

ANÁLISE DO MODELO AUTÔMATO CELULAR PARA PREVISÃO DA MACROESTRUTURA BRUTA DE SOLIDIFICAÇÃO EM LIGAS METÁLICAS

ANALYSIS OF THE CELLULAR AUTOMATON MODEL TO PREDICT THE AS-CAST MACROSTRUCTURE OF METALLIC ALLOYS

Vinicius Bertolazzi Biscuola¹, Marcelo de Aquino Martorano^{1*}

^{1*} Autor para contato: Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais, São Paulo, SP, Brasil; (11) 3091-6032; e-mail: martoran@usp.br

Recebido para publicação em 08/09/2004

Aceito para publicação em 10/02/2005

RESUMO

O objetivo do presente trabalho é a implementação e posterior análise crítica do modelo autômato celular para a previsão da macroestrutura bruta de solidificação em ligas metálicas. O modelo implementado é capaz de prever a fração de sólido local, o tamanho e forma dos grãos, a transição colunar-equiaxial e a transferência de calor na solidificação. Durante a implementação, o modelo foi dividido em dois submodelos: um submodelo macroscópico, que soluciona a equação diferencial de condução de calor através do método dos volumes finitos, e um submodelo microscópico, utilizado para prever o crescimento dos grãos através da técnica do autômato celular. Após comparação de seus resultados com dados da literatura, o modelo foi utilizado para simular a solidificação direcional de uma liga Al-7%Si. Os resultados foram analisados criticamente frente ao comportamento físico esperado. Observa-se a presença de um líquido super-resfriado adjacente à frente de crescimento colunar, como mostrado em outros modelos da literatura. Entretanto, existem diversas inconsistências em relação ao perfil de fração de sólido calculado. Nota-se que essas inconsistências são resultantes do processo de acoplamento entre os submodelos micro e macroscópicos e que uma pequena modificação pode eliminar uma dessas inconsistências.

Palavras-chave: transição colunar equiaxial, CET, Monte-Carlo, modelo matemático, alumínio-silício

ABSTRACT

The objective of the present work is to implement and critically analyze a

cellular automaton model to predict the as-cast macrostructure in binary alloys. The implemented model is capable of predicting the local solid fraction, the size and shape of grains, the columnar-to-equiaxed transition, and the heat transfer during solidification. During implementation, the complete model is divided into two submodels: a macroscopic submodel to solve the heat conduction equation by the finite volume method, and a microscopic submodel to predict the evolution of grains by the cellular automaton technique. Results from the complete model are first compared with available literature results, showing excellent agreement. Afterwards, the model is used to simulate the directional solidification of an Al-7%Si alloy. Results from this simulation are critically compared with the expected physical behavior. The existence of an undercooled liquid region ahead of the columnar grains is observed, in agreement with other results from the literature. There are, however, a few inconsistencies in the calculated solid fraction profile. These are understood to be the result of the specific methodology proposed to couple the micro and macroscopic submodels. A minor modification of the coupling method can eliminate one of the inconsistencies from the model.

Key words: cellular automaton, columnar-to-equiaxed transition, CET, Monte-Carlo, mathematical model, aluminum-silicon

1. Introdução

A macroestrutura bruta de solidificação das ligas metálicas geralmente possui uma combinação de três zonas distintas: uma zona coquilhada, próxima à superfície do molde; uma zona colunar, composta por grãos de formato alongado; e uma zona equiaxial, formada por grãos equiaxiais semelhantes aos grãos da zona coquilhada, porém com tamanho médio maior (Garcia, 2001). Nem sempre todas estas zonas estão presentes, mas, quando as zonas colunar e equiaxial existirem, a região de transição entre elas é chamada de zona de transição colunar-equiaxial (CET - "Columnar-to-Equiaxed Transition"). Como as propriedades de um metal estão intrinsecamente ligadas à sua macroestrutura de grãos e especificamente à quantidade de zona colunar e equiaxial, existe uma grande motivação para se prever a transição colunar-equiaxial.

Durante a solidificação, a transição colunar-equiaxial ocorre quando os grãos equiaxiais à frente da zona de crescimento colunar impedem o crescimento desta frente. O aparecimento dos grãos equiaxiais, por sua vez, depende dos mecanismos de nucleação e crescimento comuns aos processos de transformação de fases. Atualmente, os detalhes destes mecanismos são relativamente bem entendidos (Flood & Hunt,

1998).

Os modelos matemáticos empregados para a previsão da transição colunar-equiaxial baseiam-se em um mecanismo proposto por Winegard e Chalmers (1954); estes sugeriram que os grãos equiaxiais nucleiam e crescem na região super-resfriada existente à frente da zona colunar em crescimento. Estes modelos são usualmente classificados em estocásticos ou determinísticos. Os modelos estocásticos sempre utilizam algum tipo de variável aleatória em seus procedimentos, ou seja, existem parâmetros que dependem de probabilidades (Rappaz & Gandin, 1993). Estes modelos acompanham a nucleação e crescimento de cada grão, simulando sua forma e tamanho e, conseqüentemente, a CET. Os modelos determinísticos, por outro lado, não utilizam variáveis aleatórias e não consideram os grãos individualmente, mas sim, de forma média (Martorano, Beckermann & Gandin, 2003).

Spittle e Brown (1989) foram os precursores na criação dos modelos estocásticos baseados no método de Monte Carlo. Neste primeiro modelo, o domínio de simulação contendo sólido e líquido foi subdividido em diversas células, associando um nível de energia a cada interface entre células. O conceito de minimização da energia total das células foi utilizado para simular o crescimento dos grãos durante a solidificação.

O modelo final forneceu macroestruturas que podiam ser comparadas diretamente com macroestruturas reais, entretanto houve problemas na identificação de uma escala de tempo associada ao crescimento dos grãos.

Rappaz e Gandin (1993) propuseram um novo modelo estocástico baseado na técnica conhecida como “Cellular Automaton” (CA), eliminando o problema da escala de tempo através da utilização de equações estabelecidas para o crescimento dendrítico. Os autores assumiram, ainda, que cada sítio para nucleação heterogênea era formado por um tipo de substrato, ao qual era associado um super-resfriamento crítico diferente para nucleação. Também foi assumido que este super-resfriamento crítico estava distribuído entre os substratos de acordo com uma distribuição normal. Após nucleação, o crescimento do núcleo era simulado pela técnica “cellular automaton”. Segundo esta técnica, associou-se a cada célula um quadrado cujo crescimento obedecia às equações de crescimento dendrítico. Em um determinado instante durante o crescimento, este quadrado acabava tocando o centro da célula vizinha, que era ativada, originando um novo quadrado. A transferência de informações de uma célula a outra simulava o crescimento de um envelope dendrítico. Gandin e Rappaz (1994) acoplaram este modelo, denominado microscópico, a um outro modelo de transferência de calor, baseado no método dos elementos finitos, denominado macroscópico. O modelo completo foi chamado de CAFE (“cellular automaton-finite element”). Foram realizados diversos testes onde as estruturas de grãos e curvas de resfriamento simuladas foram comparadas com dados experimentais, apresentando uma boa concordância.

Gandin e Rappaz (1997) estenderam este modelo, implementado em duas dimensões, para simulações em três dimensões. As características do novo modelo são semelhantes às do modelo anterior. Entretanto, em lugar de associar um retângulo em crescimento a cada célula, foi associado um quadrado cujo centro não necessariamente coincidia com o centro da célula. Este novo procedimento facilitou a simulação da estrutura em três dimensões.

Cho, Okane e Umeda (2001) utilizaram o modelo microscópico proposto por Gandin e Rappaz (1997) para previsão do crescimento dos envelopes dendríticos, porém a transferência de calor foi mode-

lada utilizando-se o método das diferenças finitas. Estes autores assumiram, ainda, dois tipos de distribuição de super-resfriamentos para os substratos da nucleação heterogênea: um para o interior do metal e outro para a superfície interna do molde. O comportamento do método, mediante a variação dos parâmetros de nucleação na superfície e no interior do molde, foi analisado após o cálculo das estruturas de grãos para cada caso.

Os modelos estocásticos têm sido aplicados a diversos processos de solidificação para a previsão da macroestrutura de grãos final. Entretanto, estes modelos não foram suficientemente testados ou comparados com modelos determinísticos já consagrados na literatura. Desta forma, o objetivo do presente trabalho é implementar e testar um modelo matemático estocástico bidimensional para prever a macroestrutura bruta de solidificação em ligas metálicas binárias. O modelo será aplicado à solidificação direcional de uma liga Al-7%Si e o seu comportamento será analisado qualitativamente e quantitativamente através da comparação com resultados do modelo de Scheil (Kurz & Fisher, 1989).

2. Metodologia

O modelo implementado no presente trabalho foi baseado no modelo proposto por Gandin e Rappaz (1997). A principal modificação introduzida foi a utilização do método dos volumes finitos para resolução numérica da equação de condução de calor, em lugar do método dos elementos finitos. O modelo foi dividido em duas partes: um submodelo macroscópico, responsável pelo cálculo da transferência de calor na liga metálica, e um submodelo microscópico, responsável pelo cálculo da estrutura de grãos. Estes submodelos serão descritos a seguir.

2.1 Submodelo Macroscópico

O submodelo macroscópico foi implementado para modelar a transferência de calor bidimensional em um domínio retangular. Neste modelo, foi solucionada a equação diferencial de condução de calor escrita na

forma da entalpia em coordenadas retangulares, como mostrado a seguir:

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

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

As condições adotadas nos contornos do domínio retangular foram:

$$\kappa \frac{\partial T}{\partial y} = h(T - T_w) \quad p/ \ y = 0 \text{ (contorno inferior)} \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial y} = 0 \quad p/ \ y = L \text{ (contorno superior)} \quad (3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad p/ \ x = 0 \text{ (contorno à esquerda)} \quad (4)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad p/ \ x = W \text{ (contorno à direita)} \quad (5)$$

onde L é o comprimento do domínio; W é a largura do domínio; h é o coeficiente de transferência de calor na interface metal-molde e T_w é uma temperatura de referência do molde (esta temperatura pode ser, por exemplo, aquela da água de refrigeração no caso de um molde refrigerado). Segundo estas condições de contorno, as paredes laterais e superior do domínio estão isoladas termicamente e o calor é extraído pelo contorno inferior, resultando em uma solidificação unidirecional ascendente. Como condição inicial, adotou-se um domínio totalmente líquido com uma temperatura homogênea.

A Equação (1) e suas condições de contorno e inicial foram solucionadas numericamente através do método dos volumes finitos, utilizando-se volumes retangulares contendo um nó em seu centro (Patankar, 1981). A formulação explícita foi adotada, resultando na seguinte equação algébrica para um volume interno:

$$\delta H_P^{t+\Delta t} = \left(a_E T_E^t + a_W T_W^t + a_N T_N^t + a_S T_S^t + [-a_E - a_W - a_S - a_N] \cdot T_P^t \right) \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x \cdot \Delta y} \quad (6)$$

onde:

$$\delta H_P^{t+\Delta t} = H_P^{t+\Delta t} - H_P^t$$

$$a_E = \frac{K_E \Delta y}{(\delta x)_E} \quad a_W = \frac{K_W \Delta y}{(\delta x)_W}$$

$$a_N = \frac{K_N \Delta x}{(\delta y)_N} \quad a_S = \frac{K_S \Delta x}{(\delta y)_S}$$

sendo que $\delta H_P^{t+\Delta t}$ é a variação de entalpia do volume P do instante t até o instante t+ Δt ; Δx e Δy representam as dimensões do volume finito P; K_i a condutividade térmica calculada na interface com o volume indicado pelo subscrito i; $(\delta x)_i$ e $(\delta y)_i$ indicam as distâncias entre o nó do volume P e o nó do volume vizinho identificado pelo subscrito i e Δt é o passo de tempo utilizado no método numérico de resolução das equações diferenciais. Os subscritos i adotados foram E (direita), W (esquerda), N (superior) e S (inferior), de acordo com a nomenclatura proposta por Patankar (1981).

A Equação (6) permite o cálculo da variação de

entalpia de um volume finito após um intervalo de tempo Δt . Note que a entalpia do volume finito varia à medida que o calor escoia através de suas faces. O cálculo da temperatura deste volume no instante de tempo t + Δt , definida como $T_P^{t+\Delta t}$, depende de sua variação de entalpia $\delta H_P^{t+\Delta t}$. Conseqüentemente, uma relação entre a entalpia e a temperatura do volume deve ser fornecida para que o cálculo da temperatura seja efetuado. Esta relação será descrita no item relativo ao acoplamento entre os submodelos macroscópico e microscópico.

2.2. Submodelo Microscópico

O submodelo microscópico, baseado na técnica do autômato celular, foi implementado com a função de simular o crescimento dos grãos dendríticos. Este modelo é análogo ao modelo proposto por Gandin e Rappaz (1997) e, portanto, apenas alguns aspectos importantes serão descritos. O domínio de cálculo foi subdividido em pequenas células quadradas com o intuito de simular a nucleação e o crescimento dos grãos.

Inicialmente, diversos substratos para a nucleação heterogênea foram distribuídos aleatoriamente entre as células. A cada substrato para a nucleação foi associado um super-resfriamento crítico que indicou a temperatura na qual sua ativação deveria ocorrer. A taxa de variação da densidade do número de substratos (número de substratos por unidade de volume) em relação à temperatura foi assumida obedecer a uma distribuição normal, como indicado abaixo (Gandin & Rappaz, 1997):

$$\frac{dn}{d(\Delta T)} = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi} \cdot \Delta T} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta T - \Delta T_{\text{nuc}}}{\Delta T_{\sigma}}\right)^2\right] \quad (7)$$

onde n é a densidade de substratos já ativados em um super-resfriamento ΔT ; n_{\max} é a densidade total de substratos e ΔT_{nuc} e ΔT_{σ} são a média e desvio padrão, respectivamente, da distribuição assumida. Logo, a densidade de substratos ativados, que corresponde à densidade de núcleos presentes (n_s), em uma região do líquido com super-resfriamento ΔT foi dada por

$$n_s(\Delta T) = \int_0^{\Delta T} \left[\frac{dn}{d(\Delta T')} \right] \cdot d(\Delta T') \quad (8)$$

Quando a temperatura em uma região do líquido decrescia abaixo da temperatura crítica de nucleação do substrato, a célula nesta posição era ativada, atribuindo-se uma orientação cristalográfica escolhida aleatoriamente entre 48 classes divididas igualmente na faixa de -45° a 45° . Neste momento, também se associava um retângulo de tamanho reduzido, que representava o envelope dendrítico e cujas diagonais cresciam segundo a equação de crescimento dendrítico descrita a seguir:

$$v(\Delta T) = a_2 \times \Delta T^2 + a_3 \times \Delta T^3 \quad (9)$$

onde $v(\Delta T)$ representa a velocidade das diagonais do retângulo; ΔT é o super-resfriamento ($T_{\text{liquidus}} - T$) no centro deste retângulo e a_2 e a_3 são constantes determinadas experimentalmente ou através de algum outro modelo matemático. Deste modo, a diagonal L_i do retângulo associado à célula i era atualizada após cada passo de tempo Δt , no tempo t , apresentava um tamanho total dado pela equação a seguir:

$$L_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_m^i v[\Delta T_i(\tau)] d\tau \quad (10)$$

onde t_n é o instante no qual ocorreu a nucleação da célula i .

Os retângulos cresciam até que o centro da célula vizinha fosse ultrapassado. Neste momento, se esta célula vizinha ainda não tivesse sido ativada, ou seja, se ainda pertencesse ao líquido, ela era ativada pelo retângulo em crescimento. Na ativação, a célula vizinha recebia um retângulo com a mesma orientação e um tamanho, que dependia da célula que a ativou. O tamanho e a orientação do envelope cujo crescimento se está simulando devem ser preservados nesta etapa de transferência de informação de uma célula a outra.

2.3. Acoplamento Macroscópico - Microscópico

Os submodelos macroscópico e microscópico foram acoplados para que a transferência de calor e o crescimento dos grãos fossem simulados consistentemente, garantindo a conservação de energia no sistema. O acoplamento correto permite que a temperatura do volume finito no instante $t + \Delta t$, definida como, $T_P^{t+\Delta t}$ seja calculada.

O submodelo macroscópico fornece a variação de entalpia do volume finito no período de t até $t + \Delta t$, denominada $\delta H_P^{t+\Delta t}$ e obtida através da resolução da Equação (6). No submodelo microscópico, o domínio foi subdividido em células geralmente menores do que o tamanho do volume finito do submodelo macroscópico. No entanto, o valor de $\delta H_P^{t+\Delta t}$ calculado pelo submodelo macroscópico está associado à posição do nó localizado no interior do volume finito e não no interior de cada célula. Desta forma, a variação de entalpia da célula, $\delta H_{CA}^{t+\Delta t}$, deve ser obtida interpolando-se linearmente os valores de $\delta H_P^{t+\Delta t}$ associados aos nós dos volumes finitos mais próximos.

O submodelo microscópico utiliza a variação de entalpia da célula ($\delta H_{CA}^{t+\Delta t}$) para calcular a sua variação de fração de sólido durante o período Dt através da equação (Rappaz & Gandin, 1997)

$$\delta f_{s,CA}^{t+\Delta t} = \frac{-\delta H_{CA}^{t+\Delta t}}{\rho \cdot C_p \cdot (T_{liquidus} - T_f) \cdot (k-1) \cdot [1 - f_{s,CA}^t]^{k-2} + \Delta H_f \cdot \rho} \quad (11)$$

onde ρ é a densidade; C_p é o calor específico; $T_{liquidus}$ é a temperatura liquidus da liga; T_f é a temperatura de fusão do metal puro; k é o coeficiente de partição de soluto, definido como $k = \frac{C_s}{C_l}$, onde C_s e C_l são as concentrações de soluto no sólido e no líquido em equilíbrio para uma temperatura dada; $f_{s,CA}^t$ é a fração de sólido da célula no instante de tempo t e ΔH_f é o calor latente de fusão. A Equação (11), apresentada por Gandin e Rappaz (1997), é resultante da aplicação do modelo de Scheil (Kurz & Fisher, 1989) para o cálculo da fração de sólido em função da temperatura.

Através da Equação (11), o submodelo microscópico calcula a variação da fração de sólido em cada célula da malha do autômato celular. Posteriormente, calcula-se a média desta variação para todas as células localizadas no interior de um volume finito (VF) através da equação

$$\delta f_{s,P}^{t+\Delta t} = \frac{\sum \delta f_{s,CA}^{t+\Delta t}}{n_{CA}} \quad (12)$$

onde $\delta f_{s,P}^{t+\Delta t}$ será considerada como a variação de fração de sólido total no interior do volume finito e n_{CA} é o número de células localizadas no interior deste volume. Esta fração é, então, fornecida para o submodelo macroscópico para que o cálculo da temperatura do volume finito no instante $t + \Delta t$ seja realizado através da equação

$$T_P^{t+\Delta t} = T_P^t + \frac{\delta H_P^{t+\Delta t} + \Delta H_f \rho \delta f_{s,P}^{t+\Delta t}}{\rho C_p} \quad (13)$$

finalizando o acoplamento durante a solidificação primária.

O acoplamento descrito acima, utilizado para a solidificação primária, pode ser resumido nos seguintes passos:

- calcula-se a variação de entalpia no interior do volume finito, $\delta H_P^{t+\Delta t}$, através da Equação (6);

- calcula-se a variação de entalpia no interior da célula, $\delta H_{CA}^{t+\Delta t}$, através da interpolação linear a partir dos valores calculados para os volumes finitos;
- calcula-se a variação da fração de sólido no interior de cada célula, $\delta f_{s,CA}^{t+\Delta t}$, através da Equação (11);
- utilizando a variação de fração de sólido nas células, calcula-se a variação de fração de sólido no interior dos volumes finitos, $\delta f_{s,P}^{t+\Delta t}$, através da Equação (12);
- através da Equação (13) calcula-se finalmente a temperatura no interior do volume finito, $T_P^{t+\Delta t}$.

Estes passos estabelecem implicitamente a relação entre a entalpia do volume finito ($H_P^{t+\Delta t}$) e sua temperatura durante a solidificação primária ($T_P^{t+\Delta t}$). À medida que a solidificação primária ocorre em um dado volume finito, sua temperatura decresce até atingir a temperatura da reação eutética. A partir deste instante, a Equação (11), que é fundamentada no modelo de Scheil, não é mais válida. Como a reação eutética é uma transformação que ocorre a uma temperatura constante em ligas binárias, apenas o calor latente pode ser extraído do volume finito enquanto a reação não terminar. Neste caso a Equação (11) deve ser substituída por

$$\delta f_{s,CA}^{t+\Delta t} = -\frac{\delta H_{CA}^{t+\Delta t}}{\Delta H_f \cdot \rho} \quad (14)$$

A solidificação eutética e, portanto a solidificação final, termina quando a fração de sólido (f_s) atingir o valor unitário. A partir deste instante, o problema transforma-se em um problema de simples condução de calor. As equações utilizadas automaticamente convertem-se para este problema quando a variação de fração de sólido for nula.

Um último detalhe do acoplamento está associado ao cálculo da velocidade dos envelopes acompanhados pelo submodelo microscópico. Este cálculo, que é realizado através da Equação (9), é função do super-resfriamento ΔT da célula. Este super-resfriamento é calculado também através da interpolação linear dos valores de temperatura obtidos para

os volumes finitos.

O programa computacional do modelo completo, contendo os submodelos microscópico e macroscópico e o seu acoplamento, foi totalmente implementado em linguagem de computador ANSIC. Os resultados obtidos através deste programa foram gerados em um computador pessoal com microprocessador Pentium IV¹.

3. Resultados e Discussão

No presente trabalho, o modelo implementado foi aferido mediante comparações da macroestrutura calculada com aquelas apresentadas por Rappaz e Gandin (1993) durante a solidificação isotérmica. Além disso, a macroestrutura e as curvas de resfriamento calculadas pelo modelo durante a solidificação direcional de uma liga Al-Si foram comparadas com os resultados fornecidos por Gandin e Rappaz (1994). Nos dois casos comparados a concordância foi excelente, mostrando que o modelo foi implementado corretamente.

Após a verificação do programa implementado, este foi aplicado à solidificação direcional da liga Al-7%Si com o objetivo de se analisar criticamente seus resultados. As condições de contorno necessárias para a solução da equação diferencial foram definidas pelas Equações de (2) a (5). Nestas condições, foram adotados: o comprimento do domínio $L = 0,15$ m; a largura do domínio $W = 0,07$ m; o coeficiente de transferência de calor na interface metal-molde $h = 250$ W/m²K e a temperatura de referência do molde $T_w = 298$ K. O coeficiente h e a temperatura T_w adotados são característicos de molde metálicos refrigerados a água. A temperatura inicial do metal líquido foi considerada como 100 K acima da temperatura liquidus da liga, a saber, 991 K (718 °C).

As propriedades da liga utilizada para a simulação estão apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1 - Propriedades da liga simulada.

Propriedades	Al-7%Si
K_s (W/mK)	233 - 0,110 T (K)
K_l (W/mK)	36,5 + 0,028 T (K)
H_f (J/Kg)	387,4 x 10 ³
C_p (J/KgK)	1126
ρ (Kg/m ³)	2452
k (-)	0,13
$T_{liquidus}$ (K)	891
$T_{eutético}$ (K)	850
a_2 (ms ⁻¹ K ⁻²)	2,9 x 10 ⁻⁶
a_3 (ms ⁻¹ K ⁻²)	1,49 x 10 ⁻⁶

Os resultados examinados na simulação foram: a macroestrutura de grãos; o perfil de temperatura e o perfil de fração de sólido. Nesta simulação, foram assumidas duas distribuições normais (Equação (7)) diferentes para se calcular o super-resfriamento dos substratos para a nucleação. Uma distribuição foi aplicada às células adjacentes ao contorno inferior, no contato metal-molde, e outra, às células restantes, como sugerido por Cho, Okane e Umeda (2001). Estas distribuições são definidas pela Equação (7) e pelos parâmetros apresentados na Tabela 2. Os diversos parâmetros apresentados nesta tabela foram definidos com base em observações experimentais e dados coletados na literatura. Inicialmente, definiu-se um tamanho médio de grão mínimo possível de 2,6 mm. Este tamanho mínimo está associado a uma densidade máxima do número de substratos para a nucleação heterogênea equivalente a $n_{max} = 10^8$ m⁻³. Esta densidade deve ser transformada para poder ser utilizada no modelo bidimensional desenvolvido. Nas células que não são adjacentes à interface metal-molde, deve-se converter n_{max} , definido como o número de núcleos por unidade de volume, para número de núcleos por unidade de área ($n_{max,V}$). Por outro lado, para os volumes

¹ Pentium IV é marca registrada de Intel Corporation.

adjacentes ao contorno inferior, a densidade deve ser convertida para número de núcleos por unidade de comprimento ($n_{\max,S}$). Estas conversões foram realizadas utilizando-se algumas relações de estereologia fornecidas por Rappaz e Gandin (1993). Valores distintos de super-resfriamento médio para a nucleação (ΔT_{nuc}) foram adotados para os volumes do contorno inferior ($\Delta T_{\text{nuc,S}}$) e para os volumes restantes ($\Delta T_{\text{nuc,V}}$). Estes valores e aqueles relativos ao desvio padrão da distribuição, ΔT_{σ} (Tabela 2), foram definidos com base em valores correntemente utilizados para ligas de Al (Gandin & Rappaz, 1994).

Tabela 2 - Parâmetros para nucleação na interface metal-molde (S) e no restante do domínio (V).

$\Delta T_{\text{nuc,S}}$	$\Delta T_{\sigma,S}$	$n_{\max,S}$	$\Delta T_{\text{nuc,V}}$	$\Delta T_{\sigma,V}$	$n_{\max,V}$
[K]	[K]	[m ⁻¹]	[K]	[K]	[m ⁻²]
0,5	0,1	583	4,5	0,5	267300

No submodelo macroscópico, a solução numérica foi obtida utilizando-se uma malha de volumes finitos de 1 x 20, contendo 20 volumes na direção vertical (coordenada y). No submodelo microscópico, utilizou-se uma malha de células contendo 100 x 11 no interior de cada volume finito, resultando em uma malha completa de 100 x 220 células. Alguns testes de convergência foram realizados para os dois tipos de malhas. Observou-se que malhas de volumes finitos ou células mais refinadas do que as utilizadas não alteravam significativamente as curvas de resfriamento e as macroestruturas. O passo de tempo Δt empregado nas simulações foi de 0,02 s. Este passo de tempo foi o maior possível sem ultrapassar os limites requeridos pela técnica do autômato celular. A técnica requer que, dentro de um único intervalo de tempo Δt , o quadrado em crescimento não aumente o seu tamanho de um valor maior do que o espaçamento entre as células da malha. Os resultados das simulações estão apresentados a seguir.

3.1. Macroestrutura de Grãos

A Figura 1 apresenta a macroestrutura de grãos final obtida através do modelo autômato celular implementado. Através desta macroestrutura pode-se observar a presença de grãos colunares e equiaxiais, bem como a transição colunar-equiaxial. Esta transição ocorreu aproximadamente na coordenada Y = 0,08 m.

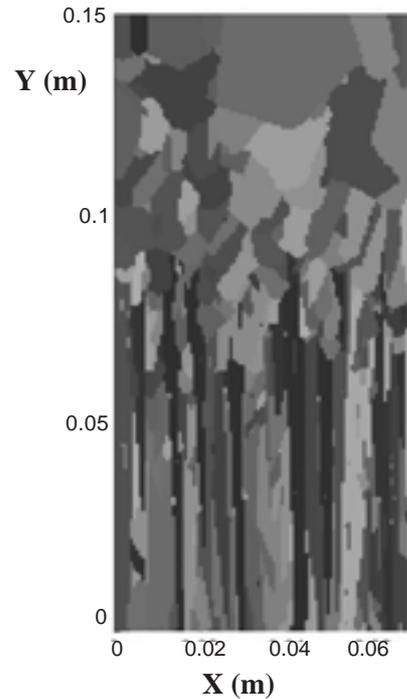


Figura 1 - Macroestrutura de grãos calculada pelo modelo para a solidificação direcional da liga Al-7%Si.

3.2. Análise Crítica do Modelo Autômato Celular

No intuito de analisar detalhadamente o comportamento do modelo autômato celular implementado, a simulação da solidificação da liga Al-7%Si foi interrompida quando a isoterma liquidus atingiu a coordenada Y = 0,1 m. A Figura 2 apresenta a macroestrutura de grãos, o perfil de temperatura e o perfil de fração de sólido neste instante. Os pontos distribuídos ao longo do perfil indicam as posições de cada nó localizado no centro dos volumes finitos (malha do submodelo macroscópico). O perfil de temperatura fornecido pelo

modelo foi utilizado para calcular a fração de sólido através da equação de Scheil (Kurz & Fisher, 1989).

Na Figura 2, esta fração está sobreposta à fração de sólido calculada pelo modelo implementado.

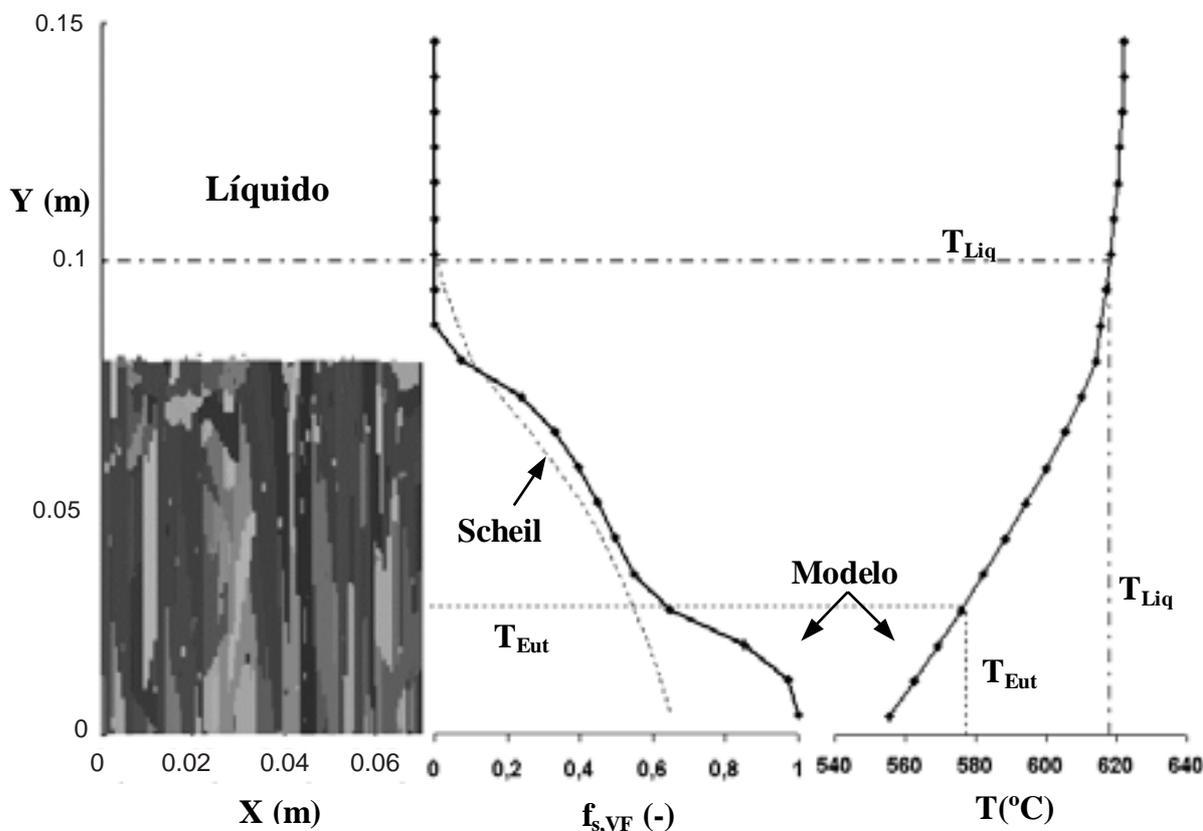


Figura 2- Macroestrutura de grãos, fração de sólido e perfil de temperatura calculados pelo modelo. A fração de sólido resultante do modelo de Scheil (Kurz, & Fisher, 1989) está indicada pela linha pontilhada.

A macroestrutura apresentada consiste basicamente de grãos colunares crescendo na direção do fluxo de calor, porém em sentido oposto. Nota-se que a frente de crescimento colunar está super-resfriada em relação à temperatura liquidus, resultando em uma região de aproximadamente 0,025 m contendo líquido super-resfriado constitucionalmente. Este super-resfriamento também foi observado nos resultados de modelos determinísticos (Martorano, Beckermann & Gandin, 2003).

A Figura 2 apresenta dois aspectos que não retratam o comportamento físico esperado. O primeiro aspecto é a presença de líquido em regiões da estrutura com temperaturas abaixo da temperatura da reação eutética (T_{Eut}), ou seja, $f_s < 1$ nestes locais. Esta situação somente poderia existir caso o super-resfriamento para o crescimento eutético tivesse sido considerado no modelo. Os resultados da simulação mostram que a fração de sólido atinge a unidade, indicando o final

da solidificação, apenas cerca de 20°C abaixo da temperatura do eutético. Este aspecto representa uma inconsistência em relação ao comportamento físico esperado.

O segundo aspecto que não retrata o comportamento físico esperado é notado ao se comparar o perfil de fração de sólido fornecido pelo modelo com aquele calculado pela equação de Scheil (Kurz & Fisher, 1989). Logo abaixo de $T_{liquidus}$, a fração de sólido dada pelo modelo é nula, entretanto, a fração fornecida pela equação de Scheil é diferente de zero. Como será discutido posteriormente, este comportamento não está incorreto, pois no modelo automático consideraram-se envelopes dendríticos e o seu super-resfriamento para nucleação e crescimento. No modelo de Scheil, por outro lado, assume-se que todos os super-resfriamentos são nulos. No entanto, a principal inconsistência aparece na região contendo envelopes dendríticos em solidificação, onde a fração

de sólido deveria ser exatamente igual àquela fornecida pela equação de Scheil. Este comportamento, chamado de Scheil “truncado” (Flood & Hunt, 1987), não foi reproduzido pelo modelo autômato celular (Figura 2), apesar de ser observado nos resultados de modelos determinísticos propostos na literatura (Gandin, 2000). Estas duas inconsistências entre os resultados do modelo autômato celular e o comportamento físico esperado serão discutidas nos próximos itens.

3.3. Acoplamento Microscópico-Macroscópico na Solidificação Eutética

Após exame do modelo autômato celular, concluiu-se que as inconsistências apresentadas anteriormente resultaram basicamente da metodologia empregada no acoplamento entre os submodelos micro e macroscópicos. No acoplamento, a temperatura de uma célula do submodelo microscópico foi obtida através da interpolação linear das temperaturas calculadas em cada nó dos volumes finitos do submodelo macroscópico, como mostrado na Figura 3. No momento em que a temperatura interpolada na posição central da célula atingiu T_{Eut} , assumiu-se que a reação eutética teria início no interior da célula. A partir deste instante, a Equação (14) substituiu a Equação (11) no cálculo da variação da fração de sólido da célula.

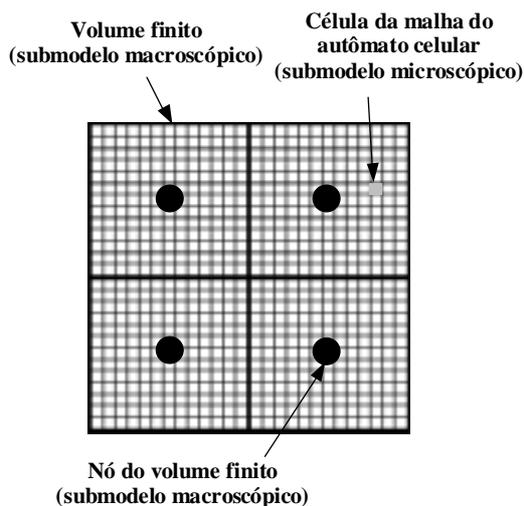


Figura 3 - Malha de células utilizada no submodelo microscópico (autômato celular) sobreposta à malha de volumes finitos utilizada no submodelo macroscópico.

A Equação (14) foi utilizada para realizar o acoplamento durante a solidificação eutética. Como foi mencionado anteriormente, esta equação assume que a temperatura da célula permanece constante até o final da solidificação, em uma transformação de fase isotérmica. Desta forma, a variação de entalpia na célula era resultante apenas da extração de calor de transformação, ou seja, do calor latente. Devido ao processo de interpolação, no interior de um dado volume finito existiam células que apresentavam temperaturas acima, igual ou abaixo de T_{Eut} , mesmo quando a temperatura do nó do volume ($T_P^{t+\Delta t}$) era menor do que T_{Eut} . Portanto, a variação de fração de sólido nestas células foi calculada pela Equação (11) ou (14), dependendo das condições. Após o cálculo das variações das frações de todas as células presentes em um volume finito, obteve-se a variação da fração total para este volume através da Equação (12). Desta forma, uma parte da variação da fração total ($\delta f_{s,P}^{t+\Delta t}$) foi calculada através de uma equação que considerou $T = T_{\text{Eut}}$ e uma outra parte foi calculada através de uma equação que considerou $T > T_{\text{Eut}}$. Finalmente, a variação na fração de sólido do volume ($\delta f_{s,P}^{t+\Delta t}$) foi utilizada na Equação (13) para o cálculo da temperatura do volume finito. Em diversos casos, esta equação forneceu valores de $T_P^{t+\Delta t}$ inferiores a T_{Eut} , mesmo quando $f_{s,P}^{t+\Delta t} < 1$, pois as temperaturas de algumas de suas células ainda eram maiores do que T_{Eut} , explicando a primeira inconsistência observada.

O submodelo microscópico, baseado no modelo autômato celular proposto originalmente por Gandin e Rappaz (1997), foi modificado para eliminar a inconsistência discutida. Quando a temperatura do volume finito, $T_P^{t+\Delta t}$ (malha do submodelo macroscópico), atingisse T_{Eut} , esta era mantida constante e igual a T_{Eut} até que $f_{s,P}^{t+\Delta t} = 1$, em lugar de ser calculada através da Equação (13). O resultado da simulação através do modelo modificado está apresentado na Figura 4. Observa-se que f_s aumenta bruscamente com a distância quando a temperatura do volume atinge T_{Eut} , e que o primeiro nó na região onde a temperatura está abaixo de T_{Eut} apresenta $f_s = 1$, reproduzindo o resultado físico esperado.

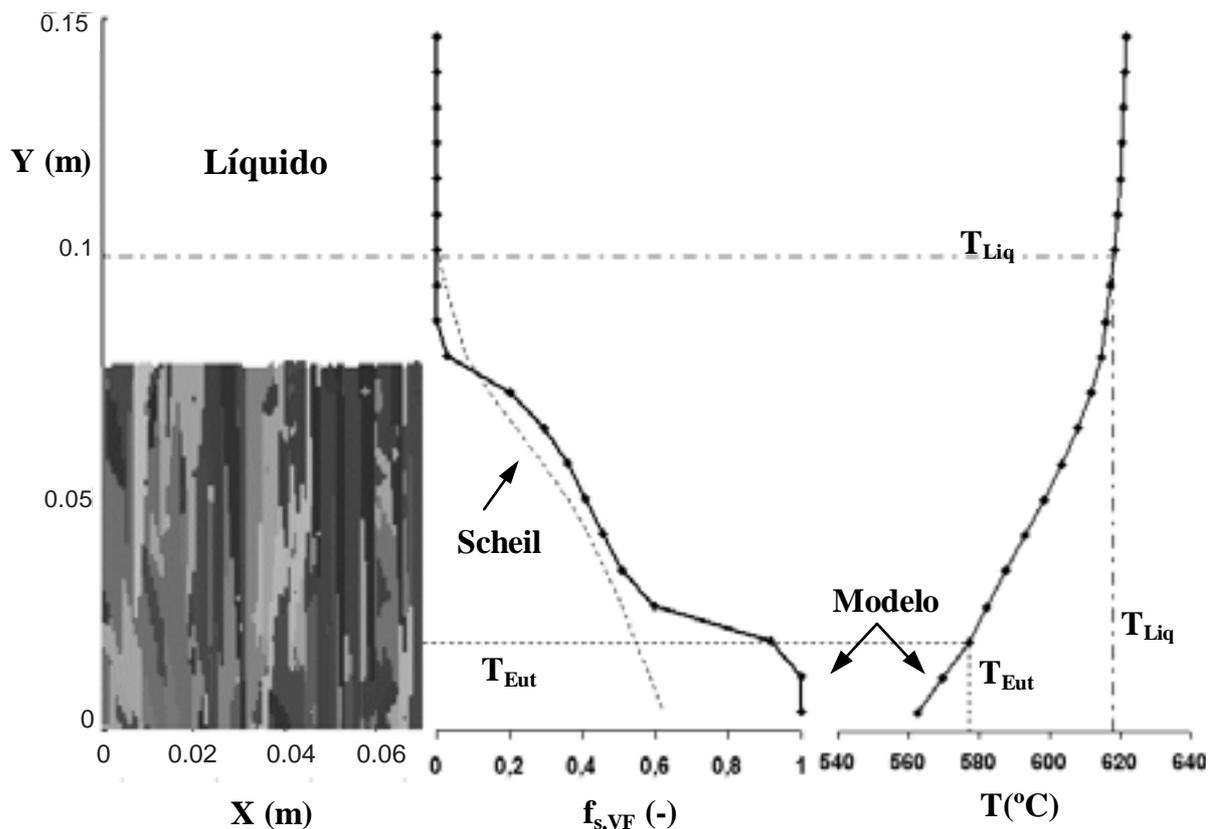


Figura 4- Macroestrutura de grãos, fração de sólido e perfil de temperatura calculados pelo modelo modificado. A fração de sólido resultante do modelo de Scheil (Kurz, & Fisher, 1989) está indicada pela linha pontilhada.

3.4. Acoplamento Microscópico-Macroscópico na Solidificação Primária

A segunda inconsistência do modelo autômato celular discutida anteriormente estava associada à diferença entre a fração de sólido fornecida pelo modelo e aquela calculada através da equação de Scheil (Kurz & Fisher, 1989) na região de solidificação primária ($T > T_{Eut}$). Após investigações, concluiu-se que esta diferença (Figura 2) era causada por dois efeitos: (1) o super-resfriamento necessário para a nucleação e o crescimento dos envelopes dendríticos e (2) a interpolação dos valores de variação de entalpia dos volumes finitos (submodelo macroscópico) para as células (submodelo microscópico).

Em relação ao primeiro efeito, deve-se entender que o modelo autômato celular implementado considera os super-resfriamentos para a nucleação e crescimento dos grãos, enquanto que a equação de Scheil, não. Segundo o modelo de Scheil, a fração de sólido será maior do que zero em temperaturas imediatamente abaixo da temperatura liquidus da liga. Por outro

lado, o modelo autômato celular considera que a fase sólida se formará no interior da célula apenas quando esta já tiver sido ativada. Esta ativação pode ocorrer através da nucleação ou do crescimento de envelopes dendríticos vizinhos. Logo, quando o super-resfriamento para a nucleação for diferente de zero e quando os envelopes necessitam de algum super-resfriamento para crescerem, esta célula poderá não estar ativada em regiões com temperaturas logo abaixo da temperatura liquidus. Portanto, o modelo autômato celular indicará $f_s = 0$ nesta região, enquanto a equação de Scheil indicará $f_s > 0$. Estes dois comportamentos são observados na região entre a frente de crescimento colunar e a temperatura liquidus apresentada na Figura 2.

Uma simulação especial foi conduzida com o objetivo de analisar o efeito dos super-resfriamentos para a nucleação e para o crescimento. Nesta simulação, um substrato para nucleação heterogênea com super-resfriamento crítico nulo foi posicionado em cada célula (malha do submodelo microscópico). Desta for-

ma, eliminaram-se os dois tipos de super-resfriamentos, pois no instante em que a temperatura da célula decrescia abaixo da temperatura liquidus, a célula era ativada imediatamente. O resultado desta simulação está apresentado na Figura 5, mostrando que a frente dendrítica de crescimento não está super-resfriada, ou

seja, acompanha a isoterma liquidus. Pode-se observar também que a fração de sólido fornecida pelo modelo autômato celular torna-se maior do que zero no momento em que a temperatura decrescia abaixo da temperatura liquidus, confirmando o mecanismo sugerido anteriormente.

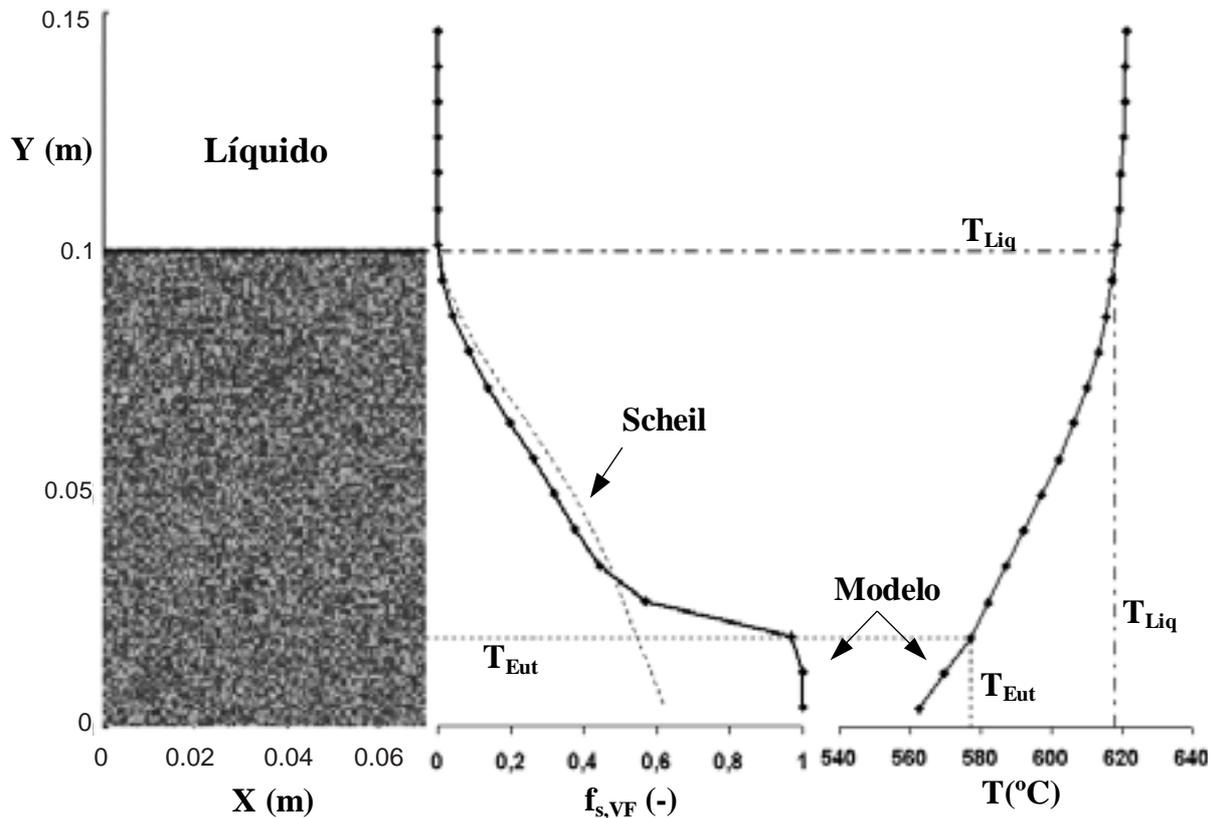


Figura 5 - Macroestrutura de grãos, fração de sólido e perfil de temperatura calculados pelo modelo modificado e considerando um super-resfriamento nulo para nucleação e crescimento. A fração de sólido resultante do modelo de Scheil (Kurz, & Fisher, 1989) está indicada pela linha pontilhada.

A Figura 5 mostra que a fração de sólido calculada pelo modelo está muito próxima daquela fornecida pela equação de Scheil. No entanto, ainda existe uma diferença que não deveria estar presente, já que o modelo de Scheil foi utilizado na obtenção das equações de acoplamento do modelo autômato celular. Acredita-se que esta diferença esteja associada à interpolação linear da variação de entalpia (δH). Como descrito na metodologia, a Equação (6) é utilizada para o cálculo da variação de entalpia do volume finito ($\delta H_P^{t+\Delta t}$), que faz parte da malha do submodelo macroscópico. Este valor foi assumido estar concentrado na posição do nó do volume. A variação de entalpia da célula, $\delta H_{CA}^{t+\Delta t}$,

por outro lado, é obtida através da interpolação dos valores calculados para os volumes finitos próximos. Posteriormente, o valor $\delta H_{CA}^{t+\Delta t}$ interpolado é introduzido na Equação (11), que fornecerá a variação de fração de sólido na célula do submodelo microscópico. Apesar da Equação (11) representar uma relação entre $\delta H_{CA}^{t+\Delta t}$ e $\delta f_{s,CA}^{t+\Delta t}$ que reflete exatamente o modelo de Scheil, o valor de $\delta H_{CA}^{t+\Delta t}$ não obedece exatamente ao princípio de conservação de energia para a célula, pois foi interpolado a partir dos valores calculados para os volumes finitos. Desta forma, o valor de $\delta f_{s,P}^{t+\Delta t}$, calculado a partir de $\delta f_{s,CA}^{t+\Delta t}$ (Equação (12)), e da variação de entalpia do volume finito, $\delta H_P^{t+\Delta t}$,

não refletem exatamente o modelo de Scheil. Em uma tentativa de confirmar esta hipótese, o número de volumes finitos (malha do submodelo macroscópico) foi definido igual ao número de células (submodelo microscópico), ou seja, existe uma célula para cada volume finito. Esta modificação não é vantajosa do ponto de vista computacional, pois o número de volumes finitos é desnecessariamente elevado, aumentando o tempo

de processamento. Entretanto, ela será utilizada para testar a hipótese formulada, porque desta forma os valores de $\delta H_{CA}^{t+\Delta t}$ não precisam ser interpolados. O resultado deste modelo modificado está apresentado na Figura 6. Nesta figura, nota-se que o perfil de fração de sólido fornecido pelo modelo automático celular é exatamente igual àquele fornecido pela equação de Scheil, reforçando a hipótese apresentada.

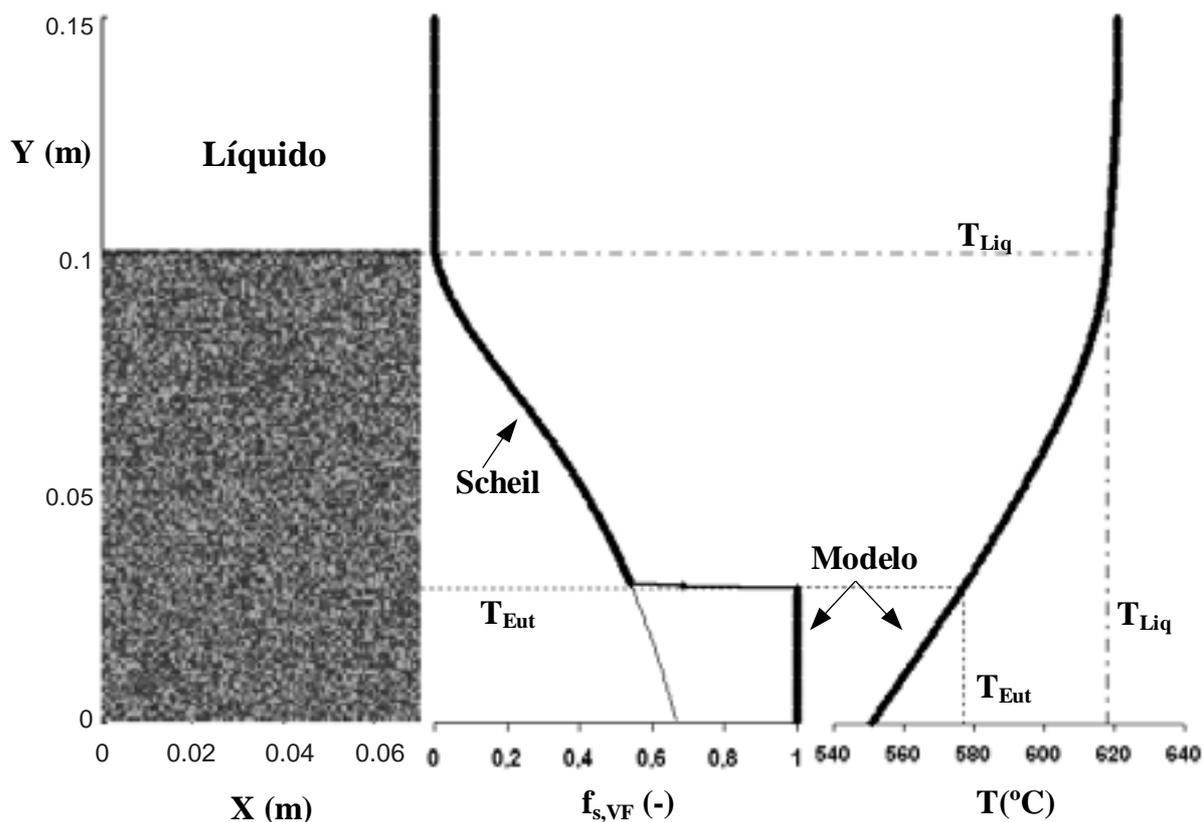


Figura 6 - Macroestrutura de grãos, fração de sólido e perfil de temperatura calculados pelo modelo modificado, considerando um super-resfriamento nulo para nucleação e crescimento e um número de volumes finitos igual ao de células. A fração de sólido resultante do modelo de Scheil (Kurz, & Fisher, 1989) está indicada pela linha pontilhada.

4. Conclusões

O presente trabalho apresenta uma análise crítica de um modelo matemático correntemente (Gandin & Rappaz, 1997) utilizado na literatura para a previsão da transferência de calor e da formação da macroestrutura de grãos durante a solidificação de ligas metálicas. O modelo foi implementado na forma de um programa computacional e aplicado à solidificação unidirecional da liga Al-7%Si. Os resultados das simu-

lações foram examinados, permitindo que diversas conclusões fossem obtidas.

Nota-se que o modelo implementado reproduz o super-resfriamento da frente de crescimento colunar e a transição colunar-equiaxial na solidificação unidirecional. A existência do super-resfriamento já foi observada em outros tipos de modelos e confirmada experimentalmente em dados publicados na literatura. No entanto, o modelo mostra algumas inconsistências importantes. Apesar de utilizar a hipótese de Scheil na

definição da Equação (11), o perfil de fração de sólido calculado não corresponde ao perfil fornecido pela equação de Scheil clássica (Kurz & Fisher, 1989). Os resultados mostram que, na região de solidificação primária, esta diferença é resultante do esquema de acoplamento entre os submodelos micro e macroscópicos e, também, da consideração dos super-resfriamentos para a nucleação e crescimento dos envelopes dendríticos.

Uma inconsistência observada ainda mais grave é a presença da fase líquida mesmo abaixo da temperatura da reação eutética, o que é impossível para uma liga binária quando não há super-resfriamento para o crescimento eutético. Os resultados indicam que esta inconsistência também é resultante do esquema de acoplamento entre os submodelos micro e macroscópicos e que este acoplamento pode ser facilmente modificado para eliminá-la.

Agradecimentos

Um dos autores (V.B.B.) agradece à Fundação para o Desenvolvimento Tecnológico da Engenharia (FDTE) pela Bolsa de Iniciação Tecnológica (BIT).

REFERÊNCIAS

- 1 CHO, S.-h.; OKANE, T.; UMEDA, T. CA-DFD Analysis of Nucleation Parameter Effects on the Grain Structures of Castings. **International Journal of Cast Metals Research**, v. 13, p. 327-35, 2001.
- 2 FLOOD, S.C.; HUNT, J.D. Columnar and Equiaxed Growth I. **Journal of Crystal Growth**, v. 82, p. 543-551, 1987.
- 3 FLOOD, S.C.; HUNT, J.D. **ASM Handbook**, ASM, Materials Park, Oh, v. 15, p. 130-36, 1998.
- 4 GANDIN, Ch.-A. From Constrained to Unconstrained Growth during Directional Solidification. **Acta Materialia**, v. 48, p. 2483-501, 2000.
- 5 RAPPAZ, M.; GANDIN, Ch.-A. Probabilistic Modelling of Microstructure Formation in Solidification Processes. **Acta Metallurgica**, v. 41, p. 345-60, 1993.
- 6 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.
- 7 GANDIN, Ch.-A.; RAPPAZ, M. A 3D Cellular Automaton Algorithm for the Prediction of Dendritic Grain Growth. **Acta Materialia**, v. 45, p. 2187-95, 1997.
- 8 GARCIA, A. **Solidificação - Fundamentos e Aplicações**. Campinas: Editora da Unicamp, 2001.
- 9 KURZ, W.; FISHER, D.J. **Fundamentals of solidification**. Aedermannsdorf, Trans Tech Publications Ltd., 1989.
- 10 MARTORANO, M.A.; BECKERMANN, C; GANDIN, Ch.-A. A solutal interaction mechanism for the columnar-to-equiaxed transition in alloy solidification. **Metallurgical and Materials Transactions A**, v. 34A, p. 1657-74, 2003.
- 11 PATANKAR, S.V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. New York: Publishing Corp., 1981.
- 12 SPITTLE, J.A.; BROWN, S.G.R. Computer Simulation of the Effects of Alloy Variables on the Grain Structures of Castings. **Acta Metallurgica**, v. 37, p. 1803-10, 1989.
- 13 WINEGARD, W.C.; CHALMERS, B.: Supercooling and Dendritic Freezing in Alloys, **Transactions of the ASM**, v. 46, p. 1214-23, 1954.