a temperatura num nó é calculada através das temperaturas em instantes anteriores.

Tal método, entretanto, pode tornar-se instável. A equação que descreve a condição de estabilidade em coordenadas cilíndricas é dada por [7]

$$\frac{K(T).\Delta t}{Cp(T).\Delta r^2} < 0.25$$

(6)

Onde

K é a condutividade térmica do material (função da temperatura);

Cp é o calor específico do material (função da temperatura);

Δr é o menor espaçamento da malha de nós;

O método implícito é aquele no qual as temperaturas, num determinado instante, são calculadas simultaneamente através da resolução de um sistema de equações. Este processo é estável incondicionalmente.

Aplica-se o método de diferenças finitas em qualquer sistema de coordenadas fazendo-se um balanço de energia [7] sobre cada um dos volumes de

controle existentes sobre o domínio (sólido, líquido ou zona pastosa) ou utilizando-se técnicas [7] baseadas em séries de Taylor [8] .

O balanço de energia conduzido [7] num dado volume de controle é :

$$\text{div}[k.\text{grad}(T(r,z,t))]+\frac{\partial Q}{\partial t}=C_p.\frac{\partial T(r,z,t)}{\partial t}$$

(7)

Onde

T é a temperatura dependente da posição em coordenadas cilíndricas (r,z);

t é o tempo;

k é a condutividade térmica do material (sólido, líquido ou uma mistura deles), sendo dependente da temperatura;

Cp é o calor específico do material (sólido,líquido ou uma mistura deles), sendo dependente da temperatura;

r e z são as coordenadas radiais e longitudinais respectivamente do sistema cilíndrico.

O primeiro termo do primeiro membro da equação 7 relaciona-se à variação dos fluxos de calor por condução (Lei de Fourier) [7,8] que entram e saem do volume de controle.

Já o segundo termo do primeiro membro da equação 7 relaciona-se à taxa de liberação de calor latente que ocorreu dentro do volume de controle.

A taxa de liberação de calor latente é função da variação da fração de sólido com o tempo, ou seja, tem-se que:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = L \cdot \frac{dfs(T(r,z,t))}{dt} = L \cdot \frac{dfs}{dT} \cdot \frac{dT}{dt}$$

(8)

Onde

T é a temperatura;

t é o tempo;

Q é o calor latente liberado durante a solidificação;

L é o calor latente de solidificação por unidade de volume;

fs é a fração de sólido.

Rearranjando-se as equações 7 e 8, tem-se a equação geral da condução de calor utilizada no método do calor específico equivalente (equação 9), a ser discretizada pelo método das diferenças finitas ou volumes finitos.

$$\text{div}[K \cdot \text{grad}T(r,z,t)] = Cpe(T(r,z,t)) \cdot \frac{\partial T(r,z,t)}{\partial t}$$

(9)

Onde:

Cpe é o calor específico equivalente por unidade de volume;

T é a temperatura;

K é a condutividade térmica;

t é o tempo;

O calor específico equivalente é definido como sendo [1] :

$$C_{pe}(T(r, z, t)) = C_p(T(r, z, t)) - L \cdot \frac{df_s(T(r, z, t))}{dT}$$

(10)

A equação discretizada pelo método de volumes finitos explícito utilizada no modelo macroscópico e amplamente divulgada na literatura especializada [7,8] é a seguinte:

$$T_{(r,z)}^{t+\Delta t} = T_{(r,z)}^t + \frac{\Delta t}{C_{pe}(T(r, z, t)) \cdot \text{volume do elemento}(r, z)} \cdot \{ \sum (\text{fluxo} \cdot A) \text{ entre os 4 volumes vizinhos ao volume } (r, z) \}$$

(11)

Onde

$T(r, z)$ é a temperatura num elemento de coordenadas r e z ;

t é o tempo no qual conhece-se o campo térmico;

$t+\Delta t$ é o instante posterior no qual calcular-se-á o novo campo térmico;

$C_{pe}(T)$ é o calor específico equivalente em função da temperatura;

A são as áreas de troca de calor entre dois volumes vizinhos

Os quatro (nos sentidos ao norte, sul ,leste e oeste) fluxos considerados na análise bidimensional do cilindro podem ser apreciados através da primeira Lei de Fourier:

$$Q(i \rightarrow P) = [(áreade troca i \rightarrow P)].(R_{i \rightarrow p}).(T_p^t - T_i^t)$$

(12)

Onde

T_p é a temperatura no volume térmico de ordem p

T_i é a temperatura no volume térmico de ordem i, vizinho ao volume de ordem p;

$Q(i \rightarrow P)$ é o calor trocado por unidade de tempo entre dois volumes térmicos, i e p, vizinhos;

$R (i \rightarrow P)$ é a resistência térmica é função da condutividade térmica entre os volumes i e p;

Na equação 12 acima, o ponto i pode ser um ponto a norte, sul, leste ou oeste do ponto P analisado. (modelo com geometria bidimensional). A figura a seguir relata as quatro taxas de calor possíveis ao redor de um volume térmico qualquer.

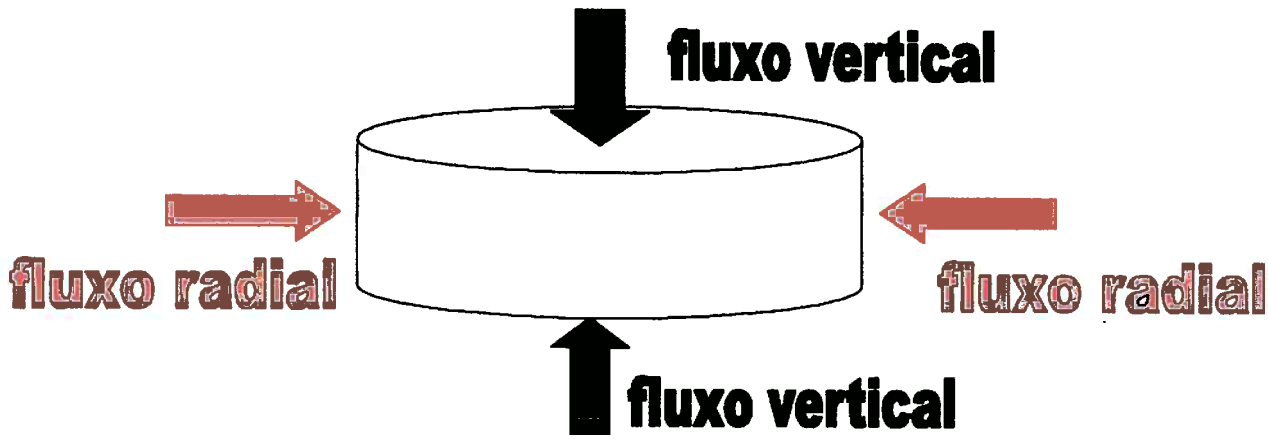


Figura 5: Troca de calor possível entre um volume térmico e o seu vizinho no caso de um sistema cilíndrico bidimensional.

A área de troca entre os pontos i e P constituem-se de áreas de volumes de controle vizinhos.

Finalmente, as condições de contorno a serem consideradas num modelo térmico podem ser basicamente de dois tipos, segundo Rappaz ^[1] :

- 1) Condição de Cauchy : Onde se define um fluxo de calor através determinada interface pertencente ao contorno do sistema:

$$- K \cdot \frac{\partial T}{\partial n} = h(t) \cdot (T - T_{meio})$$

(13)

Onde

K é a condutividade térmica do material pertencente ao sistema analisado;

T é a temperatura;

n é a coordenada ao longo do versor normal a superfície de troca de calor;

$h(t)$ é o coeficiente de transferência de calor, dependente do tempo;

T é a temperatura de um ponto pertencente ao contorno;

T_{meio} é a temperatura do meio, com o qual o volume troca calor ;

Os modelos macroscópicos recentemente propostos [2,3,4] supõem, para simular um regime de extração de calor unidirecional, apenas a dependência temporal do coeficiente global de transferência de calor $h(t)$ associado à base do cilindro.

- 2) A segunda condição de contorno que, normalmente, se aplica num modelo macroscópico, diz respeito a uma condição de Dirichlet [1] , onde as temperaturas de todos os nós superficiais num dado tempo têm seu valor atribuído

Finalmente, deve-se dizer que vários pesquisadores como [1,2,3,4,5,6] têm trabalhado no campo da solidificação através de modelagens macroscópicas de processo de solidificação. A figura abaixo mostra curvas de resfriamento obtidas através de termopares e simuladas em processos de solidificação unidirecional em sistemas cilíndricos de lingotes de liga Al 4.5%Cu, obtidas por Wong e Cho [2] .

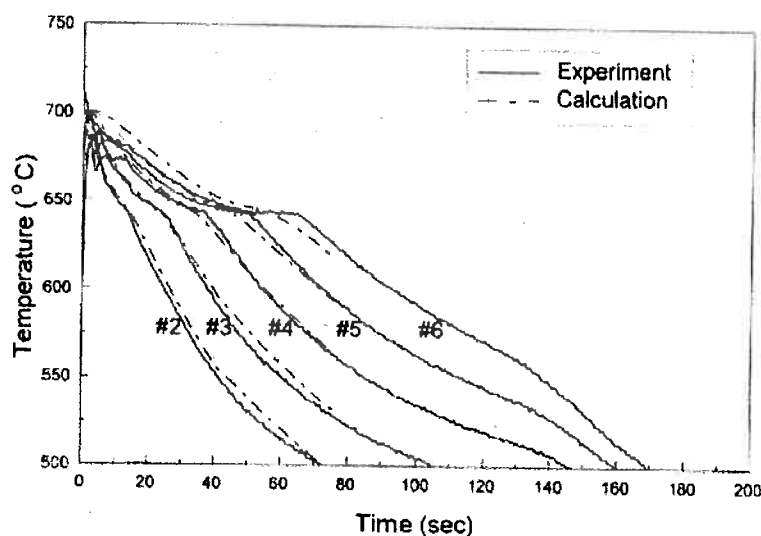


Figura 6: Curvas de Resfriamento medidas e simuladas de lingotes que solidificam unidirecionalmente à partir da base. Fonte [2]

3.2 MODELOS MICROSCÓPICOS

Quando o presente trabalho se refere a modelos microscópicos, quer significar as técnicas que foram desenvolvidas no sentido de simular a formação da macroestrutura bruta de solidificação.

Basicamente, duas linhas de modelos microscópicos foram desenvolvidas. Uma linha pioneira e totalmente probabilística, atribuída a Spittle e Brown [10,11,12], e outra, quase determinística, proposta principalmente por Rappaz et al [1,18,21]. Estes modelos serão apresentados nos itens a seguir.

3.2.1 MODELOS MICROSCÓPICOS PROBABILÍSTICOS OU ESTOCÁSTICOS:

Spittle e Brown [10,11,12] propuseram uma modelagem matemática totalmente probabilística, capaz de simular a evolução macroestrutural em um processo de solidificação, particularmente a transição entre as zonas colunares e equiaxiais.

Tal transição acontecia dentro de condições já relatadas por outros estudiosos da área como Flood e Hunt que previam [15] a sua ocorrência quando a fração de sólido que cresce equiaxialmente, no seio de um líquido, na frente da zona colunar, fosse de 50% em volume.

Outros motivos de êxito do modelo proposto foram: a previsão da dependência entre o tamanho da zona colunar em função das temperaturas do molde e de vazamento e a previsão do tamanho de grão em função de parâmetros da liga e mais precisamente em função do conhecido parâmetro de super-resfriamento constitucional [9] .

Inicialmente [11] , a evolução macroestrutural foi implementada de um modo bem simplificado, em condições isotérmicas e com composição uniforme (solidificação de metal puro) e as macroestruturas obtidas foram bem próximas das experimentais. A figura 7 mostra as macroestruturas simuladas por Spittle e Brown [10,11,12] .

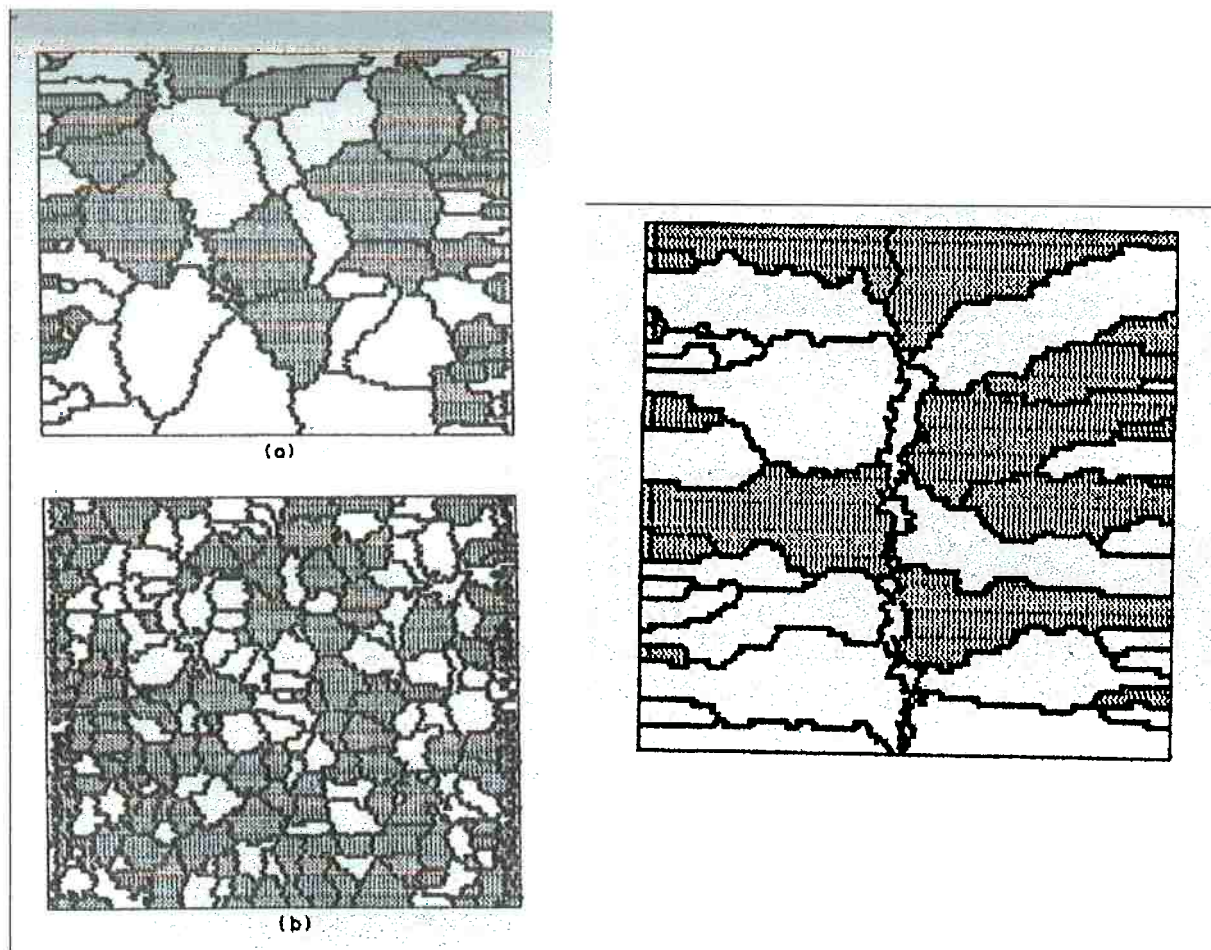


Figura 7: Macroestruturas resultantes das simulações propostas por Spittle e Brown.

[10,11,12]

A forma de simular a nucleação neste modelo somente verificava se uma determinada posição aleatória no líquido tinha condições necessárias para se solidificar (super-resfriamento suficiente para nucleação). O super-resfriamento era considerado como um valor constante e não consideravam famílias distintas de substratos disponíveis dentro de um lingote, como descrito anteriormente por Rappaz [1]. Já a simulação de crescimento da fase sólida nada mais era do que

uma adaptação de um algoritmo utilizado em crescimento de grão e portanto de crescimento de fase sólida sobre fase sólida [13,14]. Tal modelo, mesmo com o sucesso na obtenção de macroestruturas semelhantes às observadas experimentalmente, era incapaz de prever a influência tanto de parâmetros do processo, como de parâmetros do material.

Em um modelo mais moderno [11], além de funções que descreviam a evolução macroestrutural, como nucleação e crescimento, outros efeitos foram adicionados, tais como extração de calor. Considerou-se simplificada a movimentação de núcleos sólidos pela fase líquida através da realocação aleatória no seio do líquido de núcleos sólidos formados na parede do molde, nos estágios iniciais do vazamento.

Os autores objetivaram com isso assumir o mecanismo de formação de grãos equiaxiais chamado de “Big Bang”, proposto por Chalmers [15]. A sobrevivência destes núcleos foi simulada através de uma busca aleatória daqueles que estivessem num líquido superaquecido. Se encontrado, por acaso, tal núcleo seria refundido. Este modelo [12] obteve sucesso, pois conseguiu prever de forma real as macroestruturas. O modelo de Spittle e Brown [10,11,12] considerou apenas a teoria do “Big Bang”, porém simulou a dependência do tamanho da zona colunar com temperatura do molde.

Um outro modelo [12], proposto por Spittle e Brown, incluía uma rotina que simulava de modo simplificado a redistribuição de soluto durante a solidificação. Tal modelo, além de apto a simular a dependência [9] do tamanho de grão com a composição da liga, também forneceu a dependência macroestrutural com parâmetros como o coeficiente de partição de soluto e a inclinação da linha *liquidus*.

Os modelos de Spittle e Brown [10,11,12] usaram o conceito de mapeamento macroestrutural, onde a macroestrutura a ser analisada é discretizada em pequenos volumes ou células. Em cada célula ficam armazenados dados instantâneos locais de temperatura, composição (caso o material seja uma liga), fase (sólida ou líquida), orientação cristalográfica (sólido). Alguns autores [1,2,18,21] denominam tal método de “cellular automata”.

Spittle e Brown [10,11,12] adotaram, então, para o caso da solidificação, procedimentos de Monte Carlo associados ao conceito “cellular automata” (figura 8).

O método de mapeamento, utilizado por Slorovitz e Anderson [13,14] e aplicados por Spittle e Brown [10,11,12] no crescimento da fase sólida durante a solidificação, pode ser entendido como sendo um algoritmo baseado na minimização de energia interfacial com o andamento do processo. Isto é conseguido, pois a macroestrutura é, como já foi dito, dividida em células, e considera-se uma energia hipotética associada às células de diferentes fases ou cristalografias (vizinhos sólido/líquido ou vizinhos sólido/sólido de diferentes orientações cristalográficas).

A movimentação destas interfaces se dá, então, ao gerar-se aleatoriamente uma nova orientação para uma dada célula líquida analisada, dentro das possíveis cristalografias que a rodeiam (cristalografias dos vizinhos). Se a nova configuração gerada à célula em questão tiver associada a si uma energia interfacial menor do que a anterior, a mudança na orientação da célula é feita efetivamente, simulando-se, assim, a movimentação da interface (figura 8).

Caso contrário, ou seja, se à nova configuração estiver associada uma energia interfacial maior que a original, a mudança de orientação da célula analisada não é feita e a interface não se movimenta.

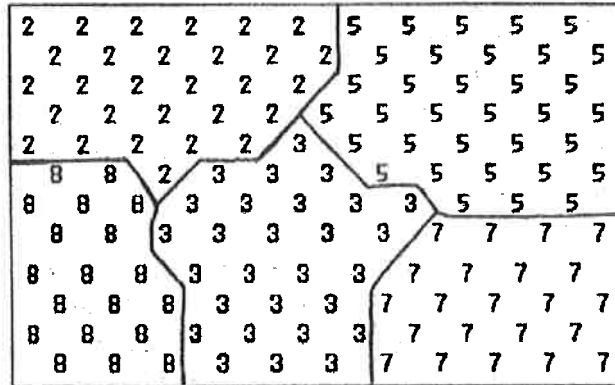


Figura 8: Mapeamento em que cada valor representa uma orientação cristalográfica para as células sólidas, proposto por Spittle e Brown. [10,11,12]

O modelo desenvolvido por Spittle e Brown [12] pode ser dividido em transporte de calor e massa (no caso de ligas); nucleação e crescimento da fase sólida. A rotina de nucleação busca uma célula ao acaso dentro do volume analisado e verifica se a célula possui super-resfriamento para ocorrer a nucleação. O modelo apenas considera o super-resfriamento térmico, não sendo considerado super-resfriamento constitucional.

Além disso a nucleação simulada não leva em conta a diferença nos tipos de substratos existentes.

A principal limitação do modelo estocástico proposto por Spittle e Brown [10,11,12] é: O método utilizados por eles para simular o transporte de calor para fora do sistema apenas se aplica à certas condições particulares. Isto porque estes

consideram um método de diferenças finitas onde a temperatura de um elemento é obtida através de uma média aritmética entre as temperaturas entre seus vizinhos mais próximos. Sabe-se através da literatura especializada, em métodos de diferenças finitas [7] que isso só ocorre para determinados valores de difusividade térmica do material e para determinadas dimensões da malha espacial, ou seja, quando:

$$\alpha = \frac{K}{\rho \cdot Cp \cdot \Delta x} = 0.25$$

(14)

Onde

K é a condutividade térmica do material;

ρ é a densidade do material;

Cp é o calor específico do material;

Δx é a dimensão da malha.

Nota-se que, para a situação proposta por Spittle e Brown [10,11,12] ocorrer, as propriedades térmicas do material (condutividade térmica, calor específico) e densidade deveriam ser consideradas constantes com a temperatura, fato este limitante também.

Outra limitação ainda mais significativa que a primeira diz respeito ao fato de que nenhum acoplamento entre o cálculo do campo de temperaturas e a evolução macroestrutural é feito nos modelos [10,11,12] propostos por Spittle e Brown, ou seja, não há nenhuma ligação da rotina térmica por eles sugerida e a liberação de calor latente obtida pelo modelo microestrutural.

O modelo proposto por Spittle e Brown [12] também não levou em consideração propriedades de materiais reais. Com isso, consideraram, seus autores, valores como energia interfacial sólido-líquido, de valor unitário, temperaturas de fusão do metal puro 1.0, temperaturas líquidas das ligas simuladas 0.8, 0.9, temperaturas do molde 0.2 .

A simulação de distribuição de soluto proposto no terceiro artigo, também é injustificada teoricamente pois é executada apenas nos instantes iniciais da solidificação, ou seja, apenas os sólidos formados inicialmente expulsariam soluto. A forma de movimentação de núcleos formados no início da solidificação junto à parede do molde, que é implementada no modelo proposto para dar suporte à teoria do “Big Bang” [15] de formação de grãos equiaxiais é aleatória. Assim os modelos propostos por Spittle e Brown [10,11,12] não consideram aspectos fluido-dinâmicos envolvidos durante o processo de solidificação.

Pelas limitações acima relatadas, Zhu e Smith, [16,17] desenvolveram outros modelos microscópicos que nada mais são do que aperfeiçoamentos dos modelos de Spittle e Brown [10,11,12]. Entre as principais mudanças propostas por Zhu e Smith estão:

- a implementação de transporte de calor e massa é através da correta aplicação do método de diferenças finitas;
- a inclusão de valores de energia interfacial e de parâmetros característicos do diagrama de fases de materiais reais, no caso a liga Al 4.5%Cu;
- a abordagem do fenômeno de nucleação, não só levando em conta condições termodinâmicas de disponibilidade de super-resfriamento, mas também pelo uso da teoria de Oldfield que, segundo Rappaz [1], trata a nucleação junto à parede do molde de uma forma muito mais provável que a do seio do líquido;

- neste caso, o mecanismo implementado que dará suporte à formação da transição colunar/equiaxial não foi o do “Big Bang” [15], como nos modelos de Spittle e Brown [10,11,12], mas sim o super-resfriamento constitucional [9] à frente da zona colunar;
- o acoplamento entre o modelo macroscópico de diferenças finitas, que calcula o campo térmico, e o modelo microscópico é teoricamente justificada, já que em cada passo de tempo em que se calcula o campo de temperaturas e de soluto, executam-se rotinas de nucleação e crescimento que fornecerão informações da evolução da fração de sólido durante o passo de tempo considerado, para o posterior cálculo do campo térmico.

3.2.2. MODELOS MICROSCÓPICOS DETERMINÍSTICOS UTILIZADOS EM MÉTODOS ESTOCÁSTICOS:

Descrevem-se, a seguir, os modelos [2,18, 21] que, ao darem suporte físico aos mecanismos de nucleação e crescimento, simulam o processo de formação macroestrutural.

Devem-se a Rappaz e Kurz [1,9], os principais trabalhos desenvolvidos nessa área. Os modelos determinísticos utilizados em métodos estocásticos simulam a ocorrência de fenômenos como nucleação e crescimento.

Segundo Rappaz [1,18], partindo-se de dois fenômenos, a saber, nucleação e crescimento, pode-se entender como um modelo determinístico simula a formação da macroestrutura bruta de solidificação.

O primeiro, está em que a nucleação deve ser considerada em separado, tanto do ponto de vista homogêneo, quanto do heterogêneo, sendo que a densidade volumétrica de núcleos formados deve ser baseada no super-resfriamento ao qual o líquido está submetido.

O segundo aspecto é o de fornecer uma teoria mais justificável para o crescimento da fase sólida. Nesse caso, ao invés de se considerar um mecanismo de crescimento por minimização de energia interfacial, como é feito nos modelos estocásticos [10,11,12,16,17], utiliza-se a teoria de crescimento da fase sólida baseada na cinética de crescimento da ponta da dendrita, através do uso do modelo KGT [19], proposto por Kurz, Giovanola e Trivedi.

O próximo item analisará abordagem do fenômeno de nucleação e crescimento utilizado pelos métodos determinísticos.

3.2.2.1) NUCLEAÇÃO

Rappaz [18] afirma que, para considerar o fenômeno de nucleação, um modelo microscópico determinístico deveria basear-se em teorias como a de nucleação heterogênea, proposta por Turnbull e Fisher (de nucleação “quasi-instantânea figura 9) [1], pela qual a taxa de nucleação depende da densidade de sítios iniciais propícios à ocorrência da nucleação e, também, da exponencial do inverso do quadrado do super-resfriamento local.

Essa teoria, entretanto, quando aplicada a um modelo, falha quando tenta prever o tamanho do grão final de uma amostra, solidificada em condições conhecidas[1].

A referida falha deve-se a duas causas; a primeira, é o fato de que, nos processos comerciais de solidificação, há um super-resfriamento crítico em que, uma vez atingido, a nucleação dá-se quase que instantaneamente, o que faz com que se atinja com muita rapidez a concentração de núcleos críticos de equilíbrio, não ocorrendo quase nenhuma outra nucleação em super-resfriamentos maiores.

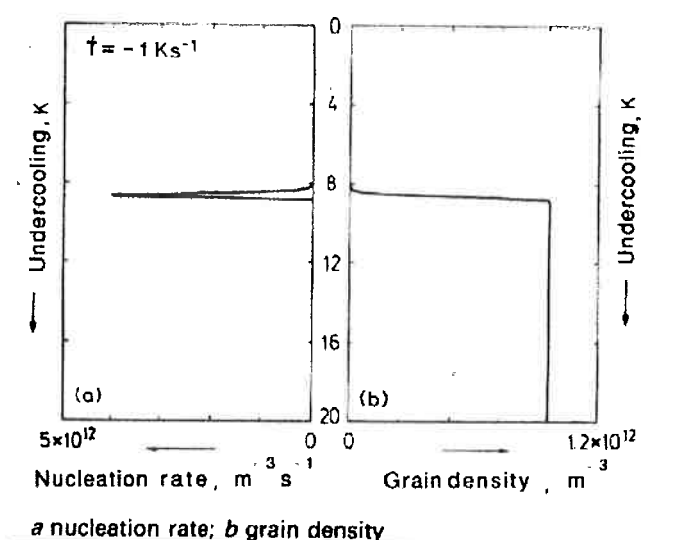


Figura 9: Aspecto da nucleação "quasi- instantânea", descrita por Rappaz ^[1], em famílias de sítios.

A segunda explicação para a falha relativa à predição do tamanho de grão final da macroestrutura está no fato de que, em processos comerciais de solidificação, há mais de um tipo de família de sítios para nucleação heterogênea. Cada sítio exigirá uma energia livre para a formação do núcleo crítico diferente; portanto, tais sítios estarão ativos em diferentes situações de super-resfriamento, ou seja, em diferentes instantes de tempo no decorrer da simulação.

Tendo em vista, então, a insuficiência da teoria de Turnbull e Fischer, descrita por Rappaz ^[1], quanto ao relato da realidade, alguns autores ^[1,2,16,17,18]

sugeriram o uso da teoria de nucleação, proposta por Oldfield e descrita por Rappaz [1].

Nessa proposta, Rappaz [1,18,21] aconselha a adoção de funções estatísticas para simular, tanto a ocorrência dessa nucleação quase instantânea, como a da ativação em diferentes super-resfriamentos das diferentes famílias de sítios disponíveis.

O proposto por Oldfield e mencionado por Rappaz [1] é obtido ao se considerar distribuições probabilísticas (Guaussianas ou até polinomiais) da densidade de núcleos formados em função do super-resfriamento. Rappaz [1] aponta, ainda, que os parâmetros de ajuste das curvas estatísticas (figura 10) podem ser obtidos empiricamente ou ajustados ao próprio modelo do qual se utiliza a teoria.

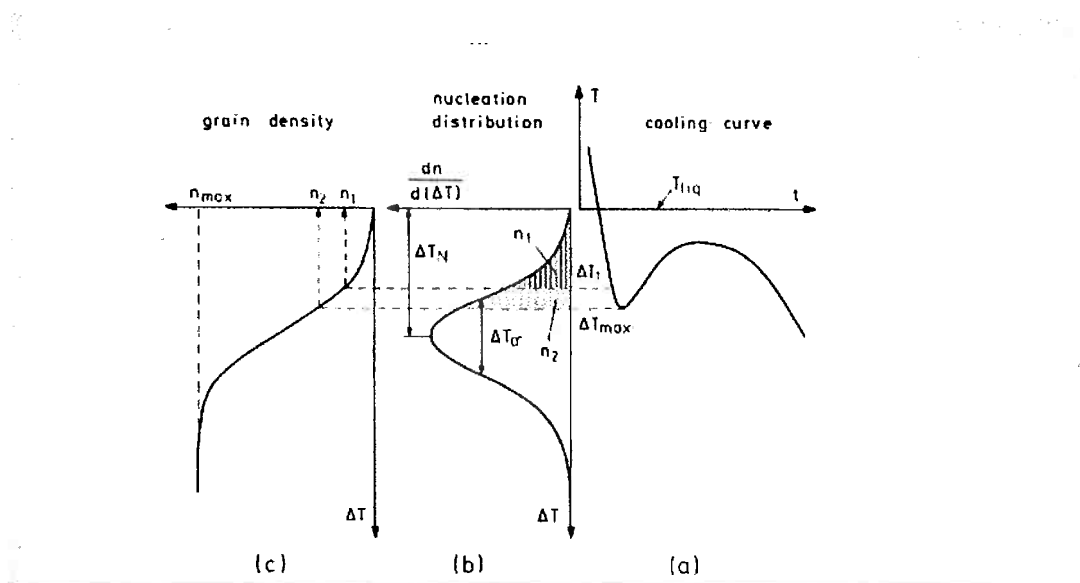


Figura 10: Curvas estatísticas Gaussianas que simulam a distribuição de sítios de nucleação disponíveis com o superresfriamento. [1]

3.2.2.2) CRESCIMENTO

A outra teoria, sempre presente em modelos microscópicos determinísticos, acolhe o uso de teorias ^[9,19] que relacionam a velocidade da ponta da dendrita em função do super-resfriamento na ponta dessa dendrita.

No caso, a diagonal principal da malha quadrada que discretizou o sistema cresceria com a velocidade calculada por tal modelo ^[9,19] e, como relata Rappaz ^[1, 18], quando tal diagonal encontrar o centro de uma célula líquida vizinha, esta se solidificará e a interface movimentar-se-á.

O processo de crescimento da fase sólida utilizado nos modelos propostos por Rappaz ^[1, 18, 21] é obtido através de considerações da dependência da taxa de crescimento com o comportamento da região da ponta da dendrita.

Os processos difusivos são regidos por gradientes no líquido, na frente do cristal sólido em crescimento. Esses gradientes, na frente da ponta da dendrita, podem ter super-resfriamento de origem térmica, super-resfriamento devido a gradientes de composição que, através de análises do diagrama de fases, podem ser entendidos como gradientes térmicos, super-resfriamento devido à curvatura na ponta da dendrita e super-resfriamento de características cinéticas.

A velocidade de crescimento da fase sólida dependerá, portanto, da resolução de fenômenos de transporte de massa e calor.

Como na realidade, em processos comerciais de solidificação, o super-resfriamento térmico é pequeno (1 a 10K), sua influência pode ser desprezada.

Os conceitos básicos propostos por Kurz-Giovanola-Trivedi ^[19], na teoria conhecida como KGT, são amplamente usados em modelos microscópicos determinísticos^[1,2,18,21] e estabelecem que uma dendrita cresce com um “raio de curvatura” da ponta dado pelo menor comprimento de onda que promove uma instabilidade da interface sólido-líquido (conceito conhecido como estabilidade marginal) ^[9,19]; então, o potencial termodinâmico para que ocorra difusão de massa na ponta da dendrita, é dado pela supersaturação, definida esta como a diferença entre a concentração das fases líquida e sólida na interface, de forma que, aumentando-se a supersaturação, aumenta-se a taxa de crescimento da dendrita e da fase sólida.

Há dificuldades nesse modelo, em virtude da interdependência entre a supersaturação e a geometria da ponta da dendrita ^[9].

Tal geometria pode ser aproximada por um semi-hemisfério, para que o tratamento matemático que forneça a velocidade de crescimento dendrítico em função do superresfriamento, fique mais fácil, ou, se se considerar uma geometria parabolóide, a obtenção de tal abordagem matemática deve utilizar a função de Ivantsov ^[9,19].

Tais modelos, alcançaram resultados satisfatórios, como mostram as simulações e experimentos propostas por Hang-Cho ^[2].

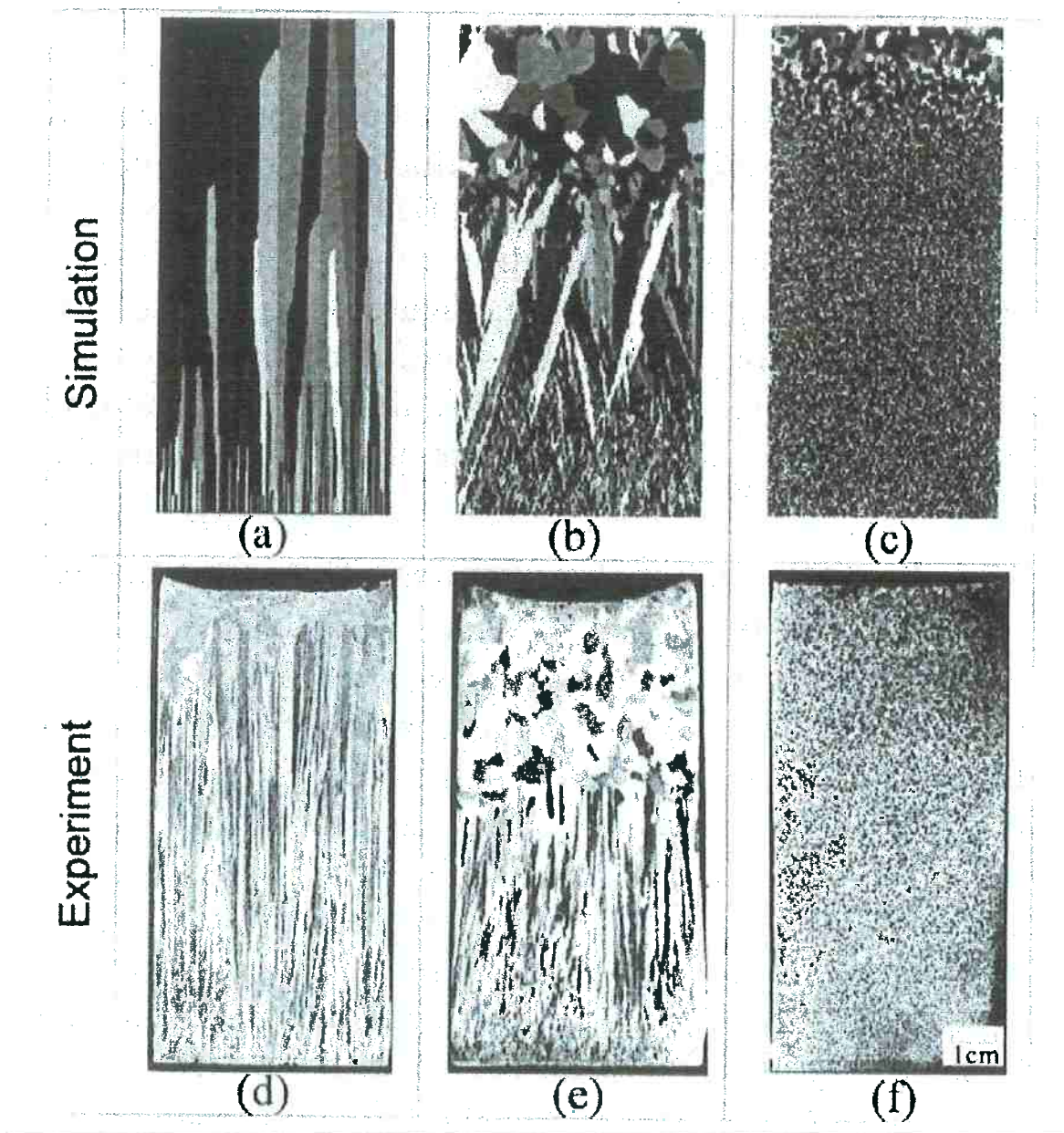


Figura 11: Simulações (a,b,c) e macros experimentais (d,e,f) ^[2].

Entretanto, segundo Rappaz ^[18], no caso de nucleação e crescimento, as ferramentas usadas em modelos determinísticos não são, por si só, suficientes para prever importantes fenômenos observados na macroestrutura de um lingote, como a transição entre grãos coquilhados para colunares, que ocorre próximo à parede do molde, a variação da seção transversal de grãos colunares durante o crescimento,

nem, e transição entre grãos colunares e equiaxiais . Ainda segundo Rappaz ^[18], os modelos determinísticos não conseguem simular graficamente a evolução macroestrutural por não levarem em conta aspectos de cristalografia.

4. MATERIAIS E MÉTODOS

4.1 CONSIDERAÇÕES GERAIS:

Foi proposta uma modelagem matemática para solidificação de ligas binárias baseada no acoplamento de um modelo macroscópico, que usou como ferramenta o método de diferenças finitas explícitas, com um modelo microscópico estocástico de formação macro e microestrutural, que representa uma evolução da linha de modelos probabilísticos propostos por Spittle e Brown ^[10,11,12].

Neste item serão descritas as principais equações utilizadas pelo modelo matemático proposto e os dados experimentais obtidos por Martorano ^[20]. Estes dados experimentais serão utilizados para comparação com as simulações geradas pelo modelo desenvolvido. Inicialmente descrevem-se as duas experiências realizadas por Martorano ^[20], em seguida, descreve-se o modelo desenvolvido.

As duas experiências utilizaram a liga Cu 8%Sn, solidificada unidirecionalmente num molde cilíndrico de raio 16,5mm e altura 56mm, como mostrado na figura 12, abaixo.



Figura 12: Fotografia do molde cilíndrico e dos termopares utilizado por Martorano^[20] para a execução das experiências.

No primeiro ensaio, Martorano^[20] obteve uma macroestrutura bruta de solidificação completamente colunar e, na segunda experiência, obteve-se parte da estrutura colunar e parte equiaxial, onde se observa claramente a transição entre as zonas colunares e equiaxial, como mostra a figura 13, abaixo.



EXPERIÊNCIA 1



EXPERIÊNCIA 2

Figura 13: Macroestruturas brutas de solidificação obtidas por Martorano^[20] nas duas experiências analisadas.

As condições de realização dos dois ensaios estão descritas em detalhes na tabela 1, abaixo.

O primeiro ensaio utilizou uma base refrigerada no qual circulou água em temperatura de 25°C para promover a extração de calor do sistema. A temperatura de vazamento do primeiro ensaio foi de 1134°C enquanto que do segundo ensaio foi de 1074°C.

No segundo experimento, Martorano [20] não utilizou refrigeração na base de cobre, todo calor é extraído pela base sem esta ser refrigerada e um revestimento com tinta isolante térmica foi utilizado sobre a superfície interna da base de cobre. Portanto as condições de extração de calor foram mais severas no primeiro do que no segundo experimento. Tal fato é notado através da análise dos coeficientes de transferência de calor entre a base e o sistema obtidos por Martorano [20]. Tais dados encontram-se nas tabelas 3 e 4 abaixo.

Nos dois experimentos, Martorano [20] descreve que a condição de extração de calor do sistema foi unidirecional, sendo o calor extraído à partir da base inferior do molde cilíndrico. Obteve-se, portanto, uma situação de isolamento térmico nas paredes laterais do molde cilíndrico.

Em ambas as experiências, Martorano [20] mediu o perfil térmico de pontos no interior do cilindro através da utilização de termopares conectados a um sistema de aquisição de dados. Abaixo apresenta-se na figura 16 um esquema de posicionamento dos termopares utilizados dentro dos cilindros para ambos os ensaios. O posicionamento preciso destes termopares é apresentado nas tabelas 2 e 3. As curvas de resfriamento dos termopares foram, então, confrontadas com as curvas de resfriamento simuladas pelo modelo ora proposto.

A figura (14) e as tabelas (1,2,3,4,5 e 6) a seguir relatam as condições em que se procederam as experiências.

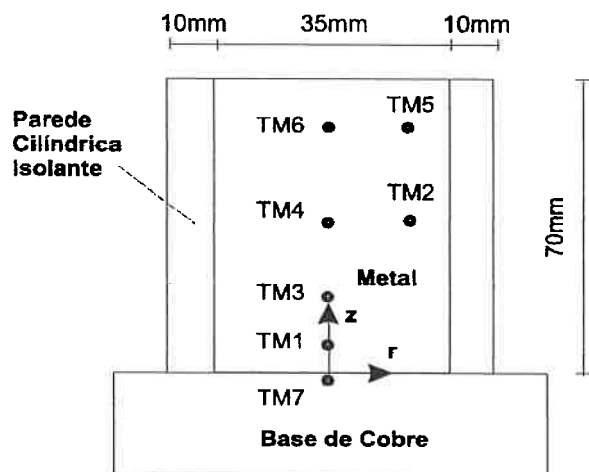


Figura 14: Esquemas do posicionamento dos termopares utilizados por em suas experiências Martorano [20]

TABELA 1: Condições experimentais dos ensaios usados

EXPERIÊNCIA	TEMPERATURA DE VAZAMENTO (°C)	TEMPERATURA AMBIENTE (°C)	TEMPERATURA DA ÁGUA REFRIGERANTE DA BASE DO MOLDE (°C)	TEMPO TOTAL DE SIMULAÇÃO(s)
1	1134	25	25	250
2	1074	25	Não utilizou-se	500

TABELA 2 : Descrição do posicionamento dos termopares na experiência 1 cujas medidas foram utilizadas na confrontação com o modelo proposto.

EXPERIÊNCIA 1		
Nº DO TERMOPAR	POSICIONAMENTO * RADIAL DO TERMOPAR (mm)	POSICIONAMENTO ** VERTICAL DO TERMOPAR (mm)
0	10,5	5,5
1	1,5	8,5
2	10,5	30,5
3	1,0	15,0
4	0,5	34,0

TABELA 3: Descrição do posicionamento dos termopares na experiência 2 cujas medidas foram utilizadas na confrontação com o modelo proposto.

EXPERIÊNCIA 2		
Nº DO TERMOPAR	POSICIONAMENTO * RADIAL DO TERMOPAR (mm)	POSICIONAMENTO ** VERTICAL DO TERMOPAR (mm)
1	0,5	7,3
2	13,5	33,0
3	0,0	18,5
4	0,0	34,5
6	0,0	56,2

*: medida a partir do eixo de simetria vertical do cilindro

**: medida a partir da base inferior de cobre refrigerado do cilindro

As tabelas a seguir mostram a evolução do coeficiente global de transferência de calor estimado por Martorano^[20]:

TABELAS 4 e 5: Variação temporal do coeficiente global de transferência de calor na base do molde, calculado por Martorano^[20].

EXPERIÊNCIA 1	
TEMPO (s)	$h_{\text{BASE}} \text{ (} \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}} \text{)}$
0	9894.25
12,5	5330.56
25	5361.14
50	4286.75
75	4063.59
100	3047.63
175	2323.40
250	2025.74

EXPERIÊNCIA 2	
TEMPO(s)	$h_{\text{BASE}} \text{ (} \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}} \text{)}$
0	745.52
300	990.65
400	475.93
500	393.53

Os dados de variação térmica das propriedades termofísicas da liga ensaiada (Cu - 8% Sn) foram retiradas também de Martorano^[20] e apresentam-se a seguir, nas tabelas:

TABELA 6: Dados de calor específico utilizados no modelo proposto.

CALOR ESPECÍFICO DAS FASES SÓLIDO E LÍQUIDO:

$$C_p \text{ Sólido} = 329.79 + 0.08278 \cdot T \text{ (} \frac{\text{J}}{\text{Kg} \cdot \text{K}} \text{)}$$

$$C_p \text{ Líquido} = 437.2 \text{ (} \frac{\text{J}}{\text{Kg} \cdot \text{K}} \text{)}$$

TABELA 7: Dados de densidade utilizados no modelo proposto.

DENSIDADE DAS FASES SÓLIDO E LÍQUIDO:

$$\rho_{\text{Sólido}} = 8.800 \text{ Kg/m}^3$$

$$\rho_{\text{Líquido}} = 7903.9 \text{ Kg/m}^3$$

TABELA 8: Dado de calor latente de solidificação usado no modelo proposto.

$$\Delta H_{\text{Fusão}} = 193576.6 \text{ (J/Kg)}$$

TABELA 9: Dados de condutividade térmica utilizadas no modelo proposto.

$$K_{\text{sólido}} = 62 + 0.127 (T - 293) \text{ (W/m . K)}$$

$$K_{\text{líquido}} = 95.48 \text{ (W/m . K)}$$

Os dados relativos às propriedades do diagramas de fase Cu-Sn, como curva *liquidus*, *solidus*, coeficiente de partição de soluto de equilíbrio e declividade da curva *liquidus* foram obtidos através da interpolação linear entre pontos extraídos de Martorano [20]. A tabela a seguir descreve a seqüência de pontos colhidos do diagrama de fases do sistema Cu-Sn.

Tabela 10: Pontos das curvas *solidus* e *liquidus* para o sistema Cu - Sn.

TEMPERATURA (°C)	% Sn DA CURVA SÓLIDUS	% Sn DA CURVA LÍQUIDUS
1084.5	0.0	0.0
1075.0	0.38	1.667
1050.0	0.90	5.0
1028.0	1.52	8.0
1000.0	2.20	11.2
975.0	2.96	13.75
950.0	3.71	16.01
925.0	4.66	17.97
900.0	5.80	19.78
875.0	7.09	21.39
850.0	8.57	22.85
825.0	10.64	24.31
799.0	13.5	25.5

De posse dos dados da variação das temperaturas *liquidus* e *solidus* com a porcentagem de estanho, para qualquer valor local da porcentagem de estanho na fase líquida, a temperatura *liquidus* local poderá ser estimada através de uma simples interpolação linear entre o intervalo de pontos experimentais que contenham o valor da composição local.

O mesmo raciocínio, quanto à interpolação, é implementado pelo modelo proposto, para a determinação de um valor instantâneo do coeficiente global de transferência de calor, na base do molde de cobre refrigerado a água.

No caso da experiência 1, a temperatura da água que refrigera a base inferior de cobre varia durante o processo.

Portanto, Martorano ^[20] obteve experimentalmente uma variação temporal da temperatura da água.

Novamente, o mesmo raciocínio de interpolação foi aplicado, pelo modelo proposto, para obter a temperatura instantânea da água refrigerante.

A parte superior do molde está aberta ao ambiente, de forma que, em ambas as experiências, poder-se-ia ter adotado, no modelo, uma condição de contorno do tipo de Cauchy, sendo que o fluxo de calor externo seria dado por irradiação e convecção junto ao ar.

Porém, a condição de contorno na parte superior do cilindro adotado pelo modelo, foi a de atribuir aos elementos do sistema pertencentes a essa condição de contorno, temperaturas medidas empiricamente através dos termopares de nº 5, como indicado na figura 14.

Os dados acima relatados, de variação das temperaturas *liquidus* e *solidus*, com a porcentagem de estanho, de variação temporal do coeficiente global de transferência de calor na base de cobre, de variação da temperatura da água (experiência 1) e de variação temporal da temperatura do líquido na superfície superior, são armazenados em arquivos de texto que alimentarão de informações, o modelo proposto.

4.2 DESCRIÇÃO DO MODELO

Neste item serão descritos detalhes da implementação do modelo matemático proposto no presente trabalho. Ao final desta seção, apresenta-se um fluxograma do modelo proposto.

O modelo proposto compõe-se de duas rotinas básicas.

A primeira diz respeito ao modelo macroscópico, que calcula o campo térmico do metal, a cada intervalo de tempo. Já a Segunda rotina, refere-se à execução de um modelo microscópico probabilístico que simula a evolução da macroestrutura bruta de solidificação.

O modelo macroscópico divide o sistema em estudo, ou seja, um cilindro de 16,5mm de raio e 55mm de altura, em volumes térmicos, sendo que, na direção radial, há 17 volumes, e, na altura, 29 volumes. Isso resulta em elementos quadrados que medem 1,94mm, de lado.

As experiências anteriormente relatadas deram-se numa situação de quase que perfeita isolamento térmica na superfície lateral do molde cilíndrico, como

mostrado por Martorano [20] , ou seja, supôs-se que todo o calor do sistema seria extraído unidirecionalmente através da base de cobre.

A figura a seguir mostra a divisão da massa líquida em elementos de volume, nos quais será aplicado o método das diferenças finitas.

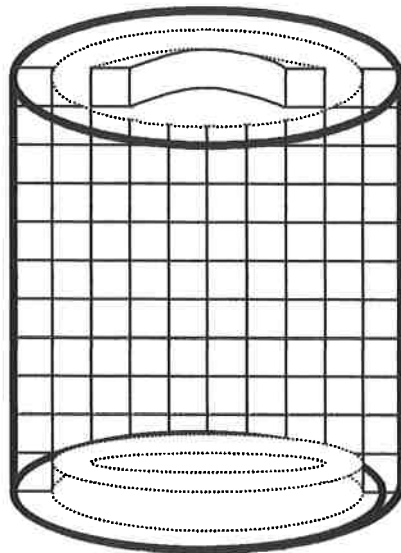


Figura 15: Discretização num plano do sistema cilíndrico.

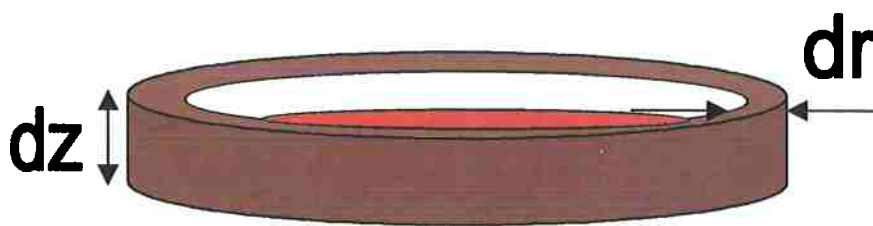


Figura 16: Volume térmico em apresentação tridimensional..

O modelo macroscópico utilizou o método numérico de diferenças finitas para o cálculo do campo térmico e de soluto durante a solidificação.

A equação geral de condução de calor aplicada ao sistema cilíndrico foi a seguinte:

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(rK \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \Delta Hf = \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t}$$

(15)

Onde

T é a temperatura dependente do ponto e do tempo considerado;

r e z são as coordenadas do sistema cilíndrico;

k, ρ e C_p , são a condutividade térmica, a densidade e o calor específico dependentes da temperatura e da fase em que o material se encontra;

ΔHf é a taxa de calor de solidificação por unidade de volume, liberado pelo sistema que está solidificando.

A resolução numérica da equação de calor exposta acima envolve que o sistema cilíndrico analisado seja discretizado em elementos de volume térmico em que, através de balanços térmicos, chegou-se à equação

$$T[r][z]^{(t+\Delta t)} = T[r][z]^{(t)} + \frac{\Delta t}{\rho \cdot C_p} \left(\frac{\sum \text{fluxo} \cdot \text{área}}{V} - \Delta Hf \cdot \rho \cdot \frac{dfs}{dt} \right)$$

(16)

Onde

T [r][z] é a temperatura do volume térmico no ponto r, z;

r, z são as coordenadas do volume térmico analisado;

t é o instante anterior no qual conhece-se todo o campo térmico;

(t+ Δt) é o instante posterior, no qual busca-se o campo térmico;

ρ_i, C_p são respectivamente a densidade e o calor específico do volume térmico;

Δt é o intervalo de tempo no qual o método de diferenças finitas se aplica;

ΔH_f é o calor de solidificação por unidade de massa liberado (tabela 7);

f_s é a fração de sólido existente dentro do volume térmico existente no instante t .

Implementaram-se as funções densidade e calor específico, que calculam a densidade e o calor específico de um dado elemento pertencente a uma determinada fase em função da temperatura, através dos dados das tabelas 5 e 6. Implementaram-se, também, funções geométricas que, dado um elemento através das coordenadas r e z , calculam o volume do elemento em questão, bem como suas áreas (norte, sul, leste, oeste) de troca de calor. A convenção das áreas a norte, sul leste e oeste de um volume térmico é mostrado na figura 17.

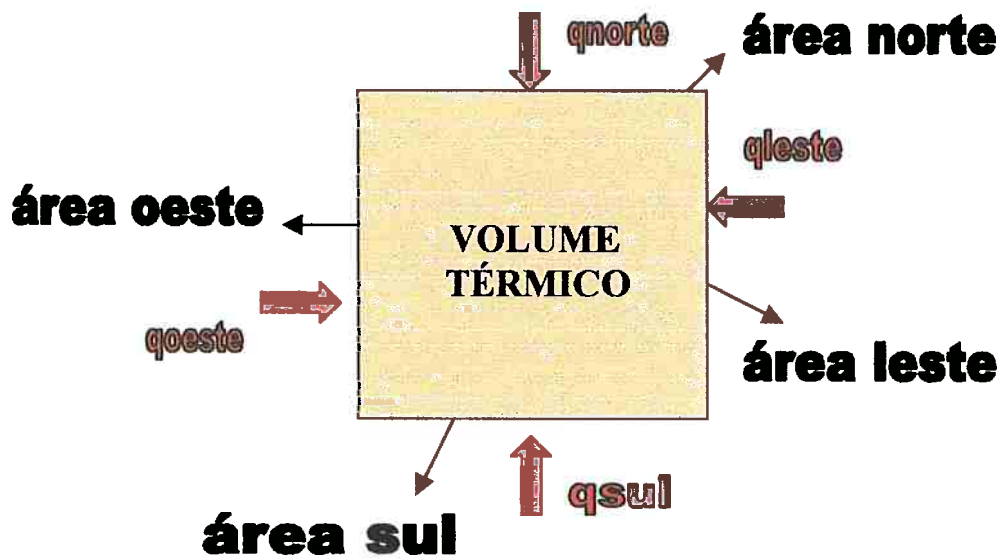


Figura 17: Fluxos de calor através das áreas de troca de calor relevantes para uma extração unidirecional de calor .Neste caso q representa os fluxos através das quatro faces do volume térmico.

Construiu-se uma função que, dado um determinado ponto através das coordenadas r e z , calcula a somatória das taxas de calor ao redor do elemento considerado. A função que calcula a condutividade térmica entre dois elementos de diferentes temperaturas foi implementada através da seguinte equação:

$$K_{p1p2} = \frac{1}{\frac{d}{K_{p1}(T)} + \frac{d}{K_{p2}(T)}}$$

(17)

Onde:

k_{p1p2} é a condutividade térmica entre o centro de dois volumes térmicos;

d é a metade do lado do volume térmico de geometria quadrada;

$k_{p1}(T)$ e $k_{p2}(T)$ são as funções que calculam a condutividade térmica de um elemento em função de sua temperatura e da fase em que ele se apresenta (tabela 9).

Deve ser ressaltado que, embora o regime térmico de extração de calor seja unidimensional, o modelo foi implementado tanto na direção do eixo z , como na do eixo r , para que a macroestrutura simulada pelo modelo microscópico pudesse ser obtida bidimensionalmente.

Três condições de contorno necessárias para que o modelo simule os fenômenos na periferia do sistema foram adotadas, a saber:

1º. Na base inferior refrigerada do molde de cobre: os elementos que pertencem a esta condição de contorno terão como condição de balanço energético a seguinte equação, para $z=0$:

$$k \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right| = h_{base} (T_{nó\ superficial} - T_{base})$$

(18)

Onde

T é a temperatura do volume térmico

K é a condutividade do material;

h_{base} é o coeficiente de transferência de calor entre o sistema e a base.

Tanto a temperatura da superfície superior, como a temperatura da água na experiência 1 foram medidas experimentalmente por Martorano [20] e tais dados são alimentados ao programa através de arquivos de texto.

Os valores de h_{base} foram obtidos por Martorano [20] e estão mostrados nas tabelas 4 e 5.

Os valores de h , temperatura dos nós superficiais, e temperatura da água (experiência 1) e da base não refrigerada (experiência 2) são obtidas pelo modelo, a qualquer instante por interpolação linear entre os pontos experimentais disponíveis.

A equação de diferenças finitas para os volumes térmicos localizados junto à base de cobre é semelhante à aplicada a um elemento qualquer interno ao sistema, com a diferença de que a taxa de calor proveniente da face sul (figura 17) do volume térmico é calculada através da condição de contorno descrita pela equação anterior.

2º. A segunda condição de contorno presente no sistema, diz respeito ao isolamento térmico lateral do cilindro.

A equação que descreve tal condição é a seguinte:

$$K \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right| = 0$$

(19)

Onde

K é a condutividade térmica;

T é a temperatura;

r é a coordenada radial do sistema cilíndrico.

A equação de diferenças finitas, quando aplicada para um elemento de volume pertencente à superfície lateral do sistema, é análoga à de um elemento interno ao sistema, a não ser pelo fato de que a função que soma as taxas ao redor do volume considerado atribui um valor nulo, ou para a taxa proveniente da face oeste (figura 17) do volume, ou para a taxa proveniente da face leste do elemento.

3º. Finalmente, a terceira condição de contorno aplica-se aos pontos que estão na superfície superior do metal líquido.

Atribuem-se aos nós pertencentes a esta condição de contorno, as temperaturas medidas experimentalmente por Martorano^[20] através do termopar número 5 indicado na figura 14 .

A equação que descreve a terceira e última condição de contorno é a seguinte:

$$T[r][z \text{ sup}] = T_{\text{atribuída}}$$

(20)

Onde

T é a temperatura dos volumes superficiais;

r é a coordenada radial do volume térmico superficial;

zsup é a coordenada superficial do elemento;

Tatribuída é a temperatura num dado instante obtida experimentalmente pelo termopar número 5 (figura 14).

Todas as funções que calculam o volume do elemento considerado, bem como suas quatro áreas de troca de calor (norte, sul, leste e oeste figura 19), foram obtidas com o auxílio das deduções presentes na literatura especializada [7,8] .

Para as duas experiências simuladas, utilizou-se uma discretização temporal diferente. Quer dizer, para ambas, estimou-se qual seria o diferencial de tempo Δt no qual a relação de estabilidade do sistema seria aceita.

$$r = \frac{K \Delta t}{\rho \cdot C_p l^2} < 0,25$$

(21)

Onde

k , ρ e C_p são, respectivamente, a condutividade térmica, densidade e calor específico do volume térmico considerado;.

l é o tamanho do volume térmico quadrado;

Δt é o intervalo de tempo usado no método de diferenças finitas;

A tabela 11, abaixo, mostra os valores de Δt usados nas simulações das duas experiências onde o processo estabilizou-se:

Tabela 11: Discretizações de tempo que levaram o modelo à estabilidade.

EXPERIÊNCIA	Δt (s)
1	0,01
2	0,001

O método de diferenças finitas foi também utilizado para simular distribuição de soluto que ocorre durante a solidificação de ligas. Basicamente, a equação geral a ser resolvida para tal fenômeno é a seguinte:

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} = D_L \cdot \nabla^2 C$$

(22)

Onde

C_l é a concentração de soluto na fase líquida;

t é o tempo;

D_l é o coeficiente de difusão de soluto na fase líquida.

No presente modelo, adotou-se o valor de $3 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ para o coeficiente de difusão do Sn na liga Cu - 8%Sn, tal valor foi obtido de Martorano [28].

No caso da redistribuição de soluto, como o coeficiente de difusão é bem menor do que a difusividade térmica dos materiais, a discretização espacial capaz de representar de forma precisa o campo de soluto deveria ser menor que o campo térmico.

Então, para cada um dos elementos térmicos considerados (17 pelo diâmetro e 29 pela altura do cilindro simulado), dividiu-se cada lado volume térmico em 11 células, inscritas a esse volume, de acordo com a figura abaixo:

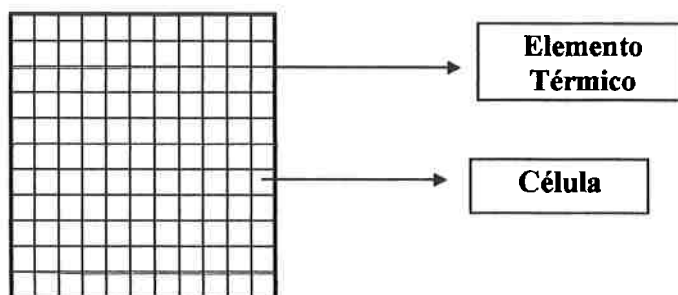


Figura 18: Esquema das 121 células inscritas a um elemento térmico.

Com tal discretização, cada célula terá uma dimensão quadrada de 0,17mm, ficando assim a célula entre 10 e 100 μm , capaz de reproduzir segundo Rappaz [1,18] o tamanho de grão macroestrutural, normalmente encontrado nos processos comerciais de solidificação.

A equação de diferenças finitas explícitas aplicada às células é a seguinte:

$$C^{(t+\Delta t)}[r][z] = C^{(t)}[r][z] + \Delta t [\Sigma(\text{área.fluxo})]$$

(23)



Onde

C é a composição do soluto a ser redistribuído;

Δt é a discretização temporal utilizada e a função;

Σ (fluxo.área) é a função que calcula a taxa de massa ao redor da célula considerada.

Aqui, algumas considerações devem ser feitas:

- 1ª) A discretização temporal, Δt , utilizada, é a mesma utilizada no fenômeno de distribuição de calor. Com isso, como a difusividade térmica é ordem de grandeza maior que o coeficiente de difusão de massa, mesmo sendo o tamanho da célula menor que o do elemento, a discretização de tempo que estabilizará o processo de transporte de calor, estabilizará o processo de redistribuição de massa.
- 2ª) A simulação de transporte de massa só é processada em células que se encontram na fase líquida; células na fase sólida são admitidas como tendo coeficiente de difusão desprezível.

3ª) A função que soma a taxa de massa ao redor da célula líquida a ser processada verifica primeiro a condição dos quatro vizinhos à célula considerada. De acordo com a condição dos vizinhos, um fluxo de massa entre as faces é calculada de acordo com a seguinte informação:

- a) Se a célula vizinha considerada já se solidificou a mais que um Δt anterior, nenhuma taxa de massa se dá entre a célula processada e o vizinho considerado.
- b) Se a célula está sólida, mas se solidificou num instante anterior, o fluxo de massa entre a célula processada e o vizinho é dado pela quantidade de soluto a ser expulso quando um sólido se forma. Tal taxa é proporcional ao coeficiente de partição de soluto de equilíbrio e da composição do vizinho sólido, antes de esse se solidificar.

Tal coeficiente de partição de equilíbrio foi considerado como dependente da temperatura. A tabela 10 mostra, para o sistema simulado (Cu - Sn), pontos das curvas *solidus* e *liquidus* do diagrama de fases. De forma que, para se calcular a temperatura *liquidus* de uma célula, basta interpolar valores de composição de soluto da célula entre os pontos retirados do diagrama de fases.

Para o caso de distribuição de soluto, apenas um tipo de condição de contorno se faz necessária. Tal condição diz respeito ao fato de que o sistema não troca massa nem pelas suas superfícies basais, nem pelas laterais do molde cilíndrico.

Isto implica na utilização da seguinte equação de contorno, para as células que estão nessa condição de contorno.

a) para r = Raio do cilindro:

$$\left. \frac{\partial C}{\partial r} \right| = 0$$

$$\left. \frac{\partial C}{\partial z} \right| = 0$$

b) para $z=0$ ou z =altura do cilindro

(24)

Onde

C é a concentração de soluto;

r e z são as coordenadas cilíndricas do sistema analisado.

Por fim, deve-se ressaltar que o processamento da distribuição térmica calcula a temperatura num ponto central ao elemento térmico considerado. Espacialmente, isto quer dizer que a célula que contém este ponto central desse elemento tem a sua temperatura calculada por tal processo. Qualquer outra célula

inscrita a esse elemento tem sua temperatura estimada através de uma interpolação linear, com o auxílio de um polinômio de Taylor.

$$T_{\text{célula}[x][y]} = T_{\text{célula central}} + \frac{\partial T}{\partial x} (x - x_{\text{célula central}}) + \frac{\partial T}{\partial y} (y - y_{\text{célula central}})$$

(25)

Onde

$T_{\text{célula}}$ é a temperatura interpolada da célula considerada;

$\frac{\partial T}{\partial x}$ e $\frac{\partial T}{\partial y}$ são os gradientes calculados por diferenças finitas centrais.

4.3 MODELO MICROSCÓPICO

Como já foi dito na introdução ao presente trabalho, a função deste modelo é a de primeiro simular a evolução macroestrutural e depois, fornecer à equação de diferenças finitas (equação 16) a variação temporal da fração de sólido. É claro que, neste caso, o modelo microscópico (que simulará fenômenos de nucleação e crescimento da fase sólida) é executado num mesmo intervalo de tempo utilizado pelo modelo macroscópico de diferenças finitas, no caso Δt de 0.01 para a experiência 1 e 0.001, para a experiência 2, como mostra a tabela 11.

Como também referido na introdução, o modelo microscópico será baseado no mapeamento ou “cellular automata” em que o sistema cilíndrico será discretizado. Tal mapeamento é o mesmo daquele realizado para o cálculo da composição de soluto, conforme descrito anteriormente no modelo macroscópico. A figura 18 esclarece tal mapeamento.

Portanto, em cada célula, além de informações de temperatura (interpolada) e composição química de soluto, já calculadas pelo modelo macroscópico, outras informações, como a da fase em que a célula se encontra (sólida ou líquida), bem como a sua orientação cristalográfica (caso a célula já tenha solidificado), devem ser levadas em conta.

Tal técnica^[10,11,12,13,14,16,17,18] é desenvolvida através de uma atribuição de um número inteiro p , onde $0 \leq p \leq 25$, a cada célula do sistema, com a seguinte convenção: se $p = 0$, a célula ainda está líquida; caso contrário, a célula já se solidificou com uma direção cristalográfica entre 25 possíveis. Segundo Rappaz^[1, 18, 21], 25 orientações disponíveis de orientações cristalográficas, numa macroestrutura solidificada unidirecionalmente, é um número normalmente encontrado em análises metalográficas desses sistemas e por isso, aqui foi adotado.

No início da simulação, todas as células têm seu valor de p nulo atribuído, estando, portanto, no estado líquido.

Em cada passo de intervalo de tempo Δt são executadas as rotinas de distribuição de calor e massa pelo modelo macroscópico, e estando todas as células com definidos valores de temperatura e composição, o modelo microscópico simula funções de nucleação e crescimento, após o que se conhecerá a variação temporal da fração de sólido.

Tal informação será acoplada à equação 16 de diferenças finitas utilizada no próximo passo de tempo. Como cada célula só pode ser ou sólida, ou líquida, e sabendo-se que há 121 células dentro de um elemento térmico, sabe-se qual a variação de fração de sólido dentro do volume térmico após o intervalo de tempo Δt

Alguns autores como Zhu e Smith [16,17] denominam uma sequência no qual são processadas as funções de nucleação e crescimento como “Monte Carlo step”. O que foi proposto neste modelo, foi de executar um “Monte Carlo step”, num intervalo de tempo Δt , usado no método de diferenças finitas que calcula o campo térmico.

Basicamente, são duas as funções simuladas no processamento do modelo microscópico: Nucleação e Crescimento. A seguir, detalham-se ambas as funções.

4.3.1 FUNÇÃO NUCLEAÇÃO

Dado o conjunto de todas as células (com temperaturas e composição calculadas) do sistema cilíndrico, sorteia-se aleatoriamente uma célula qualquer.

Uma vez sorteada (probabilisticamente), se a célula for líquida, ou seja, possuir um valor p nulo, calcula-se o super-resfriamento no qual a referida célula se encontra.

Isso é obtido através da diferença entre a temperatura real da referida célula, e a temperatura *liquidus* da célula que é calculada conhecendo-se a composição da referida célula.

$$\Delta T_{\text{célula}} = T_{\text{célula}} - T_{\text{líquidus}} (C_{\text{célula}})$$

(26)

Considera-se, então, como sugerido por Rappaz ^[1], que a densidade por unidade de área de núcleos que se formam num Δt é proporcional à diferença de super-resfriamento na célula entre o instante considerado e o instante anterior.

$$\Delta N_{\text{célula}}^t = A [\Delta T_{\text{célula}}^t - \Delta T_{\text{célula}}^{(t - \Delta t)}]$$

(27)

Onde

ΔN é o número de núcleos por unidade de área que podem se formar num Δt ;

$\Delta T_{\text{célula}}$ é o superresfriamento no qual a célula se encontra no instante t

ou num instante anterior $(t - \Delta t)$;

“A” é uma constante de proporcionalidade que, segundo Rappaz ^[1] e como adotado por Zhu e Smith ^[16,17], é uma constante que depende do sistema binário considerado e das condições de solidificação (extração de calor, grau de inoculação).

No presente modelo, os valores da constante A foram obtidos como resultado do melhor ajuste da macroestrutura simulada e aquela obtida experimentalmente. Os melhores valores de A obtidos e seus comentários são feitos no item “Resultados e Discussão” deste trabalho.

Uma vez obtida, de acordo com o polinômio da equação 27, a densidade de núcleos por área formados num Δt , o que se representa por ΔN , calcula-se a

probabilidade de ocorrência de nucleação na célula multiplicando-se ΔN da célula pela sua área.

$$\text{probabilidade da célula nuclear} = \Delta N \cdot l_{\text{célula quadrada}}^2$$

(28)

Onde

ΔN é a densidade de núcleos formados num Δt ;

$l_{\text{célula quadrada}}$ é o tamanho da célula quadrada utilizada.

É claro que tal valor de probabilidade deve ser menor que 1.0. Se tal valor for superior ao unitário, deve-se concluir que a discretização espacial (tamanho da célula) não é apropriada para reproduzir um grão de tamanho inferior às dimensões da célula. Tal atenção deve ser tomada, como já observado por Rappaz [1,18] e comentado na introdução ao presente trabalho. Deve-se, caso o descrito ocorra, inserir um maior número de células por elemento térmico, sempre tendo em mente que isto aumentará o tempo de execução do modelo.

Obtido o valor dessa probabilidade (certamente menor ou igual ao valor unitário), um gerador de números aleatórios sorteia um número entre 0 e 1. Se o valor do número aleatório gerado for menor que o da probabilidade calculada, a nucleação ocorre, e, novamente, sorteia-se uma direção cristalográfica entre os números de 1 a 25 ao núcleo formado; tal número é armazenado na célula analisada (mostrando que a célula já não é mais líquida e tem a certa direção cristalográfica entre 1 e 25).

Essa sequência : 1º) sorteio de uma célula, 2º) cálculo da probabilidade de ocorrer nucleação, 3º) verificação da ocorrência ou não do fenômeno , é repetida tantas vezes quantas forem as células que compõem o sistema; assim, fica garantida, teoricamente, uma mesma probabilidade de uma célula ser sorteada para análise.

4.3.2 FUNÇÃO CRESCIMENTO

Após a ocorrência da nucleação, tais núcleos poderão crescer. Para isso, após a execução do procedimento de nucleação, o procedimento de crescimento de núcleos sólidos será simulado.

O procedimento de crescimento da fase sólida inicia-se, então, com um sorteio de uma célula qualquer entre as possíveis presentes no sistema. Sorteada uma célula, verifica-se se esta é líquida e se ela possui vizinhos (ao norte, sul, leste e oeste de acordo com a figura 17) sólidos.

Isto é obtido através da verificação do número inteiro p pertencente à célula naquele instante. Se o valor de p for nulo, a célula ainda é líquida, caso contrário, ela já se solidificou com orientação cristalográfica dada pelo valor de p .

Satisfeitas tais condições, um dos quatro possíveis vizinhos sólidos existentes ao redor da célula líquida analisada (sorteada) é sorteado, para que a célula líquida solidifique com a mesma orientação cristalográfica do vizinho sólido sorteado. Se essa transformação realmente ocorrer, estar-se-á simulando a movimentação da interface de solidificação.

Entretanto, para que a célula líquida analisada realmente se solidifique com a orientação do sítio sólido vizinho sorteado, o modelo deve adotar um critério para que a transformação ocorra.

O critério sugerido no modelo aqui proposto prevê que, para que a transformação descrita ocorra, deve haver um abaixamento de energia livre do sistema. E, neste caso, por energia livre, entende-se pela soma de duas parcelas, energia livre volumétrica devido a um suposto super-resfriamento no qual a célula líquida se encontra e energia livre devido à presença de interfaces de separação entre as duas fases que são criadas durante a movimentação da interface sólido-líquido.

Portanto, é claro que, para que a célula líquida se transforme em sólida com orientação cristalográfica dada pelo vizinho sorteado, deve haver um abaixamento de energia livre volumétrica (ou seja, a célula deve estar super-resfriada) e mais, deve haver um abaixamento de energia interfacial, para que a interface se movimente.

A variação de energia livre resultante da transformação da célula líquida em sólida é deduzida em Zhu e Smith ^[16,17] e pode ser apresentada na equação 30 abaixo:

$$\Delta G_{\text{célula}} = \Delta G_{\text{volumétrico}}_{\text{célula}} + \Delta G_{\text{interface}}_{\text{célula}}$$

onde:

$$\Delta G_{\text{volumétrico}} = V_{\text{célula}} \cdot \frac{\Delta H_f}{T_{\text{célula}}} \cdot \Delta T_{\text{célula}}$$

$$\Delta G_{\text{interfacial}} = (n_{sl} \cdot \sigma_{sl} + n_{ss} \cdot \sigma_{ss}) \cdot l_{\text{célula}} \cdot \text{Esp}$$

(29)

Onde,

$V_{\text{célula}}$ é o volume da célula quadrada é dado pelo produto da dimensão da célula quadrada pela sua espessura;

Esp é a espessura da célula;

ΔH_f : é o calor de solidificação liberado pela célula líquida, dado pela tabela 7;

$T_{\text{célula}}$: é a temperatura da célula líquida analisada;

$\Delta T_{\text{célula}}$: é o super-resfriamento no qual a célula líquida se encontra.

n_{sl} e n_{ss} são, respectivamente, o número de interfaces novas sólido/líquido e o número de interfaces novas sólido/sólido de diferente orientação cristalográfica, criadas caso, a célula sorteada se solidificasse com orientação dada pelo vizinho sólido sorteado.

σ_{ss} e σ_{sl} são as energias de contorno de grão e de separação entre as fases sólida-líquida, respectivamente.

De acordo com Zhu e Smith ^[16,17], adotou-se com o energia de interface sólido/líquido para as ligas de Cu analisada, o valor de 0.32 J/m^2 e 0.16 J/m^2 , o valor de energia entre a interface de separação entre grãos.

A espessura da célula é adotada como sendo 3.10^{-13} m ; tal valor, como obtido por Zhu e Smith ^[16,17], descreve-se como sendo o valor de espessura no qual torna o volume da célula simulada igual a um volume atômico. Isto é objetivado, pois tudo se passa no algoritmo de crescimento descrito como se átomos rolassem, aleatoriamente, de uma fase para outra. É claro que, com a adoção do critério acima referido, haverá uma movimentação preferencial de átomos para a fase na qual tal movimentação reduza a energia livre do sistema.

Diante disso, após o cálculo da variação de energia livre que o sistema sofreria caso a célula líquida analisada se solidificasse com a orientação dada pelo vizinho sorteado, pode-se calcular a probabilidade de essa mudança realmente ocorrer.

Tal probabilidade é, então, calculada da seguinte maneira: se a célula sorteada não estiver super-resfriada, a probabilidade de ocorrência da mudança é nula; se, ao contrário, a célula estiver super-resfriada, aquela probabilidade é calculada a partir da equação 30:

$$probabilidade = \exp\left(\frac{\Delta G_{calculado}}{k.T_{célula}}\right)$$

(30)

Onde

ΔG calculado é a variação de energia livre calculada, como descrito na equação 29;

k é a constante de Boltzman;

$T_{célula}$ é a temperatura real da célula analisada.

Finalmente, a ocorrência de tal mudança existirá se um número aleatório a ser gerado pelo programa for menor que a probabilidade calculada. Se satisfeita tal situação, a célula líquida se solidificará e, então, estar-se-á simulando uma movimentação de interface de solidificação.

Assim como no procedimento de nucleação, o sorteio de uma célula líquida para simular movimentação de interface (crescimento) é repetido tantas vezes quantas forem as células que compõem o sistema, chegando-se, assim, a uma situação próxima à que, em cada Δt , todas as células teriam a mesma probabilidade de serem sorteadas.

Finalizada a execução do procedimento de crescimento, o modelo microscópico acabou de executar, num passo de tempo, a evolução macroestrutural.

Ao final de cada intervalo de tempo Δt , verifica-se qual a porcentagem das 121 células (11 de cada lado do elemento quadrado) que se solidificou; isto só pode ser feito pois cada célula é 100% sólida ou 100% líquida.

Assim, obtém-se a variação da fração de sólido com o tempo em todos os volumes térmicos. Esta informação será usada no processamento do próximo passo de tempo pelo modelo macroscópico de diferenças finitas.

Note-se, neste caso, a mútua dependência entre o campo térmico e a macroestrutura formada, porque ambos são simulados durante um mesmo passo de tempo Δt .

Utilizou-se a Experiência 1 para enriquecer a discussão e a comparação entre um acoplamento estocástico, como utilizado no modelo proposto através da simulação probabilística da macroestrutura bruta de solidificação, e um acoplamento determinístico, em que se usou a teoria de Brody e Flemings, Clyne e Kurz [9].

Portanto, foi necessário, para isso, desenvolver também um modelo macroscópico auxiliar, no qual a taxa de liberação de calor latente era dada pela Equação 4, indicada na Introdução deste trabalho.

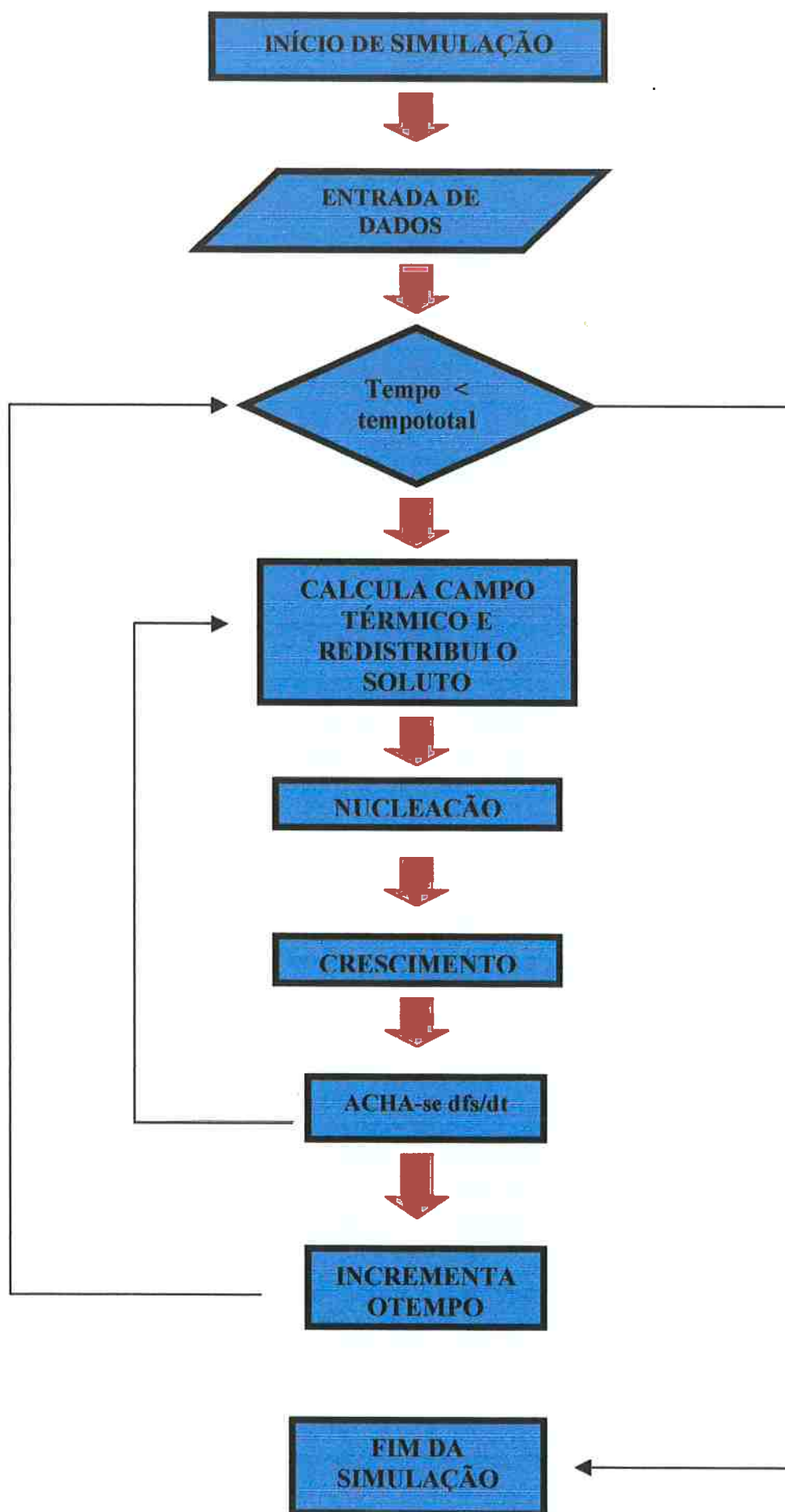
Com isso, foi possível comparar a curva de resfriamento de um ponto do sistema cilíndrico calculada através de um modelo no qual se utilizou a teoria de Brody e Flemings, Clyne e Kurz [9] para simular como o calor latente seria liberado durante o processo, com uma curva de resfriamento calculada pelo modelo proposto, ou seja, com o uso de uma simulação probabilística da macroestrutura para conhecer como o calor latente é liberado durante o processo.

Obteve-se, também, no caso da Experiência 1, uma comparação de como variou a fração de sólido para um dado elemento térmico, quando pertencia à zona pastosa do sistema, calculada a variação de duas formas: através da teoria de Brody e Flemings ^[10], com o uso da Equação 4 e através da obtenção da fração de sólido resultante da simulação probabilística do modelo proposto.

O modelo aqui exposto foi implementado em linguagem "DELPHI", utilizando-se o compilador 'DELPHI 3.0 professional', e pode ser executado em qualquer ambiente 32 bits compatível com o Microsoft Windows 95.

As duas experiências simuladas pelo modelo consumiram o seguinte tempo: a Experiência 2 consumiu 28 (vinte e oito) horas de execução, enquanto que a Experiência 1, 55 (cinquenta e cinco) horas de execução. Ambas, executadas num equipamento Pentium 2, 333Mhz, com 128Mbytes de memória Ram.

O fluxograma simplificado a seguir descreve a seqüência de processamento do modelo proposto. Um fluxograma mais detalhado e complexo está em anexo (anexo 1) a este trabalho.



5. RESULTADOS OBTIDOS E DISCUSSÃO:

Iniciar-se-á esta parte com a apresentação dos resultados obtidos, que, em seguida, serão comentados e discutidos.

Como resultados da Experiência 1, apresenta-se a evolução da macroestrutura bruta de solidificação em diversos instantes e, nesses mesmos instantes, mostra-se como se comporta o campo térmico dentro do sistema cilíndrico.

Mostram-se, também, de forma comparativa, as curvas de resfriamento para os termopares, obtidas por Martorano^[20], e as obtidas pela simulação do modelo.

A figura 20 a seguir ilustra as telas do programa de macroestruturas e os campos térmicos em diversos instantes obtidos pela simulação da Experiência 1.

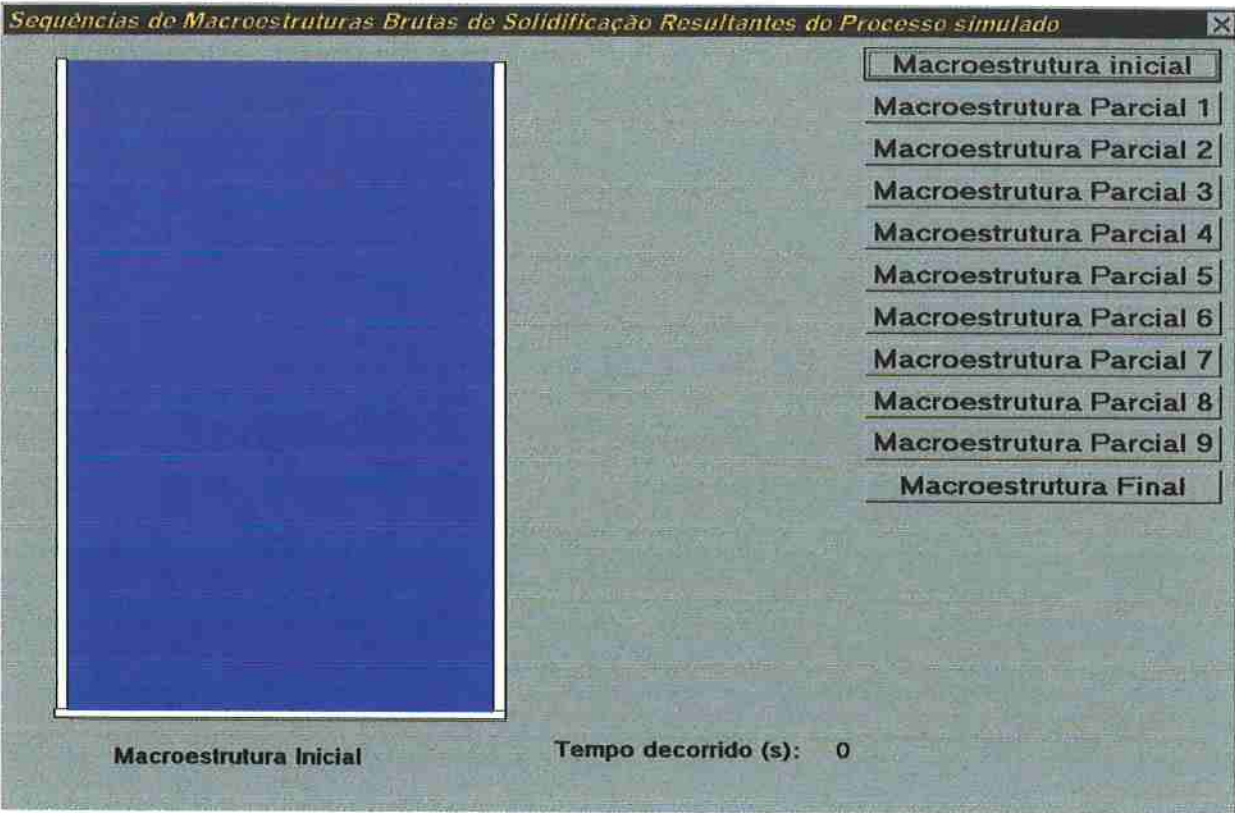


Figura 19 a: Macroestrutura no instante t= 0 segundos

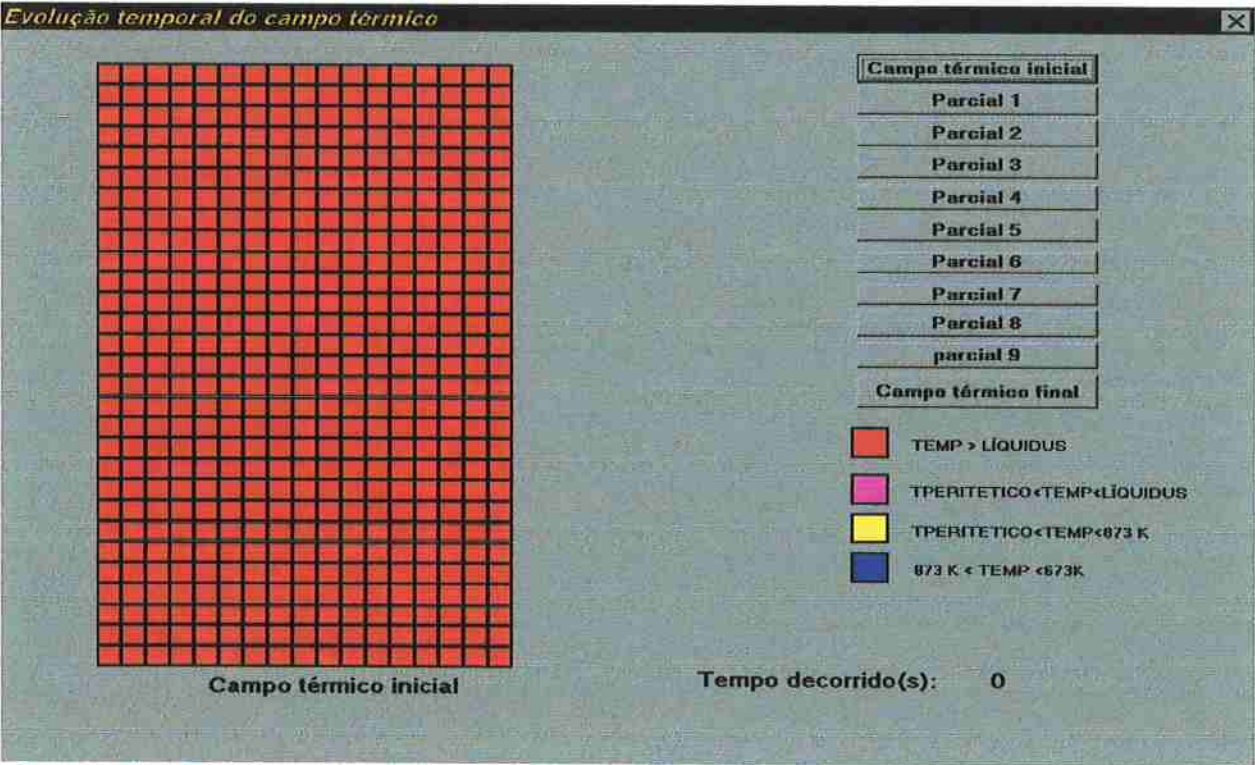


Figura 19 b: Campo térmico no instante t= 0 segundos



Figura 19 c: Macroestrutura no instante $t = 25$ segundos

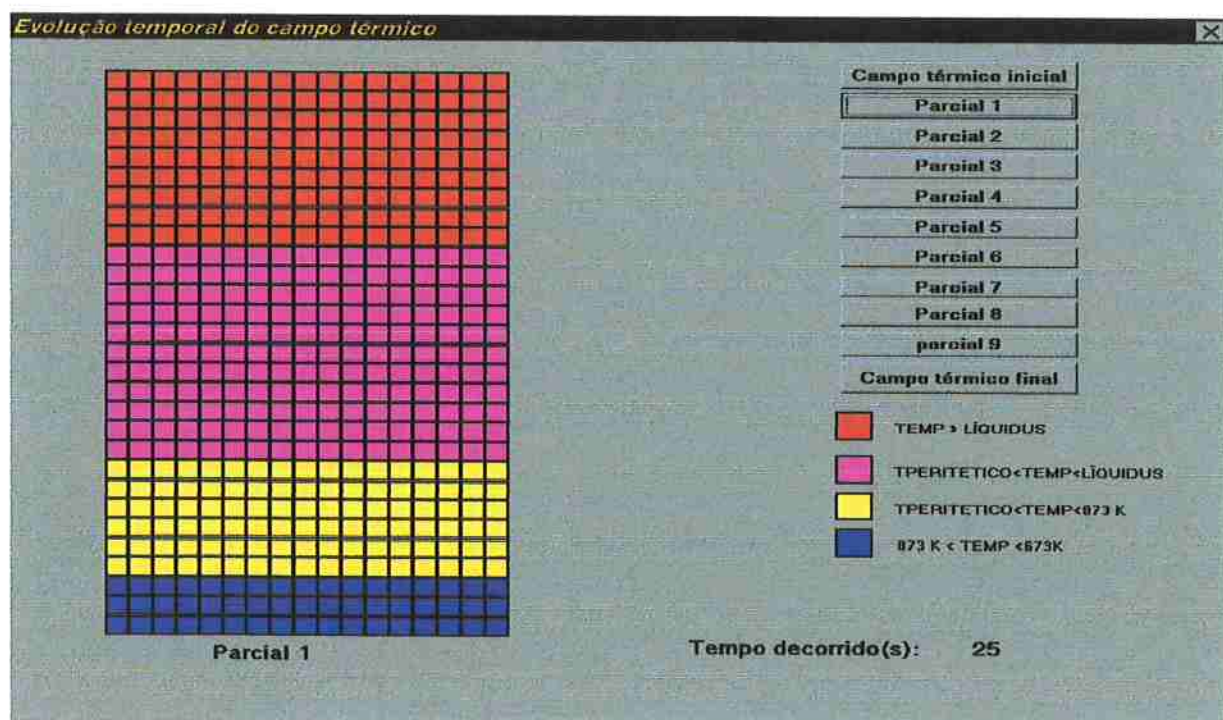


Figura 19 d: Campo térmico no instante $t = 25$ segundos

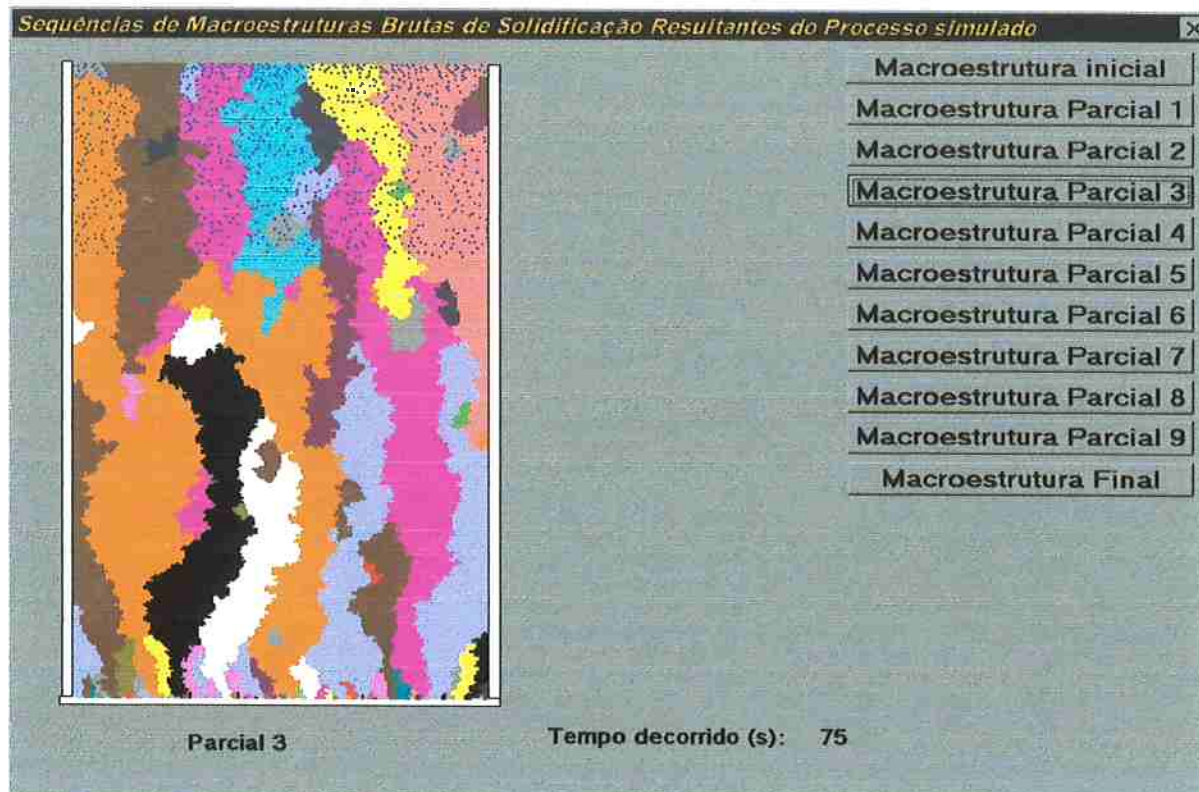
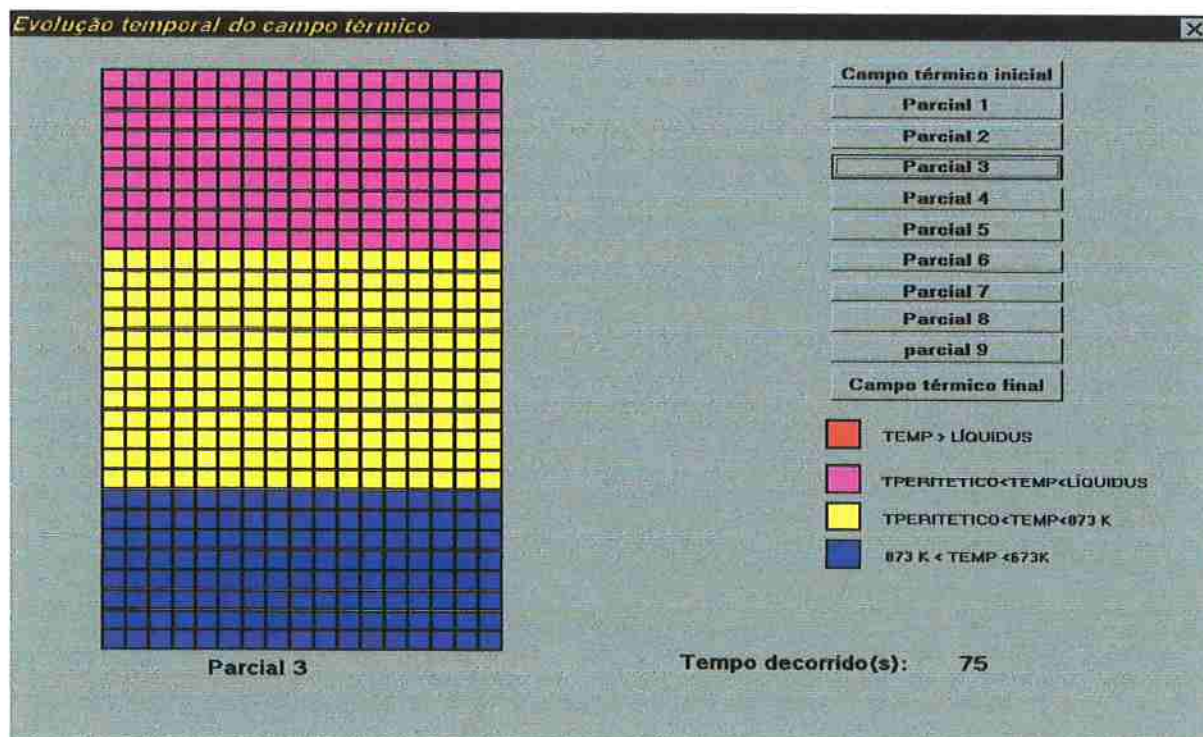


Figura 19 e: Macroestrutura no instante $t = 75$ segundos



F

Figura 19 f: Campo térmico no instante $t = 75$ segundos

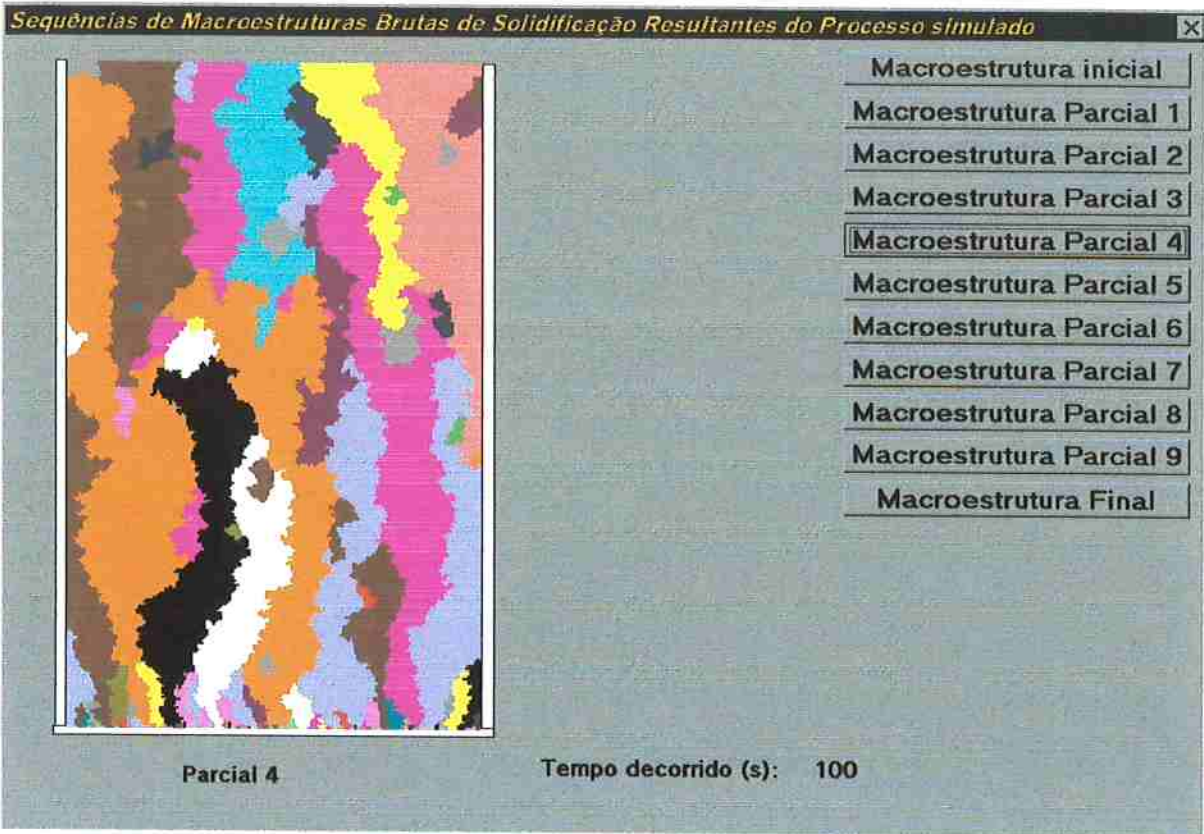


Figura 19 g: Macroestrutura no instante $t = 100$ segundos

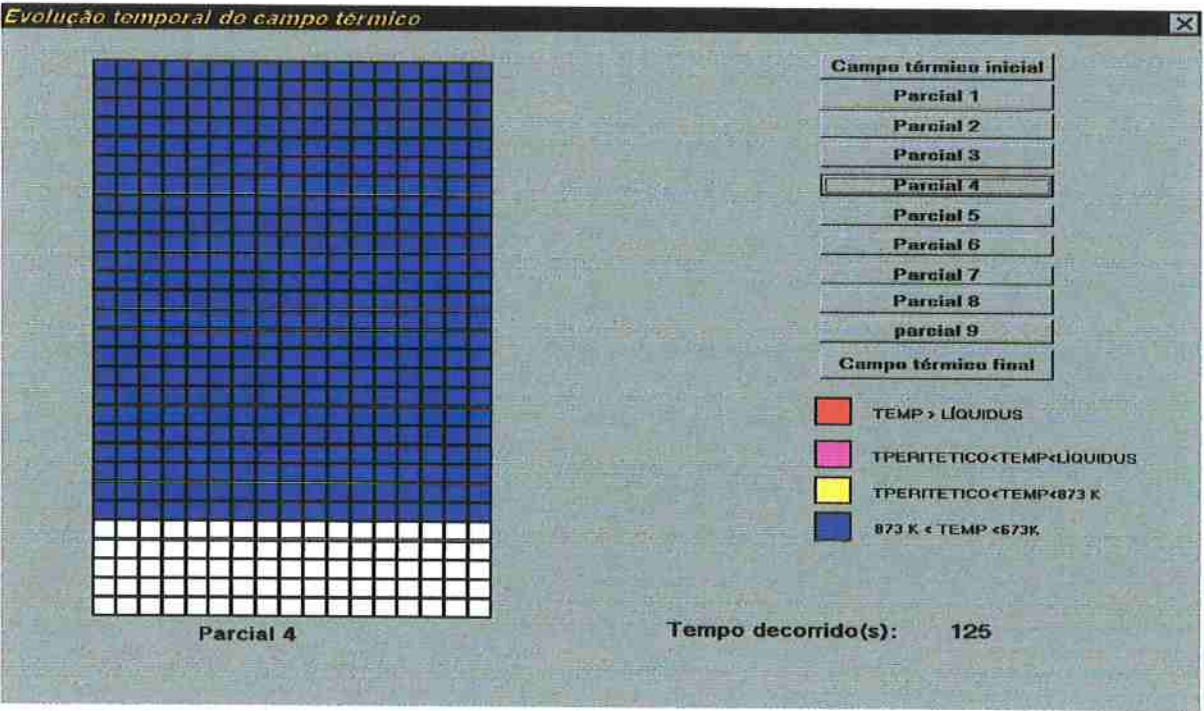
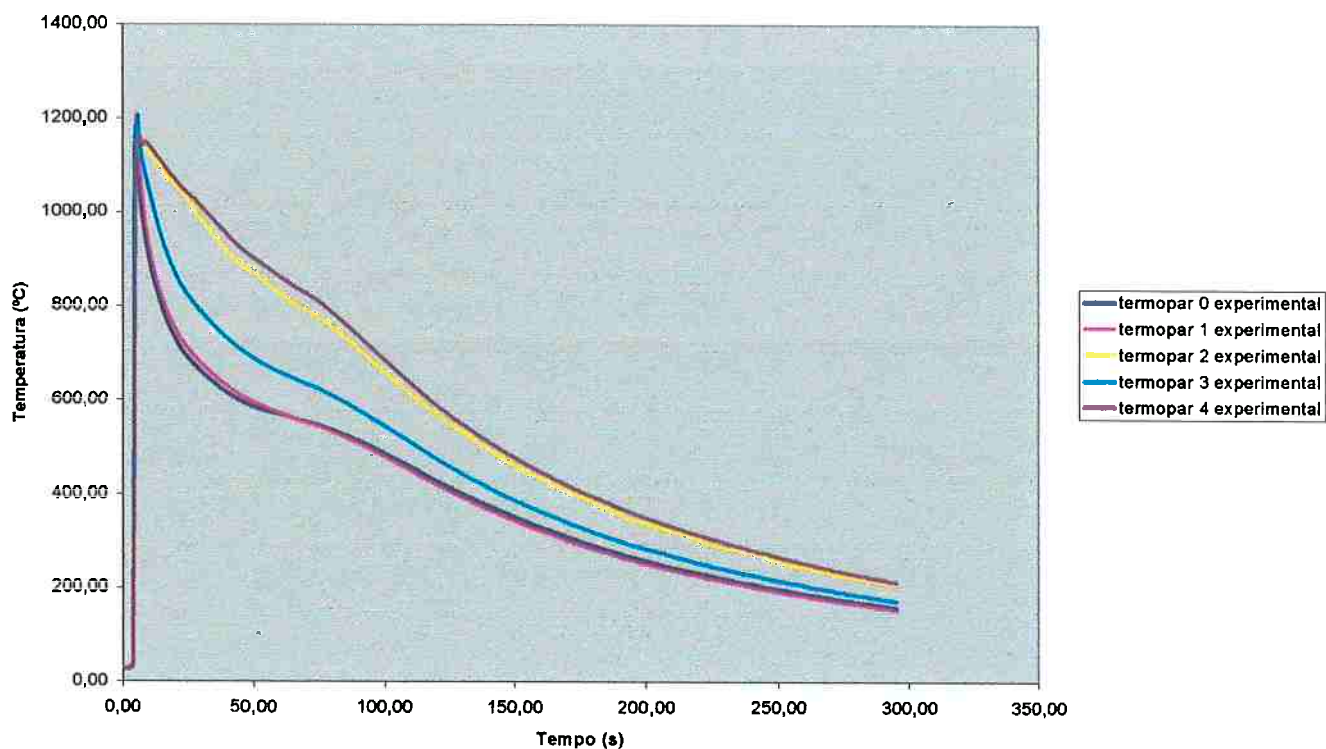


Figura 19 h: Campo térmico no instante $t = 125$ segundos

Curvas de resfriamento experimentais para os termopares da experiência 2



Curvas de resfriamento simuladas para os termopares da experiência 2

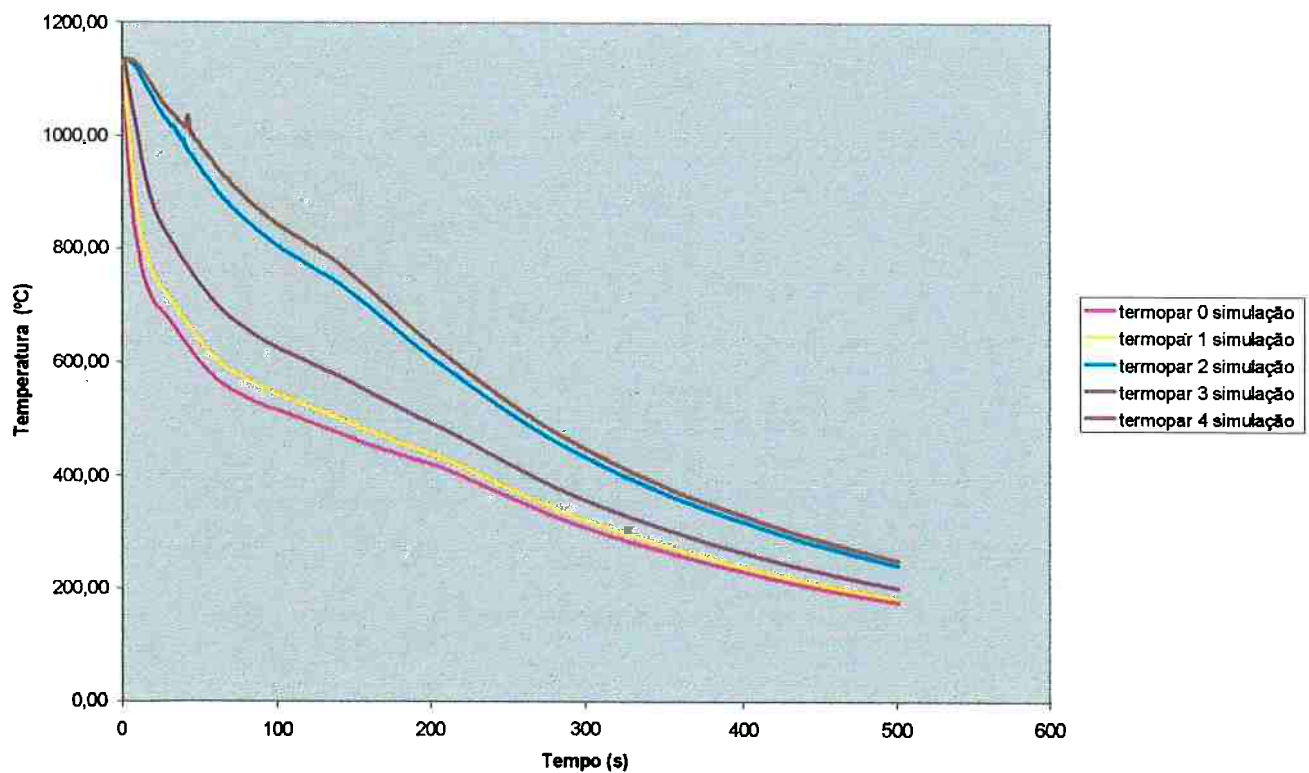


figura 19: Resultados de macroestruturas, campo térmico e curvas de resfriamento da Experiência 1.

Apresentam-se também os resultados que comparam modelos macroscópicos determinísticos com o modelo proposto. Tal comparação é feita através de curvas de resfriamento obtidas pelo modelo e através da curva da variação da fração de sólido com a temperatura, aplicados às condições da experiência 1.

Comparação entre a obtenção do campo térmico de um corpo solidificante através de acoplamento determinístico e estocástico

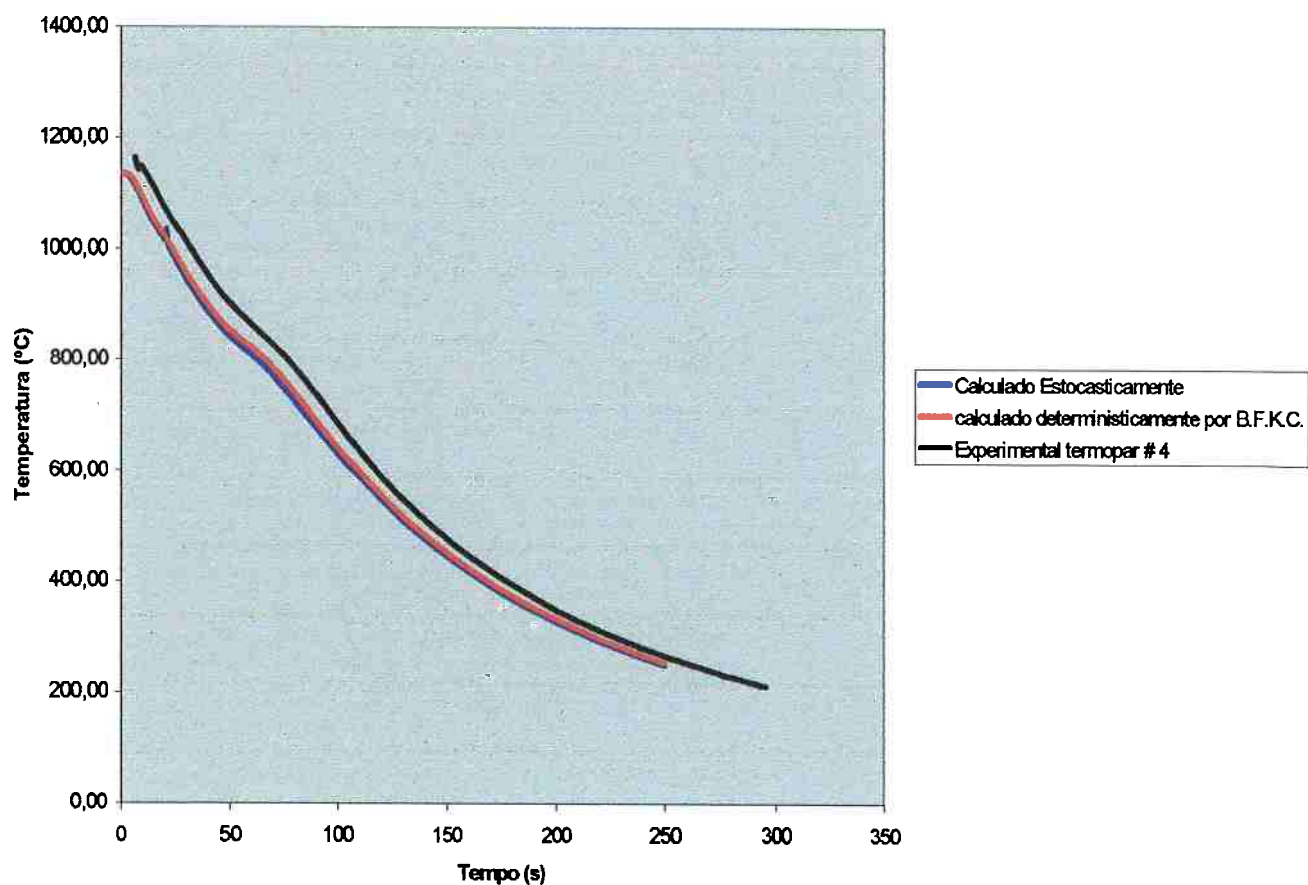


Figura 20 (a): Comparação entre a curva de resfriamento do termopar número 4 da experiência 1, calculado deterministicamente usando a teoria de redistribuição de soluto [9] e calculado através do modelo estocástico proposto

Curva fração de sólido por temperatura simulada nas condições da Experiência 2 no modelo macroscópico de acordo com a teoria de microsegregação de Brody-Flemings, Clyne-W. Kurz, e comparada com a obtida pelo acoplamento estocástico no modelo sugerido

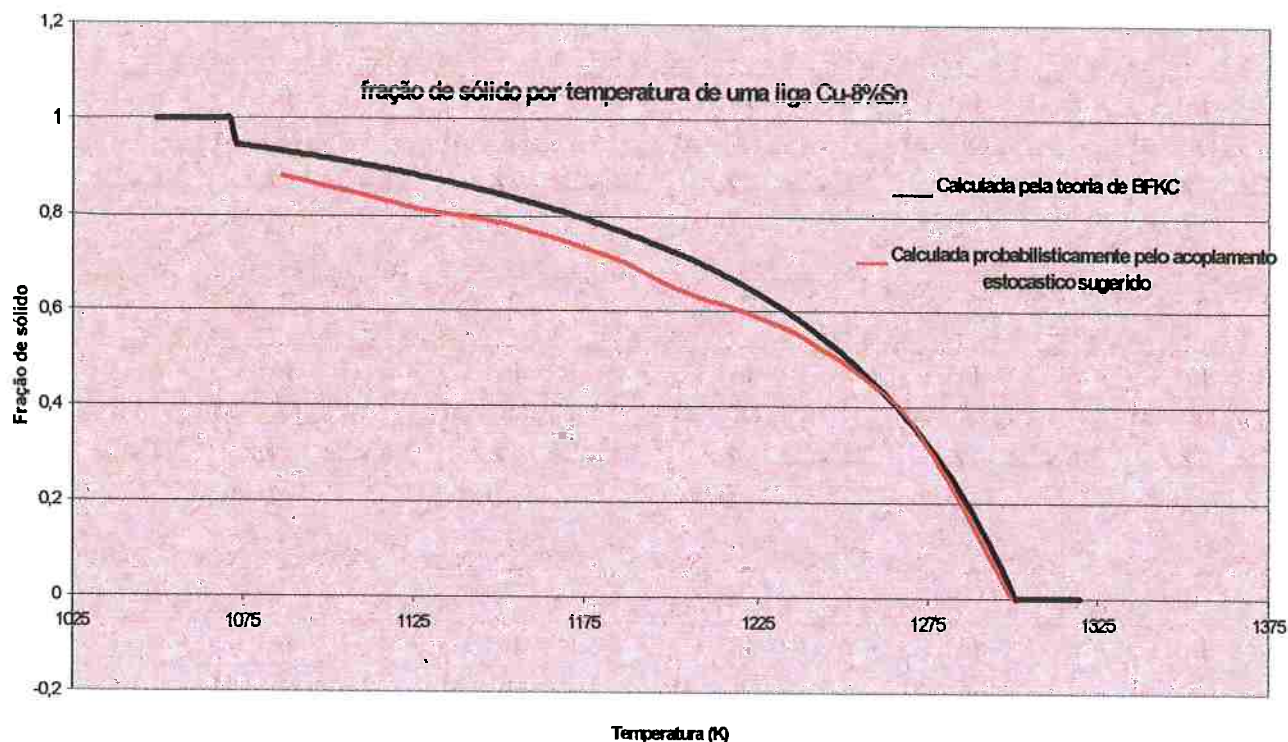


Figura 20 b: Comparação entre a variação da fração de sólido com a temperatura calculado pelo modelo proposto e comparado com o cálculo usando-se a teoria de redistribuição de soluto de Brody Flemings, com o uso da equação 4

figura 20: Comparação entre curvas de resfriamento obtidas deterministicamente e estocasticamente (a). Apresentação da comparação entre a fração de sólido calculada pelo modelo proposto e por teorias de distribuição de soluto (b) [9]

Para a Experiência 2, foi obtida a mesma sequência de evolução de macroestruturas e campos térmicos em diversos instantes e a comparação entre as curvas de resfriamento obtidas experimentalmente por Martorano ^[20] e as simuladas pelo modelo são apresentadas a seguir.



Figura 21a: Macroestrutura simulada para a experiência 2 em $t=0$ s

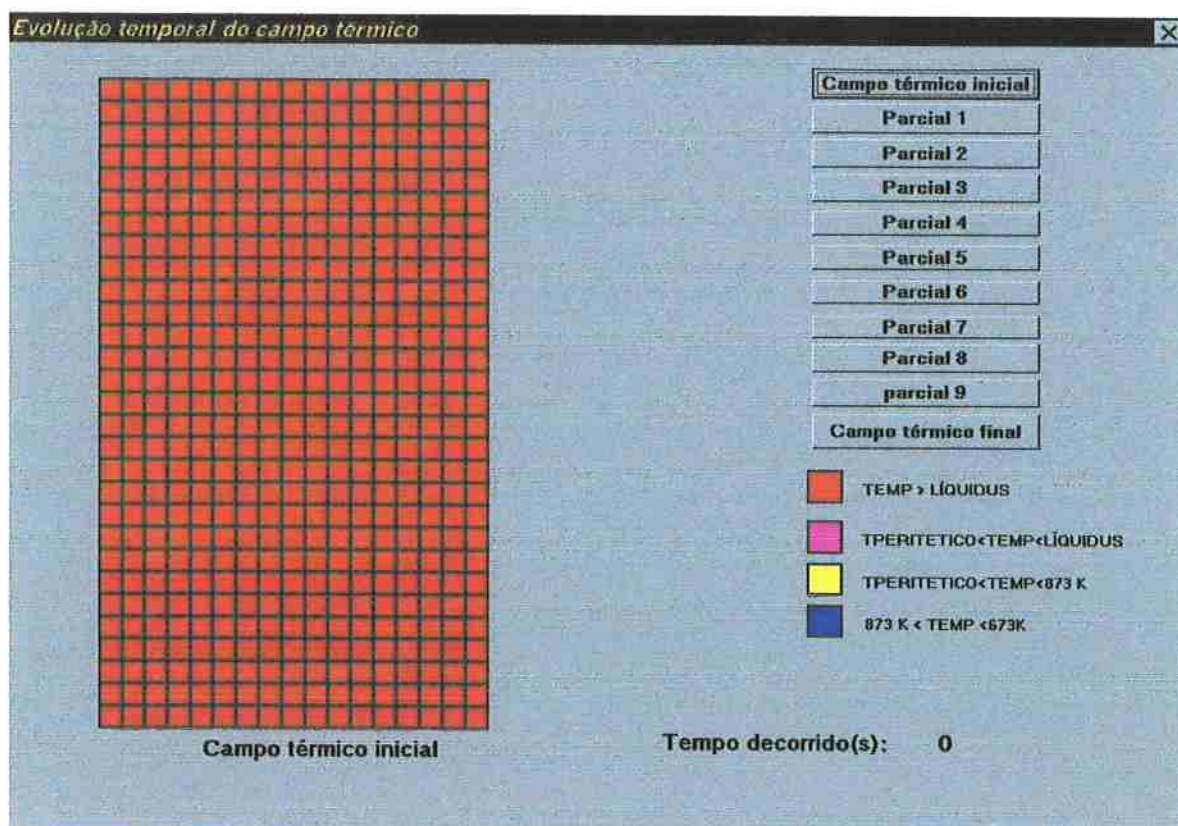


Figura 21b: Campo térmico simulado para a experiência 2 em $t=0$ s

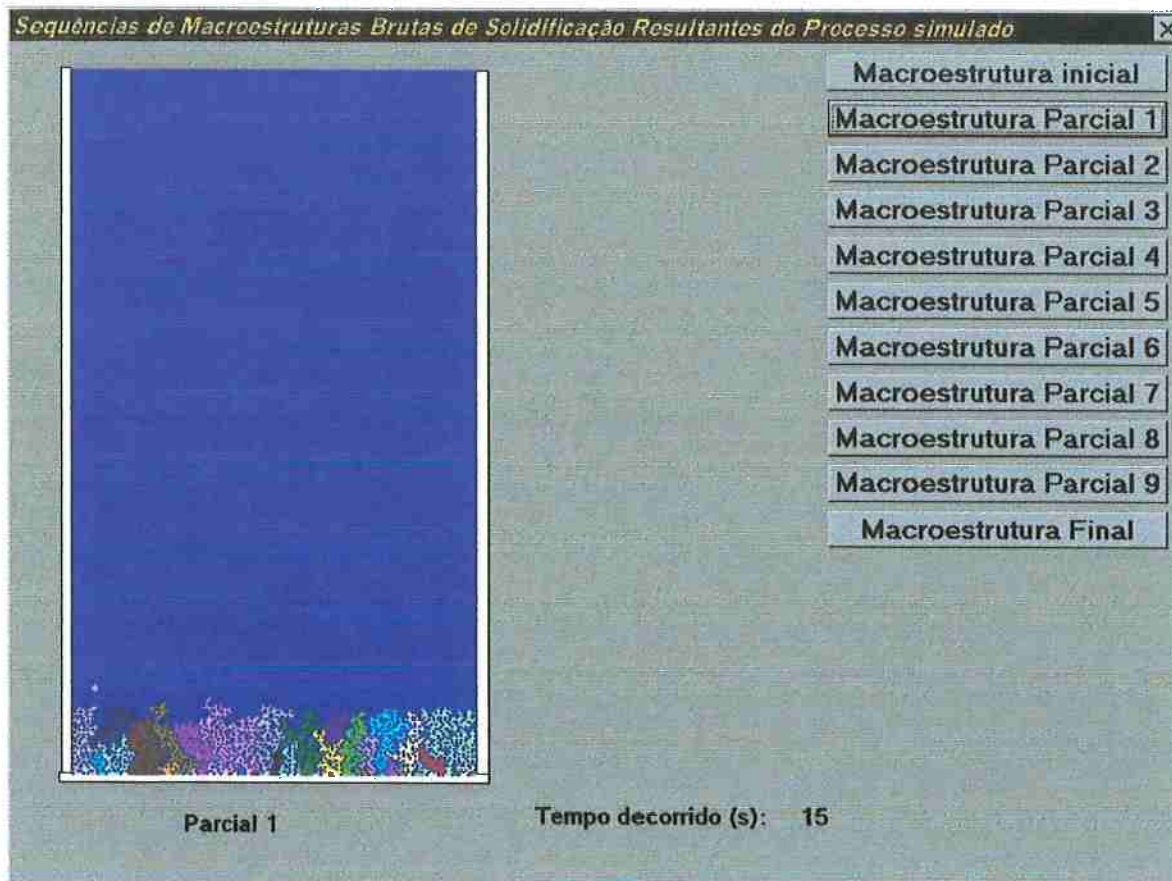


Figura 21c: Macroestrutura simulada para a experiência 2 em $t=15$ s

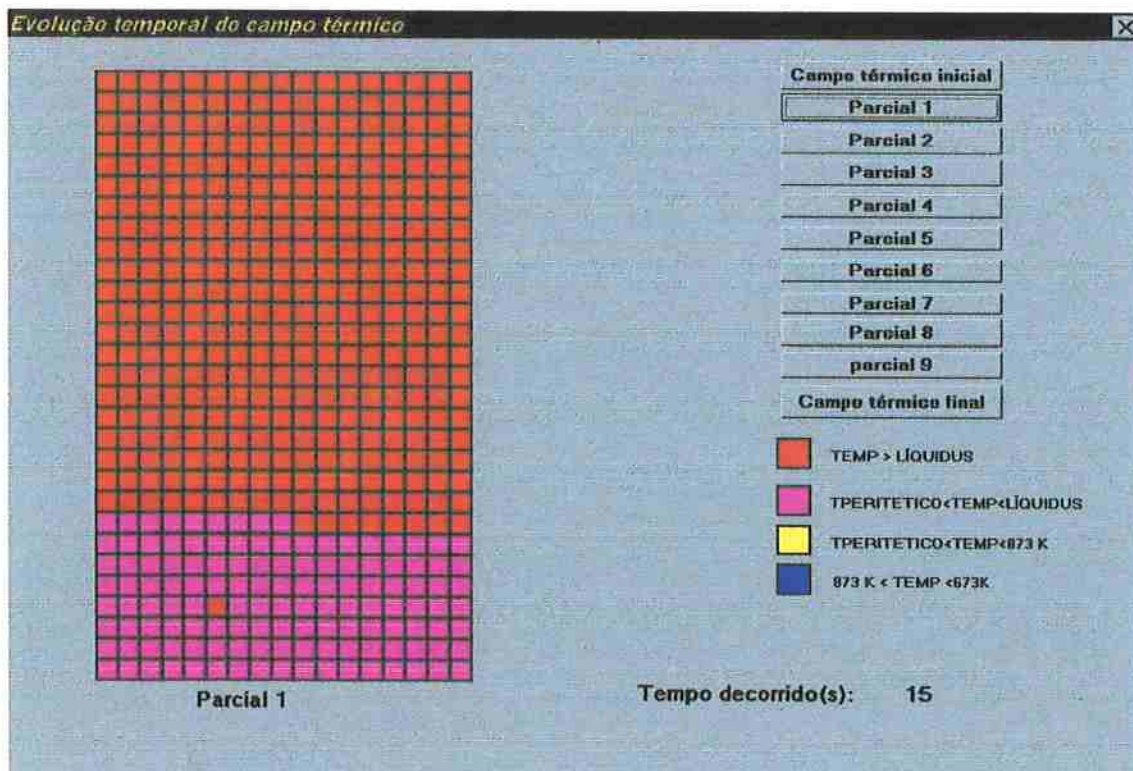


Figura 21d: Campo térmico simulado para a experiência 2 em $t=15$ s

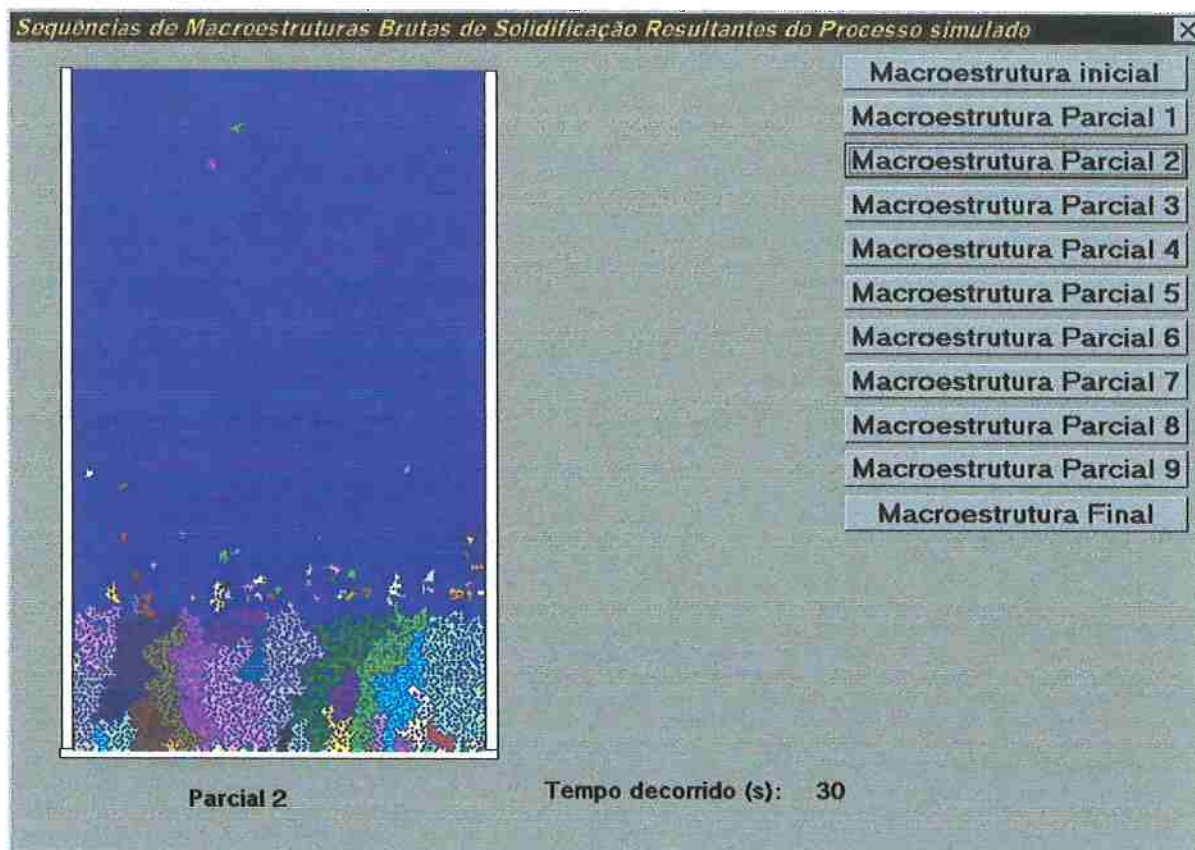


Figura 21e: Macroestrutura simulada para a experiência 2 em $t=30$ s

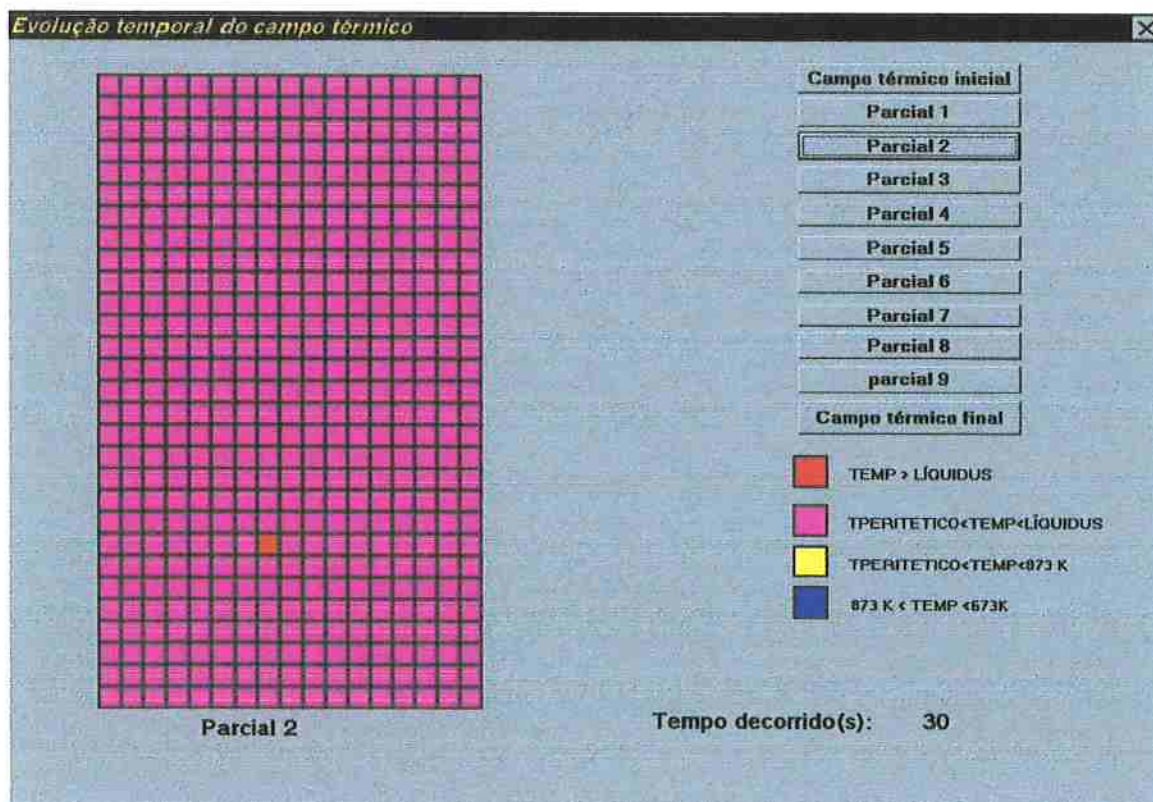


Figura 21f: Campo térmico simulado para a experiência 2 em $t=30$ s

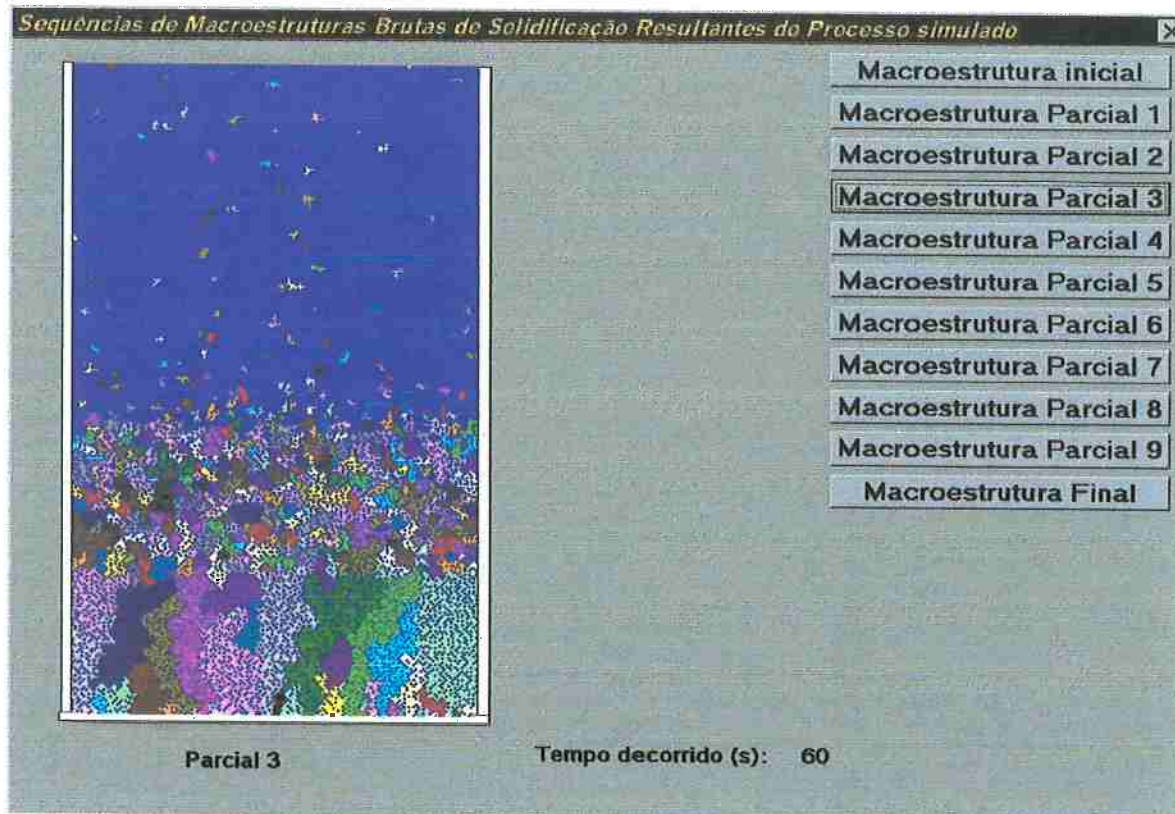


Figura 21g: Macroestrutura simulada para a experiência 2 em $t=60$ s

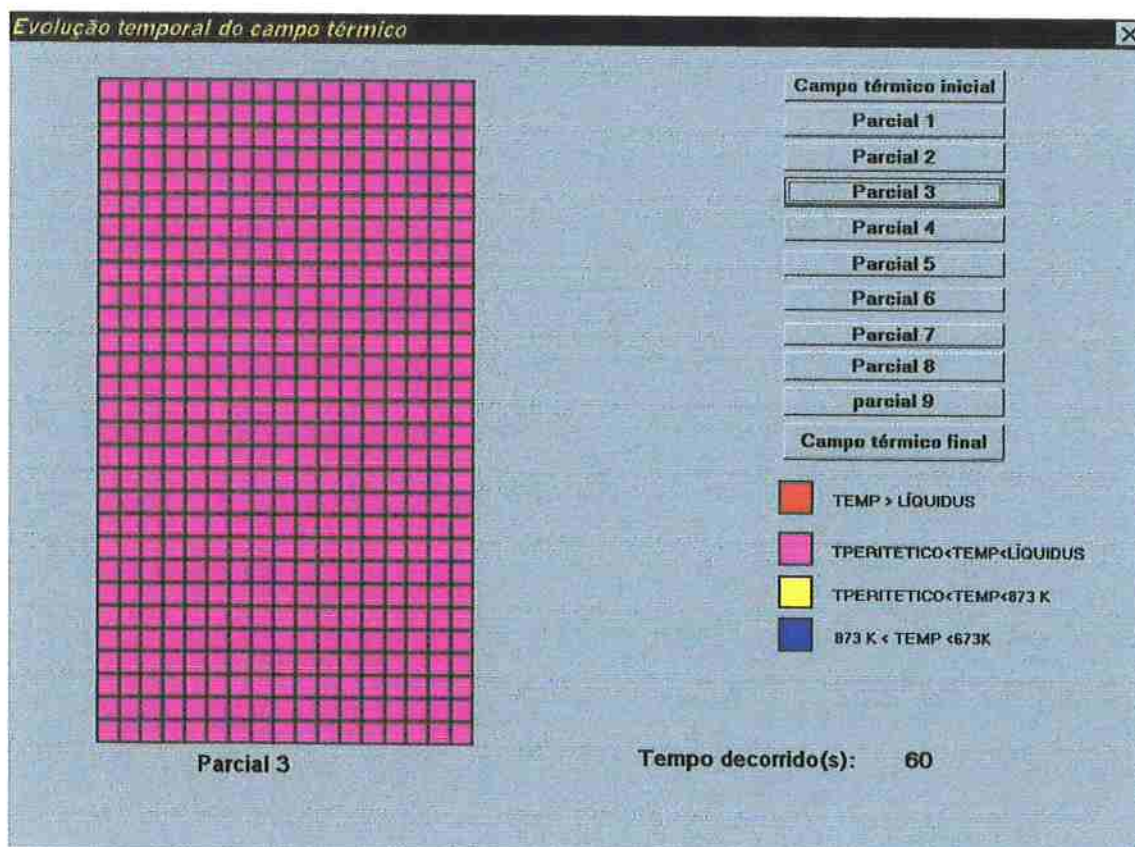


Figura 21h: Campo térmico simulado para a experiência 2 em $t=60$ s



Figura 21i: Macroestrutura simulada para a experiência 2 em $t=240s$

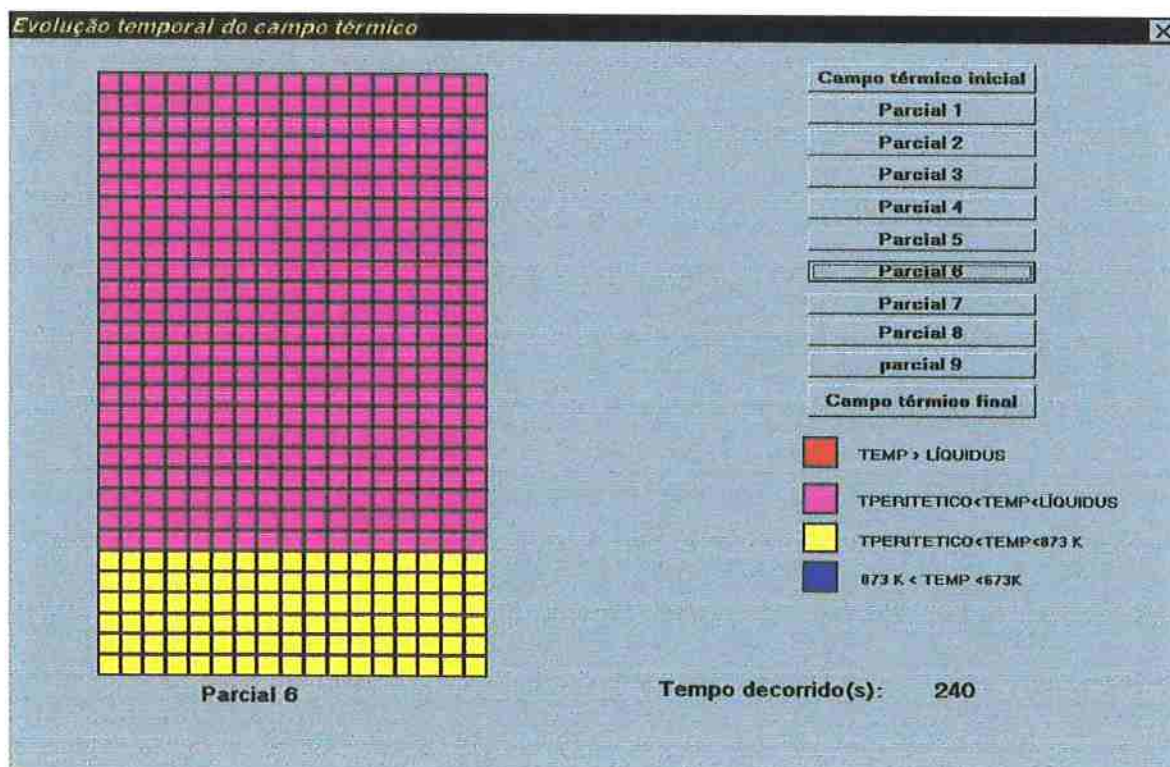


Figura 21j: Campo térmico simulado para a experiência 2 em $t=240 s$



Figura 21k: Macroestrutura simulada para a experiência 2 em $t=240s$

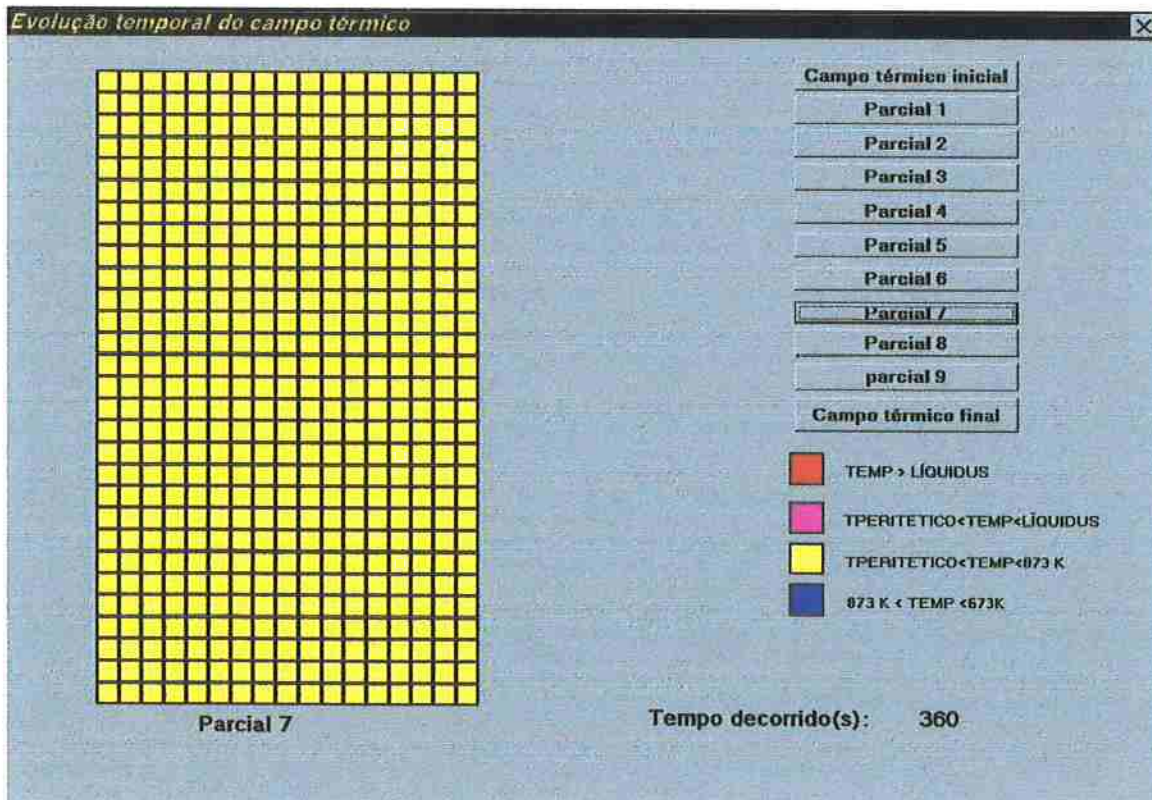


Figura 21l: Campo térmico simulado para a experiência 2 em $t=240 s$

Comparação entre as curvas de resfriamento simulada e experimental dos termopares #1 e #2 da experiência 1

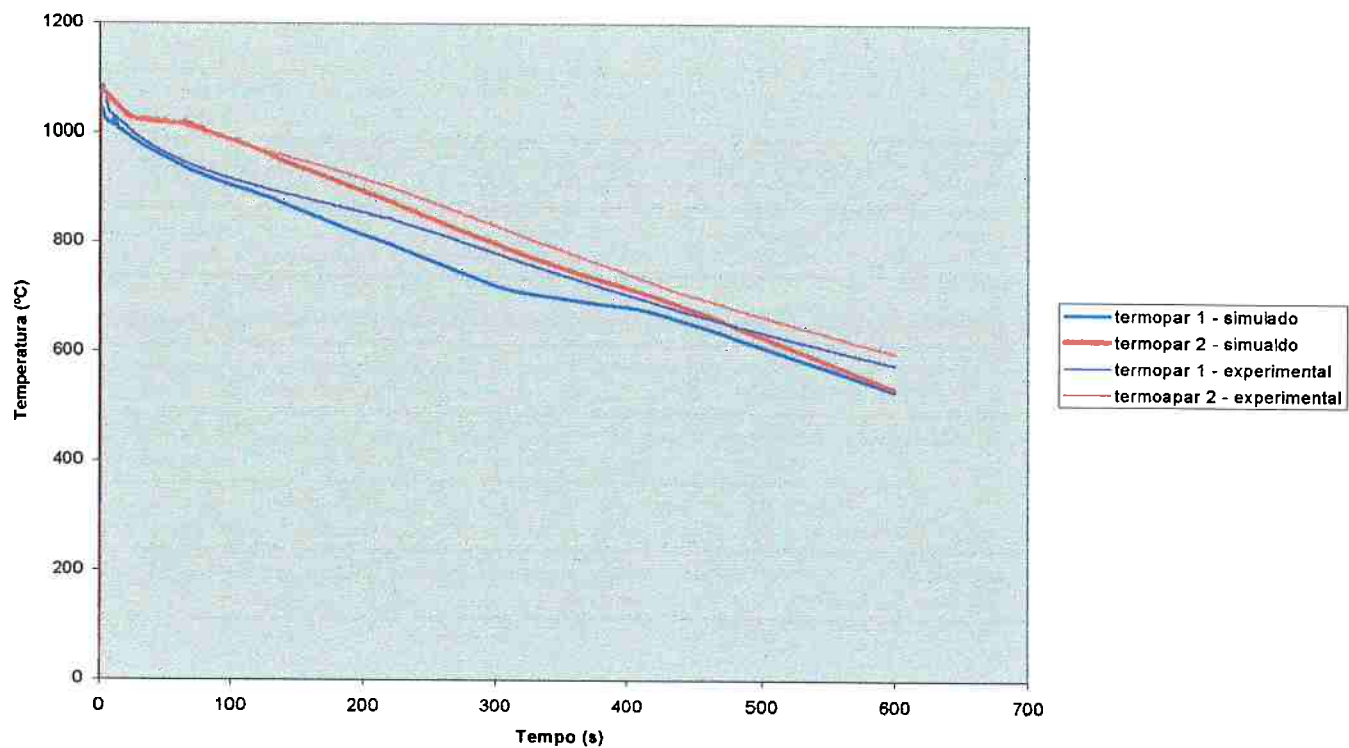
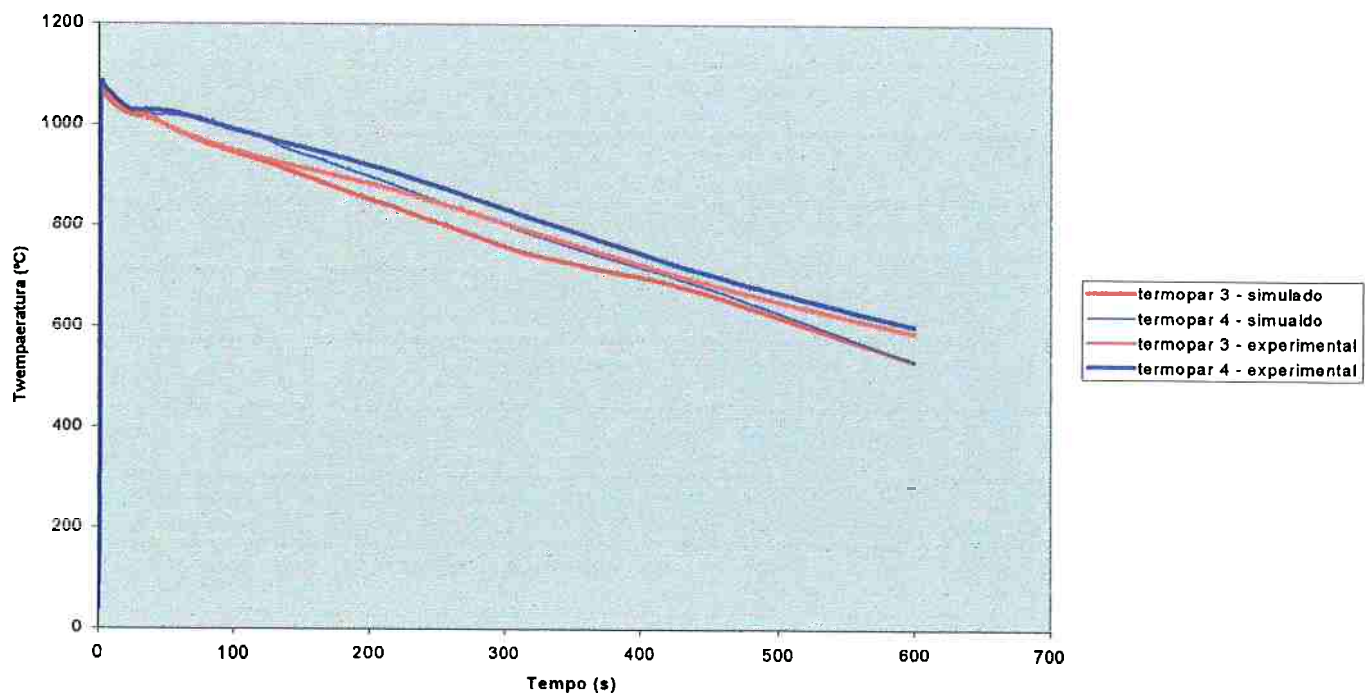
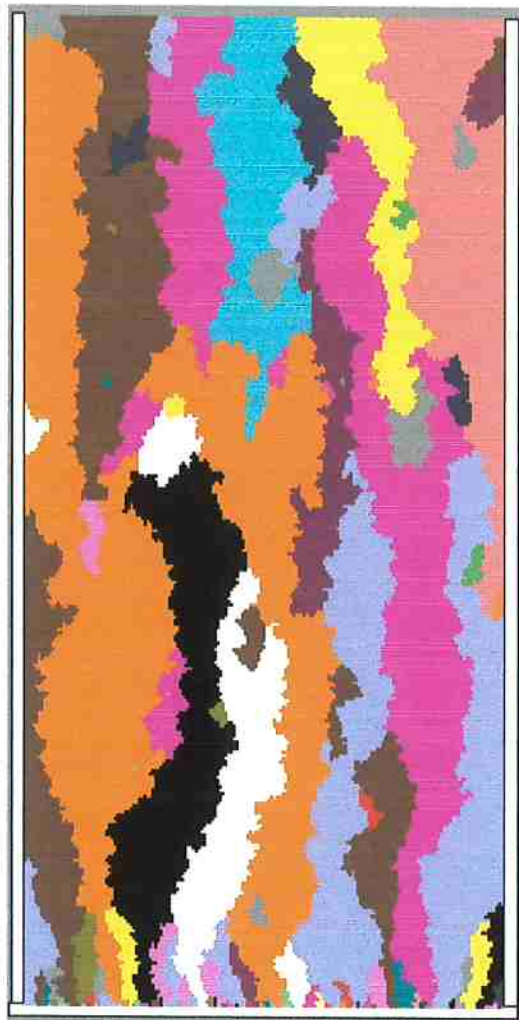


Figura 21: Resultados de macroestruturas, campo térmico e curva de resfriamento da Experiência 2.

Comparação entre as curvas de resfriamento experimental e simulada para os termopares #3 e #4 da experiência 1



Apresentam-se, também, as comparações finais obtidas para as duas experiências e as macroestruturas obtidas experimentalmente por Martorano^[28].



EXPERIÊNCIA 1



EXPERIÊNCIA 2

Figura 22: Comparação entre as macroestruturas.

Passa-se agora a comentar e discutir os resultados obtidos. Inicialmente trata-se do parâmetro “A” ajustável ao modelo e descrito na equação 28.

Para as células que estão junto da base de Cobre refrigerada, definiu-se um valor de $A=1.000.000$ (experiência 1) e $A=1.000$ (experiência 2).

Os valores de A nas células da base são maiores que os das demais, ao longo da altura do cilindro, pois, junto à base, a nucleação é mais efetiva, por tratar-se essencialmente de nucleação heterogênea e, portanto, energeticamente mais favorável.

Na experiência 2, como relatado por Martorano ^[20], utilizou-se uma tinta na base do molde, o que diminuiu o grau de acoplamento entre os possíveis planos cristalinos do núcleo formado e da base do molde; daí um valor de A mais reduzido. Já na experiência 1, como não havia a presença da tinta, como descrito por Martorano ^[20], a nucleação heterogênea é mais efetiva, o que é simulado por um valor de A mais elevado.

Para as demais células, ao longo da altura do sistema cilíndrico, o parâmetro “A” toma os seguintes valores:

Tabela 12: Valores da constante A usadas nas experiências 1 e 2 simuladas.

INTERVALO DE CÉLULAS CONTADAS A PARTIR DA BASE DO CILINDRO	VALOR DE “A” ASSUMIDO PARA O INTERVALO DE CÉLULAS
Da 2ª célula até 100ª célula	100
Da 100ª célula até a célula superficial superior	200

Tal valor de “A”, crescente, dá suporte à ocorrência de mecanismos que explicam a formação da transição entre as zonas colunares e equiaxiais. Isto é obtido de certa forma, indiretamente, pois o modelo proposto não dá suporte à movimentação de núcleos no seio do líquido, arrancados da parede em estágios iniciais da solidificação, como proposto por Chalmers^[15], mas, ao incentivar a ocorrência de nucleação, fornece, indiretamente, meios de surgimento de núcleos no seio do líquido.

A partir de agora discutem-se aspectos das macroestruturas obtidas. No caso da Experiência 2, nota-se, de forma bem nítida, a ocorrência na simulação da transição da zona colunar para a equiaxial.

O tamanho e a quantidade dos grãos colunares simulados estão bem próximos dos obtidos experimentalmente.

Já os grãos equiaxiais apresentaram-se maiores do que os observados experimentalmente, em consequência, é possível, do fato de o modelo não levar em conta o fenômeno de fluido-dinâmica fundamental no processo de formação da zona equiaxial.

O que fez o modelo proposto, como já esclarecido anteriormente foi simular o aparecimento desses grãos equiaxiais através de um aumento da constante A, presente na Equação 28 sugerida por Rappaz , Zhu e Smith^[1,16,17].

Portanto, mesmo que o aumento de tal constante fornecesse suporte à aparência desses grãos, com a evolução da macroestrutura, essa solução não seria a mais correta, pois, como se pode concluir, a quantidade de grãos equiaxiais observados na prática é maior do que a obtida pelo modelo.

Outra explicação para a diferença de tamanho entre os grãos equiaxiais do modelo e os observados experimentalmente está em que a rotina de nucleação e crescimento é executada pelo modelo apenas uma vez em cada intervalo de tempo Δt , isto é, num intervalo de tempo, apenas um passo de Monte Carlo (nucleação + crescimento) é executado; ou seja, não se conhece a relação entre um passo de Monte Carlo (em que nucleação e crescimento são simulados) e o correspondente tempo real no qual tais fenômenos ocorrem.

Em contrapartida, o efeito de se aumentar o valor da constante A na rotina de nucleação mostrou que, mais do que a ocorrência de nucleação na zona super-resfriada constitucionalmente, outros mecanismos, como por exemplo o descrito por Chalmers ^[15], estão envolvidos no aparecimento da transição entre as zonas colunar e equiaxial.

Como pode ser visto, tanto na zona colunar da Experiência 2, como em toda a macroestrutura da Experiência 1, ocorre um processo de crescimento competitivo entre os grãos pertencentes à zona colunar. Competitivo, pois percebe-se que nem todos os grãos que surgem na macroestrutura crescem sem “obstáculos” até a parte superior do molde cilíndrico. Tal fato é bem notado nas simulação da experiência 1.

O modelo desconhece mecanismos de alinhamento da família de direções cristalográficas do sistema cúbico CFC da liga de Cu-Sn <100> com a direção vertical da máxima extração de calor.

Nas simulações de ambos os ensaios percebe-se um aumento da seção transversal de um grão colunar em crescimento.

O aumento dessa seção não é verificado experimentalmente nas macroestruturas observadas, em essência porque não há isotropia na velocidade de crescimento dos grãos colunares. Na realidade o que ocorre é que grãos colunares crescem com uma velocidade na direção vertical maior do que qualquer velocidade em outra direção. Tal velocidade na direção vertical é próxima à da isoterma *liquidus*. Tal fato o modelo proposto não leva em conta, daí ter-se um aumento na seção transversal dos grãos colunares que não se verifica experimentalmente.

Quanto à zona coquilhada, ou seja, quanto ao número de grãos nucleados junto à base inferior do molde, percebe-se que, na Experiência 2, ela quase não existe, pois, experimentalmente, Martorano ^[20] descreveu o uso de uma tinta especial na base do molde, fato que pode ter reduzido a taxa de nucleação nessa interface.

No caso do modelo, isso foi simulado através da atribuição, para as células da base, de um valor menor da constante A, do que o utilizado na simulação da Experiência 1.

Em termos numéricos, o valor atribuído para a constante A, na base, para a Experiência 1 foi o de 1.000 (hum mil) e, para a Experiência 2, o de 1.000.000 (hum milhão).

Embora, como exposto, o modelo tenha simulado com precisão razoável a macroestrutura bruta de solidificação, percebe-se, ainda, uma grande dependência dele ao parâmetro ajustável “A”, que, segundo Zhu e Smith ^[16,17], depende tanto da liga a ser solidificada, quanto das condições de solidificação.

Podem ser feitas tentativas de aperfeiçoamento do modelo microscópico proposto, no sentido de incluir rotinas que simulem a movimentação física, baseada na lei de Stokes para movimentação de núcleos ou fragmentos dendríticos sólidos, para simular a possibilidade de formação de uma zona equiaxial sem que se mantenha a dependência ao parâmetro de nucleação "A".

Outra forma de evolução do modelo seria no sentido de adotar a teoria de crescimento da fase sólida como proposta por Kurz-Giovanola-Trivedi ^[19], pela qual a velocidade da fase sólida é calculada em função do campo de temperatura e soluto existente à sua frente.

Quanto à característica probabilística do modelo microscópico que simula a formação da macroestrutura, pode-se fundamentá-la em alguns pontos, a saber:

1º ao sortear, de forma aleatória, uma célula que compõe o sistema a ser analisado, tenta-se simular o fato de que nem todos os embriões existentes sobreviverão para formar núcleos de tamanho crítico.

2º se, ao invés de sortear uma célula para verificar as condições de super-resfriamento, verificar-se uma a uma, o modelo ficaria comprometido à medida em que um núcleo sólido formado, ao se movimentar no líquido, pode se refundir e, então, desaparecer.

Portanto, ao deixar de sortear um núcleo que tem condições termodinâmicas (super-resfriamento necessário) para ocorrer a nucleação, tenta-se simular, de forma indireta, o resultado do desaparecimento de núcleos por refusão.

3º tanto a formação de núcleos, como o crescimento da fase sólida, dependem não só de condições termodinâmicas (haver super-

resfriamento), como também da ocorrência de movimentação atômica da fase instável (líquida) para a fase estável (sólida).

Tal movimentação dá-se ao acaso e, portanto, justifica-se a adoção do cálculo de probabilidade, como já esclarecido, utilizado pelo modelo.

Tanto no caso da Experiência 1, como no da Experiência 2, percebe-se grande proximidade das curvas experimentais dos termopares com as simuladas pelo modelo.

Isso mostra que a taxa de liberação de calor latente do processo foi simulada de modo bem próximo ao real utilizando-se as técnicas probabilísticas para simulação da macroestrutura. Com isso pode-se dizer que o acoplamento do modelo de formação microestrutural com o modelo térmico simulou de forma satisfatória a liberação de calor latente durante o processo.

No caso da Experiência 2, nas curvas simuladas em tempos de até 10 segundos, percebe-se a presença de pequenos picos de temperatura, como mostra a próxima figura.

Curvas de resfriamento simuladas para os termopares da experiência 1

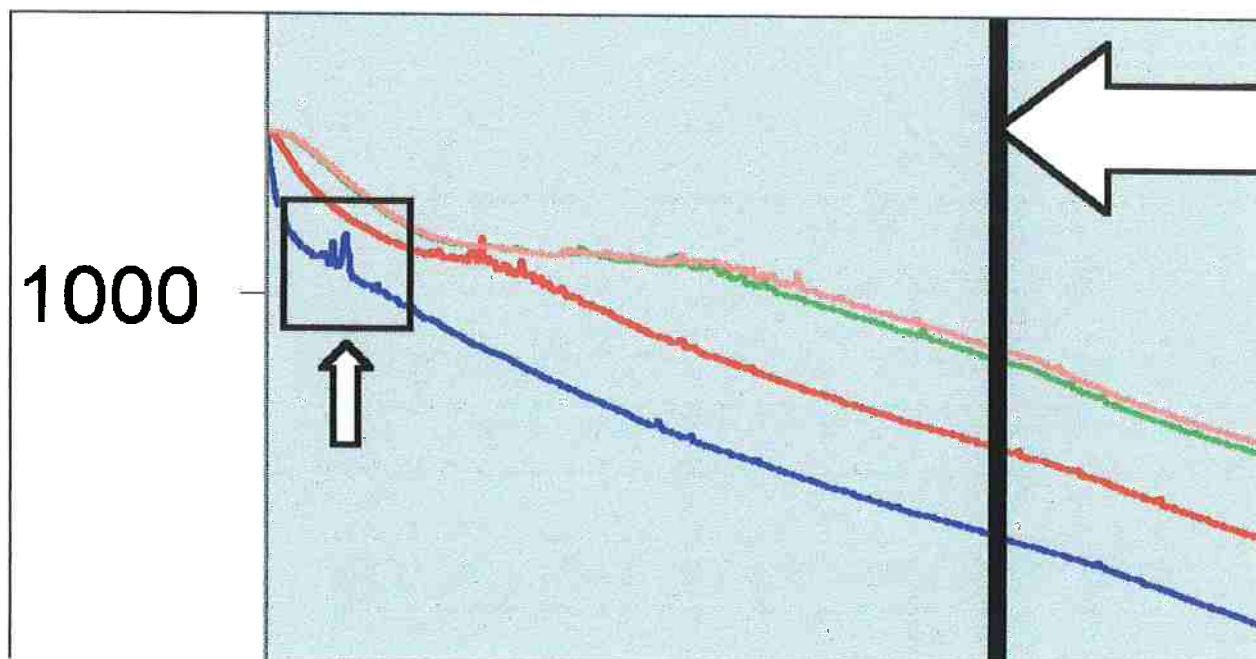
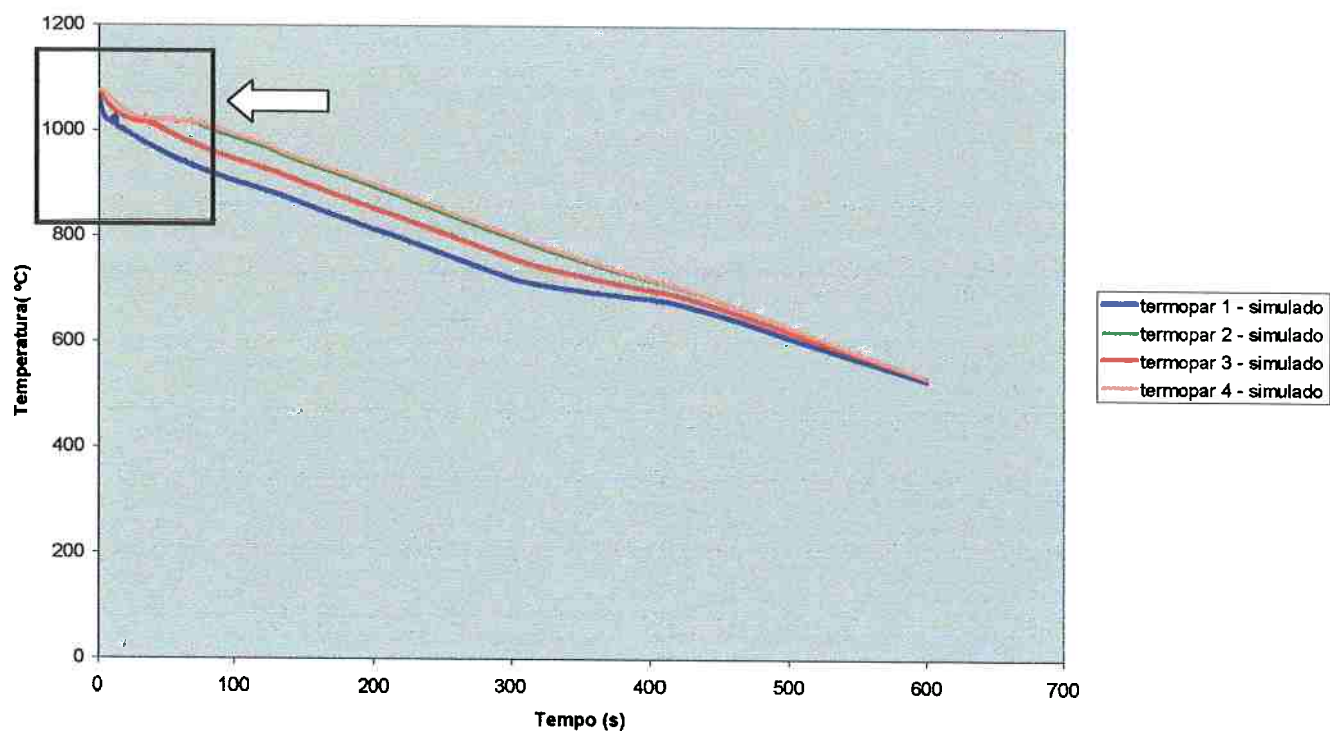


Figura 23: Picos de temperatura na curva simulada.

Alguns comentários podem ser feitos acerca desses picos de temperatura.

De início, deve-se descartar a possibilidade de que sejam devidos a uma instabilidade no processo de diferenças finitas, pois, novamente simuladas as curvas, com discretizações de tempo menores, tais picos de temperatura manteve-se.

Possivelmente, a elevação estará relacionada ao fenômeno similar à recalescência que ocorre em curvas de resfriamento de pontos que sofrem um processo de nucleação, onde os grãos equiaxiais ao crescerem liberam calor latente num líquido super-resfriado, numa velocidade maior do que o líquido propagaria tal calor.

Quanto às curvas de resfriamento da Experiência 1 (figura 19), repare-se que a liberação de calor latente, que muda a inclinação da curva de temperatura, foi simulada de modo apropriado, principalmente porque essas mudanças de inclinação, que ocorrem tanto na curva experimental do termopar, como na correspondente simulada, dão-se quase ao mesmo tempo, o que mostra a correta evolução da macroestrutura bruta de solidificação.

Finalmente, quanto aos resultados obtidos, tanto das curvas de resfriamento para um ponto calculadas através de um acoplamento determinístico (Equação 4) de Brody e Flemings ^[9], como as obtidas pelo modelo probabilístico de simulação macroestrutural, eles mostram que a teoria probabilística aplicada ao método de Monte Carlo é perfeitamente aceitável, já que tais curvas descritas estão

muito próximas e nenhuma hipótese sobre como se dá a velocidade da fase sólida / líquida é feita no modelo e, mesmo assim, a forma pela qual o calor latente é liberado está muito concordante com as teorias desenvolvidas por Brody e Flemings [9] .

A comparação das curvas de fração de sólido em função da temperatura (figura 20), usando-se a Equação 4, e aquela simulada probabilisticamente pelo modelo estão, também, muito próximas.

Repara-se que a curva de fração de sólido em função da temperatura calculada pelo modelo está abaixo da curva usando a teoria de Brody-Flemings [9] . Isto pode ser explicado pelo fato de que o modelo proposto desconsidera a movimentação de soluto na fase sólida.

Isto faz com que a curva do modelo proposto seja mais próxima ao modelo de Scheil [9] , que como dito na introdução deste trabalho, considera nula a difusão de soluto na fase sólida.

Portanto, com maior rigor, dever-se-ia ter comparado a curva de fração de sólido obtida pelo modelo com a equação de Scheil [9] e não com a teoria de Brody Flemings [9], pois esta última considera difusão de soluto também na fase sólida.

Repare-se, como o modelo simula a redistribuição do soluto na região do sistema que está na zona pastosa, ou seja, para a região do sistema onde a temperatura dos elementos é da cor rosa (figura 19 e 21), a estrutura é composta por células já sólidas e outras ainda líquidas que estão ricas em soluto e, portanto, têm sua temperatura liquidus decrementada.

A figura 24 abaixo enfatiza o raciocínio exposto.

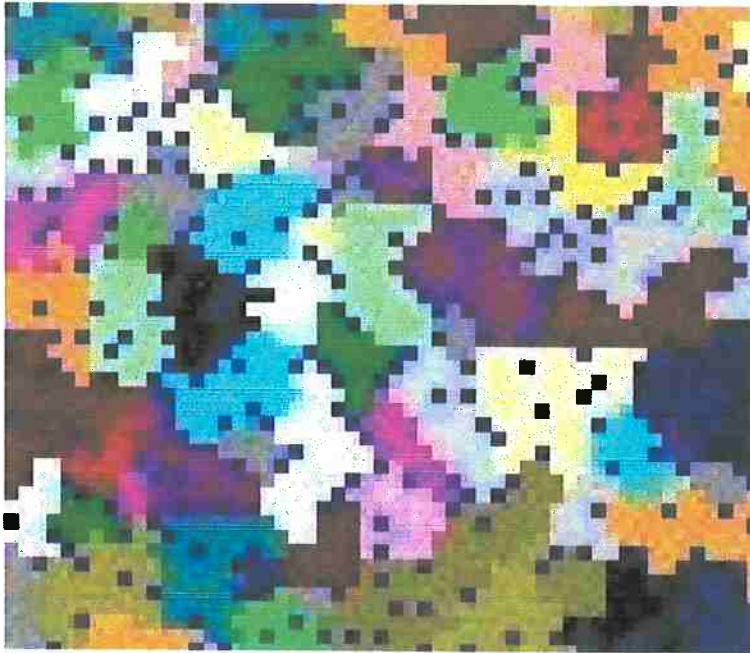


Figura 24: Comprovação da existência, na zona pastosa equiaxial, de células ainda líquidas.

Note-se que abaixo da zona pastosa, dada como sendo entre a temperatura *liquidus* e a temperatura do peritético da liga, nenhuma célula mais estará líquida, pois, para o modelo, estabeleceu-se que a solidificação peritética findaria o processo.

6.CONCLUSÕES

- 1) As simulações do modelo proposto aplicadas ao ensaio 2 resultaram em grande proximidade com a macroestrutura experimental. O principal aspecto de interesse dessa simulação foi a ocorrência da transição entre as zonas colunar e equiaxial. A altura da transição entre as zonas colunar e equiaxial no experimento foi de 15,2mm enquanto que a simulação resultou numa altura de 16,8mm.

2) Quanto aos grãos equiaxiais, o tamanho destes simulado pelo modelo ficou menor que o observado experimentalmente.

3) Foi possível simular o crescimento competitivo entre os grãos colunares mesmo não considerando aspectos de cristalografia e alinhamento com a direção de máxima extração de calor. A seção transversal dos grãos colunares na simulação sofreu um aumento não verificado nos grãos experimentais.

4) Nas simulações dos campos térmicos o modelo macroscópico acoplado ao modelo microscópico estocástico simulou com boa precisão o resfriamento do corpo de prova.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

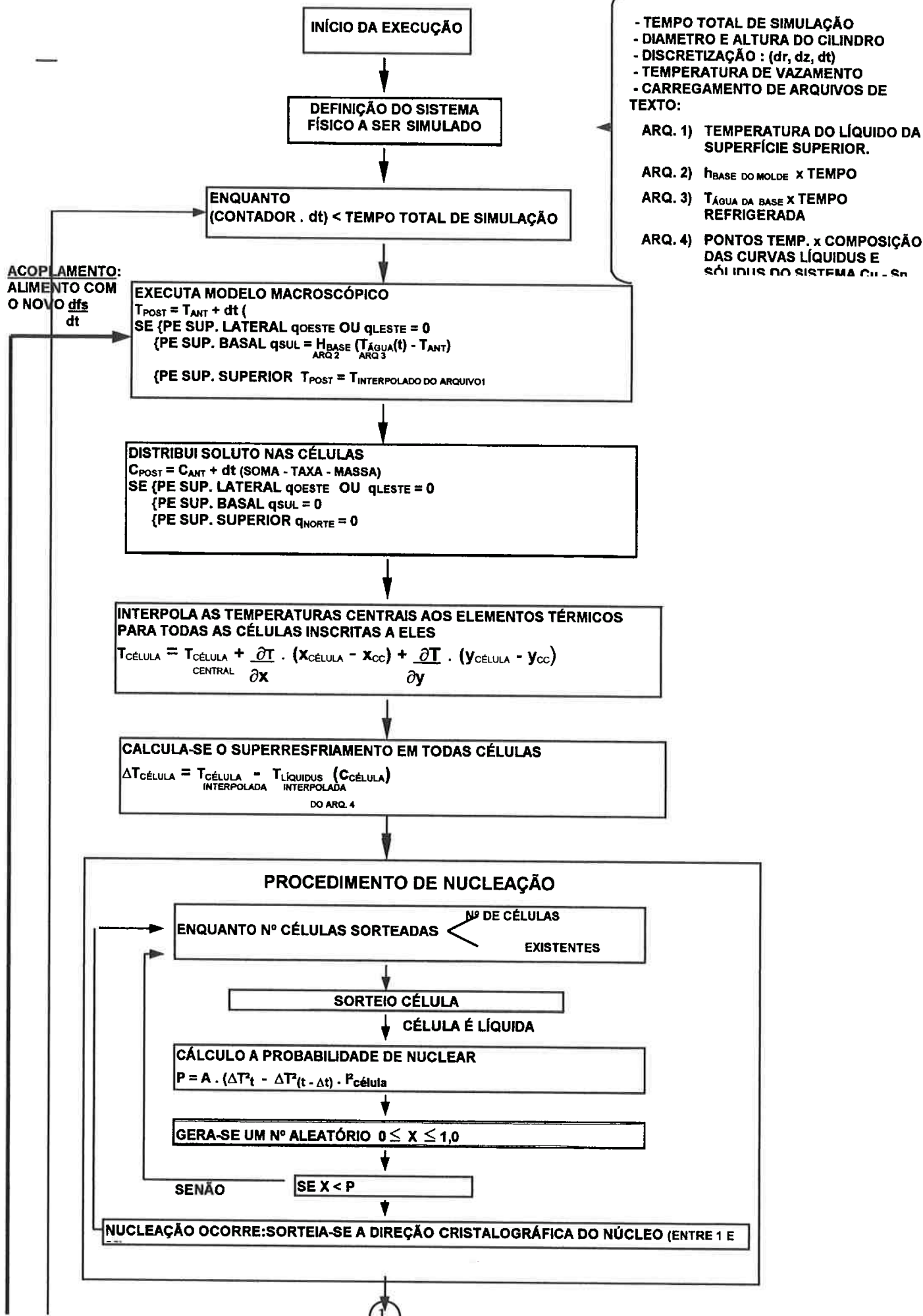
- [1] RAPPAZ, M.; Modelling of microestruture formation in solidification process, **International Mat.Reviews**, 1989, v. 34 p. 93-123.
- [2] CHO, I. S. ; HONG, C. P.; Modelling of microestrutural evolution in squeeze casting of Al-4.5%mass Cu alloy, **ISIJ international** ,1997,v. 37 p 1098-1106.
- [3] CLYNE, T. W.; The use of heat flow modelling to explore solidification phenomena, **Metalurgical transactions** , 1982, v.138, p. 471- 478.
- [4] CLYNE, T.W.; Numerical modelling of diretional solidification of metallic alloys, **Metal Science**, 1982, v.16, p 441-450.
- [5] CLYNE, T. W. ; Modelling of Heat flow in solidification, **Materials Science and Engineering**, 1984, v. 65, p 111-124.
- [6] GARCIA, A. ; CLYNE, T. W. ; PRATES M. : **Metallurgical transactions**, 1979, v.10 B, p 85- 92.
- [7] CROFT, R.D. ; LILLEY, G. D. ; **Heat transfer calculations using finite difference equations**, Applied Science Publisher LTD, London, 1977, p 39-158 .
- [8] PATANKAR, S. V. ; Numerical heat transfer and fluid flow ; 1980, New York, Hemisphere Publishing, p. 54-87
- [9] KURZ, W. ; FISHER J. D.; **Fundamentals of solidification** , 3th edition, trans tech publications, Switzerland, 1989, p 163-260.

- [10] SPITLLE J.A.; BROWN S.G.R.; Computer simulation of cast grain structures, **Journal of materials Science**, 1989, v.5, p. 362-367.
- [11] SPITLLE J.A.; BROWN S.G.R.; A computer simulation of the influence of processing conditions on as-casting grain structures, **Journal of materials Science**, 1989, v.23, p. 1777-1781.
- [12] SPITLLE J.A.; BROWN S.G.R.; A computer simulation of the effects of alloy variables on the grain structures of castings, **Acta Metallurgica**, 1989, v.37, p. 1777-1781
- [13] SROLOVITZ, D.J. ; ANDERSON M.P.; GRETT G.S. and SAHNI, P.S.; Grain growth in two dimensions, **Acta metallurgica**, 1983, v.17, p241-246.
- [14] SROLOVITZ, D.J. ; ANDERSON M.P.; GRETT G.S. and SAHNI, P.S.; Computer simulation of grain growth, **Acta metallurgica**, 1984, v.32, p783-791.
- [15] CHALMERS, B; **Principles of solidification**, Wiley, New York, 1964, p34-58
- [16] ZHU, P.; SMITH, R.W.; Dynamic simulation of crustal growth by Monte Carlo method, **Acta Metallurgica**, v40, n.4, 1992, p683-692
- [17] ZHU, P.; SMITH, R.W.; Computer Simulation of a casting grain structures by Monte Carlo Method, **Acta Metallurgica**, v40, n.4, 1992, p 3369-3379
- [18] RAPPAZ, M.; GANDIN C.A.; Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification process, **Acta Metallurgica**, v. 41, 1993, p. 345- 360.
- [19] KURZ, W.; GIOVANOLA B.; TRIVEDI, R., **Acta Metallurgica**, v. 34, 1986, p. 823-828.

[20] Martorano, M.A.; Efeitos de algumas variáveis de processo na microsegregação da liga Cu-8%Sn, **Tese de Doutorado**, Escola Politécnica, USP, 1998-11-30

[21] RAPPAZ, M.; GANDIN C. A. ; TINTILLIER, R. ; Three-dimensional simulation of solidification grain structures application to superalloy precision castings, **Metallurgical Transactions**, v.24A, 1993, p 467-479,.

ANEXO 1 – FLUXOGRAMA MAIS DETALHADO DO MODELO PROPOSTO





PROCEDIMENTO DE CRESCIMENTO

ENQUANTO Nº CÉLULAS SORTEADAS $\leftarrow$ Nº DE CÉLULAS EXISTENTES

SORTEIA CÉLULA
CÉLULA É LÍQUIDA E TEM
VIZINHOS SÓLIDOS
SORTEIO VIZINHO SÓLIDO

CÁLCULO $\Delta G = \Delta G_v + \Delta G_i$

SENÃO

SE $\Delta T_{\text{CÉLULA}} > 0$

CÁLCULA PROBABILIDADE $p = \exp\left(\frac{\Delta G}{T_{\text{célula}} \cdot K}\right)$

GERA Nº ALEATÓRIO X

SE $X < P \Rightarrow$ **CRESCER**

AO FINAL DE UM Δt DE PROCESSAMENTO VERIFICA EM TODOS OS ELEMENTOS TÉRMICOS QUAL FOI A VARIAÇÃO DA FRAÇÃO DE SÓLIDO NO Δt DECORRIDO.

ACHA-SE EM CADA ELEMENTO $= \frac{F_s \text{ POST} - F_s \text{ ANT}}{\Delta t}$

$\Rightarrow$ GUARDA AS MACROESTRUTURAS E CAMPOS TÉRMICOS, BEM COMO F_s E TEMPERATURAS NOS ELEMENTOS

INCREMENTA CONTA TEMPO

FIM DE SIMULAÇÃO

