

# MODELO HÍBRIDO DETERMINÍSTICO-ESTOCÁSTICO PARA PREVISÃO DA MACROESTRUTURA BRUTA DE SOLIDIFICAÇÃO SOB EFEITO DA DECANTAÇÃO DE GRÃOS<sup>1</sup>

*Pierre D'Amelio Briquet Caradec<sup>2</sup>*

*Marcelo de Aquino Martorano<sup>3</sup>*

## Resumo

Propõe-se um modelo matemático para prever a macroestrutura bruta de solidificação sob efeito da decantação de grãos. Combinou-se um modelo determinístico baseado nas equações de conservação de massa, energia e espécies químicas com a técnica do autômato celular para simular a nucleação, o crescimento a decantação de grãos no metal líquido. O modelo foi aplicado na solidificação de um grão isolado decantando em um líquido super-resfriado, mostrando um aumento de temperatura e da concentração de soluto em regiões inferiores devido à rejeição de calor latente e de soluto para o líquido externo durante a decantação. O modelo também foi aplicado na solidificação unidirecional ascendente ou descendente. Na solidificação ascendente, a decantação de grãos resulta em uma macroestrutura completamente de grãos colunares onde, sem o efeito de decantação, existiriam grãos colunares e equiaxiais. Na solidificação descendente, a zona colunar é bloqueada pela camada de grãos que sedimentaram na base do molde.

**Palavras-chave:** Solidificação; Autômato celular; Decantação; Modelo estocástico.

## HYBRID STOCHASTIC-DETERMINISTIC MODEL FOR THE PREDICTION OF THE AS CAST GRAIN STRUCTURE UNDER GRAIN SETTLING

### Abstract

A new mathematical model is proposed to predict the as-cast grain macrostructure subject to the effect of grain settling. This model was a combination of a deterministic model, based on equations of mass, energy, and chemical species conservation, and the cellular automaton technique to simulate the nucleation, growth and settling of grains within the liquid metal. The model was applied to the solidification of a single grain settling in an undercooled liquid and showed an increase in temperature and solute concentration in the lower regions as a result of the latent heat release and solute transfer from the grain envelopes to the liquid. The model was also applied to the upwards and downwards unidirectional solidification. In the upwards solidification, the settling of grains results in a completely columnar grain structure where, in the absence of settling, the model predicts both columnar and equiaxed grains. In the downwards solidification, the columnar grains growing downwards are blocked by the equiaxed grains that settle and grow upwards at the ingot base.

**Keywords:** Solidification; Cellular automaton; Settling; Stochastic model.

<sup>1</sup> *Contribuição técnica ao 66º Congresso Anual da ABM, 18 a 22 de julho de 2011, São Paulo, SP, Brasil.*

<sup>2</sup> *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.*

<sup>3</sup> *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

Diversos modelos matemáticos foram apresentados na literatura desde a década de 1960 com tentativas de prever a micro e macroestrutura bruta de solidificação. Modelos denominados determinísticos<sup>(1-3)</sup> utilizam um conjunto de equações diferenciais determinísticas, ou seja, sem variáveis estocásticas. Muitos destes modelos utilizam-se da técnica da média volumétrica para tratar variáveis médias e a mistura de fases na solidificação. Uma outra abordagem é utilizada pelos modelos chamados de estocásticos, que apresentam variáveis aleatórias em alguns de seus cálculos. Entre os modelos estocásticos, destacam-se os baseados em adaptações da técnica do autômato celular para a solidificação.<sup>(4-6)</sup> Neste tipo de modelo, as etapas de nucleação e crescimento são modeladas para cada grão e não de forma média, como nos modelos determinísticos. Como um de seus principais resultados, os modelos estocásticos apresentam uma imagem completa da macroestrutura de grãos. Extensões para considerar a decantação de grãos nestas abordagens (determinística ou estocástica) já foram propostas. Para a técnica do autômato celular (CA),<sup>(5)</sup> os modelos prevêem a macroestrutura de grãos, mas carecem de equacionamentos completos para a movimentação do sólido nas equações de conservação. Modelos determinísticos que consideram a movimentação de grãos<sup>(3,7,8)</sup> são vantajosos do ponto de vista computacional, mas não possuem um cálculo da macroestrutura de grãos eficiente como o fornecido pela técnica do autômato celular. O presente trabalho tem como objetivo a proposta de um modelo matemático para prever a macroestrutura de grãos bruta de solidificação a partir de uma combinação das vantagens dos modelos determinísticos e estocásticos.

## 2 METODOLOGIA

O presente modelo foi implementado em três partes: (a) algoritmo baseado na técnica do autômato celular para simular a nucleação, crescimento e translação dos grãos; (b) submodelo microscópico baseado nos princípios de conservação aplicado no interior de cada grão e (c) submodelo macroscópico baseado nos princípios de conservação aplicados em todo o domínio.

### 2.1 Equações de Conservação

O domínio do submodelo microscópico é definido como a região interna dos grãos, enquanto o do submodelo macroscópico consiste de toda a região contendo o metal (equivalente à cavidade de um molde de fundição) como seu domínio. A Figura 1 ilustra estes dois domínios. O submodelo microscópico, utilizando a técnica do autômato celular, simula fenômenos como a nucleação,<sup>(6)</sup> o crescimento<sup>(4)</sup> e a translação de grãos,<sup>(5)</sup> enquanto seu conjunto de equações diferenciais fornece a fração de sólido e a concentração de soluto internamente aos grãos. No submodelo macroscópico, por outro lado, calculam-se os campos de temperatura e de concentração de soluto no líquido extradendrítico.

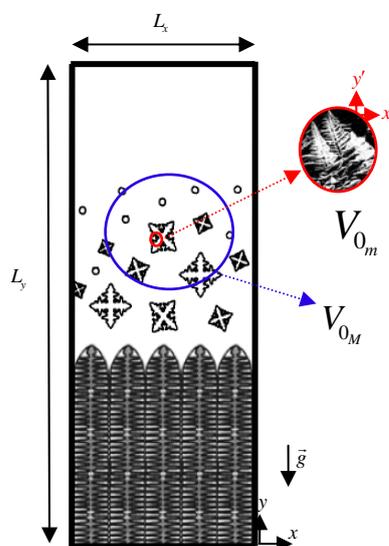
Cada um dos submodelos (microscópico e macroscópico) possui um conjunto de equações diferenciais específico, baseadas nos princípios de conservação de massa, energia e espécies químicas. Além disso, devido às escalas de tamanho dos fenômenos que são tratados em cada um dos submodelos serem diferentes, definiram-se dois volumes elementares representativos (VER) de tamanhos

diferentes para definir as variáveis médias:<sup>(9)</sup> um volume microscópico ( $V_{0_m}$ ) e um macroscópico ( $V_{0_M}$ ). As variáveis médias dos submodelos micro e macroscópicos são definidas respectivamente através das médias volumétricas apresentadas abaixo:

$$\langle \psi_k \rangle_m^k = \frac{1}{V_{k_m} V_{k_m}} \int \psi_k dV_k \quad [1]$$

$$\langle \psi_k \rangle_M^k = \frac{1}{V_{k_M} V_{k_M}} \int \psi_k dV_k \quad [2]$$

onde  $\langle \psi_k \rangle_m^k$  é a média intrínseca da grandeza  $\psi$  no VER microscópico e  $\langle \psi_k \rangle_M^k$  no VER macroscópico;  $V_{k_m}$  e  $V_{k_M}$  são os volumes da fase  $k$  nos VER micro e macroscópico respectivamente.



**Figura 1** – Definição dos domínios de cada modelo. O contorno do molde delimita o domínio do modelo macroscópico, e em azul é definido o seu volume representativo que contém um conjunto de grãos e líquido, enquanto os grãos ilustrados definem o domínio do submodelo microscópico, onde, destacado em vermelho, está um exemplo de seu volume representativo.

No desenvolvimento das equações de conservação para cada submodelo, foram utilizadas hipóteses gerais que se aplicam aos dois submodelos. Estas hipóteses são: (a) a liga metálica que solidifica é binária com eutético; (b) as densidades e calores específicos de todas as fases são iguais e constantes; (c) os grãos apresentam apenas o movimento de decantação; (d) a convecção natural do líquido é desprezada, porém aquela induzida pela decantação de grãos é considerada; (e) as velocidades médias de todas as pseudofases líquidas e sólidas nos dois submodelos apresentam direção paralela à da aceleração gravitacional; (f) o eutético apresenta velocidade igual à da fase primária; (g) não há difusão de soluto nas fases sólidas e eutético; (h) a fase líquida extradendrítica não tem área de contato com as fases sólidas; (i) despreza-se a difusão de soluto macroscópica; (j) existe equilíbrio termodinâmico local na interface sólido-líquido. As equações do submodelo microscópico obtidas por este conjunto de hipóteses são:

$$\varepsilon_d \langle v'_d \rangle^d = - \frac{\kappa_v \langle v_s \rangle_M^s}{\varepsilon_{g_M}} \quad [3]$$

$$\rho C_p \left[ \frac{\partial T}{\partial t} + \varepsilon_d \langle v'_d \rangle^d \frac{\partial \langle T \rangle_M}{\partial y} \right] = L_f (\Gamma_s + \Gamma_e) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \bar{K} \frac{\partial \langle T \rangle_M}{\partial y} \right) \quad [4]$$

$$\frac{\partial (\varepsilon_d \langle C_d \rangle^d)}{\partial t} + \varepsilon_d \langle v'_d \rangle^d \frac{\partial \langle C_d \rangle^d}{\partial y} = \bar{\nabla} \cdot (\varepsilon_d D_d \bar{\nabla} \langle C_d \rangle^d) - \frac{k \langle C_d \rangle^d}{\rho} \Gamma_s - \frac{C_e}{\rho} \Gamma_e \quad [5]$$

$$T = T_f + m_l \langle C_d \rangle^d$$

$$\frac{\partial \varepsilon_d}{\partial t} = - \frac{1}{\rho} (\Gamma_s + \Gamma_e) \quad \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \Gamma_s \quad \frac{\partial \varepsilon_e}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \Gamma_e \quad [6]$$

onde  $\langle v'_d \rangle^d$  é a velocidade do líquido interdendrítico relativa ao referencial do grão;  $\kappa_v$  é o coeficiente de partição de escoamento <sup>(10)</sup>;  $\langle v_s \rangle_M^s$  é a velocidade média das fases sólidas no VER macroscópico,  $\varepsilon_{g_M}$  é a fração de grão no VER macroscópico;  $\langle T \rangle_M$  é a temperatura do VER macroscópico,  $T$  é a temperatura dentro do grão,  $\Gamma_s$  e  $\Gamma_e$  são as taxas de transformação de fase de sólido primário e eutético respectivamente,  $L_f$  é o calor latente de fusão;  $\bar{K}$  é a condutividade térmica média das fases;  $\varepsilon_d$  é a fração de líquido interdendrítico dentro do REV microscópico;  $\langle C_d \rangle^d$  é a concentração de soluto na fase líquida interdendrítica;  $D_d$  o coeficiente de difusão na fase líquida interdendrítica;  $k$  o coeficiente de partição;  $T_f$  é a temperatura de fusão do metal puro;  $m_l$  a e inclinação da curva *liquidus* do diagrama de fases;  $C_e$  é a concentração eutética dada pelo diagrama de equilíbrio;  $\varepsilon_s$  e  $\varepsilon_e$  são as frações das fases sólidas primária e eutética respectivamente.

Para o submodelo macroscópico, as seguintes equações foram obtidas:

$$\rho C_p \frac{\partial \langle T \rangle_M}{\partial t} = L_f (\Gamma_{s_M} + \Gamma_{e_M}) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \bar{K} \frac{\partial \langle T \rangle_M}{\partial y} \right) \quad [7]$$

$$\varepsilon_{l_M} \frac{\partial \langle C_l \rangle_M^l}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} (\varepsilon_{l_M} \langle C_l \rangle_M^l \langle v_l \rangle_M^l) = \frac{1}{V_{0_M} A_{id}} \int \langle C_d \rangle^d \left( \frac{\kappa_v \langle \bar{v}_s \rangle_M^s}{(1 - \varepsilon_{l_M})} - \bar{v}_s \right) \cdot \bar{n}_l dA + \frac{1}{V_{0_M} A_{id}} \int (\langle C_d \rangle^d - \langle C_l \rangle_M^l) \left( \bar{w}'_g + \bar{v}_s + \frac{D_l}{\delta_{ld}} \bar{n}_l \right) \cdot \bar{n}_l dA \quad [8]$$

$$\frac{\partial}{\partial y} (\varepsilon_{l_M} \langle v_l \rangle_M^l) = \frac{1}{V_{0_M} A_{id}} \int \frac{\kappa_v \langle \bar{v}_s \rangle_M^s}{(1 - \varepsilon_{l_M})} \cdot \bar{n}_l dA \quad [9]$$

$$\frac{\partial \varepsilon_{s_M}}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \Gamma_{s_M} \quad \frac{\partial \varepsilon_{e_M}}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \Gamma_{e_M} \quad [10]$$

onde  $\Gamma_{s_M}$  e  $\Gamma_{e_M}$  são as taxas de transformação das fases sólido primário e eutético, respectivamente;  $\langle v_l \rangle_M^l$  é a velocidade média da fase líquida extradendrítica na direção vertical,  $\varepsilon_{l_M}$  é a fração de fase líquida extradendrítica,  $\bar{v}_s$  é a velocidade do grão,  $\bar{n}_l$  é o versor normal à interface  $A_{id}$ , orientado para dentro do grão;  $\langle C_l \rangle_M^l$  é a concentração de soluto na fase líquida extradendrítica;  $\bar{w}'_g$  é a velocidade de

crescimento da interface dos grãos;  $\bar{v}_s$  é a velocidade de translação da interface dos grãos;  $D_l$  é o coeficiente de difusão da fase líquida extradendrítica,  $\delta_{ld}$  é a espessura efetiva de difusão para o líquido extradendrítico na interface dos grãos;  $\varepsilon_{sM}$  e  $\varepsilon_{sM}$  são as frações das pseudofases sólida primária e eutética para o submodelo macroscópico respectivamente.

## 2.2 Nucleação Contínua

Assume-se que a nucleação de um novo grão ocorre heterogeneamente sobre uma partícula de substrato, cada um apresentando um super-resfriamento crítico distinto. Considera-se que a população de super-resfriamentos críticos associados a estes substratos obedece a uma distribuição gaussiana (normal). Duas distribuições gaussianas de super-resfriamento são definidas: uma para os substratos distribuídos na parede interna do molde e outra para os substratos distribuídos no interior do líquido. A equação que define a distribuição de super-resfriamentos para nucleação entre os substratos é dada abaixo:

$$\frac{dn}{d(\Delta T)} = \left( \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi\Delta T_\sigma}} \right) \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\Delta T - \overline{\Delta T_N}}{\Delta T_\sigma} \right)^2 \right] \quad [11]$$

onde  $n$  é densidade de núcleos,  $\Delta T$  é o super-resfriamento,  $n_{\max}$  é a densidade máxima de número de núcleos, ou seja, a densidade de partículas de substratos sobre as quais a nucleação pode ocorrer,  $\overline{\Delta T_N}$  é o super-resfriamento médio da distribuição e  $\Delta T_\sigma$  é o seu desvio-padrão. Por se tratar de um modelo bi-dimensional, é necessário converter as densidades indicadas na distribuição para serem utilizadas no presente modelo. Esta conversão estereológica é indicada abaixo:<sup>(6)</sup>

$$n_s^* = \frac{\pi}{4} (n_L)^2 \quad n_v^* = \sqrt{\frac{\pi}{6}} (n_L)^{3/2} \quad [12]$$

onde  $n_L$  é a quantidade de substratos por unidade de comprimento da borda do domínio;  $n_s^*$  é a quantidade de substratos por unidade de superfície do molde;  $n_A$  é a quantidade de substratos por unidade de área do domínio e  $n_v^*$  é a quantidade de substratos por unidade de volume.

## 2.3 Cinética de Crescimento

A velocidade de crescimento de um grão é calculada pela seguinte equação:

$$|\vec{w}'_g| = \frac{D_l (k-1) (\langle T \rangle_M - T_f)}{\pi^2 \Gamma} \left[ 0,4567 \left( \frac{\Omega_C}{1-\Omega_C} \right)^{1,195} \right]^2 \quad [13]$$

onde  $D_l$  é a difusividade de soluto no líquido;  $k$  é coeficiente de partição de soluto;  $\Gamma$  é o coeficiente de Gibbs-Thompson; e  $\Omega_c$  é um super-resfriamento adimensional de soluto dado por:

$$\Omega_c = \frac{(\langle T \rangle_M - T_{liq})}{(\langle T \rangle_M - T_f)(1-k)} \quad [14]$$

onde  $T_{liq}$  é a temperatura *liquidus* para a concentração  $C_0$ .

## 2.4 Técnica do Autômato Celular

No submodelo microscópico utiliza-se a técnica do autômato celular (CA) para simular a nucleação, o crescimento e a decantação dos grãos. Na técnica do CA, o domínio é dividido em uma malha de células quadradas de lado  $\Delta x_{CA}$  que podem apresentar três estados: ativa, inativa ou líquida. Cada célula ativa contém uma mistura entre sólido e líquido interdendrítico, e possui um polígono de crescimento definido como um quadrilátero de diagonais ortogonais conforme foi apresentado em Guillemot, Gandin e Combeau.<sup>(5)</sup> Na célula ativa, armazena-se um polígono de crescimento que, ao atingir o centro de células líquidas vizinhas, as ativam. Estas células ativas se tornam novamente inativas quando todas as células vizinhas mais próximas estiverem ativas ou tiverem sido ativadas em algum momento, não havendo mais crescimento de seus polígonos.

Uma célula líquida pode conter apenas líquido, ou pode conter também um substrato para nucleação heterogênea de um novo grão. Cada célula líquida que contém uma partícula de substrato para nucleação torna-se uma célula ativa originando um novo grão através do processo de nucleação.

## 2.5 Algoritmo de Translação

Se o grão ou aglomerado de grãos (*cluster*) não está fixado na borda do domínio, sua velocidade de decantação será assumida igual à velocidade terminal de decantação. A densidade do aglomerado é calculada por:

$$\rho_c = \varepsilon_{s,c} \rho_s + (1 - \varepsilon_{s,c}) \rho_l \quad [15]$$

onde  $\rho_c$  é a densidade média do grão ou "cluster",  $\rho_s$  e  $\rho_l$  são as densidades da fase sólida e líquida respectivamente e  $\varepsilon_{s,c}$  é a fração de sólido média do cluster calculada por:

$$\varepsilon_{s,c} = \frac{1}{N_c} \sum_{N_c} \varepsilon_s \quad [16]$$

onde  $N_c$  é o número de células do CA que compõem o grão ou *cluster*, e  $\varepsilon_s$  a fração de sólido interna de cada uma destas células. A sua velocidade de decantação é calculada através do modelo de Haider e Levenspiel,<sup>(11)</sup> onde o efeito da forma do corpo é considerado no coeficiente de arraste. Para obter a velocidade terminal, utiliza-se a equação:

$$u_* = \left[ \left( \frac{18}{d_*^2} \right)^{K_2} + \left( \frac{2K_1}{4d_*^{0.5}} \right)^{K_2} \right]^{-1/K_1} \quad [17]$$

onde  $K_1$  e  $K_2$  são parâmetros que dependem do formato do corpo em decantação, que para este modelo têm valores de 1,1272 e 0,9677 respectivamente;  $u_*$  e  $d_*$  são adimensionais calculados por:

$$v_* = |\vec{v}_s| \left[ \frac{\rho_l^2}{|\vec{g}| \mu_l (\rho_c - \rho_l)} \right]^{1/3} \quad [18]$$

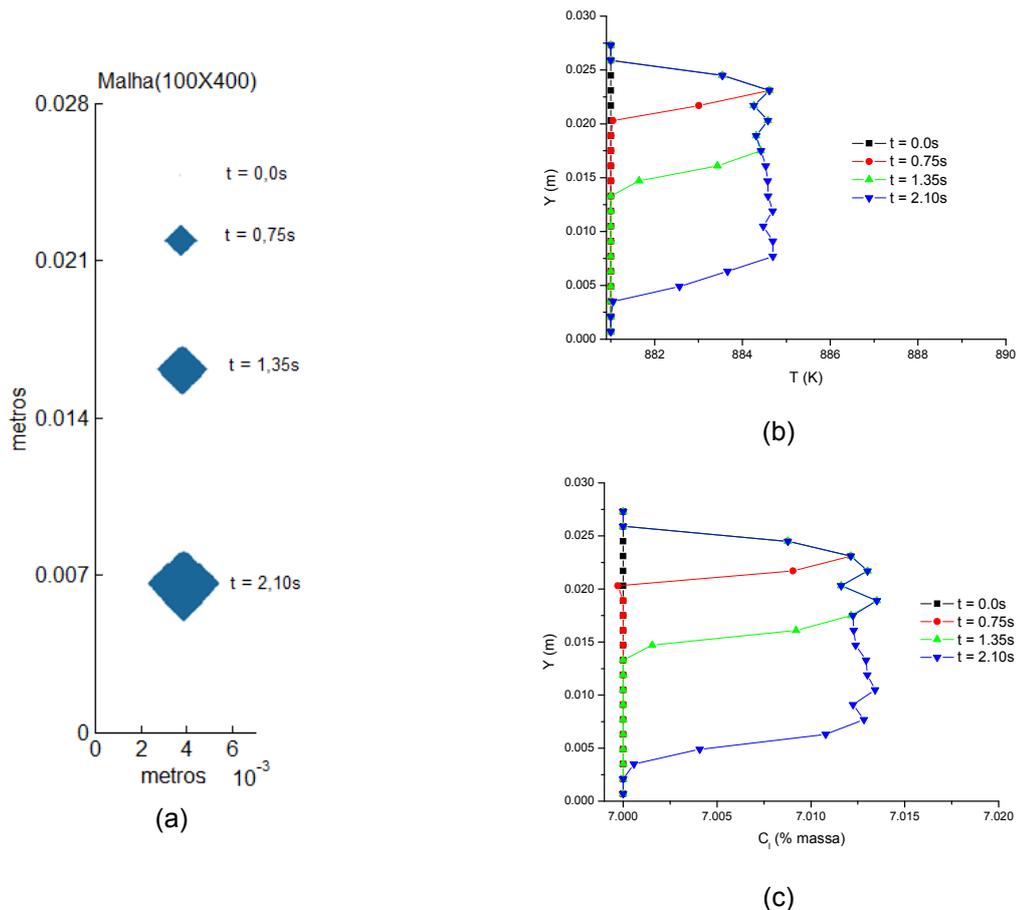
$$d_* = d_g \left[ \frac{|\vec{g}| \rho_l (\rho_c - \rho_l)}{\mu_l^2} \right]^{1/3} \quad [19]$$

onde  $\vec{v}_s$  é a velocidade terminal;  $\vec{g}$  é o vetor gravidade e  $\mu_l$  é a viscosidade.

### 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

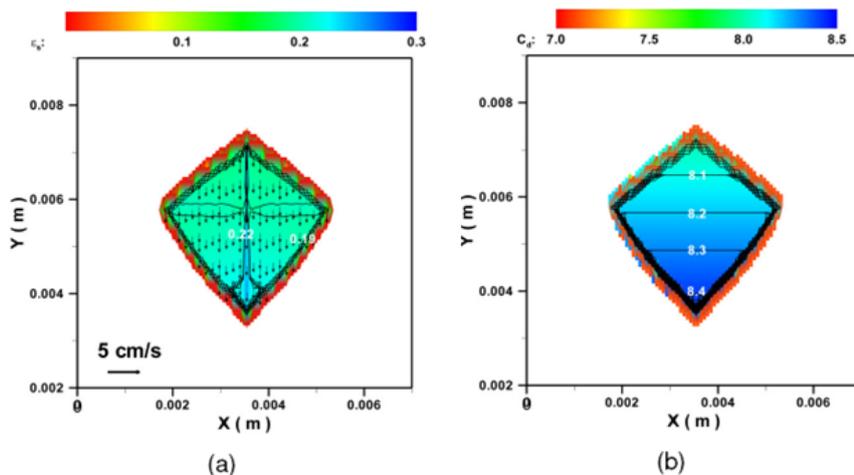
#### 3.1 Decantação de um Grão Dendrítico em Líquido Super-resfriado

Resultados da simulação de decantação de um grão dendrítico estão mostrados neste item. Um grão dendrítico com formato de losango de lado muito pequeno (70  $\mu\text{m}$ ) da liga Al-7%Si foi posicionado no topo do domínio, que está preenchido com líquido a uma temperatura uniforme de 881 K, representando um super-resfriamento de 10 K abaixo da linha *liquidus*. Durante a queda no líquido super-resfriado, este grão também apresenta crescimento, libera calor latente e troca soluto com o líquido ao redor. A malha microscópica utilizada para esta simulação foi de 100x400 e a macroscópica foi de 1x4 e os parâmetros para a liga Al-7%Si nesta simulação foram:  $C_0 = 7\%$ ;  $\rho_s = 2452,0 \text{ kg m}^{-3}$ ;  $\rho_l = 2370,0 \text{ kg m}^{-3}$ ;  $T_{liq} = 891,0 \text{ K}$ ;  $T_f = 933,0 \text{ K}$ ;  $T_e = 850,0 \text{ K}$ ;  $L_f = 387,4 \times 10^3 \text{ J kg}^{-1}$ ;  $C_p = 1126,0 \text{ J K}^{-1} \text{ kg}^{-1}$ ;  $m_l = -6,5 \text{ K (\% peso)}^{-1}$ ;  $k = 0,13$ ;  $D_l = D_d = 6,45 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ;  $K_s = 137,5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ;  $K_l = 60,5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ;  $\mu_l = 0,001 \text{ Pa s}$ ;  $\Gamma = 1,96 \times 10^{-7} \text{ m K}$ ;  $\lambda_2 = 10^{-5} \text{ m}$ .<sup>(10)</sup> A Figura 2 mostra a macroestrutura calculada pelo modelo em três instantes de tempo diferentes e seus respectivos perfis de temperatura e concentração de soluto na fase líquida extradendrítica.



**Figura 2** – (a) Macroestrutura de um grão dendrítico decantando em um líquido super-resfriado em 10 K em relação a temperatura *liquidus* em diferentes instantes e o perfil de temperatura (b) e concentração de soluto na fase líquida extradendrítica (c) para os instantes das macroestruturas.

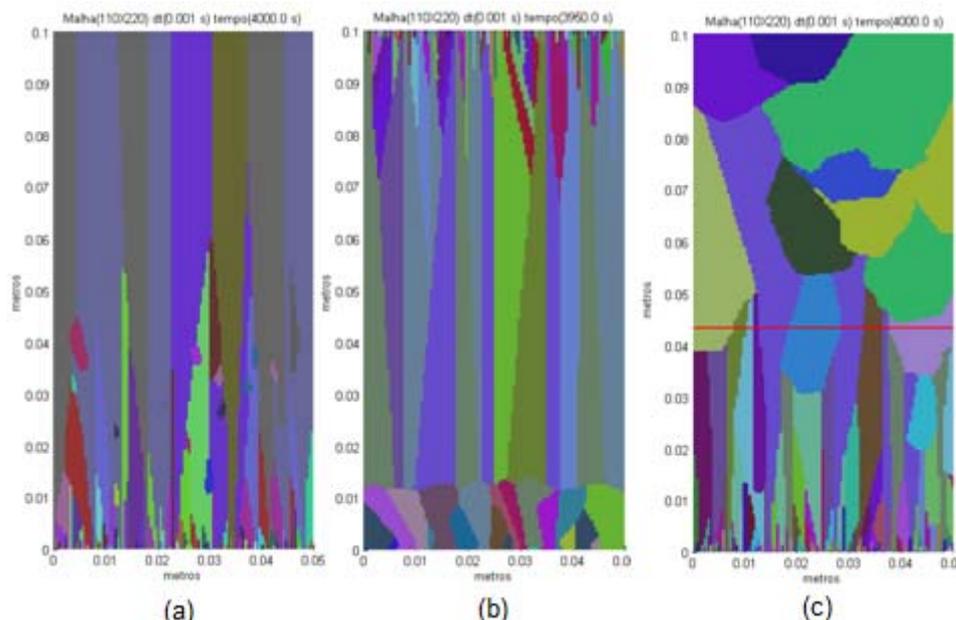
Este resultado do modelo mostra um envelope dendrítico em queda durante um intervalo de aproximadamente 2 segundos. Observa-se claramente o crescimento do envelope que apresentava um formato inicial de losango, que se tornou assimétrico durante a queda devido ao crescimento um pouco mais acentuado da região inferior. Este efeito pode ser entendido com o auxílio dos perfis de temperatura, apresentados na Figura 2 para diferentes instantes de tempo. Inicialmente, o líquido apresenta temperatura uniforme, mas à medida que o grão decanta, a temperatura aumenta com o aumento da quantidade de sólido. Esta solidificação do grão resulta na liberação de calor latente, o que eleva a temperatura local do líquido. Na Figura 3, são ilustrados os cálculos de fração de sólido, velocidade do líquido interdendrítico e concentração de soluto dentro do grão em decantação, que é maior nas regiões inferiores com maior super-resfriamento.



**Figura 3** – Campos internos ao grão dendrítico em decantação apresentado na Figura 2 para o instante de tempo 2,1s: (a) campo de fração de sólido e velocidade do líquido interdendrítico; (b) campo de concentração do líquido interdendrítico.

### 3.2 Solidificação Unidirecional Ascendente e Descendente

A solidificação unidirecional ascendente e descendente da liga Al-3%Cu também foram simuladas. As macroestruturas de grãos fornecidas pelo modelo estão apresentadas na Figura 4.



**Figura 4** – Macroestrutura de grãos calculada para a solidificação unidirecional da liga Al-3%Cu: (a) considerando o efeito de decantação de grãos no caso ascendente; (b) no caso descendente; (c) e sem efeito de decantação dos grãos. A linha vermelha horizontal é a posição da transição colunar-equiaxial prevista pelo modelo de Wang e Beckermann<sup>(2)</sup> para o caso sem decantação.

A malha microscópica foi de 110x220 e a macroscópica foi de 1x20 volumes finitos. Os parâmetros para a liga Al-3%Cu e para o modelo foram semelhantes aos utilizados no trabalho de Wang e Beckermann,<sup>(2)</sup> sendo estes:  $C_0 = 5\%$ ;  $\rho_s = 2633,2 \text{ kg m}^{-3}$ ;  $\rho_l = 2370,0 \text{ kg m}^{-3}$ ;  $T_{liq} = 922,89 \text{ K}$ ;  $T_f = 933,0 \text{ K}$ ;  $T_e = 821,0 \text{ K}$ ;  $L_f = 382,0 \times 10^3 \text{ J kg}^{-1}$ ;  $C_p = 1291,2 \text{ J K}^{-1} \text{ kg}^{-1}$ ;  $m_l = -3,37 \text{ K (\% peso)}^{-1}$ ;  $k = 0,17$ ;

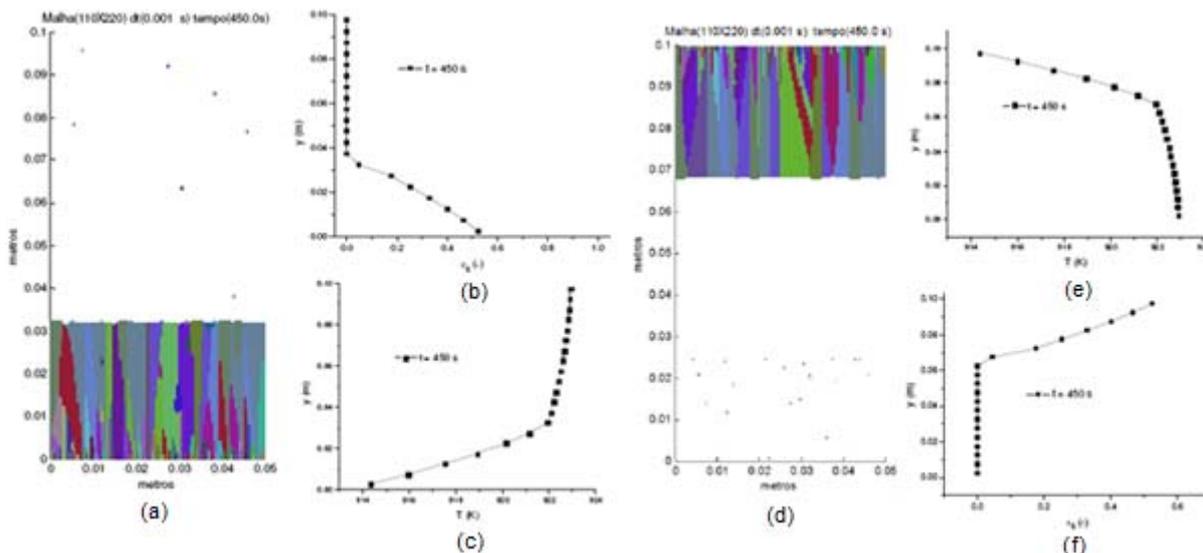
$$D_l = D_d = 5,0 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}; \quad K_s = 153,0 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}; \quad K_l = 77,0 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1};$$

$$\mu_l = 0,001 \text{ Pa s}; \Gamma = 9,8 \times 10^{-8} \text{ m K}; \quad \lambda_2 = 10^{-5} \text{ m}; \quad L_x = 0,05 \text{ m}; \quad L_y = 0,1 \text{ m};$$

$$h = 65,0 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}; T_0 = 942,89 \text{ K}; n_A^* = 3,0 \times 10^6 \text{ m}^{-2}; n_V^* = 10^5 \text{ m}^{-3}.$$

Para o caso de solidificação ascendente (Figura 4a), se observam apenas grãos colunares que cresceram a partir da base e atingiram o topo, passando pelo bem conhecido período de competição entre grãos. Não há transição colunar-equiaxial (CET). No caso da solidificação descendente (Figura 4b), há uma disputa entre a velocidade de crescimento colunar e a velocidade de decantação dos grãos equiaxiais para haver a formação de CET. Com os parâmetros utilizados, os grãos equiaxiais se depositaram na base do molde antes que a zona colunar os “capturasse”, formando assim duas zonas colunares distintas: Outra simulação foi conduzida eliminando-se a decantação dos grãos e a convecção do líquido, resultando na macroestrutura apresentada na Figura 4c. A linha horizontal vermelha traçada na Figura 4c mostra a posição da transição colunar-equiaxial calculada por Wang e Beckermann<sup>(2)</sup> através de um modelo completamente determinístico, onde não foi considerada a decantação dos grãos. Nota-se também que o modelo implementado no presente trabalho, sem considerar a decantação de grãos, forneceu um resultado muito semelhante ao resultado experimental destes autores para a posição da CET.

Na Figura 5, estão apresentadas as macroestruturas calculadas pelo modelo (considerando a decantação) no instante  $t = 450,0\text{s}$  no caso de solidificação ascendente (Figura 5a) e solidificação descendente (Figura 5d).



**Figura 5** – (a) Macroestrutura de grãos calculada para a solidificação unidirecional ascendente da liga Al-3%Cu no instante  $t = 450,0\text{s}$  considerando o efeito de decantação de grãos e (d) para o caso descendente. Os perfis de temperatura (b) e (e), fração de sólido (c) e (f) para os casos ascendente e descendente respectivamente.

Nos itens (b), (c), (e) e (f) da Figura 5, são apresentados os perfis de temperatura e fração de sólido correspondentes à macroestrutura da Figura 5a e Figura 5d. Uma mudança brusca de temperatura e fração de sólido ocorre exatamente na posição onde está a frente de crescimento colunar, como esperado.

Na Figura 5a, observam-se os grãos colunares crescendo e diversos pequenos grãos equiaxiais decantando ao seu encontro. Estes grãos equiaxiais atingirão a frente colunar com tamanho insuficiente para o seu bloqueio, não formando a CET conforme visto na Figura 4a. Na Figura 5d, são encontrados grãos decantando sobre a base do molde. Estes grãos formarão a camada de grãos do contorno inferior mostrada na Figura 4b. Mesmo que a superfície de extração de calor seja diferente para ambos os casos, os perfis de Figura 5 são semelhantes, apenas diferindo quanto à sua orientação no eixo vertical.

### 3.3 Efeito da Distribuição de Super-resfriamentos

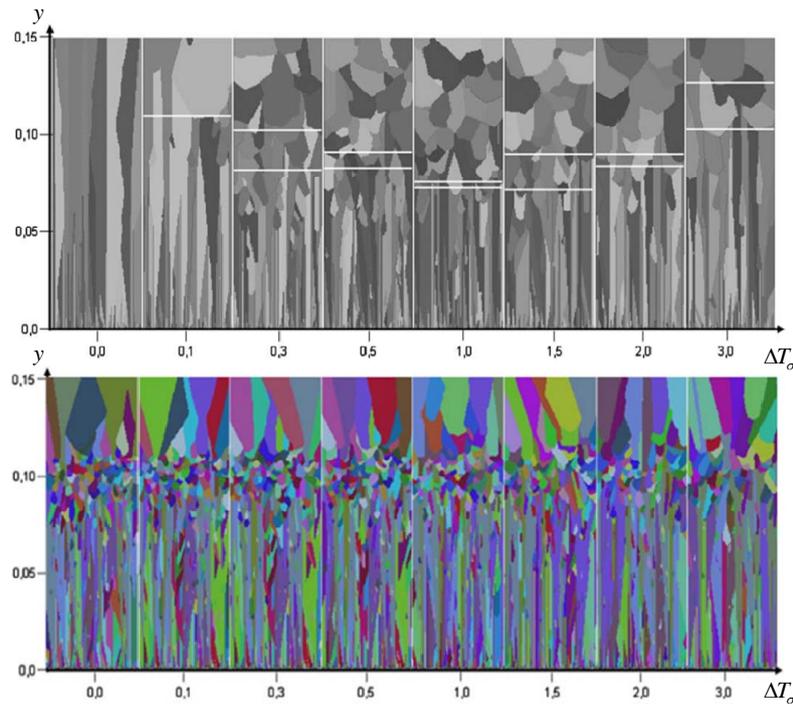
O presente modelo possibilita a utilização de uma distribuição normal de super-resfriamentos para a nucleação de grãos. Para avaliar o efeito dos diferentes parâmetros da distribuição em conjunto com a decantação, foi realizada uma comparação com as simulações descritas por Martorano e Biscuola,<sup>(12)</sup> que não consideraram o efeito de decantação. Os parâmetros foram: super-resfriamento médio  $\overline{\Delta T_N} = 2,0$  K e  $\overline{\Delta T_N} = 5,0$  K, com desvio-padrão  $\Delta T_\sigma$  variando entre 0,0 K e 3,0 K. A malha de CA foi de 100x300 e de volumes finitos macroscópicos de 1x30. Os parâmetros para a liga Al-7%Si estão descritas no item 3.1, e específicos para esta simulação foram:  $L_x = 0,05$  m;  $L_y = 0,15$  m;  $h = 250,0$  W m<sup>-2</sup>K<sup>-1</sup>;  $T_0 = 991,0$  K;  $n_A^* = 3,0 \times 10^6$  m<sup>-2</sup>;  $n_V^* = 5,0 \times 10^6$  m<sup>-3</sup>.

Foi utilizada a equação abaixo para o cálculo da velocidade do crescimento dendrítico também utilizada por Martorano e Biscuola:<sup>(12)</sup>

$$|\vec{w}'_g| = A_{C_0} \Delta T^m \quad [20]$$

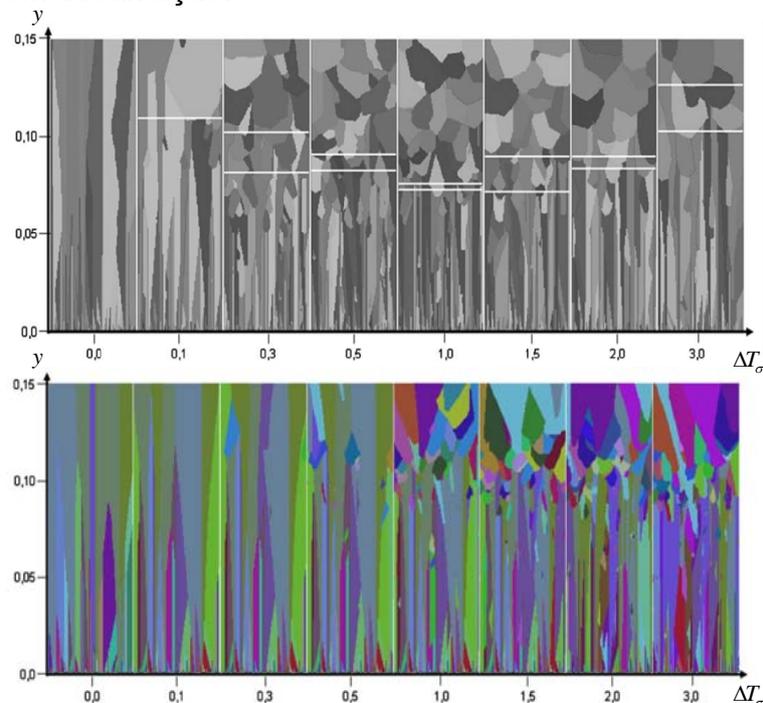
com  $A_{C_0} = 3 \times 10^{-6}$  m s<sup>-1</sup>K<sup>-2,7</sup> e  $m = 2,7$  para a liga Al-7%Si.

Para a distribuição normal com  $\overline{\Delta T_N} = 2,0$  K, as macroestruturas calculadas pelo modelo (Figura 6) apresentaram posição da CET constante com a variação da largura da distribuição ( $\Delta T_\sigma$ ), enquanto que, no modelo sem decantação<sup>(12)</sup> houve variação da posição da CET, implicando que a decantação diminui o efeito da largura da distribuição de super-resfriamentos.



**Figura 6** – Macroestruturas fornecidas no trabalho de Martorano e Bisciola<sup>(12)</sup> (seqüência acima) e as calculadas pelo modelo (seqüência abaixo) para  $\overline{\Delta T_N} = 2\text{K}$ , com  $\Delta T_\sigma$  entre 0,0 K e 3,0 K.

Para a distribuição normal com  $\overline{\Delta T_N} = 5,0\text{ K}$ , no trabalho de Martorano e Bisciola<sup>(12)</sup> há CET logo para o caso de  $\Delta T_\sigma$  próximo de 0,1, enquanto que, para o presente modelo, só há uma zona equiaxial distinta a partir do desvio-padrão com valor de 1,0 K (Figura 7). Para o valor de desvio-padrão igual a 3,0 K, a posição da CET calculada pelo modelo com decantação está abaixo da posição calculada pelo modelo de CA sem decantação.



**Figura 7** – Macroestruturas fornecidas no trabalho de Martorano e Bisciola<sup>(12)</sup> (seqüência acima) e as calculadas pelo modelo (seqüência abaixo) para  $\overline{\Delta T_N} = 5\text{K}$ , com  $\Delta T_\sigma$  entre 0,0 K e 3,0 K.

## 4 CONCLUSÕES

Os resultados obtidos no presente trabalho possibilitaram a formulação das seguintes conclusões:

- As macroestruturas obtidas pelo modelo aplicado à solidificação unidirecional nas condições simuladas diferem significativamente dos resultados obtidos pelo modelo determinístico quando a decantação de grãos é considerada.
- Na simulação da solidificação unidirecional ascendente, o presente modelo mostra em determinadas condições que os grãos equiaxiais que decantam não atingem tamanho suficiente para bloquear o crescimento colunar e causar a transição colunar-equiaxial, resultando em uma macroestrutura composta apenas de grãos colunares. Entretanto, quando a decantação não é simulada, a macroestrutura calculada apresenta a transição colunar-equiaxial em uma posição próxima à apresentada pelo modelo determinístico.
- Na simulação da solidificação unidirecional descendente, observam-se grãos equiaxiais que sedimentam na base do molde sem bloquear a zona colunar. Este depósito de grãos gera uma nova zona colunar na região inferior que se encontra com os grãos colunares que crescem a partir do contorno superior.
- O modelo matemático mostrou que a decantação de grãos altera o efeito da largura da distribuição de super-resfriamentos de nucleação na posição da transição colunar-equiaxial. Em determinadas condições de solidificação, o efeito da largura da distribuição foi completamente eliminado quando se considera a decantação de grãos.

## Agradecimentos

Os autores agradecem 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 WANG, C.Y.; BECKERMANN, C..A Multiphase Solute Diffusion Model for Dendritic Alloy Solidification..Metallurgical Transactions A, v. 24A, p. 2787-2802, 1993.
- 2 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.
- 3 WANG, C.Y.; BECKERMANN, C. Equiaxed Dendritic Solidification with Convection. Metallurgical and Materials Transactions A. v. 27A, p. 2754, 1996.
- 4 GANDIN, Ch.-A; RAPPAZ, M. A Coupled Finite Element-Cellular Automaton Model for the Prediction of Dendritic Grain Structures in Solidification Processes. Acta Metallurgica, v. 42, p. 2233-46, 1994.
- 5 GUILLEMOT, G.; GANDIN, Ch-A.; COMBEAU, H. Modeling of Macrosegregation and Solidification Grain Structures with a Coupled Cellular Automaton-Finite Element Model. ISIJ Internacional, v. 46, p.880-895, 2006.
- 6 RAPPAZ, M., GANDIN, Ch.-A.; Probabilistic Modelling of Microstructure Formation in Solidification Processes. Acta Metallurgica, v. 41, p. 345-60, 1993.
- 7 WU, M. LUDWIG, A. Modelling Equiaxed Solidification with Melt Convection and Grain Sedimentation I: Model Description. Acta Materialia, v. 57, n. 19, p. 5621-5631, 2009.



- 8 COMBEAU, H.; ZALOZNIK, M.; HANS, S.; RICKY, P.E. Prediction of Macrosegregation in Steel Ingots: Influence of the Motion and the Morphology of Equiaxed Grains. Metallurgical and Materials Transaction B – Process Metallurgy and Materials Processing Science, v. 40, n. 3, p. 289-304, 2009.
- 9 WHITAKER, S. Advanced in Theory of Fluid Flow Motion in Porous Media. Industrial and Engineering Chemistry, v. 61, n. 12, 1969.
- 10 WANG, C.Y.; AHUJA, S.; BECKERMANN, C.; DE GROH III, H.C. Multiparticle Interfacial Drag in Equiaxed Solidification. Metallurgical and Materials Transactions B, v. 26, n. 1, p. 111-119, 1995.
- 11 HAIDER, A.; LEVENSPIEL, O. Drag Coefficient and Terminal Velocity of Spherical and Nonspherical Particles. Powder Technology, v.58, p.63-70, 1989.
- 12 MARTORANO, M.A.; BISCUOLA, V.B. Predicting the Columnar-to-Equiaxed Transition for a Distribution of Nucleation Undercoolings. Acta Materialia, v. 57, pp. 607-615, 2009.