

MODELO HÍBRIDO DETERMINÍSTICO-ESTOCÁSTICO PARA A SOLIDIFICAÇÃO MULTIFÁSICA DE LIGAS¹

Vinicius Bertolazzi Biscuola²
Marcelo Aquino Martorano³

Resumo

Um novo modelo está sendo proposto para simular a nucleação e o crescimento de grãos durante a solidificação bidimensional de ligas metálicas binárias. Este modelo, chamado de CADE (“cellular automaton-deterministic”), utiliza a técnica do autômato celular em conjunto com um modelo determinístico multifásico baseado em equações macroscópicas de conservação. A técnica do autômato celular, empregada pelos modelos estocásticos, é utilizada para simular a nucleação e o crescimento de cada grão individualmente e prever o seu encontro com os grãos vizinhos. A previsão destes parâmetros permite um cálculo mais exato da fração de grãos e da concentração de área de interface entre estes grãos e o líquido ao redor. Os parâmetros obtidos pelo autômato celular são utilizados pelo modelo determinístico, no qual um sistema de equações diferenciais é resolvido para se determinar algumas variáveis de campo, a saber, a temperatura, a concentração média de soluto e a fração de sólido. Este novo modelo apresenta as vantagens da previsão da macroestrutura permitida pela técnica do autômato celular e o forte acoplamento entre as equações do modelo determinístico. O CADE foi aplicado à solidificação isotérmica de uma liga Al-Si e os seus resultados mostraram uma excelente aderência aos resultados de um modelo determinístico publicado na literatura quando a correção de Avrami é utilizada.

Palavras-chave: Autômato celular; Modelo determinístico; Macroestrutura.

HYBRID STOCHASTIC-DETERMINISTIC MODEL FOR THE MULTIPHASE SOLIDIFICATION OF ALLOYS

Abstract

A new mathematical model to predict the formation of the grain structure during the two-dimensional solidification of binary alloys is proposed. This model, which is called CADE (cellular automaton-deterministic), combines the cellular automaton technique with a deterministic multiphase model that is based on macroscopic conservation equations. The cellular automaton technique is used to track the growth and predict the impingement of each individual grain envelope, enabling accurate calculations of the grain fraction and the interfacial area concentration between grain envelopes and the surrounding liquid. The parameters calculated with the cellular automaton are transferred to the deterministic model, in which a system of differential equations is solved to determine several field variables, such as the temperature, the average liquid concentration, and the solid fraction. The complete CADE model has the advantage of the grain structure prediction derived from the cellular automaton technique and the strong coupling between the equations from the deterministic model. The CADE model is applied to the isothermal solidification of an Al-Si alloy. The results are compared with those from a deterministic model published in the literature, showing reasonable agreement when the Avrami correction for grain impingement is used in the deterministic model.

Key words: Cellular automaton; Deterministic model; Macrostructure.

¹ *Contribuição técnica ao 63º Congresso Anual da ABM, 28 de julho a 1º de agosto de 2008, Santos, SP, Brasil*

² *Engenheiro de Materiais e aluno de doutorado do Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Av. Prof. Mello Moraes, 2463, São Paulo, SP, Brasil, CEP 05508-900.*

³ *Professor, Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Av. Prof. Mello Moraes, 2463, São Paulo, SP, Brasil, CEP 05508-900.*

1 INTRODUÇÃO

Os modelos matemáticos utilizados para a previsão da estrutura bruta de solidificação são chamados de estocásticos (probabilísticos) ou determinísticos. Os modelos estocásticos por definição utilizam alguma variável aleatória em seus cálculos, enquanto os determinísticos são baseados somente em equações determinísticas. Um dos primeiros modelos determinísticos para a previsão da formação da estrutura de grãos durante a solidificação foi proposto por Oldfield.⁽¹⁾ Neste modelo, o crescimento microscópico de células eutéticas foi acoplado à transferência de calor macroscópica, resultando em um modelo micro-macroscópico. Fortes simplificações foram assumidas: considerou-se somente a presença de grãos equiaxiais, grãos esféricos (não dendríticos) e um sistema isotérmico (temperatura uniforme). Durante a evolução dos modelos determinísticos micro-macroscópicos, muitas das simplificações foram eliminadas e outros fenômenos importantes para a formação da estrutura bruta de solidificação foram introduzidos. Maxwell e Hellawell⁽²⁾ e Greer et al.⁽³⁾ incorporaram diferentes modelos de nucleação para grãos esféricos, prevendo o seu tamanho final. Rappaz e Thévoz⁽⁴⁾ consideraram a solidificação de grãos dendríticos esféricos na tentativa de prever a recalescência presente nas curvas de resfriamento. Thévoz et al.⁽⁵⁾ também propuseram um modelo para a solidificação de grão dendríticos equiaxiais, porém utilizaram uma distribuição Gaussiana de super-resfriamentos críticos para nucleação. As previsões dos raios dos grãos equiaxiais ao longo de uma amostra solidificada unidirecionalmente concordaram muito bem com resultados experimentais.

Hunt⁽⁶⁾ incluiu o cálculo do crescimento colunar dendrítico nos modelos determinísticos para prever a transição colunar equiaxial (CET) em solidificações unidirecionais e em estado estacionário. Este modelo foi posteriormente modificado para simular a solidificação transiente unidirecional.⁽⁷⁾ Wang e Beckermann^(8,9) propuseram um modelo determinístico unidimensional e multifásico para simular a solidificação dendrítica equiaxial e colunar e assim prever a CET, levando-se em conta as interações entre os campos de soluto ao redor dos grãos equiaxiais. Este modelo foi então estendido por Martorano et al.⁽¹⁰⁾, que consideraram também as interações entre os campos de soluto dos grãos equiaxiais e colunares. Embora a extensão destes modelos determinísticos para a previsão da CET em duas dimensões seja complexa, algumas tentativas foram feitas através da utilização de algoritmos especiais que acompanham a posição da frente colunar bidimensional.^(9,11-14) Apesar das dificuldades em se utilizar os modelos determinísticos para a resolução de problemas bi ou tridimensionais, eles apresentam vantagens importantes, como: muitos fenômenos já foram considerados em seus sistemas de equações; existem métodos numéricos confiáveis para a resolução dos seus sistemas de equações fortemente acoplados e malhas mais grosseiras são utilizadas para a resolução numérica de suas equações.

Os modelos estocásticos são utilizados para calcular imagens da macroestrutura bruta de solidificação que podem ser diretamente comparadas com as macroestruturas reais, obtidas em experimentos. Este é um ponto importante dos modelos estocásticos e é a diferença fundamental em relação aos modelos determinísticos, possibilitando desta forma, a previsão do tamanho de grão em duas ou três dimensões e também da CET. Gandin e Rappaz⁽¹⁵⁾ desenvolveram um modelo estocástico chamado CAFE que combinou a técnica do autômato celular com o método dos elementos finitos para prever a formação da estrutura de grãos e o campo de temperaturas durante a solidificação. Uma grande desvantagem destes

modelos reside na necessidade de malhas refinadas para permitir a simulação de cada grão. Este problema tornou-se mais evidente nas extensões deste modelo para prever os fenômenos que ocorrem na escala dos braços dendríticos, dando origem aos modelos de autômato celular modificados.^(16,17) No modelo originalmente proposto por Gandin e Rappaz,⁽¹⁵⁾ a menor escala simulada foi a dos grãos dendríticos, não sendo considerados os braços dendríticos. Apesar da extensa utilização deste modelo, não foram feitas muitas tentativas com o intuito de se incluir novos fenômenos nos seus cálculos.

O principal objetivo deste trabalho é a implementação de um modelo híbrido estocástico-determinístico, doravante chamado de CADE (“cellular automaton-deterministic”), que combina pela primeira vez as equações diferenciais fortemente acopladas do modelo determinístico com a capacidade do modelo estocástico em prever a geometria dos grãos em solidificação. As equações diferenciais do modelo determinístico apresentam algumas variáveis, como a concentração interfacial de envelopes de grãos e a fração volumétrica de grãos, que dependem da geometria dos grãos em solidificação. Para se calcular estes parâmetros no modelo determinísticos, os envelopes de grãos eram geralmente considerados esféricos ou cilíndricos. No entanto, no presente trabalho estes parâmetros são obtidos diretamente da estrutura de grãos prevista pelo autômato celular. A concentração de soluto presente no líquido ao redor dos envelopes de grão é calculada pelo modelo determinístico e então usada pelo autômato celular para prever a interação entre os grãos e o campo de soluto durante o crescimento.

2 MODELOS MATEMÁTICOS

O modelo CADE implementado no presente trabalho é uma combinação das equações utilizadas pelo modelo determinístico e a técnica do autômato celular empregada pelos modelos estocásticos na previsão da nucleação e do crescimento de grãos durante a solidificação. Os detalhes do modelo estão descritos abaixo.

2.1 Modelo Determinístico

As equações adotadas no presente trabalho são análogas às propostas por Wang e Beckermann⁽⁹⁾ e utilizadas por Martorano et al.⁽¹⁰⁾ Estas equações foram baseadas na média volumétrica das equações de conservação de massa, energia e espécies químicas em cada pseudofase, denominadas, sólido (s), líquido interdendrítico (d) e líquido extradendrítico (l). Estas pseudofases foram definidas de acordo com o conceito de envelope de grão, que representa um envelope imaginário envolvendo cada grão. O líquido interno ao envelope é denominado líquido interdendrítico, enquanto o líquido externo recebe o nome de líquido extradendrítico. Os seguintes preceitos foram utilizados na determinação das equações finais para uma liga binária: (a) o sistema é considerado isotérmico, ou seja, a temperatura é uniforme; (b) convecção, movimentação do sólido e difusão do soluto no sólido são desprezados; (c) todos os grão nucleiam imediatamente abaixo da linha líquidus (nucleação instantânea), ou seja, o super-resfriamento crítico para nucleação é zero; (d) os calores específicos, c_p , e as densidades, ρ , das pseudo-fases são iguais e constantes; e (e) a concentração de soluto no líquido interdendrítico, C_d , é uniforme e se relaciona com a temperatura T pela linha líquidus do diagrama de fases, ou

seja, $T = T_f + m_l C_d$, na qual T é a temperatura, T_f é a temperatura de fusão do metal puro e m_l é a inclinação da linha líquidus do diagrama de fases.

As equações finais do modelo são as seguintes:

$$\frac{dT}{dt} = R + \frac{L_f}{c_p} \frac{d\varepsilon_s}{dt} \quad [1]$$

$$(1-k) C_d \frac{d\varepsilon_s}{dt} = \varepsilon_d \frac{dC_d}{dt} + \frac{S_e}{\delta_e} D_l (C_d - C_l) \quad [2]$$

$$\frac{d}{dt}(\varepsilon_l C_l) = C_d \frac{d\varepsilon_l}{dt} + \frac{S_e}{\delta_e} D_l (C_d - C_l) \quad [3]$$

$$\varepsilon_s + \varepsilon_d + \varepsilon_l = 1 \quad [4]$$

onde R é taxa de resfriamento do sistema isotérmico calculada antes do início da solidificação; C é a concentração de soluto na fase indicada pelo subscrito; t é o tempo; L_f é o calor latente de fusão; k é o coeficiente de partição do soluto; D_l é o coeficiente de difusão do soluto no líquido extradendrítico; δ_e é o comprimento efetivo de difusão para o transporte de soluto entre os envelopes dendríticos e o líquido extradendrítico; S_e é a área superficial de envelopes de grãos por unidade de volume; e ε representa a fração de volume, onde o subscrito indica a pseudo-fase. A fração volumétrica de grãos, ε_g , é definida como $\varepsilon_g = \varepsilon_s + \varepsilon_d$. Note que, no presente modelo, ε_g , S_e , e δ_e dependem da estrutura de grãos, a qual é obtida com o modelo de autômato celular, parte estocástica do presente modelo. No modelo usado por Wang e Beckermann⁽⁹⁾ e Martorano et al.,⁽¹⁰⁾ estes parâmetros eram completamente calculados por equações determinísticas baseadas no preceito de envelopes cilíndricos e esféricos. As equações [1] a [4] foram solucionadas numericamente pelo método dos volumes finitos, com uma formulação explícita.⁽¹⁸⁾

2.2 Modelo Estocástico

A técnica do autômato celular (CA) proposta por Gandin e Rappaz⁽¹⁵⁾ foi adotada no presente modelo para se calcular a estrutura de grãos de um fundido de forma quadrada que solidifica isotermicamente. O fundido bidimensional é subdividido por uma malha de células do CA quadradas que contem um sítio no centro. Os substratos para a nucleação heterogênea são distribuídos de forma aleatória pelas células do CA, nas quais não pode haver mais de um substrato. Quando a temperatura, T , é menor que a temperatura líquidus, todos os substratos são ativados e um quadrado de crescimento, que representa o envelope de grão, é criado com centro no sítio das células de CA e com orientação aleatoriamente escolhida entre 48 classes na faixa entre -45° e 45° . Para simular o crescimento dos envelopes dos grãos, estes quadrados crescem com o tempo e suas meia-diagonais aumentam com a velocidade V abaixo:⁽¹⁹⁾

$$V = \frac{D_l m_l (k-1) C_d}{\pi^2 \Gamma} \left[0.4567 \left(\frac{\Omega}{1-\Omega} \right)^{1.195} \right]^2 \quad [5]$$

onde Γ é coeficiente de Gibbs-Thomson e Ω é o super-resfriamento adimensional, definido como $\Omega = (C_d - C_l) / (C_d (1-k))$, no qual C_d e C_l são fornecidos pela parte determinística do modelo. A dependência entre Ω e C_l , a concentração de soluto no

líquido extradendrítico, simula a interação entre o campo de soluto ao redor do envelope de cada grão, a qual não foi levada em consideração na técnica original do CA⁽¹⁵⁾. Quando os quadrados em crescimento tocam algum dos quatro sítios vizinhos, o qual não está ativo, este sítio vizinho é então ativado e associa-se a este um novo quadrado no qual o centro e o tamanho são definidos como proposto Gandin and Rappaz.⁽¹⁵⁾ As diagonais deste novo quadrado passam a crescer com a velocidade calculada pela equação [5]. Outros detalhes deste algoritmo podem ser encontrados na literatura.⁽¹⁵⁾

As equações que regem a parte determinística do modelo dependem de algumas variáveis, denominadas, S_e e ε_g , as quais estão relacionadas com a geometria da estrutura tridimensional. Diferentemente dos modelos determinísticos anteriormente propostos, no presente trabalho estas variáveis são obtidas a partir das macroestruturas bidimensionais calculadas pela parte estocástica do modelo. Primeiramente, a fração de área de envelopes, A_A , e o perímetro dos envelopes (interface com o líquido extradendrítico) por unidade de área, L_A , são obtidos a partir da macroestrutura bidimensional calculada. Posteriormente, relações estereológicas são utilizadas para se calcular S_e e ε_g , que são então transferidos para as equações do modelo determinístico. Dois tipos de relações estereológicas foram utilizadas para simular dois tipos diferentes de sistemas de solidificação. No primeiro sistema, os envelopes de grãos foram assumidos como cubos de tamanhos e orientações iguais e uniformemente espaçados. O plano de cálculo do CA foi considerado paralelo a uma face dos envelopes cúbicos de grãos. Então, a imagem de qualquer envelope no plano de cálculo seria sempre representada por um quadrado cujos lados tinham o mesmo tamanho dos lados do envelope cúbico. Para este sistema, o domínio de simulação era uma célula unitária quadrada contendo somente um envelope de grão. Foram utilizadas as seguintes relações estereológicas $\varepsilon_g = A_A^{3/2}$, $S_e = 3L_A^2 / 8n_v^{1/2}$, e $n_v = n_a^{3/2}$, onde o número de substratos para a nucleação heterogênea por unidade de volume é n_v , e por unidade de área do plano de cálculo do CA é n_a . No segundo sistema, o plano de cálculo do autômato celular foi definido como uma seção aleatória de uma porção tridimensional de envelopes de grão aleatoriamente posicionados e orientados. Neste caso, $\varepsilon_g = A_A$ e $S_e = (4/\pi)L_A$.⁽²⁰⁾ Quando o diâmetro médio dos envelopes é calculado assumindo-se que estes são esferas de tamanhos iguais, então $n_v = (\sqrt{\pi/6})n_a^{3/2}$.⁽¹⁵⁾ A distância efetiva de difusão, δ_e , foi calculada assumindo-se que todos os envelopes de grãos são esferas de tamanhos iguais, como descrito por Martorano et al.⁽¹⁰⁾

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os procedimentos numéricos de obtenção de A_A e L_A a partir da macroestrutura do CA foram definidos a partir da simulação do crescimento de um envelope quadrado centrado em um domínio quadrado (1.5 x 1.5 mm) e com uma orientação de 45° em relação a um lado deste domínio. Os resultados dos cálculos do CA para uma malha grosseira (100 x 100) e uma refinada (1.000 x 1.000), ambas bidimensionais, apresentaram uma boa concordância com aqueles calculados por uma expressão analítica exata (Figura 1). Os valores de A_A calculados para a malha mais grosseira, no entanto, mudam em pequenos degraus. Após os vértices do quadrado atingirem as fronteiras do domínio, o valor de L_A começou a decrescer

devido à diminuição do perímetro de contato com o líquido externo. Um efeito análogo é observado quando dois envelopes se encontram durante a solidificação.

O modelo CADE foi então utilizado para simular um liga Al-5%Si solidificando a partir da temperatura liquidus (894.5 K) na forma de envelopes iguais e eqüidistantes, orientados de 30° em relação ao lado da célula quadrada unitária (1.6 mm de lado), como descrito previamente. Na Figura 2, resultados desta simulação são comparados com aqueles obtidos por uma implementação do modelo determinístico proposto por Wang e Beckermann,⁽⁸⁾ ajustado para a solidificação isotérmica de envelopes equiaxiais cúbicos, ao invés dos esféricos originais. A malha de CA foi de 200×200 e as propriedades da liga e as condições de simulação foram: $D_l = 3 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$; $L_f = 372 \times 10^3 \text{ J kg}^{-1}$; $c_p = 921.5 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$; $m_l = -7.7 \text{ K (\% peso)}^{-1}$; $k = 0.117$; $\Gamma = 9 \times 10^{-8} \text{ m K}$; $T_f = 933 \text{ K}$; $R = 45 \text{ K s}^{-1}$; e $n_v = 2.4 \times 10^8 \text{ m}^{-3}$. A curva de resfriamento (incluindo a recalescência) e as curvas da evolução no tempo de ε_s , ε_g , C_l , C_d , S_e calculadas com o modelo CADE coincidem com aquelas calculadas pelo modelo de Wang and Beckermann's⁽⁸⁾ até 0.8 s. Após este tempo os resultados diferem pois os envelopes quadrados atingem as fronteiras da célula unitária, causando uma diminuição do S_e com o decorrer do crescimento (Figura 2(d)).

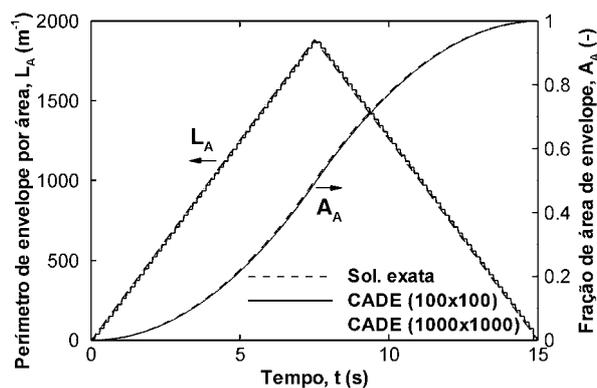


Figura 1 – Fração de área de envelopes (A_A) e perímetro de interface de envelopes por unidade de área (L_A) em função do tempo calculados com o algoritmo do CA para um envelope crescendo à velocidade $V = 10^{-4} \text{ m s}^{-1}$ utilizando-se duas malhas (100 x 100, 1.000 x 1.000) comparados com os resultados obtidos de uma expressão analítica exata.

Um segundo sistema de solidificação, no qual 30 grãos nuclearam com orientações e localizações aleatórias, foi simulado com o modelo CADE utilizando-se uma malha de 200×200 células em um domínio quadrado com lado de 7.9mm. Na Figura 3, os resultados do modelo são comparados com aqueles obtidos pelo modelo determinístico de Wang e Beckermann⁽⁸⁾ ajustado. Algumas discrepâncias podem ser observadas nas curvas de resfriamento e na evolução de ε_g , C_l , S_e . No entanto, a evolução da fração de sólido (ε_s) concordou muito bem. A estrutura de grãos calculada com o modelo CADE esta inscrita na Figura 3(a) e mostra uma típica estrutura equiaxial. Na Figura 3(d) a concentração de área interfacial de envelopes, S_e , calculada com o modelo CADE começa a decrescer aproximadamente após 1s, quando a fração volumétrica de grãos (ε_g) atinge aproximadamente 0.4.

Após este momento, o efeito do encontro com os envelopes vizinhos torna-se cada vez mais importante. Este efeito não é observado no modelo determinístico, no

qual S_e aumenta até um platô, pois nenhuma correção para o encontro de grãos (correção de Avrami) foi considerada no modelo original.⁽⁸⁾ Para examinar a fonte desta discrepância, a correção de Avrami foi incluída nas equações puramente determinísticas e os resultados também são apresentados na Figura 3. Agora, a Figura 3(d) mostra que o S_e no modelo determinístico também começa a diminuir aproximadamente após 1s, mostrando uma tendência similar ao modelo CADE. Esta correção resultou em uma melhor concordância entre todos os resultados do modelo CADE e do modelo determinístico, especialmente as curvas de resfriamento. Durante a recalescência, a aderência melhorou principalmente após a temperatura máxima. A aderência para ε_g e C_l também melhorou com a correção de Avrami, pois esta diminui a área interfacial de envelopes, através da qual o envelope cresce e o soluto é rejeitado para o líquido extradendrítico. Com isso, a taxa de aumento de ε_g e C_l com o tempo diminui, aproximando-se dos resultados do CADE.

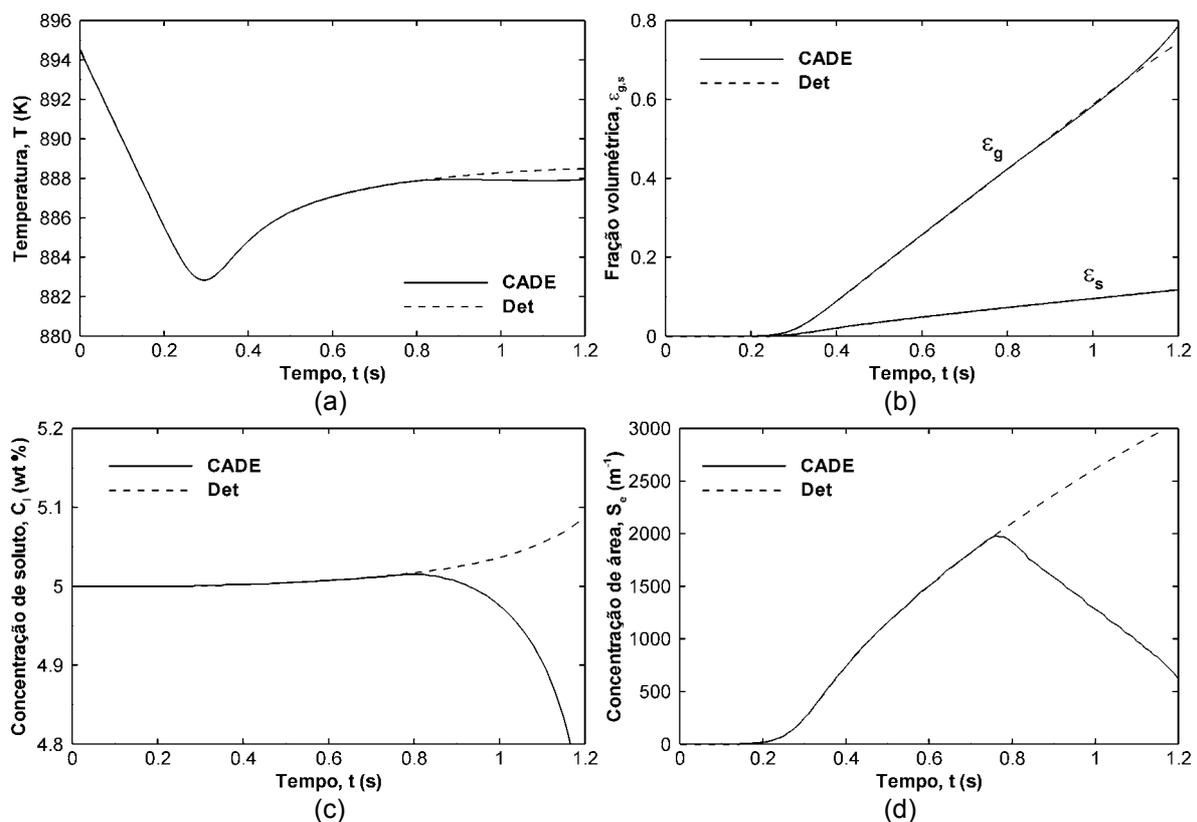


Figura 2 – Resultados do modelo CADE para envelopes cúbicos equidistantes e igualmente orientados são comparados com aqueles provenientes de uma implementação do modelo determinístico (Det) de Wang and Beckermann⁽⁸⁾ ajustado para envelopes cúbicos: (a) curvas de resfriamento; (b) frações volumétrica de (ε_s) sólido e (ε_g) grãos; (c) concentração de soluto no líquido extradendrítico (C_l); e (d) concentração de área interfacial entre o envelope e o líquido extradendrítico (S_e).

4 CONCLUSÕES

Um modelo híbrido estocástico determinístico, denominado de CADE (*cellular automaton-deterministic*), foi proposto para simular a solidificação de ligas binárias. Este modelo combina as equações do modelo determinístico proposto por Wang e

Beckermann⁽⁸⁾ e Martorano et al.⁽¹⁰⁾ com a técnica do autômato celular desenvolvida por Gandin e Rappaz.⁽¹⁵⁾ O modelo CADE foi utilizado para a simulação de dois tipos diferentes de sistemas de solidificação: envelopes cúbicos equidistantes com a mesma orientação e um grupo de 30 envelopes aleatoriamente orientados e posicionados em um domínio bidimensional quadrado. Os resultados do CADE (curvas de resfriamento, evolução das frações de sólido e grãos em função do tempo, evolução da concentração de soluto e da área interfacial de envelopes) apresentaram uma boa concordância com os resultados de um modelo puramente determinístico para envelopes cúbicos até o momento em que os envelopes esbarram nas fronteiras da célula unitária. No entanto, algumas discrepâncias foram observadas entre os resultados do modelo CADE e os do modelo determinístico para um grupo de 30 grãos aleatórios. Parte desta discrepância se deve ao encontro entre os envelopes, que foi simulado pelo modelo CADE, mas não foi considerado pelo modelo determinístico original.

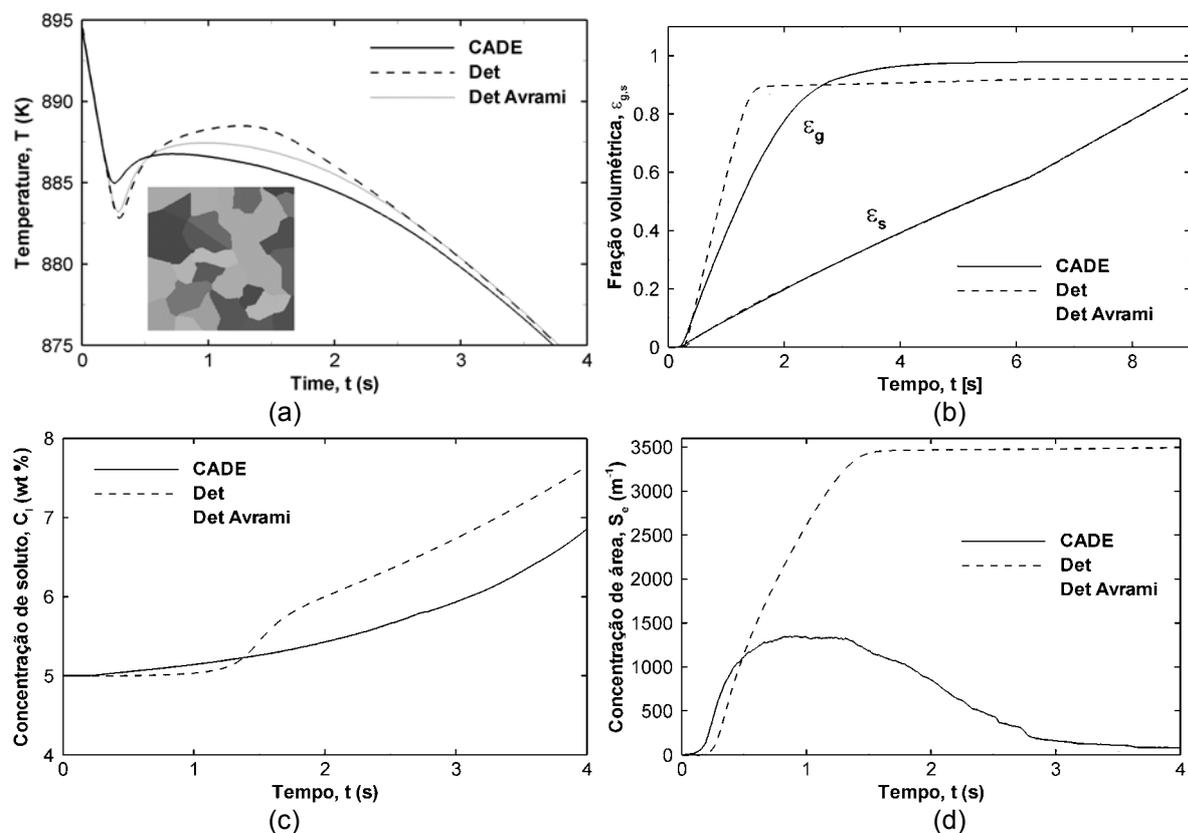


Figura 3 – Resultados do modelo CADE para 30 grãos aleatoriamente orientados e posicionados são comparados com aqueles de uma implementação do modelo determinístico de Wang e Beckermann⁽⁸⁾ ajustado para envelopes cúbicos com (Det Avrami) e sem a (Det) correção do encontro de grãos: (a) curvas de resfriamento com a estrutura de grãos calculada com o CADE; (b) frações volumétricas de sólido (ϵ_s) e grãos (ϵ_g); (c) concentração de soluto no líquido extradendrítico (C_l); e (d) concentração de área interfacial entre envelopes e líquido extradendrítico (S_e).

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela bolsa de mestrado e à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo financiamento através do projeto Jovem Pesquisador, proc. 03/08576-7.

REFERÊNCIAS

- 1 OLDFIELD, W. A quantitative approach to casting solidification: Freezing of cast iron, *Transactions of the ASM*, v. 59, p. 945-961, 1966.
- 2 MAXWELL, I.; HELLAWELL, A. A simple model for grain refinement during solidification. *Acta Metallurgica*, v. 23, p 229-237, 1975.
- 3 GREER, A.L.; BUNN, A.M.; TRONCHE, A.; EVANS, P.V.; BRISTOW, D.J. Modelling of inoculation of metallic melts: application to grain refinement of aluminium by Al-Ti-B, *Acta Materialia*, 48, p. 2823-2835, 2000.
- 4 RAPPAZ, M.; THÉVOZ, PH. Solute diffusion model for equiaxed dendritic growth. *Acta Metallurgica*, v. 35, no. 7, p. 1487-1497, 1987.
- 5 THÉVOZ, Ph.; DESBIOLLES, J.L.; RAPPAZ, M. Modeling of equiaxed microstructure formation in cast iron. *Metallurgical Transactions A*, v. 20A, p. 311-322, 1989.
- 6 HUNT, J.D. Steady state columnar and equiaxed growth of dendrites and eutectic. *Materials Science and Engineering*, v. 65, p. 75-83, 1984.
- 7 FLOOD, S.C.; HUNT, J.D. Columnar and equiaxed growth. *Journal of Crystal Growth*, v. 82, p. 552-560, 1987.
- 8 WANG, C.Y.; BECKERMANN, C. A unified diffusion model for columnar and equiaxed dendritic alloy solidification. *Materials Science and Engineering*, A171, p. 199-211, 1993.
- 9 WANG, C.Y.; BECKERMANN, C. Prediction of columnar to equiaxed transition during diffusion-controlled dendritic alloy solidification. *Metallurgical and Materials Transactions A*, v. 25, p. 1081-1093, may 1994.
- 10 MARTORANO, M.A.; BECKERMANN, C.; GANDIN, Ch.-A. A solutal interaction mechanism for the columnar-to-equiaxed transition in alloy solidification, *Metallurgical and Materials Transactions A*, v. 34A, p.1657-1674, august 2003.
- 11 JACOT, A.; MAIJER, D.; COCKCROFT S. A two-dimensional model for the description of the columnar-to-equiaxed transition in competing gray and white iron eutectics and its application to calender rolls. *Metallurgical and Materials Transactions*, v. 31A, p. 2059-2068, 2000.
- 12 BROWNE, D.J.; HUNT, J.D. A fixed grid front-tracking model of the growth of a columnar front and an equiaxed grain during solidification of an alloy. *Numerical Heat Transfer B-Fundamentals*, v. 45, p 395-419, 2004.
- 13 LUDWIG, A.; WU, M. Modeling the columnar-to-equiaxed transition with a three-phase Eulerian approach. *Materials Science and Engineering A*, v. 413, p 109-114, 2005.
- 14 MARTORANO, M.A.; BISCOLOLA, V.B. Columnar front tracking algorithm for prediction of the columnar-to-equiaxed transition in two-dimensional solidification, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, v. 14, p.1225-1243, 2006.
- 15 GANDIN, Ch.-A.; RAPPAZ, M. A 3D cellular automaton algorithm for the prediction of dendritic grain growth, *Acta Materialia*, v.45, no. 5, p. 2187-2195, 1997.
- 16 RAVINDRAN, K.; BROWN, S.G.R.; SPITTLE, J.A. Prediction of the effective thermal conductivity of three-dimensional dendritic regions by the finite element method, *Materials Science and Engineering*, A269, p. 90-97, 1999.
- 17 ZHU, M.F.; HONG, C.P. A Modified Cellular Automaton Model for the Simulation of dendritic growth in solidification of alloys, *ISIJ International*, v. 41, p. 436-445, 2001.
- 18 PATANKAR, S.V. *Numerical heat transfer and fluid flow*, Hemisphere Pub. Corp., New York, 1980.
- 19 LIPTON, J.; GLICKSMAN, M.E.; KURZ, W. Dendritic growth into undercooled alloy melts. *Materials Science and Engineering A*, 65, p. 57-63, 1984.
- 20 RUSS, J.C.; DeHOFF, R.T. *Practical stereology*, Kluwer Academic/Plenum, New York, 2000.