

Modelo matemático determinístico para previsão da macroestrutura bruta de solidificação

(Deterministic mathematical model for the prediction
of the as-cast macrostructure)

Davi Teves Aguiar

Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo
E-mail: davi.aguiar@poli.usp.br

Marcelo de Aquino Martorano

Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo
E-mail: martoran@usp.br

Resumo

Um modelo multifásico determinístico foi implementado para simular a solidificação unidirecional com o objetivo de prever a estrutura de grãos bruta de solidificação. O modelo consiste nas equações macroscópicas de conservação da energia, massa e espécies químicas, acopladas a leis de crescimento dendrítico. Foi adotado um modelo de nucleação dos grãos equiaxiais baseado em uma distribuição Gaussiana de super-resfriamentos. Em determinadas condições de nucleação, ocorrem oscilações nas curvas de resfriamento que impossibilitam a correta previsão do tamanho de grão médio ao longo da estrutura. Diversas simulações foram realizadas fora dessas condições, possibilitando uma análise do efeito do coeficiente de transferência de calor no tamanho de grão médio e na posição da transição colunar-equiaxial.

Palavras-chave: Modelo matemático, macroestrutura, transição colunar-equiaxial.

Abstract

A multiphase deterministic mathematical model was implemented to predict the formation of the grain macrostructure during unidirectional solidification. The model consists of macroscopic equations of energy, mass, and species conservation coupled with dendritic growth models. A grain nucleation model based on a Gaussian distribution of nucleation undercoolings was also adopted. At some solidification conditions, the cooling curves calculated with the model showed oscillations ("wiggles"), which prevented the correct prediction of the average grain size along the structure. Numerous simulations were carried out at nucleation conditions where the oscillations are absent, enabling an assessment of the effect of the heat transfer coefficient on the average grain size and columnar-to-equiaxed transition.

Keywords: *Mathematical model, macrostructure, columnar-to-equiaxed transition.*

1. Introdução

As propriedades finais de uma peça obtida por fundição estão intimamente relacionadas com a quantidade de grãos colunares e equiaxiais, que depende da região de transição colunar-equiaxial (CET - "columnar-to-equiaxed transition") presente na estrutura bruta de solidificação. Sabe-se que a CET ocorre durante a solidificação quando os grãos equiaxiais bloqueiam o crescimento dos grãos colunares (Flood & Hunt, 1988).

No primeiro modelo matemático determinístico, para a previsão da CET, proposto por Hunt (1984), para condições estacionárias, assumiu-se que a CET ocorreria quando a fração volumétrica de grãos equiaxiais imediatamente à frente das dendritas colunares atingisse o valor de 0,49 (bloqueio mecânico). Posteriormente, Wang e Beckermann (1994) desenvolveram um modelo multifásico e transiente, no qual três "pseudofases" distintas existiam no interior de um volume elementar representativo: sólido, líquido interdendrítico e líquido extradendrítico. Foi considerada, ainda, a troca de soluto entre envelopes imaginários envolvendo os grãos colunares e equiaxiais e o líquido extradendrítico. O critério do bloqueio mecânico também foi empregado para determinar a posição da CET. Martorano et al. (2003) estenderam o modelo de Wang e Beckermann (1994) e propuseram um mecanismo para a CET considerando as interações entre o crescimento colunar e o campo de soluto no líquido extradendrítico rejeitado pelas dendritas equiaxiais. Com o aumento do teor de soluto no líquido extradendrítico, o super-resfriamento para o crescimento dos grãos colunares e a sua velocidade tornavam-se aproximadamente nulos, ocasionando a CET.

O objetivo principal do presente trabalho é a implementação de um modelo matemático determinístico para a solidificação unidirecional para prever a posição da transição colunar-equiaxial e o tamanho médio de grão na região equiaxial, fornecendo uma previsão completa da macroestrutura de grãos.

2. Desenvolvimento do modelo matemático

O modelo matemático implementado no presente trabalho é baseado no modelo desenvolvido por Martorano et al. (2003), porém foi incluído um modelo que considera uma distribuição Gaussiana de super-resfriamentos críticos para nucleação dos grãos equiaxiais (Thévoz et al., 1989). Foram definidas três pseudofases distintas no interior de um volume elementar representativo: sólido (s); líquido interdendrítico (d); e líquido extradendrítico (l). As frações volumétricas de cada uma das três pseudofases são denotadas por ε_s , ε_d e ε_l , respectivamente ($\varepsilon_s + \varepsilon_d + \varepsilon_l = 1$). Os líquidos inter e extradendríticos são separados por um envelope imaginário que apenas toca os braços primários e secundários de dendrita. No caso de grãos equiaxiais, os envelopes são esféricos e envolvem cada grão equiaxial (Figura 1). Para os grãos colunares, entretanto, existe um envelope envolvendo cada braço primário (Wang & Beckermann, 1994).

As seguintes hipóteses foram também assumidas: (1) a extração de calor é unidirecional; (2) o líquido interdendrítico possui concentração de soluto (C_d) homogênea; (3) a concentração de soluto nesse líquido obedece ao diagrama de fases (equilíbrio termodinâmico com o sólido), ou seja, $C_d = (T - T_f)/m_p$, onde T é a temperatura local, T_f é a temperatura de fusão do metal puro e m_l é a inclinação da linha *liquidus* (aproximada por uma reta); (4) a difusão de soluto no sólido e os transportes de calor e massa por convecção são desprezíveis; (5) o calor específico (c_p) e a densidade (ρ) são constantes e iguais para todas as fases. A condutividade térmica (K) é dada pela média das condutividades da fase sólida (K_s) e das fases líquidas (K_l) ponderadas por suas frações volumétricas locais. Essas hipóteses permitem a definição do seguinte conjunto de equações diferenciais (Martorano et al., 2003)

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \rho L \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} \quad (1)$$

$$(1-k) C_d \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} = \varepsilon_d \frac{\partial C_d}{\partial t} + S_e \frac{D_l}{\delta_e} (C_d - C_l) \quad (2)$$

$$\frac{\partial (\varepsilon_l C_l)}{\partial t} = C_d \frac{\partial \varepsilon_l}{\partial t} + S_e \frac{D_l}{\delta_e} (C_d - C_l) \quad (3)$$

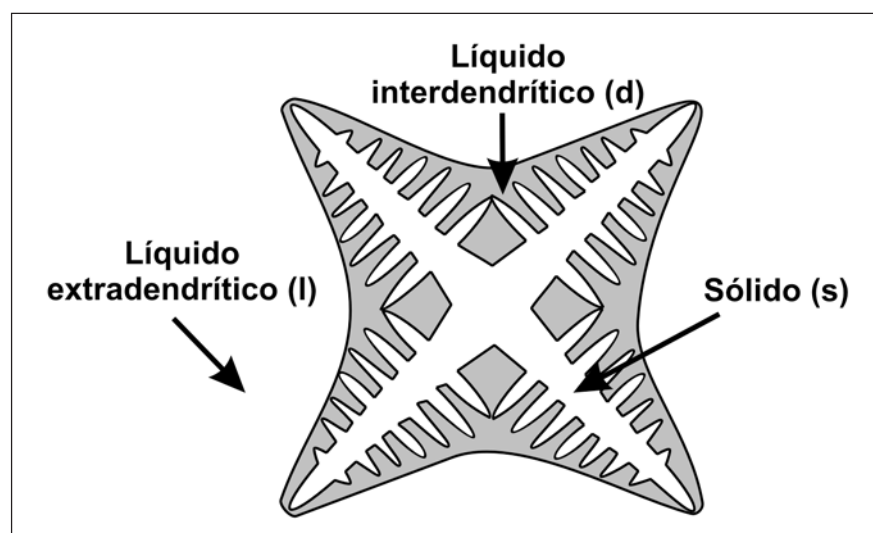


Figura 1 - Conceito de envelope de grão aplicado aos grãos equiaxiais.

onde L é o calor latente de fusão por unidade de massa; D_l é o coeficiente de difusão de soluto no líquido; S_e é a área interfacial do envelope por unidade de volume; δ_e é a espessura da camada efetiva de difusão de soluto ao redor dos envelopes e k é o coeficiente de partição de soluto.

A evolução temporal da fração volumétrica de grãos foi calculada por $\partial \varepsilon_g / \partial t = S_e V_r$, onde $\varepsilon_g = \varepsilon_s + \varepsilon_d$ é a fração de grãos e V_r é a velocidade de crescimento radial dos grãos equiaxiais e dos braços primários dos grãos colunares.

A posição da frente de crescimento colunar é calculada por

$$\frac{dx_{col}}{dt} = V_{col} \quad (4)$$

onde x_{col} é a posição da frente colunar e V_{col} é a velocidade dessa frente na direção de extração de calor. Quando os grãos equiaxiais atingem uma fração de 0,49 em x_{col} , estes são assumidos bloquear os grãos colunares (bloqueio mecânico).

A velocidade de crescimento radial dos grãos equiaxiais e colunares (V_r) e axial dos colunares (V_{col}) foi calculada através de (Martorano et al., 2003)

$$V_r = V_{col} = \frac{4\sigma^* D_l m_i (k-1) C_d (I_V^{-1}(\Omega))^2}{\Gamma} \quad (5)$$

onde $\sigma^* \approx 1/(4\pi^2)$ é a constante de estabilidade; Γ é o coeficiente de Gibbs-Thomson; I_V^{-1} é o inverso da função de Ivantsov e Ω é o super-resfriamento adimensional de soluto, calculado como $\Omega = (C_d - C_l) / [C_d(1-k)]$ para V_r e como $\Omega = (C_d - C_0) / [C_d(1-k)]$ para V_{col} , onde C_0 é a concentração média de soluto na liga.

No crescimento colunar $S_e = (6/\lambda_l)(1-\varepsilon)^{2/3}$, onde λ_l é o espaçamento entre os braços primários de dendrita. No caso do crescimento equiaxial, deve-se considerar que os grãos que nuclearam em instantes diferentes têm tamanhos distintos. Nesse caso, $S_e = \varepsilon_l S_{e-est}$ (Lameiras Júnior, 2006), onde S_{e-est} é a concentração de área estendida, definida como a área interfacial que os envelopes equiaxiais teriam, caso os seus contornos nunca se encontrassem. A evolução temporal de S_{e-est} foi calculada por $\partial S_{e-est} / \partial t = 8\pi V_e (nR_{e-est})$, onde n é a densidade local e instantânea do número de grãos equiaxiais e R_{e-est} é o raio estendido médio. A evolução de nR_{e-est} foi descrita por $\partial (nR_{e-est}) / \partial t = nV_r$. A densidade instantânea de número de grãos equiaxiais (n) depende da nucleação de novos grãos e pode ser calculada por um modelo de nucleação onde os super-resfriamentos críticos distribuem-se segundo a Gaussiana apresentada a seguir (Thévoz et al., 1989)

$$\frac{dn}{d\Delta T} = \left(\frac{\varepsilon_l n_o}{\sqrt{2\pi} \Delta T_\sigma} \right) \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta T - \Delta T_n}{\Delta T_\sigma} \right)^2 \right] \quad (6)$$

onde n_o é a densidade máxima possível de núcleos; ΔT_n é o super-resfriamento médio para nucleação e ΔT_σ é o desvio-

padrão. A espessura efetiva de difusão, δ_e , também depende do tipo de crescimento de grão e foi calculada como sugerido por Martorano et al (2003). O sistema de equações diferenciais e algébricas acopladas, apresentado anteriormente, foi solucionado numericamente através do método dos volumes finitos explícito (Aguiar, 2006).

3. Resultados e discussão

O presente modelo foi inicialmente validado comparando os seus resultados com os obtidos por diversos autores (Wang & Beckermann, 1993; Lameiras Júnior, 2006; Martorano et al., 2003; Wang & Beckermann, 1994). A seguir, a solidificação unidirecional de ligas do sistema Al-Si foi estudada. Um dos contornos do domínio de cálculo foi adiabático, enquanto, no outro contorno, considerou-se o fluxo de calor $q = h(T-T_a)$, onde h é o coeficiente de transferência de calor e T_a é uma temperatura de referência (298K). A solidificação equiaxial será examinada no item 3.1, enquanto, no item 3.2, será considerada também a transição colunar-equiaxial.

3.1 Solidificação equiaxial unidirecional

O modelo matemático implementado foi ajustado para simular a solidificação de grãos equiaxiais da liga Al-1%Si sob condições unidirecionais de extração de calor. Nesse caso, não houve o acompanhamento da frente colunar através da Eq. (4). Esse tipo de solidificação é muito comum em peças fundidas, especialmente com a adição de inoculantes.

Nas simulações, o domínio de cálculo foi de 0,01m e as propriedades e condições foram: $C_0=1,0$ (% peso); $h=500\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$; $T_f=933\text{K}$; $T_{liquidus}=927\text{K}$; $T_{eutético}=850\text{K}$; $L=372 \times 10^3\text{Jkg}^{-1}$; $c_p=1019,6\text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$; $K_s=K_l=90\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$; $\rho=2550\text{kg.m}^{-3}$; $D_l=3 \times 10^{-9}\text{m}^2\text{s}^{-1}$; $m_1=-6,0\text{K}(\% \text{ peso})^{-1}$; $k=0,13$; $\Gamma=9 \times 10^{-8}\text{K.m}$; $n_o=10^9\text{m}^{-3}$.

3.1.1 Efeitos da malha numérica

O efeito do número de volumes finitos da malha numérica sobre as curvas de resfriamento e a previsão do tamanho de grão foram examinados. Inicialmente, adotou-se o modelo de nucleação instantânea, no qual todos os núcleos surgem no líquido quando o seu super-resfriamento atinge o valor médio ΔT_n . Esse modelo é equivalente a adotar $\Delta T_\sigma = 0$ na Eq. (6). As curvas de resfriamento, para uma malha numérica de 50 volumes finitos, estão apresentadas na Figura 2(a), para uma distância de 0,1mm em relação ao contorno de extração de calor ($x=0,1\text{mm}$). As curvas correspondentes aos super-resfriamentos de 0K e 2K apresentam o comportamento esperado de uma curva de resfriamento de solidificação equiaxial, ou seja, a existência de uma única recalescência. Porém as curvas para super-resfriamentos de 4K e 6K apresentam oscilações ("wiggles"), observadas por diversos autores

(Thévoz et al., 1989; Wang & Beckermann, 1994; Martorano et al., 2003). Essas oscilações parecem um artefato numérico sem significado físico. Elas surgem com a propagação das recalcências que ocorrem em volumes finitos vizinhos em instantes diferentes. As recalcências de cada volume são propagadas por condução na malha numérica e acabam se sobrepondo, resultando nas oscilações periódicas observadas.

O número de volume finitos da malha (N) foi aumentado (Figura 2(b)), mostrando que a frequência e a amplitude das oscilações diminuem até N = 400, permanecendo constante para malhas mais refinadas. Logo, a malha tem um efeito parcial nas oscilações, que é eliminado para N ≥ 400, quando se atinge uma solução independente da malha. Dessa forma, as oscilações que ainda persistem devem pertencer à solução das equações do modelo, descartando-se a hipótese de artefatos numéricos.

Examinou-se o efeito da largura da distribuição de super-resfriamentos para nucleação (ΔT_n) nas curvas de resfriamento calculadas em $x = 0,1\text{mm}$ (Figura 3(a)) e na variação de tamanho de grão médio (TG) (Figura 3(b)), calculado a partir da densidade final de número de grãos (n) através da equação $TG = (0,5 / n)^{1/3}$ (Aguiar, 2006).

A Figura 3(a) mostra que as oscilações estão presentes quando $\Delta T_n = 0,1\text{K}$. Essas oscilações estão consistentes com aquelas mostradas na Figura 2(a), que equivalem ao caso $\Delta T_n = 0$, ou seja, nucleação instantânea. Na Figura 3(b), observa-se que as oscilações nas curvas de resfriamento são propagadas para o cálculo do tamanho de grão, que também mostra oscilações. Quando ΔT_n aumenta para 1K e 3K, as oscilações desaparecem, pois os grãos nucleiam em uma maior faixa de temperatura, distribuindo melhor a liberação de calor latente no intervalo de solidificação e evitando bruscas variações na densidade de núcleos formados. Na Figura 3(b), nota-se, ainda, que, nos casos onde não ocorreram as oscilações, uma malha com 50 volumes está adequada, pois fornece um

resultado muito semelhante ao obtido em uma malha de 200 volumes.

3.1.2 Previsão do tamanho de grão

No item anterior, notou-se que as oscilações não foram observadas nas simulações onde $1\text{K} \leq \Delta T_n \leq 3\text{K}$ para $\Delta T_n = 6\text{K}$. Conseqüentemente, neste item o tamanho médio de grão foi previsto dentro dessa faixa, examinando-se o efeito de ΔT_n e de h (coeficiente de transferência de calor), que é um parâmetro tecnológico importante nos processos de fundição. Na Figura 4(a), percebe-se que o tamanho de grão médio é menor junto ao contorno onde se extrai calor, onde

existe a maior taxa de resfriamento. Quando a distância ao contorno aumenta, a taxa de resfriamento diminui e o tamanho de grão aumenta. Esse comportamento, de forma geral, é observado experimentalmente.

O tamanho de grão médio é reduzido quando ΔT_n é alterado de 1,5K para 3K, pois a largura da distribuição de super-resfriamentos aumenta, resultando em uma maior quantidade de núcleos para um mesmo super-resfriamento do líquido ($< \Delta T_n$). Dessa forma, o tamanho de grão final torna-se menor. Na Figura 4(b), nota-se que um aumento no valor de h diminui o tamanho de grão médio, pois resulta em uma maior taxa de resfriamento ao longo do domínio.

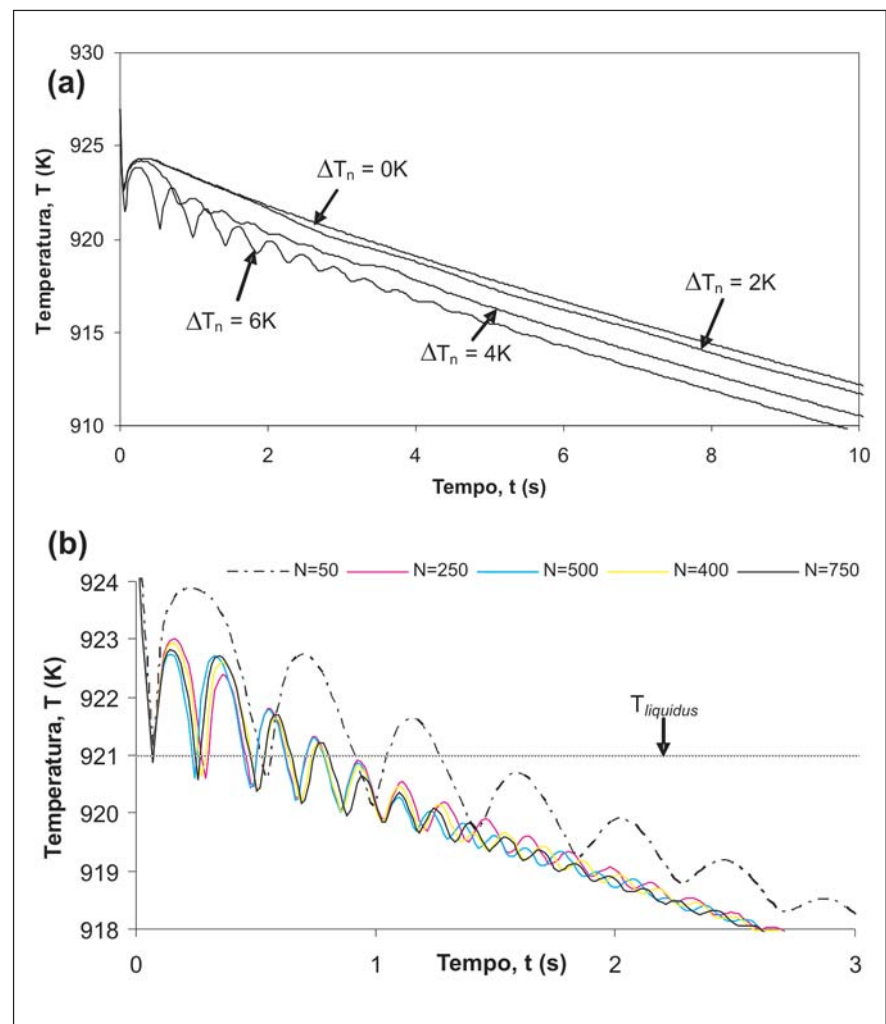


Figura 2 - Curvas de resfriamento calculadas para o volume finito adjacente ao contorno de extração de calor ($x = 0,1\text{mm}$) considerando nucleação instantânea ($\Delta T_n = 0$): (a) em função do super-resfriamento para nucleação (ΔT_n) com malha de 50 volumes e (b) em função do número de volumes (N) para $\Delta T_n = 6\text{K}$.

3.2 Transição colunar-equiaxial

No item anterior, o avanço da frente de grãos colunares não foi modelado, impossibilitando a obtenção da posição da CET. Nesse item, o acompanhamento da frente colunar foi realizado através da Eq. (4), permitindo a previsão da posição da CET nas simulações apresentadas na Figura 5. Novamente considerou-se a transferência de calor unidirecional em um domínio de cálculo de 0,15m, mas agora para uma liga Al-7%Si. As propriedades da liga e as condições utilizadas foram: $C_0=7,0$ (% peso); $T_f = 933\text{K}$; $T_{\text{liquidus}} = 891\text{K}$; $T_{\text{eutético}} = 850\text{K}$; $T_{\text{inicial}} = 1019\text{K}$; $L = 387,4 \times 10^3 \text{Jkg}^{-1}$; $c_p = 1126 \text{Jkg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$; $K_s = 137,5 \text{Wm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$; $K_l = 60,5 \text{Wm}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$; $\rho_s = 2452 \text{kgm}^{-3}$; $D_1 = 5,5 \times 10^{-9} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$; $m_1 = -6,0 \text{K}(\% \text{ peso})^{-1}$; $k=0,13$; $\Gamma = 1,96 \times 10^{-7} \text{K} \cdot \text{m}$; $n_0 = 1,5 \times 10^7 \text{m}^{-3}$; $\Delta T_n = 4\text{K}$; $\Delta T_\sigma = 1\text{K}$; $\lambda_1 = 1,5 \text{mm}$.

Na Figura 5(a), observa-se que o tamanho da zona colunar aumenta com o aumento do coeficiente de transferência de calor, pois ocorre um aumento do gradiente de temperatura na frente dos grãos colunares, deixando uma menor região super-resfriada para o crescimento dos grãos equiaxiais. Logo, os grãos colunares conseguem avançar uma maior distância antes do bloqueio. Wang e Beckermann (1994) também observaram esse comportamento utilizando um modelo matemático multifásico mais simples. A Figura 5(b) mostra que o tamanho de grão equiaxial diminui quando o coeficiente de transferência de calor aumenta. Esse efeito já foi observado no item anterior, onde foram considerados apenas os grãos equiaxiais. Nota-se, ainda, que a variação do tamanho de grão ao longo do domínio é menor para o maior valor de h ($1000 \text{Wm}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$).

4. Conclusões

Um modelo matemático multifásico para a solidificação unidirecional de ligas binárias foi implementado, no presente trabalho, considerando uma distribuição Gaussiana de super-resfriamentos para nucleação. O modelo foi utiliza-

do inicialmente para simular a solidificação unidirecional onde existem apenas grãos equiaxiais. Nota-se que as curvas de resfriamento apresentam oscilações que não correspondem ao comportamento de sistemas reais e que desaparecem quando o desvio-padrão da distribuição de super-resfriamentos (ΔT_σ) está na faixa entre 1K e 3K. Nessa faixa, o tamanho de grão calculado aumentou com o aumento da distância em relação à extremidade do domínio onde o calor é extraído. Um aumento na largura da distribuição, ΔT_σ , dentro da faixa examinada, resulta também em uma diminuição no tamanho de grão. O modelo foi utilizado para si-

mular a solidificação simultânea de grãos colunares e equiaxiais, permitindo a previsão do tamanho de grão ao longo da zona equiaxial e o tamanho da zona colunar, indicado pela posição da transição colunar-equiaxial. O aumento no coeficiente de transferência de calor, por outro lado, resulta em um aumento no tamanho da zona colunar, analogamente a outros modelos da literatura.

5. Agradecimentos

Os autores agradecem à FDTE pela Bolsa BIT e à FAPESP pelo auxílio nº 03/08576-7.

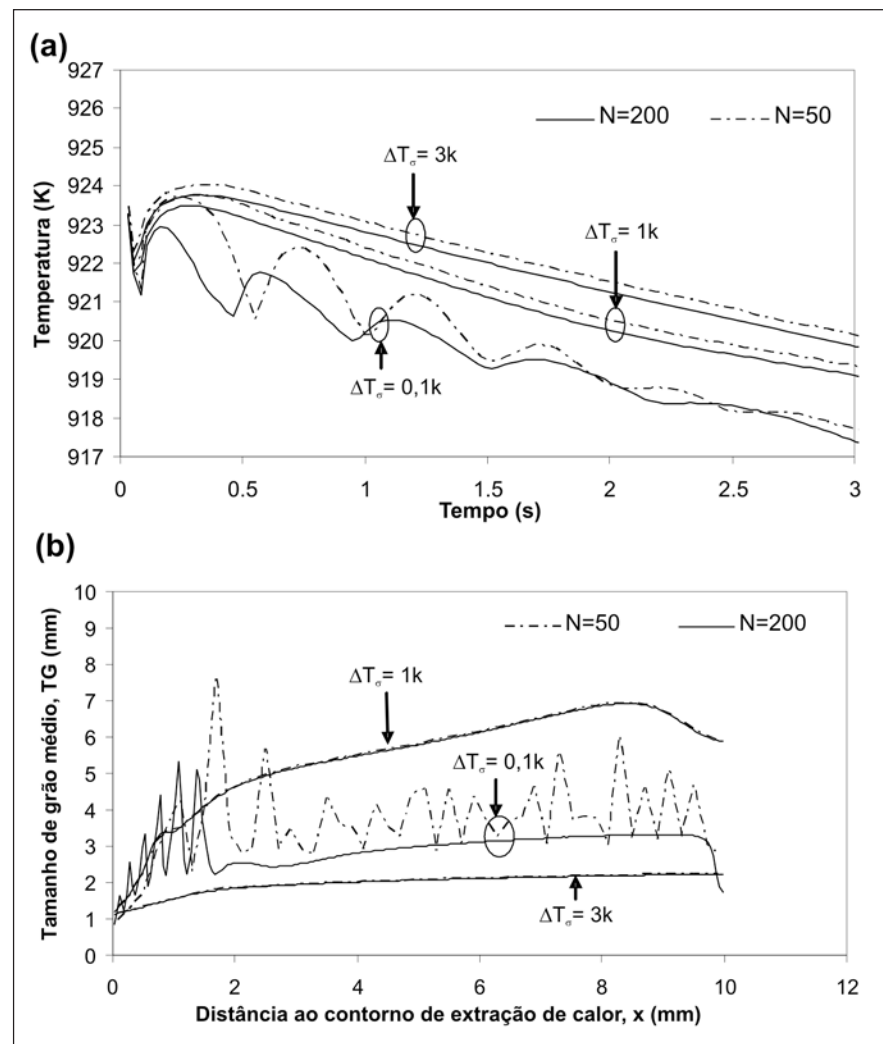


Figura 3 - Simulações com o modelo unidirecional utilizando malhas contendo 50 e 200 volumes finitos para um super-resfriamento de nucleação médio de $\Delta T_n = 6\text{K}$ e diversos valores de desvio-padrão ΔT_σ : (a) curvas de resfriamento para o volume adjacente à base extratora de calor; (b) tamanho de grão médio final em função da distância ao longo do domínio.

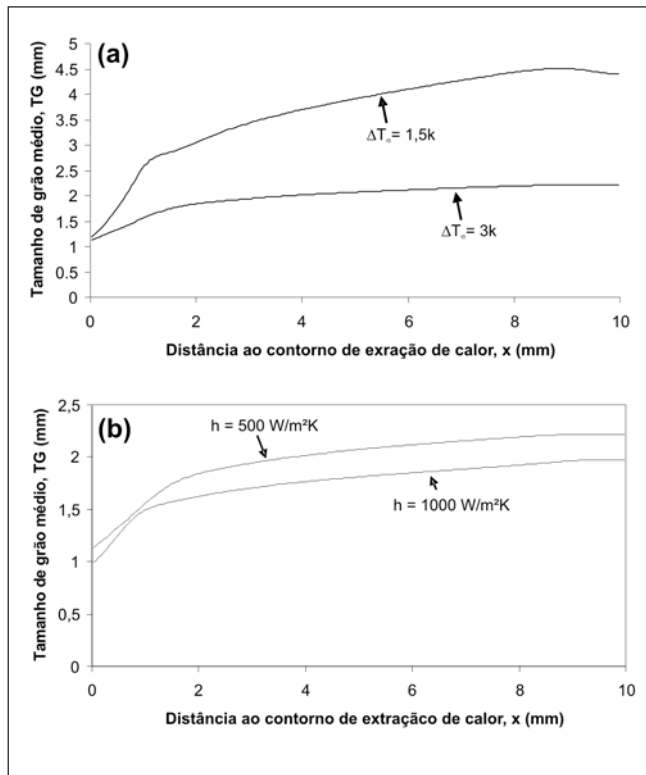


Figura 4 - Tamanho de grão médio em função da distância ao contorno de extração de calor para: (a) diferentes larguras de distribuição de super-resfriamentos (ΔT_{σ}) para $\Delta T_n = 6K$ e $h = 500 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$; (b) diferentes coeficientes de transferência de calor (h) para $\Delta T_n = 6K$ e $\Delta T_{\sigma} = 3K$.

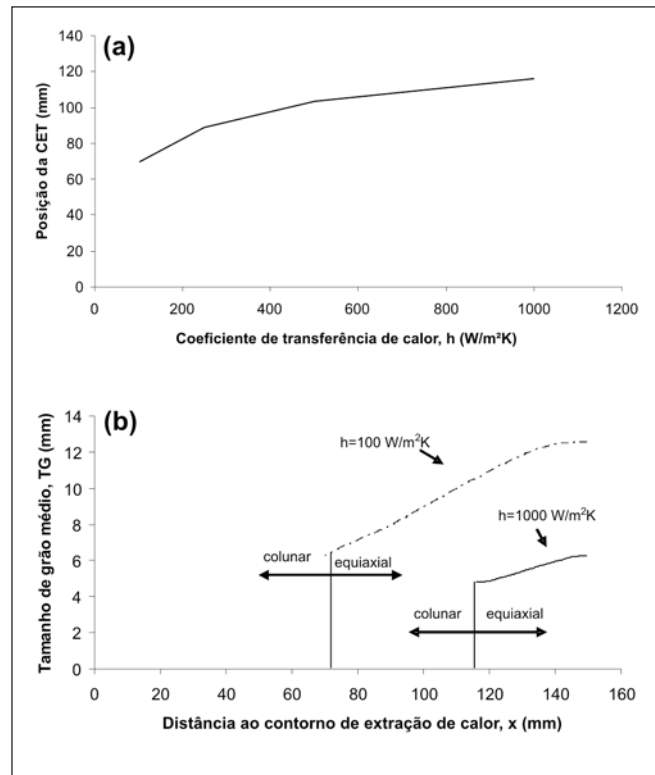


Figura 5 - a) Variação da posição da CET com o coeficiente de transferência de calor, h; b) Variação do tamanho de grão equiaxial em função da distância no interior da zona equiaxial a partir do final da zona colunar para diferentes valores de coeficiente de transferência de calor, h.

6. Referências bibliográficas

- [1] AGUIAR, D. T. *Modelagem matemática da solidificação equiaxial*. São Paulo: FDTE, 2006. 40p. (Relatório Final).
- [2] FLOOD, S. C., HUNT, J. D. *Colunar to equiaxed transition*. In: METALS HANDBOOK 9. ed. V. 15. Warrendale, ASM International, 1988. p. 130-136.
- [3] HUNT, J.D. Steady-State Columnar and Equiaxed Growth of Dendrites and Eutectic, *Materials Science and Engineering*, v. 65, p. 75-83, 1984.
- [4] LAMEIRAS JÚNIOR, F. *Efeito da nucleação de grãos nas previsões do modelo multifásico para a solidificação equiaxial*. São Paulo: Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2006. 99p. (Dissertação de Mestrado).
- [5] MARTORANO, M. A., BECKERMANN, C., GANDIN, Ch.-A. A solutal interaction mechanism for the columnar-to-equiaxed transition in alloy solidification, *Metallurgical and Materials Transactions A*, v. 34A, p. 1657-1674, 2003.
- [6] THÉVOZ, P., DESBIOLLES, J. L., RAPPAZ, M. Modeling of equiaxed microstructure formation in casting, *Metallurgical Transactions A*, v. 20A, p. 311-321, 1989.
- [7] WANG, C. Y., BECKERMANN, C. A multiphase solute diffusion model for dendritic alloy solidification, *Metallurgical Transactions A*, 1993, v. 24A, p. 2787-2802.
- [8] WANG, C. Y., BECKERMANN, C. Prediction of columnar to equiaxed transition during diffusion-controlled dendritic alloy solidification, *Metallurgical and Materials Transactions A*, v. 25A, p. 1081-1093, 1994.

Artigo recebido em 24/03/2008 e aprovado em 23/06/2008.

**A REM tem novo endereço:
Rua Carlos Walter Marinho Campos, 57
Bairro: Vila Itacolomy
35400-000 Ouro Preto - MG**