

# MODELO MATEMÁTICO PARA A FORMAÇÃO 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**

Foi implementado e analisado um modelo matemático estocástico bidimensional para prever a formação de macroestruturas brutas de solidificação sob o efeito da decantação de grãos. Este modelo é baseado na técnica do autômato celular para simular a solidificação de ligas. Para considerar a decantação dos grãos, o modelo desenvolvido contém: um algoritmo para a translação de grãos; o cálculo do crescimento dendrítico considerando a convecção ao redor do grão e o cálculo da velocidade de decantação dos grãos. Os resultados deste modelo foram comparados com dados experimentais envolvendo o crescimento e a decantação simultâneos de um único grão isolado e imerso em líquido super-resfriado. O modelo foi ainda utilizado para analisar o efeito da decantação em macroestruturas de grãos. Nestas macroestruturas, foram observados grãos equiaxiais menores depositados na base. Além disto, a posição da transição colunar-equiaxial (CET) foi alterada quando o efeito de decantação dos grãos foi considerado.

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

## **MATHEMATICAL MODELLING OF AS-CAST MACROSTRUCTURE FORMATION CONSIDERING GRAIN SETTLING EFFECT**

### **Abstract**

A stochastic mathematical model of solidification in two dimensions was implemented to predict the as-cast grain macrostructure considering the settling of grains. This model is based on the cellular automaton technique to simulate the solidification of alloys. To consider the settling of grains, the present model consists of an algorithm to calculate the translation of grains, a methodology to calculate the dendritic growth with fluid flow; and a procedure to determine the terminal settling velocity of grains. The model results were compared with experimental results of an isolated dendritic grain that is simultaneously settling and growing in an undercooled liquid. The model was also used to determine the effect of grain settling on the formation of the grain macrostructure. In the model results, equiaxed grains were smaller at the lower boundary of the calculation domain. Moreover, the columnar-to-equiaxed transition (CET) also changed when grain settling was considered.

**Key words:** Solidification; Cellular automaton; Settling; Stochastic model.

<sup>1</sup> *Contribuição técnica ao 63º Congresso Anual da ABM, 28 de julho a 1º de agosto de 2008, Santos, 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

A previsão da estrutura bruta de solidificação é de extrema importância tecnológica, pois esta possui uma forte relação com as propriedades do material. Esta estrutura é determinada pelos parâmetros do processo de fundição, como o superaquecimento do metal líquido, o coeficiente de transferência de calor na interface entre o metal e o molde e a concentração média de soluto na liga. A previsão de como cada um destes parâmetros influi na macroestrutura final demanda a consideração simultânea de diversos fenômenos que ocorrem em diferentes escalas de tamanho, e que se modificam mutuamente.<sup>(1)</sup>

Durante os estágios iniciais da solidificação, os grãos equiaxiais crescem livremente no interior do banho metálico e tendem a decantar devido à diferença de densidade em relação ao líquido que os rodeia. Este efeito, em combinação com outros fatores, é apontado como uma das causas da macrossegregação de soluto nos produtos brutos de fundição,<sup>(1)</sup> além de modificar a macroestrutura final.<sup>(2)</sup> No entanto, a simulação deste efeito é complexa, pois a velocidade de crescimento de um grão é modificada pela movimentação relativa do líquido ao redor da ponta de cada braço dendrítico, sendo esta determinada pelo tamanho do grão e pelo movimento convectivo do metal líquido.

A técnica do autômato celular é tradicionalmente utilizada para simular a formação da macroestrutura de grãos bruta de solidificação.<sup>(3)</sup> Esta técnica possibilita simular os fenômenos da escala microscópica e acoplá-los de maneira recursiva a fenômenos da escala macroscópica, permitindo o estudo da influência de diversos fatores na macroestrutura final. Todavia, a aplicação desta técnica para a previsão da macroestrutura sob efeito da decantação de grãos é praticamente inexistente,<sup>(4)</sup> e por isto, estudos mais detalhados sobre sua potencialidade e limitações ainda são necessários.

O objetivo do presente trabalho é implementar um modelo matemático baseado na técnica estocástica do autômato celular para a previsão dos efeitos da decantação de grãos na formação da macroestrutura bruta de solidificação. O modelo será examinado comparando seus resultados com dados experimentais relativos à decantação de um único grão e observando as diferenças entre as macroestruturas calculadas quando a decantação de grãos é considerada.

## 2 METODOLOGIA

O modelo matemático desenvolvido no presente trabalho foi baseado no modelo proposto por Guillemot, Gandin e Combeau<sup>(4)</sup> para previsão de macroestruturas. A principal modificação introduzida foi o fator empírico proposto por Badillo, Ceynar e Beckermann<sup>(5)</sup> que considera a orientação da ponta dendrítica em relação ao movimento do fluido na cinética de crescimento. Utilizou-se o modelo da nucleação contínua e a técnica do autômato celular para simular a nucleação e o crescimento de grãos.<sup>(6)</sup>

### 2.1 Nucleação Contínua

A nucleação foi assumida heterogênea, ocorrendo sobre substratos distribuídos no domínio, cada um apresentando um super-resfriamento crítico distinto para nucleação. São consideradas duas distribuições normais de super-resfriamentos: uma para os substratos localizados junto à parede interna do molde e outra para os substratos distribuídos no interior do líquido. Cada distribuição é definida por

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

onde  $n$  representa a densidade de número de substratos;  $n_{\max}$  representa o máximo número de substratos por unidade de volume ou de superfície,  $\Delta T_{nuc}$  define o valor médio do super-resfriamento para nucleações e  $\Delta T_{\sigma}$  define o desvio-padrão.

As densidades de número de substratos no interior do líquido e na parede do molde representam o número de núcleos por unidade de volume e por unidade de superfície, respectivamente. No entanto, como o domínio de cálculo é bidimensional, o volume interior do líquido é representado pela área do domínio e a superfície do molde, pelo comprimento do contorno. Por isto, são necessárias conversões estereológicas<sup>(6)</sup> definidas pelas equações [2] e [3]:

$$n_S^* = \frac{\pi}{4} [n_L]^2 \quad [2]$$

$$n_V^* = \sqrt{\frac{\pi}{6}} \cdot [n_A]^{3/2} \quad [3]$$

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.

Os substratos são distribuídos aleatoriamente no domínio até que o número máximo de núcleos seja atingido. Se durante o resfriamento, a célula em que o substrato está contido atingir um super-resfriamento maior ou igual ao indicado pelo substrato, este se torna um núcleo e sua orientação é selecionada aleatoriamente entre 48 classes no intervalo entre  $-45^\circ$  e  $+45^\circ$ .

## 2.2 Cinética de Crescimento

A velocidade de crescimento de um braço dendrítico primário foi calculada através do modelo de crescimento proposto por Gandin et al.<sup>(7)</sup>, com o fator proposto por Badillo, Ceynar e Beckermann.<sup>(5)</sup> O super-resfriamento total disponível para o crescimento é composto pelo super-resfriamento devido à curvatura e pelo super-resfriamento constitucional, sendo calculado por

$$\Delta T = m_L C_L^* \left(1 - \frac{1}{1 - (1 - k)\Omega_C}\right) + \frac{2\Gamma}{r} \quad [4]$$

onde  $m_L$  é a inclinação da linha liquidus,  $C_L^*$  a concentração de soluto na ponta de dendrita,  $k$  o coeficiente de partição de soluto,  $\Gamma$  o coeficiente de Gibbs-Thompson,  $r$  o raio de curvatura da ponta da dendrita, e  $\Omega_C$  é um super-resfriamento adimensional definido por

$$\Omega_c = \frac{C_L^* - C_L^\infty}{C_L^*(1-k)} \quad [5]$$

onde  $C_L^\infty$  é a concentração de soluto no líquido suficientemente distante da ponta dendrítica.

O super-resfriamento adimensional é correlacionado ao número de Peclet através da teoria da camada limite através de Gandin et al.:<sup>(7)</sup>

$$\Omega_c = Pe_c \exp(Pe_c) \left\{ E_1(Pe_c) - f_B(\theta) E_1 \left[ Pe_c \left( 1 + \frac{4}{0,5773 Re^{0,6596} Sc^{0,5249}} \right) \right] \right\} \quad [6]$$

onde  $E_1(\ )$  é a função exponencial integral e  $f_B(\theta)$  é o fator empírico proposto por Badillo, Ceynar e Beckermann,<sup>(5)</sup> dado por

$$f_B(\theta) = 1 + \sum_{i=1}^5 a_i \theta^i \quad [7]$$

onde  $\theta$  é fornecido em graus, e os coeficientes  $a_i$  têm os seguintes valores:  $a_1 = -6,11 \times 10^{-2}$ ;  $a_2 = 1,670 \times 10^{-3}$ ;  $a_3 = -2,02 \times 10^{-5}$ ;  $a_4 = 1,065 \times 10^{-7}$ ;  $a_5 = -2,08 \times 10^{-10}$ .

Os adimensionais  $Pe_c$ ,  $Re$  e  $Sc$  são dados respectivamente por

$$Pe_c = \frac{v_p r}{2D_L} \quad [8]$$

$$Re = \frac{2ru^\infty}{\nu} \quad [9]$$

$$Sc = \frac{\nu}{D_L} \quad [10]$$

sendo  $\nu$  a viscosidade cinemática do fluido,  $v_p$  a velocidade da ponta da dendrita, e  $u^\infty$  o módulo da velocidade do fluido ao longe.

O critério da estabilidade marginal<sup>(7)</sup> fornece a última equação para o fechamento do sistema

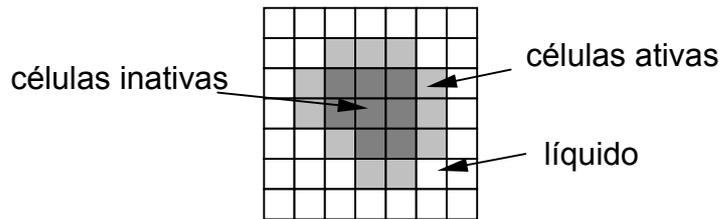
$$\sigma^* = \frac{D_L}{v_p r^2} \frac{\Gamma}{m_L [C_L^*(1-k)]} \quad [11]$$

onde  $\sigma^*$  é a constante de estabilidade, igual a  $(4\pi^2)^{-1}$ , e  $D_L$  é o coeficiente de difusão do soluto no líquido.

### 2.3 Técnica do Autômato Celular

A técnica do autômato celular (CA) utilizada no presente trabalho é análoga àquela empregada por Guillemot, Gandin e Coubeau.<sup>(4)</sup> Desta forma, serão aqui apresentados apenas os aspectos principais. Neste modelo, o domínio é dividido em uma malha de células quadradas que podem apresentar três estados: líquido, sólido ativo e sólido inativo (Figura 1). Cada célula líquida pode conter um substrato para nucleação heterogênea de um novo grão. O conjunto de células sólidas que constituem o mesmo grão é chamado de envelope dendrítico. Cada célula sólida possui um polígono de crescimento definido como um quadrilátero de diagonais ortogonais que crescem em função do super-resfriamento local da célula. As células sólidas ativas têm os seus polígonos em crescimento e determinam o contorno de

um envelope dendrítico. As células sólidas inativas têm as quatro células vizinhas sólidas e os seus polígonos de crescimento não crescem.



**Figura 1.** Representação de um envelope na malha de células da técnica do autômato celular.

Durante a simulação, o desenvolvimento de um envelope ocorre a partir da nucleação de um substrato, cujo polígono de crescimento tem tamanho inicial nulo e é posicionado no centro da célula com uma de suas diagonais com orientação entre  $-45^\circ$  e  $+45^\circ$  em relação ao eixo horizontal. Após cada passo de tempo, suas diagonais crescem com velocidades distintas, calculadas através do procedimento descrito anteriormente.

Durante o crescimento, o polígono de crescimento da célula atingirá o centro de suas células vizinhas. Quando isto ocorrer, se a célula atingida estiver no estado líquido, ela deve ser ativada, e um novo polígono de crescimento deve surgir nesta. O novo polígono de crescimento possui inicialmente o contorno em comum com o polígono anterior.<sup>(3)</sup> Se as quatro células ao redor da original estiverem em estado sólido, a célula original passa a ser um sólido inativo, cujo quadrado de crescimento não cresce mais. O algoritmo de captura pode ser encontrado com maiores detalhes no trabalho de Takatani, Gandin e Rappaz.<sup>(8)</sup>

## 2.4 Algoritmo de Translação

O algoritmo de translação é dividido em quatro partes: verificação de interfaces comuns entre envelopes; cálculo da velocidade de decantação; incremento ao deslocamento; e verificação do critério para migração completa entre células adjacentes.

A verificação de interfaces tem como função assegurar que um envelope não ocupe a posição que outro já ocupa ou garantir que este não saia do domínio, fixando-os no contorno. Ao verificar que células pertencentes a envelopes diferentes são vizinhas (superior, inferior, à direita ou à esquerda), estes dois envelopes formam um aglomerado (*cluster*).

Para o cálculo da velocidade de decantação, foi assumido (a) o equilíbrio entre as forças peso, de Arquimedes e de arraste e (b) um aglomerado equivalente a um sólido poroso com formato de octaedro regular.<sup>(4)</sup>

A densidade do aglomerado é calculada por

$$\rho_C = f_{s,c}\rho_S + (1 - f_{s,c})\rho_L \quad [12]$$

onde,  $\rho_S$  e  $\rho_L$  são as densidades da fase sólida e da fase líquida, respectivamente;  $\rho_C$  é a densidade do aglomerado; e  $f_{s,c}$  é a fração de sólido do aglomerado, calculada por

$$f_{s,c} = \frac{1}{N_C} \sum^{N_C} f_{s,CA} \quad [13]$$

onde  $N_C$  é o número total de células do aglomerado,  $f_{s,CA}$  é a fração de sólido local de cada célula que compõe o aglomerado, calculada pela equação de Scheil<sup>(9)</sup> através de

$$f_{s,CA} = 1 - \left( \frac{T_f - T_{CA}}{T_f - T_{liq}} \right)^{\frac{1}{k-1}} \quad [14]$$

onde  $T_{CA}$  é a temperatura local da célula,  $T_{liq}$  a temperatura liquidus para a composição inicial  $C_0$ ,  $k$  o coeficiente de partição de soluto, e  $T_f$  é a temperatura de fusão para o metal puro.

Para octaedros regulares, a velocidade terminal é calculada em função de sua dimensão através das equações de Haider e Levenspiel:<sup>(10)</sup>

$$u_* = u_t \cdot \left[ \frac{\rho_L^2}{g\mu(\rho_C - \rho_L)} \right]^{\frac{1}{3}} \quad [15]$$

$$d_* = d_{sph} \cdot \left[ \frac{g\rho_L(\rho_C - \rho_L)}{\mu^2} \right]^{\frac{1}{3}} \quad [16]$$

$$u_* = \left[ \left( \frac{18}{d_*^2} \right)^{0,9677} + \left( \frac{3,3816}{4d_*^{0,5}} \right)^{0,9677} \right]^{-1,1272} \quad [17]$$

onde  $\mu$  é a viscosidade do fluido em que o corpo está imerso;  $d_{sph}$  o diâmetro da esfera equivalente de mesmo volume que o corpo decantação;  $u_*$  a velocidade adimensional e  $d_*$  é o diâmetro adimensional.

Os aglomerados ou envelopes isolados que não estão fixos recebem um incremento ao seu deslocamento (inicialmente nulo) após cada passo de tempo, dado por

$$\Delta \vec{d}_i = \vec{V}_i \delta t \quad [18]$$

onde  $\Delta \vec{d}_i$  é o incremento para o deslocamento do aglomerado,  $\vec{V}_i$  a velocidade do aglomerado, e  $\delta t$  é o passo de tempo, calculado para manter a estabilidade do modelo.

No momento em que o vetor deslocamento ultrapassar os limites de uma célula, as informações contidas em todas as células que definem o envelope devem migrar para as células vizinhas correspondentes.

### 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

#### 3.1 Decantação e Crescimento de um Único Grão

Badillo, Ceynar e Beckermann<sup>(5)</sup> obtiveram dados sobre a cinética de crescimento de um grão equiaxial em decantação para várias composições da liga de succinonitrila-1,3% acetona (SCN-1,3%ACE) em diferentes super-resfriamentos. Para o experimento, foi utilizada uma coluna cilíndrica de vidro de 40 cm contendo SCN-ACE líquida e um gerador de cristais no topo da coluna. Ao iniciar o experimento, um cristal de SCN era solto do gerador e duas câmeras posicionadas

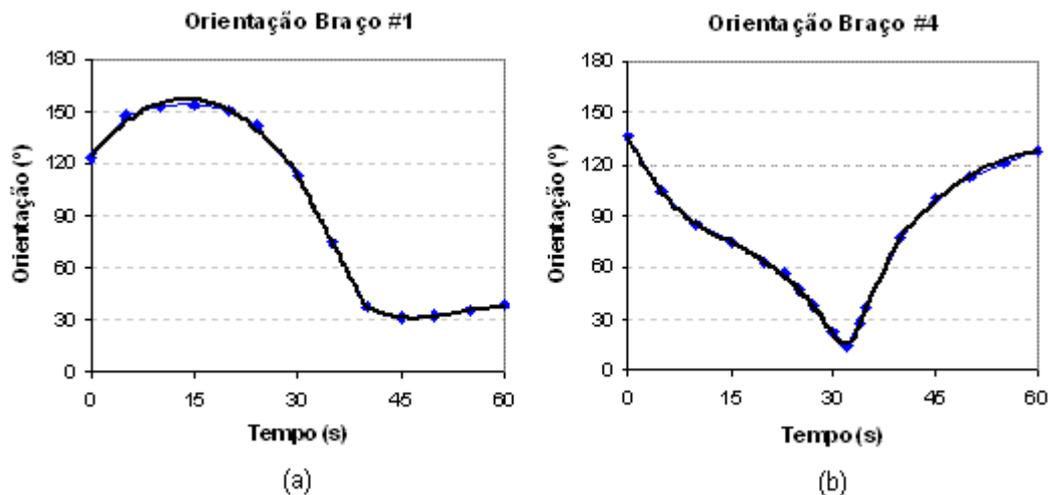
na mesma altura captavam imagens em direções ortogonais. Na simulação, foram utilizados os dados da liga SCN-1,3%ACE e as condições do experimento #3<sup>(5)</sup> cujos dados estão na Tabela 1. Para a simulação, foram adotadas as seguintes hipóteses:

- Concentração de soluto ao longe  $C_L^\infty$  igual à concentração média inicial  $C_0$ ;
- Líquido homogêneo e isotérmico;
- Módulo da velocidade do fluido igual ao módulo da velocidade de decantação (rotação desconsiderada);
- Braços #5 e #6 ortogonais ao domínio da simulação.

As orientações dos braços #1 e #4 em função do tempo estão representadas na Figura 2. Os braços #1 e #3 são opostos, assim como os braços #2 e #4.

**Tabela 1.** Propriedades para a liga SCN-1,3%ACE e parâmetros para a simulação do experimento de Badillo, Ceynar e Beckermann<sup>(5)</sup>

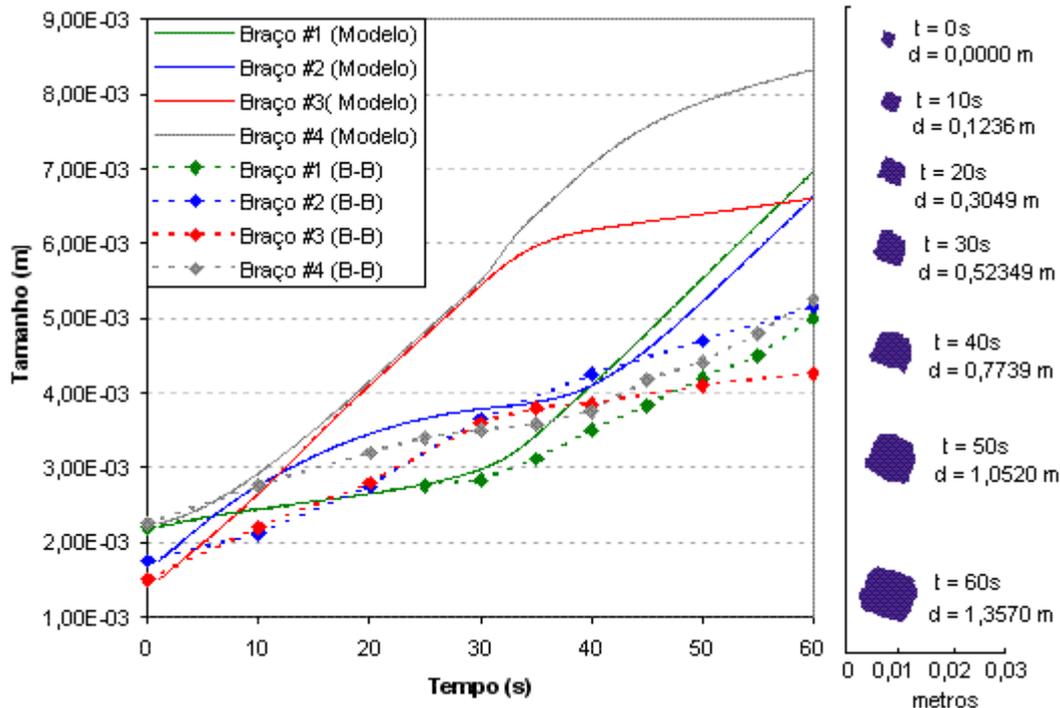
Parâmetros		Propriedades	
Malha Numérica	100 x 200	$\rho_L$ (Kg/m <sup>3</sup> )	988
Domínio (m)	0,03 x 0,06	$\rho_S$ (Kg/m <sup>3</sup> )	1050
Passo de tempo inicial $\Delta t$ (s)	0,001	$\Delta H_f$ (J/kg)	46588,7
Temperatura inicial $T_0$ (K)	327,16	$C_p$ (J/Kg.K)	2024,3
$\Delta x_{CA}$ (m)	$3 \cdot 10^{-4}$	$\mu$ (Pa.s)	$1,82 \cdot 10^{-3}$ (Ref)
$\psi$	0,846	$m_L$ (°C/%w)	-2,791
$C_0$	1.3%ACE	k	0,124
L inicial Braço #1 (m)	$2,20 \cdot 10^{-3}$	$\sigma$	0,02
L inicial Braço #2 (m)	$1,75 \cdot 10^{-3}$	$\Gamma$ (°C m)	$6,40 \cdot 10^{-6}$
L inicial Braço #3 (m)	$1,50 \cdot 10^{-3}$	$D_L$ (m <sup>2</sup> /s)	$1,27 \cdot 10^{-9}$
L inicial Braço #4 (m)	$2,25 \cdot 10^{-3}$	Temperatura de Fusão (K)	331,23
$\alpha$	0,1	Temperatura Liquidus (K)	328



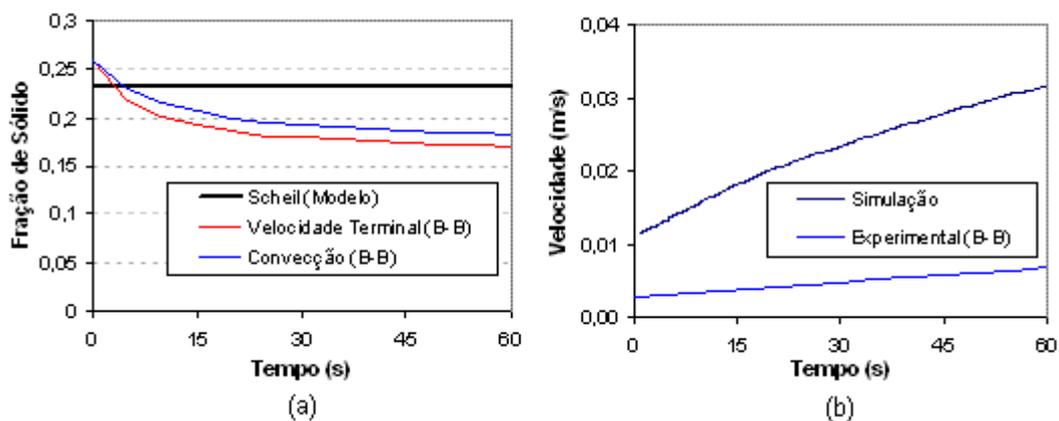
**Figura 2.** Dados experimentais de Badillo, Ceynar e Beckermann<sup>(5)</sup> e interpolação polinomial das orientações em relação ao eixo vertical em função do tempo para os braços #1 (a) e #4 (b)

Na simulação do presente trabalho foi obtido um envelope maior do que o experimental (Figura 3), como também velocidades de decantação maiores em todo o intervalo de tempo (Figura 4b). Para uma análise mais detalhada da discrepância entre os resultados, as hipóteses consideradas no presente modelo devem ser verificadas.

O equilíbrio instantâneo de forças é atingido em tempos menores do que 1 s para partículas de tamanho constante, que é um período desprezível em relação ao tempo total de decantação (60 s). Entretanto, por estar sempre em crescimento, o envelope simulado apresenta sempre velocidades maiores comparadas ao caso de não-equilíbrio.



**Figura 3.** Comparação entre o tamanho dos braços primários calculados pela simulação e os dados experimentais de Badillo, Ceynar e Beckermann<sup>(5)</sup> (B-B) e evolução do envelope da simulação.



**Figura 4.** (a) Comparação entre a velocidade de decantação calculada e a medida experimentalmente, e (b) a comparação entre as frações de sólido calculada pela equação de Scheil, e as calculadas a partir dos dados experimentais de Badillo, Ceynar e Beckermann<sup>(5)</sup> (B-B).

A equação de Scheil<sup>(9)</sup> para super-resfriamento igual a 0,84 K fornece uma fração de sólido interna no envelope de aproximadamente 0,23, que comparada às frações de sólido obtidas experimentalmente é apenas menor inicialmente (Figura

4a). Contudo, mesmo com a fração de sólido menor, foram obtidas velocidades iniciais maiores.

A hipótese do formato de um octaedro regular para o envelope pode ser apontada como a principal causa da discrepância, pois em uma das fotografias de um grão cadente,<sup>(5)</sup> é notado que o envelope real é mais próximo do envelope proposto por de Groh III et al.,<sup>(11)</sup> que aproxima os braços primários por pirâmides com base quadrada. Ao comparar o formato dos modelos de envelopes, considerando a fração de sólido do envelope constante, é notado que o formato de octaedro regular fornece maiores massas de sólido do que o envelope de de Groh III et al.<sup>(11)</sup>

### 3.2 Sistemas de Múltiplos Grãos

O efeito de decantação considerando a interação entre múltiplos grãos foi verificado em dois sistemas diferentes: um contendo apenas grãos equiaxiais, e outro com grãos equiaxiais e colunares. Para ambos os sistemas, as seguintes hipóteses foram consideradas:

- Concentração de soluto ao longe  $C_L^\infty$  igual à concentração média inicial  $C_0$ .
- Líquido homogêneo com taxa de resfriamento constante.
- Efeitos de parede e de múltiplas partículas na força de arraste desprezíveis

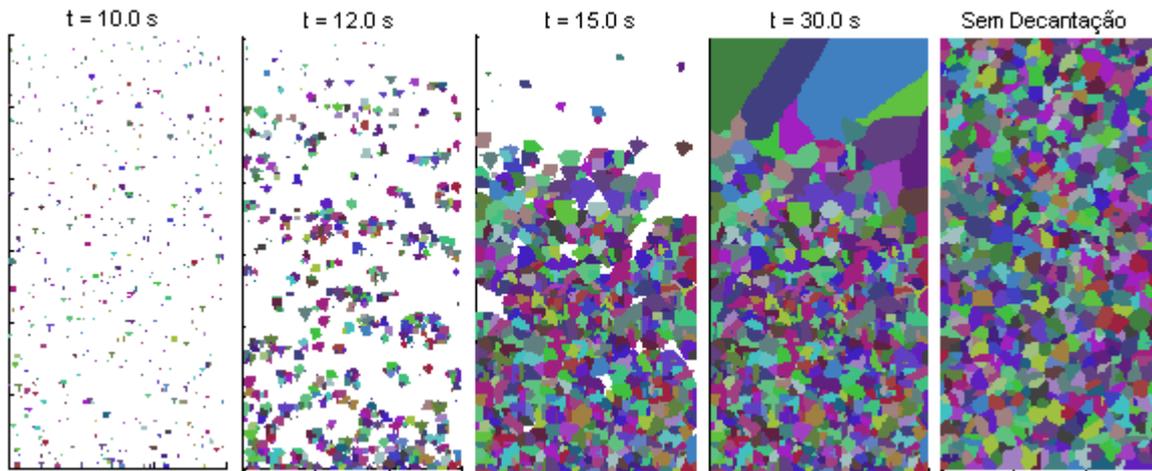
Para o sistema de grãos equiaxiais não foi considerado a fixação de grãos nas paredes laterais, de forma que o sistema represente um volume de controle no interior de um domínio maior, cujas paredes laterais estão abertas e a parede inferior é sólida. As propriedades para a liga Al-7%Si e os parâmetros de entrada para a simulação estão definidos na Tabela 2.

**Tabela 2.** Propriedades da liga Al-7%Si e parâmetros para a simulação do sistema com apenas grãos equiaxiais.

Parâmetros		Propriedades	
Malha Numérica	100x200	$\rho_L$ (Kg/m <sup>3</sup> )	2370
Domínio (m)	0,03x0,06	$\rho_S$ (Kg/m <sup>3</sup> )	2535
Passo de tempo $\Delta t$ (s)	0.001	$\Delta H_f$ (J/kg)	387400
Temperatura inicial $T_0$ (K)	891	$C_p$ (J/Kg.K)	1126
$\Delta x_{CA}$ (m)	$3 \cdot 10^{-4}$	$\mu$ (Pa.s)	$1,38 \cdot 10^{-3}$
$\psi$	0,846	$m_L$ (°C/%w)	-6,5
$C_0$	7%Si	k	0,13
$n_V^*$ (m <sup>-3</sup> )	$2,55 \cdot 10^8$	$\sigma$	0,0253
$\Delta T_{v,nuc}$ (K)	5	$\Gamma$ (°C m)	$1,96 \cdot 10^{-7}$
$\Delta T_{v,\sigma}$ (K)	1	$D_L$ (m <sup>2</sup> /s)	$6,45 \cdot 10^{-9}$
Taxa de Resfriamento R (K/s)	-0,5	Temperatura de Fusão (K)	933
$\alpha$	0,1	Temperatura Liquidus (K)	891

A Figura 5 apresenta a evolução da macroestrutura do metal durante a solidificação. No instante  $t = 12$  s, os grãos equiaxiais nucleados ainda são pequenos. Desta maneira, com a decantação é formado um depósito de pequenos grãos equiaxiais na base. O crescimento destes grãos depositados será suprimido pelos grãos que decantarão em seguida. Com o acréscimo do super-resfriamento, os grãos crescem mais antes de atingirem o depósito de grãos que nuclearam anteriormente. Desta forma, com o avanço do tempo, houve grãos maiores decantando e suprimindo o crescimento dos grãos inferiores no leito. Como conseqüência, a macroestrutura final apresentou uma diferença de tamanho de grão

entre a região inferior e a região superior do domínio, o que não se verificou na macroestrutura calculada sem o efeito de decantação (Figura 5).



**Figura 5.** Evolução da macroestrutura calculada em diversos instantes com o efeito de decantação para o sistema com apenas grãos equiaxiais e a macroestrutura sem o efeito de decantação

No sistema com grãos colunares e equiaxiais, todas as células do contorno do domínio foram preenchidas com substratos cuja distribuição de super-resfriamentos é diferente da distribuição no interior do domínio. Para intensificar o efeito da decantação neste sistema, foi considerado o valor da densidade do sólido como o dobro do valor real. As outras propriedades da liga Al-7%Si estão na Tabela 2, e foram utilizados dados de entrada semelhantes ao sistema de grãos equiaxiais (Tabela 2) com exceção dos dados contidos na Tabela 3.

**Tabela 3.** Dados para a simulação do sistema com grãos colunares e equiaxiais sendo o índice S referente a superfície do molde e o índice V ao interior do volume.

$n_v^*$ ( $m^{-3}$ )	$2,55 \cdot 10^8$	$\rho_s$ ( $Kg/m^3$ )	5070
$\Delta T_{v,nuc}$ (K)	15,0	$\Delta T_{s,nuc}$ (K)	1,0
$\Delta T_{v,\sigma}$ (K)	5,0	$\Delta T_{s,\sigma}$ (K)	0,1
Taxa de Resfriamento R (K/s)	-0,5	Temperatura Inicial (K)	891

A Figura 6 apresenta a formação de uma “pirâmide” de grãos equiaxiais depositados durante a solidificação. Este formato ocorre, pois, com o avanço da frente colunar das paredes laterais, há um estreitamento do domínio onde os grãos equiaxiais podem ainda decantar livremente. Os grãos colunares localizados na região inferior do domínio são bloqueados antes do que os grãos colunares localizadas na região superior. Conseqüentemente, a CET tem a sua posição alterada com a altura e se torna mais central quanto mais superior for a cota, até se tornar inexistente pela ausência de uma zona equiaxial.

Na macroestrutura calculada sem a decantação (Figura 6), não há a variação da posição da CET em relação à parede lateral do molde. Em todo domínio, a frente colunar é suprimida, mostrando uma grande diferença em relação à macroestrutura calculada com o efeito de decantação.

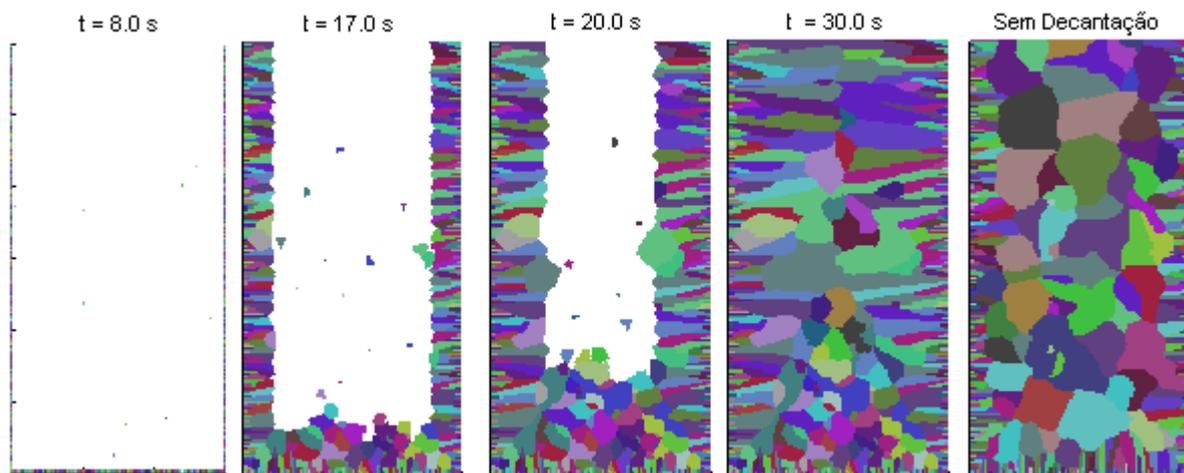


Figura 6. Evolução da macroestrutura com o tempo calculada com o efeito de decantação para o sistema com grãos colunares e equiaxiais e a macroestrutura sem o efeito de decantação

#### 4 CONCLUSÕES

A partir dos resultados do presente trabalho, foi possível concluir que:

- 1) O modelo implementado obteve velocidades de decantação maiores comparadas a dados experimentais<sup>(5)</sup>, gerando envelopes em decantação até duas vezes maiores do que os medidos experimentalmente.
- 2) Para sistemas de múltiplos grãos, nas condições simuladas, o efeito de decantação provoca um gradiente vertical de tamanho de grão na macroestrutura bruta de solidificação, ou seja, o tamanho de grão local é menor próximo à base, aumentando em direção ao topo.
- 3) Devido ao efeito de decantação, a posição da CET é mais próxima à parede em regiões inferiores, e mais central em regiões superiores.

#### 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 BECKERMANN, C. Modelling of Macroseggregation: Applications and Future Needs. *International Materials Reviews* Vol. 47 N° 5, p. 243-261, 2002.
- 2 SOUTHIN, R.T. Nucleation of the Equiaxed Zone in Cast Metals. *Transactions of the Metallurgical Society of AIME* Vol. 239, p.220-239, 1967.
- 3 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.
- 4 GUILLEMOT, G.; GANDIN, Ch.-A.; COMBEAU, H. Modeling of Macroseggregation and Solidification Grain Structures with a Coupled Cellular Automaton-Finite Element Model. *ISIJ Internacional*, v. 46, p.880-895, 2006.

- 5 BADILLO, A.; CEYNAR, D; BECKERMANN, C. Growth of Equiaxed Dendritic Crystals Settling in an Undercooled Melt. *Journal of Crystal Growth* 309, p.197-224, 2007.
- 6 RAPPAZ, M., GANDIN, Ch.-A.; Probabilistic Modelling of Microstructure Formation in Solidification Processes. *Acta Metallurgica*, v. 41, p. 345-60, 1993.
- 7 GANDIN, Ch-A.; GUILLEMOT, G.; APPOLAIRE, B.; NIANE, N.T. Boundary Layer Correlation for Dendritic Tip Growth with Fluid Flow. *Materials Science and Engineering A342*, p.44-50, 2003.
- 8 TAKATANI, H.; GANDIN, Ch.-A.; RAPPAZ, M. EBSD Characterisation and Modelling of Columnar Dendritic Grains Growing in the Presence of Fluid Flow. *Acta Materialia* 48, p.675-688, 2000.
- 9 KURZ, W.; FISHER, D.J. Fundamentals of solidification. Aedermannsdorf, Trans Tech Publications Ltd., 1989.
- 10 HAIDER, A.; LEVENSPIEL, O. Drag Coefficient and Terminal Velocity of Spherical and Nonspherical Particles. *Powder Technology*, v.58, p.63-70, 1989.
- 11 GROH III, H.C. de; WEIDMAN, P.D.; ZAKHEM, R.; AHUJA, S.; BECKERMANN, C. Calculations of Dendrite Settling Velocities Using a Porous Envelope. *Metallurgical Transactions B*, Vol. 24B, p.749-753, 1993.