

COMPARAÇÃO DA TRANSIÇÃO COLUNAR-EQUIAXIAL PREVISTA ATRAVÉS DE MODELOS ESTOCÁSTICO E DETERMINÍSTICO ¹

Vinicius Bertolazzi Biscuola²
Marcelo Aquino Martorano³

Resumo

Os resultados de um modelo estocástico implementado com base na técnica do autômato celular foram comparados com os resultados obtidos através de um modelo determinístico apresentado na literatura. O modelo determinístico fornece diretamente a posição da transição colunar-equiaxial (CET), enquanto o modelo estocástico fornece a macrografia completa dos grãos. A CET foi extraída destas macrografias para uma comparação com o modelo determinístico através da definição de uma razão de aspecto dos grãos, o que permitiu identificar a região de transição entre os grãos equiaxiais e colunares. As simulações foram realizadas para a liga Al-7%Si em condições unidirecionais de extração de calor e forneceram curvas de resfriamento muito semelhantes para os dois tipos de modelo. Simulações para diferentes super-resfriamentos críticos para a nucleação dos grãos equiaxiais mostraram que a posição da CET obtida pelos dois modelos também é semelhante. No entanto, quando uma distribuição de super-resfriamentos para a nucleação é utilizada no modelo estocástico, os seus resultados diferem significativamente dos resultados do modelo determinístico.

Palavras-chave: Transição colunar-equiaxial; Modelo estocástico; Modelo determinístico; Autômato celular.

Abstract

Results from a stochastic model of solidification based on the cellular automaton technique were compared with those from a deterministic model. The deterministic model calculates the position of the columnar-to-equiaxed transition (CET) directly, while the stochastic model gives the whole grain macrostructure image, from which the CET must be extracted. The CET was obtained from these images by the definition of an aspect ratio for the grains, which allowed the identification of columnar and equiaxed regions, as well as the transitional region between them. The simulations were carried out for an Al-7%Si alloy under unidirectional heat extraction and the calculated cooling curves obtained with the two models showed very good agreement. The CET position calculated with the models for different critical nucleation undercoolings of equiaxed grains were also similar. Nevertheless, when a distribution of critical nucleation undercoolings is adopted for the stochastic model, its results differ significantly from those obtained with the deterministic model.

Key words: Columnar-to-equiaxed transition; Stochastic model; Deterministic model; Cellular automaton.

¹ Contribuição técnica apresentada na 61º Congresso Anual da ABM, de 24 a 27 de julho de 2006, Rio de Janeiro – RJ

² Engenheiro de Materiais e aluno de mestrado 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

A previsão da transição colunar-equiaxial (CET) é importante para o projeto de peças fundidas, já que esta delimita a transição entre duas regiões com propriedades significativamente diferentes, apresentando estruturas de grãos colunares ou equiaxiais. Tal previsão pode ser obtida através de métodos empíricos ou modelos matemáticos, que são divididos em modelos determinísticos e estocásticos. O primeiro grupo caracteriza-se pela utilização de equações que independem de probabilidades estatísticas e não procura simular os grãos individualmente, mas sim de forma média. Estes modelos apresentam algumas desvantagens, como a necessidade da escolha de um critério para se determinar o bloqueio da frente colunar pelos grãos equiaxiais. Além disso a aplicação deste critério a situações multidimensionais é complexa.

Por outro lado, o grupo dos modelos estocásticos, também denominados de modelos de autômato celular (CA), apresenta algum tipo de variável aleatória em alguma de suas etapas de cálculo e, portanto, depende de probabilidades estatísticas. Estes modelos acompanham ainda a nucleação e o crescimento de cada grão, mostrando a macroestrutura como resultado final. Entretanto, ao contrário dos modelos determinísticos, os modelos estocásticos não informam diretamente a posição da CET. A macroestrutura calculada deve ser analisada e a posição da CET identificada. Estes modelos também apresentam algumas desvantagens, tais como a necessidade de uma grande capacidade computacional devido à utilização de malhas numéricas relativamente refinadas.

Cho et al.⁽¹⁾ utilizaram um modelo de CA para a solidificação unidirecional e obtiveram uma boa aderência a resultados experimentais. Estes autores compararam a velocidade da frente colunar e o gradiente de temperatura com resultados de um modelo determinístico, mas não compararam a posição da CET. Martorano et al.⁽²⁾ também aplicaram um modelo estocástico à solidificação direcional, considerando a interação entre os campos de soluto na frente de crescimento colunar e entre os grãos equiaxiais sem a necessidade de definir um parâmetro para a ocorrência da CET. Através deste modelo, Martorano et al.⁽²⁾ analisaram os resultados de fração de sólido, temperatura, concentração e também levantaram um mapa da posição da CET em função do super-resfriamento para nucleação instantânea. Gandin e Rappaz⁽³⁾ utilizaram um modelo estocástico para a simulação de um caso de resfriamento unidirecional realizado experimentalmente e obtiveram uma boa aderência entre as curvas de temperatura e a posição da CET. Cho et al.⁽⁴⁾ verificaram a influência de alguns parâmetros de nucleação nas macroestruturas calculadas através de um modelo de CA. Vários aspectos de ambos os modelos foram analisados separadamente, mas nenhuma análise comparativa entre os resultados dos modelos determinísticos e estocásticos foi realizada.

O presente trabalho visa comparar a posição da transição colunar-equiaxial (CET) obtida através de dois tipos de modelos matemáticos para a solidificação de ligas binárias: um modelo estocástico, baseado na técnica do autômato celular (CA), e um modelo determinístico proposto na literatura.⁽²⁾ A posição da CET foi determinada na macroestrutura do modelo de CA através de uma razão de aspecto para os grãos. O efeito de alguns parâmetros de nucleação foi analisado na posição da CET prevista pelos dois modelos e os resultados comparados.

2 MODELOS MATEMÁTICOS

2.1 Modelo Estocástico

O modelo estocástico implementado no presente trabalho foi baseado no modelo proposto por Rappaz e Gandin.⁽⁵⁾ A principal modificação introduzida foi a utilização do método dos volumes finitos, em lugar do método dos elementos finitos, para resolução numérica da equação de condução de calor. Analogamente a Rappaz e Gandin,⁽³⁾ o modelo foi dividido em duas partes: um submodelo macroscópico, responsável pelo cálculo da transferência de calor, e um submodelo microscópico, responsável pelo cálculo da microestrutura, havendo assim a necessidade de um acoplamento posterior entre os submodelos, que estão descritos abaixo.

Submodelo Macroscópico

No submodelo macroscópico, utilizado para modelar a transferência de calor, a equação de condução de calor bidimensional abaixo, escrita em coordenadas retangulares, foi solucionada

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad [1]$$

onde H é a entalpia; T é a temperatura; K é a condutividade térmica; t é o tempo e x e y são as coordenadas espaciais.

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

$$q=0 \quad \text{contornos laterais e superior} \quad [2]$$

$$q=h(T - T_w) \quad \text{contorno inferior} \quad [3]$$

onde q é o fluxo de calor saindo através dos contornos do domínio; h é o coeficiente de transferência de calor na interface metal-molde; T_w é a temperatura da água de refrigeração e T é a temperatura da superfície do domínio. A equação [1] foi discretizada utilizando-se o método numérico dos volumes finitos, com uma formulação explícita.⁽⁶⁾

Submodelo Microscópico

O submodelo microscópico é análogo ao modelo proposto por Rappaz e Gandin.⁽⁵⁾ Desta forma, somente os principais aspectos serão descritos a seguir, porque maiores detalhes podem ser obtidos na literatura.⁽⁵⁾ Neste modelo, o domínio foi subdividido em pequenas células quadradas com o intuito de simular a nucleação e o crescimento dos grãos, prevendo a macroestrutura final. Primeiramente, diversos substratos para a nucleação heterogênea são distribuídos aleatoriamente entre as células e, a cada substrato, associa-se um super-resfriamento crítico para sua ativação. O número de grãos que nucleiam em cada temperatura foi determinado através de uma distribuição de super-resfriamentos críticos para a nucleação, cuja função densidade de distribuição foi assumida obedecer a uma distribuição normal ou Gaussiana, com a seguinte equação:⁽³⁾

$$\frac{dn}{d(\Delta T)} = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi} \cdot \Delta T_{\sigma}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta T - \Delta T_{nuc}}{\Delta T_{\sigma}} \right)^2 \right] \quad [4]$$

onde n é a densidade de número de substratos que são ativados em um super-resfriamento crítico ΔT ; n_{\max} é a densidade total de número de substratos, ΔT_{nuc} e ΔT_{σ} são a média e o desvio padrão, respectivamente, da distribuição Gaussiana assumida. Logo, a densidade de número de substratos ativados para uma diminuição de temperatura pode ser obtida pela integração da equação [4]. Esta distribuição foi aplicada com parâmetros diferentes na superfície e no interior da cavidade quadrada do molde, para desta forma simular o diferente potencial para a nucleação heterogênea existente nestes locais.

Quando o super-resfriamento em uma região atinge o super-resfriamento crítico para a nucleação dos seus substratos, as células correspondentes são ativadas e a estas são atribuídas orientações cristalográficas escolhidas aleatoriamente entre 48 classes, divididas igualmente na faixa de -45° a 45° . A cada célula ativa é associado um quadrado que representa o envelope dendrítico, cujas diagonais são atualizadas segundo a equação de crescimento dendrítico descrita a seguir:

$$v = A \times \Delta T^n \quad [5]$$

onde v representa a velocidade de crescimento da diagonal do quadrado; ΔT é o super-resfriamento $\Delta T = (T_L - T)$, onde T_L é a temperatura liquidus, calculado no centro da célula; e A e n são constantes que podem ser determinadas experimentalmente ou através de algum modelo matemático.

Desta forma os quadrados que representam o envelope dendrítico crescem e, ao ultrapassarem o centro de alguma célula vizinha, esta é ativada. Na ativação, a célula recebe um quadrado centrado em seu interior e com duas arestas coincidentes com as do quadrado que ativou esta célula, conservando assim o tamanho do envelope. Este quadrado recebe a mesma orientação do quadrado que ativou a sua célula. Uma célula qualquer é desativada quando as quatro células vizinhas estiverem ativas.

Acoplamento entre Submodelos Macroscópico e Microscópico

Um acoplamento entre os submodelos macroscópico e microscópico é necessário para possibilitar um cálculo consistente do campo de temperaturas, do crescimento dos envelopes dendríticos e da fração de sólido. Neste acoplamento, o submodelo macroscópico fornece a variação de entalpia do volume finito (equação [1]) para o submodelo microscópico. Como o número de células do modelo microscópico é geralmente maior do que o número de volumes finitos do modelo macroscópico, a entalpia e a temperatura são interpolados linearmente para o centro das células a partir do centro dos volumes finitos. A temperatura interpolada é utilizada para o cálculo da velocidade de crescimento dos envelopes através da equação [5]. Por outro lado, a variação de entalpia interpolada (δH_{CA}) é utilizada para o cálculo da variação de fração de sólido, $f_{s,CA}^{t+\delta t}$, através da equação

$$f_{s,CA}^{t+\delta t} = \frac{-\delta H_{CA}^{t+\delta t}}{\rho \cdot C_p \cdot (T_L - T_f) \cdot (k-1) \cdot [1 - f_{s,CA}^t]^{(k-2)} + \Delta H_f \cdot \rho} \quad [6]$$

onde ρ é a densidade; C_p é o calor específico; T_L é a temperatura liquidus da liga; T_f é a temperatura de fusão do metal puro; k é o coeficiente de partição; ΔH_f é o calor

latente de fusão e t e $t + \delta t$ indicam os instantes de tempo correspondentes, sendo δt o passo de tempo do método numérico. Esta equação é o resultado da aplicação do modelo de Scheil⁽⁷⁾ para o cálculo da fração de sólido em função da temperatura.

A equação [6] é utilizada para calcular a variação de fração de sólido no interior de cada célula ativa no submodelo microscópico. A partir destes valores, define-se a variação de fração de sólido no interior do volume finito, $\delta f_{s,VF}^{t+\delta t}$, como a média da variação de todas as células em seu interior. Utilizando-se $\delta f_{s,VF}^{t+\delta t}$, fornecido pelo submodelo microscópico, a temperatura do volume finito $T_p^{t+\delta t}$ é calculada através da equação:

$$T_p^{t+\delta t} = T_p^t + \frac{\delta H_{CA}^{t+\delta t} + \Delta H_f \rho \delta f_{s,VF}^{t+\delta t}}{\rho \cdot C_p} \quad [7]$$

A fração de sólido de cada célula deve ser atualizada após cada passo de tempo até que se atinja a temperatura do eutético. Neste instante, uma transformação isotérmica é imposta no sistema.

2.2 Modelo Determinístico

O modelo matemático determinístico proposto por Martorano et al.⁽²⁾ é baseado nas equações apresentadas por Wang e Beckermann.⁽⁸⁾ Neste modelo assumiu-se a existência de três pseudofases, a saber, sólido (s), líquido interdendrítico (d) e líquido extradendrítico (l). Definem-se as duas fases líquidas após o posicionamento de um envelope dendrítico imaginário ao redor de cada grão, tocando a ponta dos braços primários e secundários de dendrita. O líquido interdendrítico é aquele localizado internamente a cada envelope e o extradendrítico, localizado externamente. As seguintes hipóteses foram ainda utilizadas para a definição das equações diferenciais e algébricas do modelo:

- o fluxo de calor é unidirecional;
- o transporte de calor e massa ocorrem apenas por difusão;
- o líquido interdendrítico (d) possui concentração de soluto homogênea;
- a difusão de soluto no sólido é desprezível;
- a difusão macroscópica de soluto no líquido é desprezível;
- existe equilíbrio local na interface sólido-líquido.

A partir dos princípios de conservação de massa, energia e espécies químicas e considerando-se as hipóteses simplificadoras apresentadas, o seguinte conjunto de equações foi obtido e utilizado para modelar a solidificação no sistema estudado:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \rho L \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} \quad [8]$$

$$V = \frac{4 \sigma^* D_l m_l (k-1) C_l^*}{\Gamma} \left[|v^{-1}(\Omega)| \right]^2 \quad [9]$$

$$\Omega = \frac{C_l^* - C_l}{C_l^* (1-k)} \quad [10]$$

$$\frac{\partial \varepsilon_l}{\partial t} = - S_e V \quad [11]$$

$$(1-k) C_l^* \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} = \varepsilon_d \frac{\partial C_l^*}{\partial t} + S_e \frac{D_l}{\delta_e} (C_l^* - C_l) \quad [12]$$

$$\frac{\partial (\varepsilon_l C_l)}{\partial t} = C_l^* \frac{\partial \varepsilon_l}{\partial t} + S_e \frac{D_l}{\delta_e} (C_l^* - C_l) \quad [13]$$

$$C_l^* = \frac{T - T_f}{m_l} \quad [14]$$

$$\varepsilon_s + \varepsilon_d + \varepsilon_l = 1 \quad [15]$$

onde ε é a fração volumétrica de cada fase, indicada pelos subscritos 's', 'd' e 'l'; T é a temperatura; t é o tempo; ρ , c_p e L são a densidade, o calor específico e o calor latente, respectivamente; κ é a condutividade térmica média, definida por $\kappa = \varepsilon_s \kappa_s + (\varepsilon_d + \varepsilon_l) \kappa_l$; C_l^* é a concentração do líquido interdendrítico; C_l é a concentração média no líquido extradendrítico; D_l é o coeficiente de difusão de soluto no líquido; k é o coeficiente de partição de soluto; S_e é a concentração de área superficial de envelope por volume; δ_e é a distância efetiva de difusão de soluto ao redor dos envelopes dendríticos; T_f é a temperatura do metal puro; m_l é a inclinação da linha liquidus do diagrama de fases; C_0 é a concentração inicial de soluto; V é a velocidade da ponta das dendritas equiaxiais; Ω é o super-resfriamento adimensional na ponta das dendritas; Γ é o coeficiente de Gibbs-Thomson; $\sigma^* \approx 1/(4\pi^2)$ é a constante de estabilidade marginal e lv^{-1} é o inverso da função de Ivantsov⁽⁷⁾. O sistema de equações [8] a [15] foi discretizado através do método dos volumes finitos em sua formulação implícita utilizando uma malha de volumes finitos quadrados. O sistema de equações algébricas resultante do processo de discretização foi solucionado através do método de Gauss-Seidel.

2.3 Determinação da CET no Modelo Estocástico

Implementou-se um método de análise de imagem para se calcular a razão de aspecto, ϕ , dos grãos presentes na macroestrutura bidimensional calculada pelo modelo de CA. A razão de aspecto implementada consiste no cálculo da razão entre as duas maiores dimensões ortogonais de um grão. Este cálculo foi realizado através das seguintes etapas: (a) calcula-se o tamanho do maior segmento de reta que pode ser inserido no grão (r_1); (b) calcula-se o maior segmento de reta possível de ser inserido no grão, mas ortogonalmente ao primeiro segmento (r_2) e (c) calcula-se a razão entre os comprimentos do menor e do maior segmento. A Figura 1 mostra esquematicamente este processo.

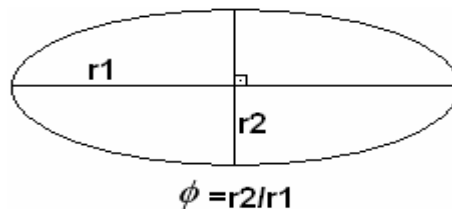


Figura 1. Definição do cálculo da razão de aspecto para uma elipse.

Os fatores de forma dos grãos alongados (grãos colunares) apresentam valores relativamente baixos, enquanto que os fatores dos grãos com formatos próximos ao de um círculo (grãos equiaxiais) apresentam valores mais próximos de

um. Finalmente, a posição da CET é definida a partir da macrografia através dos seguintes passos:

- Calcula-se a razão de aspecto para cada grão da macroestrutura;
- Associa-se a cada célula da malha do modelo microscópico a razão de aspecto do grão ao qual ela pertence;
- Associa-se uma razão de aspecto ao volume finito igual à média dos valores associados às células em seu interior;
- Levanta-se uma curva de razão de aspecto em função da distância ao longo da macroestrutura;
- Define-se que as regiões com uma razão de aspecto menor que 0,3 são compostas por grãos colunares, e, com uma razão de aspecto maior que 0,5, compostas de grãos equiaxiais;
- A região com razão de aspecto na faixa entre 0,3 e 0,5 foi considerada como a da transição colunar-equiaxial, sendo que a posição do ponto médio nesta região foi definida como a posição da CET, a ser comparada com os resultados do modelo determinístico.

2.4 Condições de Simulação

Condições de referência, listadas na Tabela 1, foram utilizadas para as simulações, que envolveram a liga Al-7%Si com propriedades descritas na Tabela 2. Os parâmetros que definem a distribuição Gaussiana de super-resfriamentos críticos para a nucleação (equação [4]) estão apresentados na Tabela 3. Para a definição das malhas, realizaram-se testes de refino garantindo que as soluções obtidas eram praticamente independentes do tamanho das malhas numéricas.

Tabela 1. Parâmetros de simulação.

Dimensões do domínio (m x m)	0,05 x 0,15
Passo de tempo (s)	0,002
Superaquecimento (K)	100
Temperatura do molde (K)	298
Malha do CA (direções x e y)	100 x 10
Malha do volume finito (direções x e y)	1 x 30
h ($W m^{-2} K^{-1}$)	250

Tabela 2. Propriedades da liga Al-7%Si.

ρ ($kg m^{-3}$)	2452,0	C_0	Al-7%Si	D_l ($m^2 s^{-1}$)	5,5E-9
k	0,13	C_p ($J kg^{-1} K^{-1}$)	1126,0	Γ (m K)	1,96E-7
K_l ($W m^{-1} K^{-1}$)	60,5	T_L (K)	891	N (m^{-3})	5E6
K_s ($W m^{-1} K^{-1}$)	137,5	T_{eut} (K)	850	m_l ($K \%Si^{-1}$)	-6,0
ΔH_f ($J m^{-3}$)	387400,0	T_f (K)	933	R_f (mm)	3,63
A ($m s^{-1} K^{-n}$)	3E-6	n	2,7	λ_l (mm)	1,5

Tabela 3. Parâmetros para distribuição dos substratos para nucleação instantânea (os subscritos indicam a posição de aplicação destes parâmetros, sendo: v no interior da cavidade e s na parede do molde).

$\Delta T_{S,nuc}$ [K]	$\Delta T_{S,\sigma}$ [K]	$n_{S,max}$ [m-1]	$\Delta T_{V,nuc}$ [K]	$\Delta T_{V,\sigma}$ [K]	$n_{v,max}$ [m-2]
0,0	0,0	2000	3,0	0,0	36300

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Após uma verificação do modelo estocástico, comparando seus resultados com os resultados de Rappaz e Gandin,⁽³⁾ as suas curvas de resfriamento em sete pontos igualmente espaçados no domínio foram comparadas com as curvas obtidas através do modelo determinístico. Estas curvas mostraram uma excelente aderência e, com isso, pôde-se concentrar a análise nas comparações entre as posições da CET. Analisou-se o efeito do super-resfriamento crítico médio para nucleação no interior da cavidade ($\Delta T_{V,nuc}$) na posição da CET, como mostra a Figura 2. Nesta figura, a posição da CET calculada pelo modelo estocástico e aquela calculada pelo modelo determinístico em função de $\Delta T_{V,nuc}$ foram sobrepostas às macroestruturas do modelo estocástico.

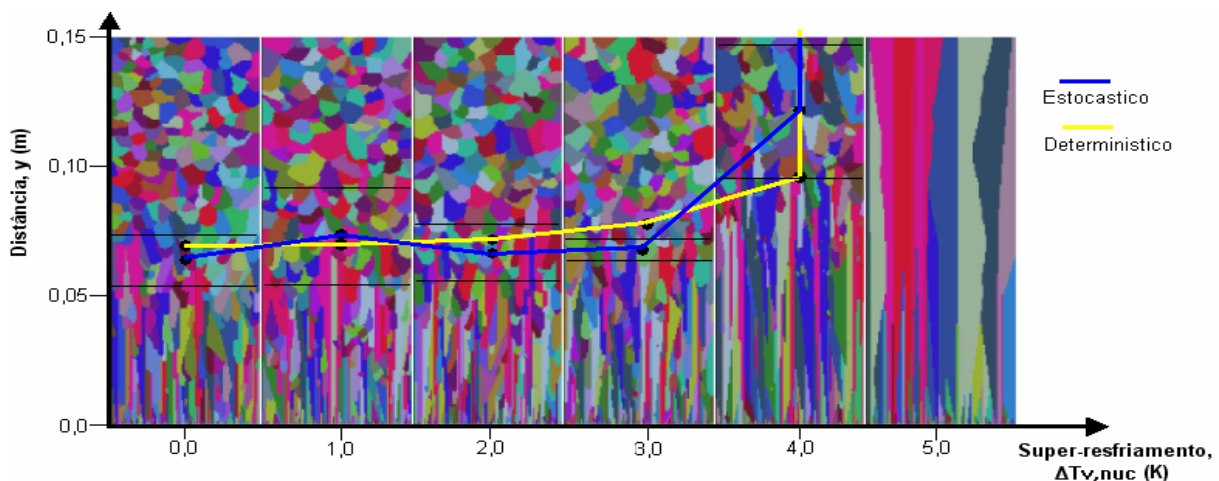


Figura 2. Comparação da posição da CET prevista pelos modelos, sobreposta às macroestruturas calculadas pelo modelo estocástico.

Os modelos apresentaram previsões da posição da CET relativamente próximas, mostrando um comportamento semelhante. Verifica-se que os dois modelos apresentam um super-resfriamento máximo onde, após este, não se observa uma CET, mas apenas grãos colunares. Martorano et al.⁽²⁾ já haviam mostrado tal comportamento para o modelo determinístico. Um exame mais detalhado do comportamento dos dois modelos foi conduzido através da comparação da evolução da posição das frentes colunares e do super-resfriamento nestas frentes em função do tempo, como ilustra a Figura 3.

Observa-se que a curva de super-resfriamento da frente no modelo estocástico (ΔT_{col} - Estoc) apresenta oscilações mas, nota-se que estas ocorrem em torno de uma curva média que se apresenta próxima à do modelo determinístico (Determin). Apesar das oscilações presentes na curva de super-resfriamento para o modelo estocástico, não se observam oscilações significativas na curva da posição desta frente (y_{col}) em função do tempo. Nesta curva, nota-se que o tempo para a ocorrência da CET foi menor no modelo estocástico.

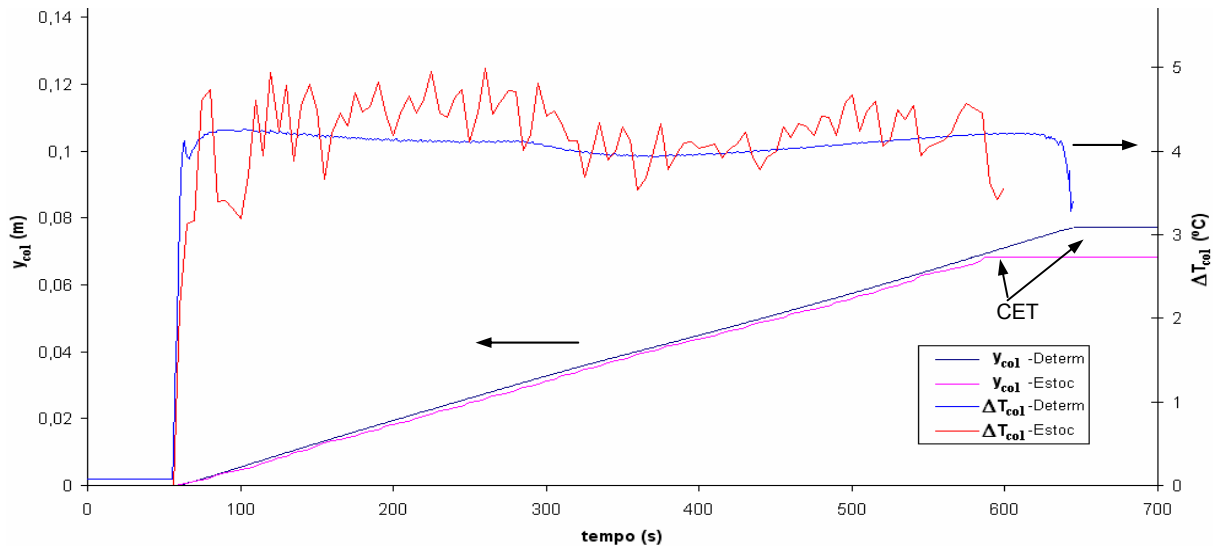


Figura 3. Posição (y_{col}) e super-resfriamento da frente colunar (ΔT_{col}) em função do tempo previstos pelos modelos utilizando $\Delta T_{V,nuc} = 3$ K.

Como pode ser visto na Figura 2, a curva de posição da CET em função do super-resfriamento para a nucleação instantânea apresenta uma elevação abrupta para um super-resfriamento de 4K nos dois modelos. Este comportamento foi examinado em detalhes, no modelo estocástico, realizando-se simulações com diversos valores de super-resfriamento médio para nucleação ($\Delta T_{V,nuc}$) e de desvio padrão ($\Delta T_{V,\sigma}$), necessários para se definir a distribuição Gaussiana de super-resfriamentos (equação [4]). Nas simulações, $\Delta T_{V,nuc}$ foi alterado entre 2 e 15 K e os valores de $\Delta T_{V,\sigma}$ foram definidos para se ter uma razão $\Delta T_{V,\sigma}/\Delta T_{V,nuc}$ que variou entre 0 e 3. Os resultados estão na Figura 4. Nota-se que um aumento na razão $\Delta T_{V,\sigma}/\Delta T_{V,nuc}$ causa um aumento no tamanho da região colunar, deslocando a posição da CET, mesmo para os menores valores de $\Delta T_{V,\sigma}/\Delta T_{V,nuc}$.

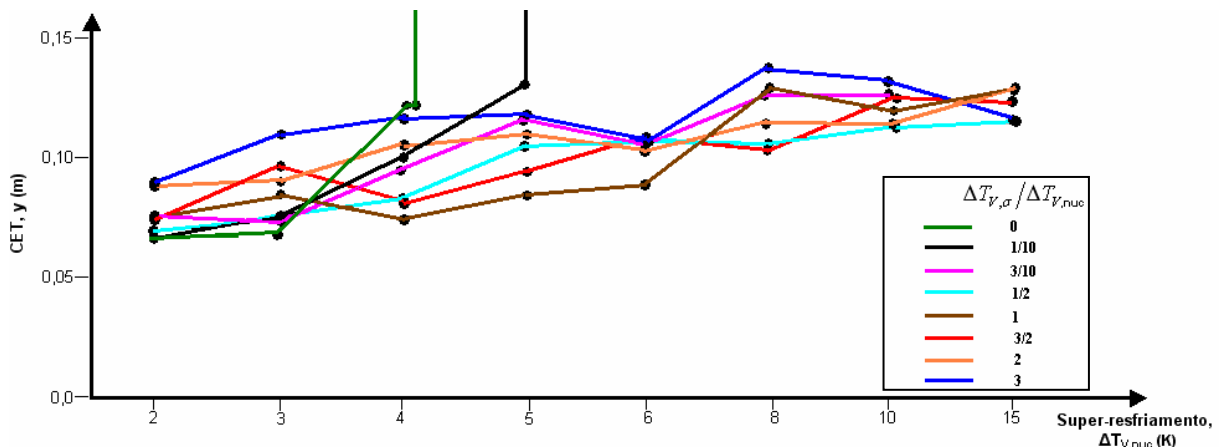


Figura 4. Curva de CET em função do super-resfriamento médio para nucleação para diversas razões $\Delta T_{V,\sigma}/\Delta T_{V,nuc}$ apresentadas.

4 CONCLUSÕES

As seguintes conclusões foram obtidas a partir das comparações realizadas entre os resultados dos modelos matemáticos estocástico e determinísticos:

- 1- As curvas de temperatura previstas pelos modelos estocástico e determinístico apresentaram uma aderência relativamente boa;
- 2- O modelo estocástico com um modelo de nucleação instantâneo ($\Delta T_{V,\sigma} = 0 K$) apresenta o mesmo comportamento do modelo determinístico reportado por Martorano et al.⁽²⁾;
- 3- Apesar do modelo estocástico não considerar o transporte de soluto, os resultados dos modelos estocástico e determinístico apresentaram uma evolução com o tempo semelhante para a posição e para o super-resfriamento da frente de crescimento colunar;
- 4- O aumento na dispersão da distribuição de super-resfriamentos para a nucleação do modelo estocástico aumenta o tamanho da região colunar, deslocando a posição da CET.

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 CHO, In-Sung; Hong Chung-Pyo, ISIJ International, v. 37 No. 11, p. 1098 –1106, 1997.
- 2 MARTORANO, M.A.; BECKERMANN, C. Metall. Mater. Trans. A, v. 34A, p. 1657-1674, 2003.
- 3 GANDIN, Ch.-A.; RAPPAZ, M. Acta matter., v. 42 No. 7, p. 2233-2246, 1994.
- 4 CHO, S.-h.; OKANE, T.; UMEDA, T. International Journal of Cast Metals Research, v. 13 No. 6, p. 327-335, 2001.
- 5 GANDIN, Ch.-A.; RAPPAZ, M. Acta mater., v. 45 No. 5, p. 2187-2195, 1997.
- 6 PATANKAR, S.V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Minnesota: Taylor & Francis, 1980, p. 62.
- 7 KURZ, W.; FISHER, D.J. Fundamentals of solidification. Aedermannsdorf, Trans Tech Publications Ltd., 1989.
- 8 WANG, C.Y.; BECKERMANN, C. Metall. Mater. Trans. A., v. 25A, p. 1081-1093, 1994.