

MECANISMO DE BLOQUEIO MECÂNICO PARA A TRANSIÇÃO COLUNAR-EQUIAXIAL¹

Vinicius Bertolazzi Biscuola²
Marcelo Aquino Martorano³

Resumo

O bloqueio mecânico da frente colunar durante a transição colunar-equiaxial é estudado através da comparação das posições da CET obtidas por um modelo estocástico e por dois modelos determinísticos para a solidificação unidirecional da liga Al-7%Si. Um dos modelos determinísticos é baseado no bloqueio por soluto da frente colunar, enquanto o outro é baseado no bloqueio mecânico. O bloqueio por soluto e o mecânico, com a tradicional fração de bloqueio de 0,49, apresentaram zonas colunares maiores que aquelas previstas pelo modelo estocástico. Quando uma fração de 0,2 é adotada, a concordância se torna-se excelente para uma faixa de super-resfriamentos críticos para nucleação e densidades de números de grãos equiaxiais. Portanto, a mudança da fração de bloqueio de 0,49 para 0,2 melhora a previsão da CET pelos modelos determinísticos.

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

MECHANICAL BLOCKING MECHANISM FOR THE COLUMNAR-TO-EQUIAXED TRANSITION

Abstract

Mechanical blocking of the columnar front during the columnar-to-equiaxed transition (CET) has been studied by quantitatively comparing the CET positions obtained with one stochastic model and two deterministic models for the unidirectional solidification of an Al-7 (wt%) Si alloy. One of the deterministic models is based on the solutal blocking of the columnar front, whereas the other, on the mechanical blocking. The solutal blocking model and the mechanical blocking with the traditional blocking fraction of 0.49 have both given columnar zones larger than those predicted with the stochastic model. When a blocking fraction of 0.2 is adopted, however, the agreement becomes excellent for a range of nucleation undercoolings and number density of grains. Therefore, changing the blocking fraction from 0.49 to 0.2 seems to improve the predictability of deterministic models of the CET.

Key Words: CET, 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

Quando ambos os grãos equiaxiais e colunares coexistem na estrutura bruta de fusão, a região de transição entre um tipo de grão para o outro é denominada transição colunar-equiaxial (CET). A posição da CET determina a quantidade de grãos colunares e equiaxiais, a qual afeta profundamente as propriedades dos fundidos. Diferentes mecanismos foram propostos para explicar o aparecimento da CET durante a solidificação, sendo geralmente aceita a teoria de que esta ocorre quando os grãos equiaxiais bloqueiam os grãos colunares.⁽¹⁻³⁾ Desta forma, os modelos matemáticos para a previsão da CET consideram o crescimento dos grãos equiaxiais e colunares.

Um dos primeiros modelos matemáticos para a previsão da CET foi proposto por Hunt,⁽⁴⁾ o qual assumiu uma solidificação unidirecional e em estado estacionário. Neste modelo, a nucleação dos grãos equiaxiais ocorria em uma dada temperatura de nucleação e estes cresciam na zona super-resfriada constitucionalmente à frente na zona colunar crescente. Para se determinar a CET, Hunt⁽⁴⁾ considerou que à frente colunar seria bloqueada quando a fração volumétrica de grãos equiaxiais atingisse 0,49. Este critério, chamado de critério de bloqueio mecânico, foi baseado na idéia de que os grãos colunares seriam bloqueados caso estes ficassem impossibilitados de crescer a uma distância maior que o diâmetro do grão equiaxial. A fração de 0,49 proposta por Hunt⁽⁴⁾ nunca foi questionada, apesar de ter sido adotada em inúmeros modelos determinísticos da CET.

No modelo proposto por Martorano, Beckermann e Gandin⁽⁵⁾ tornou-se desnecessária a utilização de um critério de bloqueio da frente colunar. Neste modelo a frente colunar era automaticamente bloqueada, causando a CET, quando o soluto rejeitado pelos grãos equiaxiais crescendo à frente da frente colunar causava um decréscimo no super-resfriamento para o crescimento dendrítico. Este efeito, que foi observado diretamente em uma liga Al-3,5%Ni,⁽³⁾ foi referenciado como bloqueio por soluto.

Os modelos acima mencionados são definidos como determinísticos. Outro tipo de modelo de CET, definido como estocástico, foi inicialmente baseado no conceito de Monte Carlo.⁽⁶⁾ Os modelos estocásticos calculam uma imagem da estrutura de grãos, no qual a CET ocorre naturalmente sem qualquer definição de critério de bloqueio da frente colunar. Os modelos estocásticos iniciais evoluíram para o modelo de autômato celular (CA) proposto por Gandin e Rappaz,⁽⁷⁾ denominado de CAFE. A CET visualmente identificada nas macroestruturas do CAFE foram comparadas com as CETs obtidas experimentalmente, mostrando uma boa concordância.⁽⁸⁾

A implementação do bloqueio mecânico da frente colunar nos modelos determinísticos exige a definição de uma fração de bloqueio. Uma fração de 0,49 foi geralmente usada, mas nunca foi experimentalmente verificada, pois o super-resfriamento para nucleação necessário para o modelo também é desconhecido. No entanto, a CET obtida a partir das macroestruturas calculadas com a técnica do CA e com modelos determinísticos poderiam ser comparadas para os mesmos parâmetros de nucleação. Desta forma, a fração de bloqueio mecânico necessária para a concordância entre as CETs obtidas pelos dois tipos de modelos poderia ser determinada.

O objetivo do presente trabalho é investigar o bloqueio mecânico da frente colunar que causa a transição colunar-equiaxial (CET). A fração de bloqueio mecânico é examinada quantitativamente pela comparação das CETs obtidas a

partir de macroestruturas calculadas com um modelo estocástico e CETs obtidas com a utilização de dois modelos determinísticos para um sistema de solidificação unidirecional. O modelo estocástico é baseado na técnica do CA, um dos modelos determinísticos é baseado no bloqueio mecânico da frente colunar, e o outro modelo determinístico é baseado no bloqueio por soluto.

2 DESCRIÇÃO DOS MODELOS

Um modelo estocástico baseado na técnica do CA e dois modelos determinísticos foram implementados no presente trabalho para simular a solidificação unidirecional de uma liga binária sob certas condições similares. Estes modelos serão brevemente explicados, pois os detalhes podem ser encontrados na literatura.

2.1 Modelo Estocástico

O modelo estocástico implementado é baseado no modelo CAFE proposto por Gandin e Rappaz,⁽⁷⁾ e consiste em um modelo macro e um microscópico. No modelo macroscópico, a equação da conservação da energia é resolvida pelo método dos volumes finitos com uma formulação explícita.⁽⁹⁾

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

onde H é a entalpia volumétrica; T é a temperatura; t é o tempo; y é a coordenada espacial na direção do fluxo de calor; e κ é a condutividade térmica, definida como sendo uma média das condutividades do sólido e do líquido com os pesos das correspondentes frações volumétricas. Esta equação foi discretizada usando-se um malha unidimensional de volumes finitos retangulares com um nó no centro e alinhados na direção y .

O submodelo microscópico foi desenvolvido para simular o crescimento de grãos dendríticos em duas dimensões. Foi utilizada uma malha numérica bidimensional de células quadradas de CA com um sítio de CA no centro de cada célula. Algumas células continham partículas que servem de substrato para a nucleação heterogênea de grãos. O número total de partículas distribuídas entre as células foi calculado a partir de uma densidade média de número de núcleos, n_T . O super-resfriamento para a nucleação em uma partícula era $\Delta T_N = T_L - T_N$, onde T_L e T_N são respectivamente as temperaturas liquidus e a de nucleação.

O procedimento para a simulação do crescimento dos grãos dendríticos foi implementado como descrito por Gandin e Rappaz.⁽⁷⁾ Um quadrado descentrado foi associado à cada célula do CA e suas diagonais crescem a uma velocidade V_d dada por:

$$V_d = A \Delta T^m \quad [2]$$

onde ΔT é o super-resfriamento ($\Delta T = T_L - T$) na posição do sítio da célula; A e m são constantes que dependem da liga. A fração de sólido em cada célula do CA foi obtida pela equação de Scheil⁽¹⁰⁾ e pela mudança da entalpia volumétrica na posição

do sítio da célula. Para verificar a correta implementação do código computacional, os resultados foram comparados com aqueles apresentados por Rappaz e Gandin,^(11,12) mostrando uma excelente concordância.

2.2 Modelos Determinísticos

Dois modelos determinísticos foram implementados, cada um com um mecanismo diferente de bloqueio da frente colunar: o modelo proposto por Martorano, Beckermann e Gandin (MBG),⁽⁵⁾ o qual considera o bloqueio por soluto, e um modelo derivado de uma modificação do modelo de Hunt (MHunt),⁽⁴⁾ o qual considera o bloqueio mecânico. Ambos os modelos são baseados no conceito de um volume elementar representativo (VER) contendo muitos envelopes de grão,^(13,14) os quais são superfícies imaginárias que tocam as pontas dos braços dendríticos primários e secundários. Três pseudofases são identificadas no VER: sólido (s), líquido interdendrítico (d) e o líquido extradendrítico (l). A fase de líquido interdendrítico e o extradendrítico estão respectivamente dentro e fora dos envelopes de grão.

As equações que regem os modelos determinísticos foram derivadas do princípio de conservação de massa, espécies e energia com os seguintes preceitos:^(5,13) (a) movimentação do líquido, movimentação do sólido, difusão de soluto no sólido e difusão macroscópica no líquido são desprezíveis; (b) todos os grãos equiaxiais, determinados pela densidade de núcleos n_T , nucleiam no líquido quando o super-resfriamento local para nucleação, ΔT_N , é atingido (nucleação instantânea); (c) a temperatura é uniforme dentro do REV; (d) os calores específicos, c_p , e as densidades, ρ , das pseudo-fases são iguais e constantes; (e) a condutividade térmica, κ , é calculada por $\kappa = \varepsilon_s \kappa_s + (\varepsilon_d + \varepsilon_l) \kappa_l$, onde ε representa a fração volumétrica e o subscrito indica as pseudo-fases; (f) a concentração de soluto no líquido interdendrítico, C_d , é uniforme dentro do REV e é relacionada à temperatura T pela linha liquidus do diagrama de fase, isto é, $T = T_f + m_l C_d$ onde T_f é o ponto de fusão do metal puro e m_l é a inclinação da linha liquidus.

Baseado nestes preceitos, o sistema de equações que é comum a ambos os modelos determinísticos é mostrado abaixo:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \rho L_f \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} \quad [3]$$

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} = - \frac{\partial \varepsilon_l}{\partial t} = S_e V \quad [4]$$

$$\varepsilon_s + \varepsilon_d + \varepsilon_l = 1 \quad [5]$$

onde L_f é o calor latente de fusão; ε_s , ε_d , e ε_l são as frações de sólido, líquido interdendrítico e líquido interdendrítico, respectivamente; ε_g é a fração volumétrica de envelopes de grão, definido como $\varepsilon_g = \varepsilon_s + \varepsilon_d = 1 - \varepsilon_l$; S_e é a área superficial de envelopes de grão por unidade de volume; e V é a velocidade de crescimento radial

dos envelopes colunares cilíndricos e equiaxiais esféricos. Esta velocidade é calculada pelo modelo de Lipton-Glicksmann-Kurz,^(5,13,15) como segue:

$$V = \frac{D_l m_l (k-1) C_d}{\pi^2 \Gamma} \left[0.4567 \left(\frac{\Omega}{1-\Omega} \right)^{1.195} \right]^2 \quad [6]$$

onde Γ é o coeficiente de Gibbs-Thomson; D_l é o coeficiente de difusão do soluto no líquido; k é o coeficiente de partição de soluto; e Ω é o super-resfriamento adimensional, definido por:

$$\Omega = \frac{C_d - C_l}{C_d (1-k)} \quad [7]$$

onde C_l é a concentração de soluto no líquido extradendrítico.

A concentração de área de envelopes, S_e , é calculado como mostrado abaixo.^(5,13)

$$S_e = \psi \frac{3(1-\varepsilon_l)^{\frac{2}{3}}}{R_f} \quad [8]$$

onde ψ é o fator de correção de efeito de esbarramento dos grãos (definido nas próximas duas seções); R_f é o meio espaço característico entre envelopes, definido

por $R_f = \left(\frac{3}{4\pi n_T} \right)^{1/3}$ para grãos equiaxiais e $R_f = \lambda_1/2$ para grãos colunares. Nestas equações n_T é a densidade de número de grãos equiaxiais e λ_1 é o espaçamento entre os braços primários dendríticos nos grãos colunares.

A posição da frente colunar foi calculada para identificar a estrutura de grãos (colunar ou equiaxial) prevalecente em uma dada região do domínio de cálculo e desta forma possibilitar a determinação da equação correta para R_f . Esta posição era seguida resolvendo-se numericamente

$$\frac{dy_{col}}{dt} = V \quad [9]$$

onde y_{col} é a posição da frente colunar e V é a velocidade da frente colunar, calculada pela Equação [6] usando-se o Ω calculado na posição da frente colunar.

As Equações [3] a [9] são usadas para ambos os modelos MBG e Mhunt. Assim como assumido por Hunt,⁽⁴⁾ no modelo M Hunt a fração de sólido nos envelopes de grão (fração de sólido interna) é relacionada à concentração do líquido interdendrítico C_d pela equação de Scheil. Desta forma, o cálculo da taxa de variação da fração de sólido com o tempo foi calculado por:

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} = \frac{\varepsilon_d}{(1-k)C_d} \frac{\partial C_d}{\partial t} + S_e V \left(1 - \left(\frac{C_d}{C_0} \right)^{\frac{1}{k-1}} \right) \quad [10]$$

onde C_0 é a concentração média de soluto na liga. Além disso, neste modelo $C_l = C_0$. A correção de Avrami foi usada para considerar o efeito da sobreposição dos grãos, implicando em $\psi = \varepsilon_l$ na Equação [8]. Para finalizar o modelo MHunt, assumiu-se que a frente colunar era bloqueada, causando a CET, quando a fração de grão equiaxiais à frente da frente colunar era igual ou maior que uma fração de bloqueio determinada (bloqueio mecânico). Duas frações de bloqueio foram estudadas: 0,49 (MHunt-0,49), como assumido por Hunt⁽⁴⁾ no seu modelo e 0,2 (MHunt-0,2).

O modelo de CET proposto por Martorano, Beckermann e Gandin,⁽⁵⁾ o qual utiliza o mecanismo de bloqueio da frente colunar por soluto, foi implementado. Em contraste com o modelo de Hunt,⁽⁴⁾ a troca de soluto entre os envelopes de grão e o líquido extradendrítico foi considerado, resultando nas seguintes equações para calcular a fração de sólido, ε_s , e a concentração de líquido extradendrítico, C_l

$$(1-k) C_d \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} = \varepsilon_d \frac{\partial C_d}{\partial t} + S_e \frac{D_l}{\delta_e} (C_d - C_l) \quad [11]$$

$$\frac{\partial (\varepsilon_l C_l)}{\partial t} = C_d \frac{\partial \varepsilon_l}{\partial t} + S_e \frac{D_l}{\delta_e} (C_d - C_l) \quad [12]$$

onde δ_e é a distância efetiva de difusão no líquido ao redor dos envelopes de grão, calculado como no modelo MBG.⁽⁵⁾ A correção de Avrami não foi originalmente usada no modelo MBG,⁽⁵⁾ por tanto $\psi = 1$ na Equação [8].

O sistema de equações do modelo MHunt e MBG foi resolvido numericamente utilizando-se uma formulação implícita do método dos volumes finitos.^(5,9)

3 RAZÃO DE ASPECTO PARA DETERMINAÇÃO DA CET

No presente trabalho, as posições da CET previstas pelo modelo estocástico e pelos modelos determinísticos foram comparadas. A posição da CET foi obtida diretamente das equações dos modelos determinísticos, no entanto um critério baseado na razão de aspecto de grãos foi utilizado para determinar a CET a partir das macroestruturas calculadas pelo modelo estocástico.

A razão de aspecto de um grão foi determinada primeiramente obtendo-se o comprimento L_1 da maior reta possível de ser inscrita no grão. Posteriormente, o comprimento L_2 da maior reta inscrita no grão e ortogonal à primeira foi obtido.

Finalmente, a razão de aspecto foi definida como $\phi = \frac{L_2}{L_1}$, como proposto por Allen⁽¹⁶⁾

para caracterizar a forma de partículas em sistemas de análise de imagens. Outros parâmetros, como aqueles que utilizam o perímetro da imagem, também foram propostos para caracterizar a forma,⁽¹⁶⁾ porém não foram adotados no presente trabalho, porque mostraram-se muito sensíveis à tortuosidade das bordas dos grãos e não tanto ao seu formato.

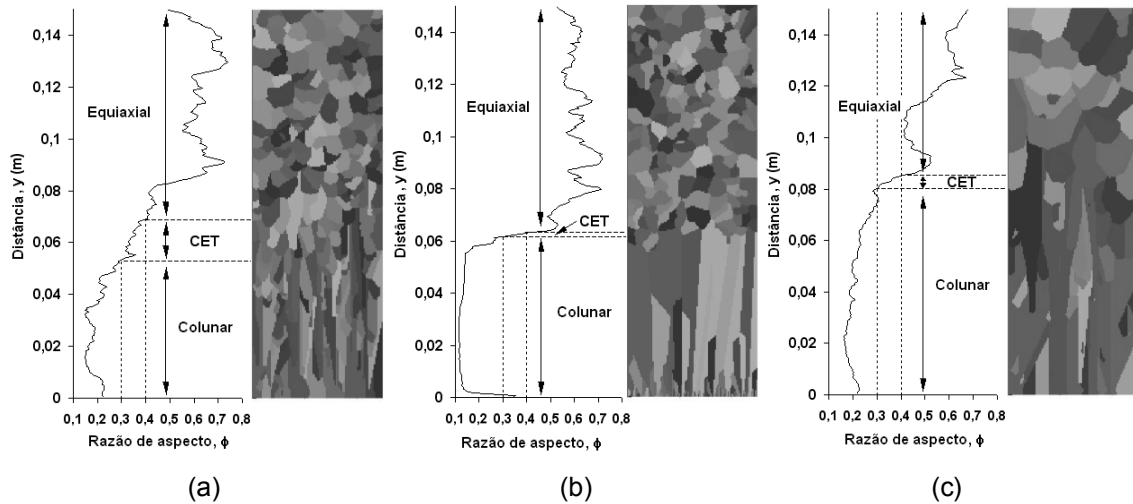


Figura 1 – Razão de aspecto de grãos, ϕ , para quatro tipos de macroestruturas calculadas, indicando as regiões colunar, equiaxial e a CET.

A razão de aspecto ϕ é determinada para cada grão na macroestrutura calculada e uma média deste valor é determinada na direção perpendicular ao fluxo de calor, possibilitando a construção de uma curva de ϕ em função de y . Curvas de ϕ obtidas para várias macroestruturas sugerem que: quando $\phi < 0,3$, os grãos são colunares; quando $\phi > 0,4$, os grãos são equiaxiais; e quando $0,3 < \phi < 0,4$, existe uma região de transição (CET) na qual os grãos não são completamente colunares nem completamente equiaxiais. Alguns exemplos de macroestruturas e suas curvas de razão de aspecto são apresentadas na Figura 1.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A solidificação unidirecional de uma liga Al-7 (wt%) foi simulada com os três modelos implementados no presente trabalho. Nas simulações, a fronteira superior do domínio ($y = 0,15$ m) foi assumida adiabática, enquanto na fronteira inferior ($y = 0$) considerou-se a saída de um fluxo de calor $q = h(T - T_\infty)$, onde h é o coeficiente de transferência de calor ($250 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$), e T_∞ é uma temperatura de referência (298 K). Uma temperatura uniforme (991 K) foi adotada por todo o domínio como condição inicial. No modelo estocástico, $\Delta T_N = 0$ para as partículas localizados nas células de CA adjacentes à base do domínio ($y = 0$), enquanto diferentes ΔT_N foram usados para as partículas do interior do domínio. As densidades de grãos para o interior do líquido, n_T , e para o líquido adjacente à fronteira inferior do domínio, $n_{T,B}$, foram convertidas para um domínio de cálculo bidimensional através de:⁽¹²⁾

$$n_T^{2D} = (n_T \sqrt{6/\pi})^{2/3} \quad \text{e} \quad n_{T,B}^{2D} = 2\sqrt{n_{T,B}/\pi}$$

As propriedades e parâmetros comuns às simulações foram: $\rho = 2452 \text{ kg m}^{-3}$; $C_0 = 7\%$; $c_p = 1126 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$; $k = 0,13$; $\kappa_l = 60.5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$; $m_l = 6 \text{ K \%Si}^{-1}$; $\kappa_s = 137.5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$; $T_L = 891 \text{ K}$; $L_f = 387 \times 10^3 \text{ J kg}^{-1}$; $T_E = 850 \text{ K}$; $\Gamma = 1.96 \times 10^{-7} \text{ m K}$; $T_f = 933 \text{ K}$; $D_l = 5.5 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$; $n_T = 3 \times 10^6 \text{ m}^{-2}$; $A = 3 \times 10^{-6} \text{ m s}^{-1} \text{ K}^m$; e $\lambda_l = 1.5 \text{ mm}$.

4.1 Efeitos do Super-resfriamento para Nucleação e do Número de Densidade de Substratos

A posição da CET foi obtida com os três modelos implementados em função do super-resfriamento para nucleação, ΔT_N , e do número de densidade de substratos para a nucleação heterogênea no interior do líquido, n_T . O efeito de ΔT_N na CET está mostrado na Figura 2(a). Para o modelo estocástico, a macroestrutura calculada e a região da CET obtida pela razão de aspecto dos grãos são apresentadas. Todos os modelos prevêem um aumento no tamanho da região colunar com um aumento em ΔT_N , resultando em uma estrutura completamente colunar para $\Delta T_N \gtrsim 4 K$. Este comportamento, também foi mostrado por Martorano et al.⁽⁵⁾ para o modelo MBG, também é observado nas macroestruturas calculadas pelo modelo estocástico. A região colunar prevista pelo modelo MBG é menor que aquela prevista com o modelo MHunt para uma fração de bloqueio de 0,49. Isto está em conformidade com os mapas de CET calculados por Martorano, Beckermann, e Gandin,⁽⁵⁾ os quais mostram que a CET do modelo MBG ocorre em gradientes de temperatura maiores, correspondendo a menores tempos para o bloqueio e menores regiões colunares em condições de solidificações unidirecionais transientes.

A CET para os modelos MBG e MHunt utilizando-se a fração tradicional de bloqueio de 0,49 (MHunt-0,49) mostra uma maior região colunar do que para o modelo estocástico. No entanto, quando a fração de bloqueio é reduzida para 0,2 (MHunt-0,2), o modelo MHunt adere muito bem às macroestruturas do modelo estocástico.

Na Figura 2(b), a CET calculada é apresentada em função da densidade total de substratos para nucleação, n_T . Novamente, o tamanho da região colunar para o modelo MBG é sempre menor que aquela para o MHunt-0,49 e o tamanho desta diferença aumenta para valores maiores de n_T .

Na Figura 2(b), novamente o tamanho da região colunar prevista com o modelo MHunt-0,49 é maior que aquele previsto com o modelo estocástico. No entanto, para todos os n_T , o MHunt-0,2 novamente apresenta uma boa concordância entre os tamanhos das regiões colunares. Esta excelente concordância para vários valores de n_T e ΔT_N mostra que o bloqueio que ocorre no modelo estocástico corresponde ao bloqueio mecânico previsto por uma fração de grãos equiaxiais de 0,2 no modelo determinístico, ao invés de 0,49 proposto por Hunt.⁽⁴⁾

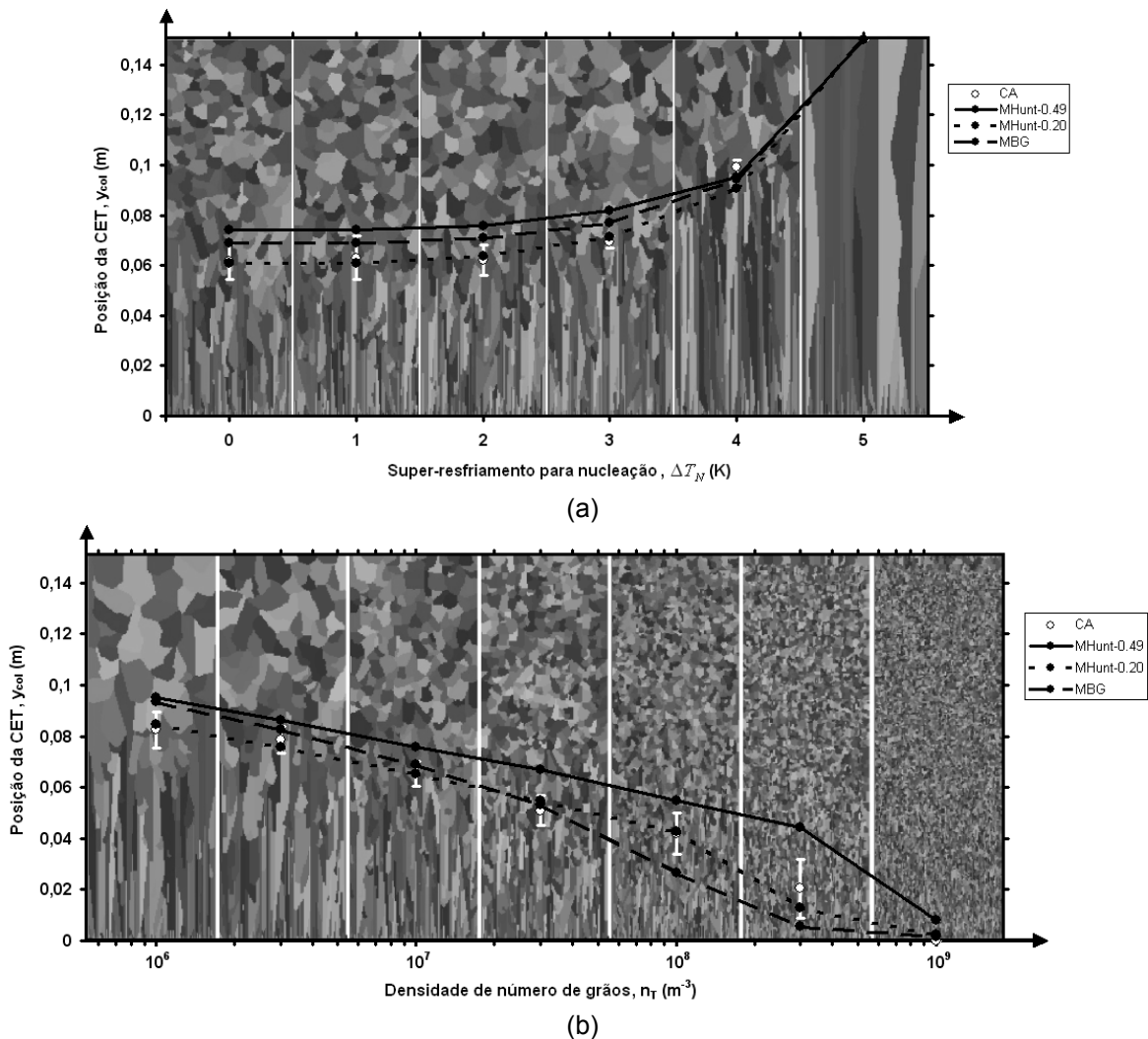


Figura 2 – Macroestruturas calculadas com o modelo estocástico (CA) em função de: (a) super-resfriamento para nucleação, ΔT_N , ($n_T = 5 \times 10^6 \text{ m}^{-3}$) e (b) densidade de número de grãos, n_T , ($\Delta T_N = 3\text{K}$). Também está mostrada a região da CET (obtida pela razão de aspecto) delimitada pelas barras de erro e a posição da CET calculada com os modelos MBG e MHunt para duas frações de bloqueio: 0,49 e 0,2.

4.2 Modelo Geométrico para o Bloqueio Mecânico da Frente Colunar

No modelo estocástico, a velocidade de crescimento dos grãos depende do super-resfriamento em relação à temperatura liquidus da concentração média da liga (C_0); desta forma, o bloqueio por soluto nunca ocorreria neste tipo de modelo. Portanto, o bloqueio da frente colunar deve ocorrer de acordo com o mecanismo de bloqueio mecânico, analogamente ao modelo MHunt. No entanto, as Figuras 2(a) e (b) mostraram que a fração tradicional de bloqueio mecânico igual a 0,49 (MHunt-0,49) resulta em regiões colunares que são maiores que aquelas previstas pelo modelo estocástico. Na Figura 3, propõe-se um simples modelo geométrico consistente com o bloqueio mecânico para o cálculo de uma nova fração de bloqueio da frente colunar. Como a frente colunar e os grãos equiaxiais próximos a esta frente possuem aproximadamente a mesma velocidade, esta é assumida igual a V . A frente colunar é bloqueada quando não puder percorrer uma distância R_g antes que dois grãos adjacentes se toquem. Isto ocorre quando

$$\frac{R_g}{V} > \frac{R_f - R_g}{V} \quad [13]$$

onde R_g é o raio instantâneo dos grãos equiaxiais quando estes encontram a frente colunar e R_f é metade da distancia média entre os centros dos grãos equiaxiais, calculada pela relação $\frac{R_g}{R_f} = \varepsilon_g^{1/3}$ para um domínio tridimensional. Substituindo-se esta relação na Eq. [13], obtém-se que a frente colunar seria bloqueada quando $\varepsilon_g > 0.125$. Esta fração de bloqueio esta em melhor concordância com a fração de 0,2 do que o valor 0,49 proposto por Hunt.⁽⁴⁾

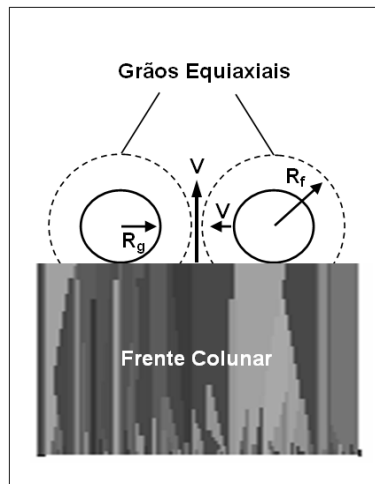


Figura 3 – Modelo geométrico do bloqueio mecânico para o modelo estocástico.

5 CONCLUSÕES

Dois modelos determinísticos e um estocástico foram implementados para investigar o bloqueio mecânico da frente colunar que resulta na transição colunar-equiaxial (CET) na solidificação unidirecional de uma liga Al-7%Si. Cada modelo determinístico é baseado em um tipo diferente de mecanismo de bloqueio da frente: o modelo MBG é baseado no bloqueio de soluto e o modelo modificado de Hunt⁽⁴⁾ (MHunt) no bloqueio mecânico. Um procedimento especial que considera a razão de aspecto dos grãos foi desenvolvido para determinar a posição da CET nas macroestruturas do modelo estocástico. As posições das CETs nas macroestruturas do modelo estocástico estão em uma região onde a razão de aspecto varia entre 0,3 e 0,4. O tamanho da zona colunar obtida com os modelos MBG e o MHunt para a fração de bloqueio $\varepsilon_g = 0.49$ (MHunt-0,49) é sempre maior que o previsto pelo modelo estocástico. No entanto, quando uma fração de bloqueio de $\varepsilon_g = 0.2$ é adotada no modelo MHunt, a concordância com o modelo estocástico é excelente, indicando que esta fração pode melhorar a previsão da CET através dos modelos determinísticos.

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 FLOOD, S.C.; HUNT, J.D. Columnar to equiaxed transition, ASM Handbook, v. 15, p. 130-136, 1966.
- 2 St JOHN, D.; HUTT, J. The origins of the equiaxed zone - Review of theoretical and experimental work. International Journal of Cast Metals Research, v. 11, p. 13-22, 1998.
- 3 HGUYEN-THI, H.; REINHART, G.; MANGELINCK-NOEL, N.; JUNG, H.; BILLIA, B.; SCHENK, T.; GASTALDI, J.; HARTWIG, J.; BARUCHEL, J. In-situ and real-time investigation of columnar-to-equiaxed transition in metallic alloy. Metallurgical and Materials Transactions A, v. 38A, p 1458-1464, 2007.
- 4 HUNT, J.D. Steady state columnar and equiaxed growth of dendrites and eutectic. Materials Science and Engineering, 65, p. 75-83, 1984.
- 5 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.
- 6 SPITTLE, J.A.; BROWN, S.G.R. A computer simulation of the influence of processing conditions on as-cast grain structures. Journal of Materials Science, v. 23, p. 1777-1781, 1989.
- 7 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.
- 8 RAPPAZ, M.; GANDIN, Ch.-A.; DESBIOLLES, J.-L. THÉVOZ, Ph. Prediction of grain structures in various solidification processes. Metallurgical and Materials Transactions A, v. 27A, p 695-705, 1996.
- 9 PATANKAR, S.V. Numerical heat transfer and fluid flow, Hemisphere Pub. Corp., New York, 1980.
- 10 KURZ, W.; FISHER, D.J. Fundamentals of solidification. Aedermannsdorf, Switzerland . Brookfield, Vt.: Trans Tech Publications; 1989.
- 11 GANDIN, Ch.-A.; RAPPAZ, M. A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes. Acta Metallurgica et Materialia, v. 42, no. 47, p. 2233-2246, 1994.
- 12 RAPPAZ, M.; GANDIN, Ch.-A. Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes, Acta Metallurgica et Materialia, no. 42, p 345-360, 1993.
- 13 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.
- 14 THÉVOZ, Ph.; DESBIOLLES, J.L.; RAPPAZ, M. Modeling of equiaxed microstructure formation in castion. Metallurgical Transactions A, v. 20A, p. 311-322, 1989.
- 15 LIPTON, J.; GLICKSMAN, M.E.; KURZ, W. Dendritic growth into undercooled alloy melts. Materials Science and Engineering, 65, p. 57-63, 1984.
- 16 ALLEN, T. Particle size measurement. London. Weinheim: Chapman & Hall; 1997.