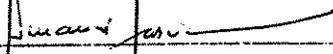


TESE OFFENDIDA POR IVALDO LEÃO FERREIRA

E APROVADA PELA

COMISSÃO JULGADORA EM 23/06/2004

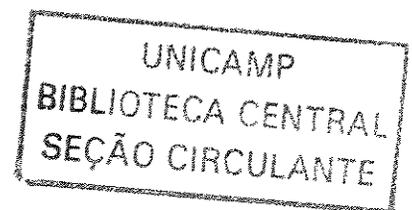

ORIENTADOR

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
COMISSÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
MECÂNICA

Análises Numérica, Analítica e Experimental
da Macrossegregação Inversa na
Solidificação

Autor: Ivaldo Leão Ferreira
Orientador: Prof. Dr. Amauri Garcia

06/04



UNIDADE	BC
Nº CHAMADA	+/UNICAMP
	F413a
V	EX
TOMBO BC/	63599
PROC.	16.P.00086-05
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	11,00
DATA	12/05/05
Nº CPD	

BIBID - 349314

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

F413a

Ferreira, Ivaldo Leão

Análises numérica, analítica e experimental da
macrosegregação inversa na solidificação / Ivaldo Leão
Ferreira.--Campinas, SP: [s.n.], 2004.

Orientador: Amauri Garcia.

Tese (Doutorado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica.

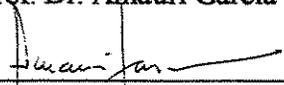
1. Solidificação. 2. Análise numérica. 3. Método dos
volumes finitos. 4. Metalurgia física. I. Garcia, Amauri.
II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de
Engenharia Mecânica. III. Título.

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
COMISSÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE MATERIAIS

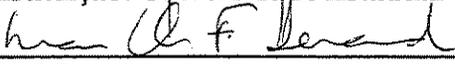
TESE DE DOUTORADO

Análises Numérica, Analítica e
Experimental da Macrossegregação Inversa
na Solidificação

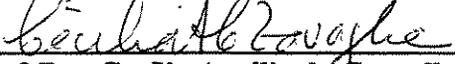
Autor: Ivaldo Leão Ferreira
Orientador: Prof. Dr. Amauri Garcia



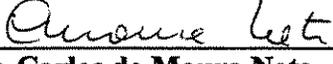
Prof. Dr. Amauri Garcia , Presidente
Instituição: Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP



Prof. Dra. Maria Clara Filippini Ierardi
Instituição: Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP



Prof. Dra Cecília Amélia de Carvalho Zavaglia
Instituição: Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP



Prof. Dr. Carlos de Moura Neto
Instituição: Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA



Prof. Dr. José Deodero Trani Capocchi
Instituição: Escola Politécnica da USP - EPUSP

Campinas, 23 de Junho de 2004

Dedicatória:

Este trabalho é dedicado à memória de Elias Leão Ferreira e Felix Augusto Leão Ferreira.

Agradecimentos

Presto aqui meus sinceros agradecimentos àquelas pessoas que foram fundamentais ao desenvolvimento deste trabalho.

Primeiramente ao Bom Deus, que por sua infinita misericórdia me permitiu galgar um passo tão grande e difícil no caminhar desta vida.

Aos meus pais Augusta Alamar Leão Ferreira e Felix Leão Ferreira, pelo incentivo em todos os momentos difíceis deste trabalho.

A Marília Aguiar Lorenzoni, Acácio Lorenzoni e Kassius Lorenzoni, pela amizade sincera.

À minha esposa Kristianny Aguiar Lorenzoni, pela compreensão e dedicação a mim dispensada.

À Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Estadual de Campinas, pelo programa de pós-graduação.

Ao Prof. Dr. Amauri Garcia, pela orientação irrepreensível no desenrolar deste trabalho.

Aos amigos e colegas do Grupo de Pesquisa em Solidificação: Dr. Wislei Riuper, Dr. Carlos Alexandre dos Santos, Dr. Noé Cheung, Prof. Dr. Otávio Rocha, Prof. Dr. José Carlos Pires, Dr. Cláudio Alves de Siqueira Filho, José Eduardo Spinelli, Eduardo Souza Netto, Prof. Fernando Sá, Prof. Manoel Diniz Peres, Daniel Rosa e Alexandre Pitol.

Às Professoras do Departamento de Materiais, Dra. Cecília Zavaglia, Dra. Célia Freire e Dra. Maria Clara Ierardi.

Ao amigo, Prof. Dr. João Lobo Peralta.

Aos técnicos do Laboratório de Caracterização de Materiais da Faculdade de Engenharia Mecânica, pelo grande apoio.

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo – FAPESP, pelo financiamento deste Projeto de Doutorado.

Resumo

FERREIRA, Ivaldo Leão, *Análises Numérica, Analítica e Experimental da Macrossegregação Inversa na Solidificação*, Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 2004. Tese (Doutorado)

O presente trabalho analisa as influências do teor de soluto, do superaquecimento e do coeficiente global de transferência de calor metal/fluido (h_g), na macrossegregação inversa durante a solidificação unidirecional vertical ascendente de ligas binárias Al-Cu e ternária Al-Cu-Si. Os perfis experimentais de segregação ao longo dos lingotes para as ligas Al-4,5%Cu, Al-6,2%Cu, Al-8,1%Cu e Al-8,1%Cu-3%Si são comparados com as predições teóricas fornecidas por modelos numérico e analítico, com perfis transitórios de (h_g) sendo determinados em cada experimento. O modelo analítico é baseado num modelo analítico de transferência de calor [Garcia, 2001], acoplado a uma formulação clássica para a redistribuição local de soluto proposta por Flemings e Nereo [Flemings e Nereo, 1967]. O modelo numérico é aquele proposto por Voller [Voller, 1997], com modificações introduzidas levando em consideração diferentes propriedades termofísicas para as fases líquida e sólida, coeficiente global de transferência de calor metal/fluido variável com o tempo e malha com distribuição de comprimento de nós variável ao longo do domínio, o que garantiu a precisão dos resultados sem aumento excessivo do número de nós. Além dessas modificações, fez-se necessária a mudança no critério de convergência para melhor representar os gradientes térmicos e taxas de resfriamento. Um modelo semi-analítico para a macrossegregação inversa, baseado na solução por variável de similaridade, é aplicado para validação do modelo numérico. Observa-se que as predições numéricas apresentam boa concordância com as medidas experimentais, e que as predições analíticas, apesar de sua relativa simplicidade, também é capaz de representar satisfatoriamente os resultados

experimentais, exceto para condições de elevado superaquecimento. O modelo numérico é aplicado com sucesso para a situação de solidificação de ligas multicomponentes, representada pela liga Al-8,1%Cu-3%Si, onde é observada boa representatividade dos resultados experimentais.

Palavras Chave

Solidificação, Segregação Inversa, Ligas Binárias e Multicomponentes, Modelagem Analítica e Numérica da Solidificação de Ligas.

Abstract

FERREIRA, Ivaldo Leão, *Numerical, Analytical and Experimental Analysis of Inverse Segregation during Solidification*, Campinas: Faculty of Mechanical Engineering, State University of Campinas, 2004. Doctorate Thesis.

The present work focuses on the influences of alloy solute content, melt superheat, and metal/fluid heat transfer coefficients on inverse segregation during upward solidification of Al-Cu and Al-Cu-Si alloys. The experimental segregation profiles of Al-4,5 wt % Cu, Al-6,2 wt % Cu, Al-8,1 wt % Cu and Al-8,1 wt % Cu-3 wt % Si alloys are compared with theoretical predictions furnished by analytical and numerical models, with transient (h_g) profiles being determined in each experiment. The analytical model is based on an analytical heat transfer model coupled with the classical local solute redistribution equation proposed by Flemings and Nereo. The numerical model is that proposed by Voller, with some changes introduced to take into account different thermophysical properties for liquid and solid phases, time variable metal/fluid interface heat-transfer coefficient, and a variable space grid along the domain in order to assure the accuracy of results without raising the number of nodes. Furthermore, changes in the convergence criterion were necessary to improve the accuracy of the thermal gradients and solidification rates calculated numerically. A sophisticated semi-analytical solution for the inverse segregation based on the similarity variable is carried out to validate the numerical model. It is observed that the numerical predictions generally conform with the experimental segregation measurements and that the predicted analytical segregation, despite its simplicity, also compares favorably with the experimental scatter except for high melt superheat. The numerical model is successfully applied for a situation of multicomponent alloy solidification, i.e., Al-8,1 wt % Cu-3 wt % Si alloy, and it is found to be in good agreement with experimental results.

Key Words

Solidification, Inverse Segregation, Binary and Multicomponent Alloys, Analytical and Numerical Modeling of Alloy Solidification.

Índice

LISTA DE FIGURAS	xiv
LISTA DE TABELAS	xxiii
NOMENCLATURA	xxiv
Capítulo 1	1
1- INTRODUÇÃO	
1.1- Considerações Iniciais	1
1.2- Objetivos	4
Capítulo 2	6
2- MACROSSEGREGAÇÃO NA SOLIDIFICAÇÃO	
2.1 - Coeficiente de Redistribuição de Solutos	6
2.2 - Macrossegregação	8
2.2.1 - Segregação Normal	8
2.2.2 - Segregação Inversa	11

Capítulo 4	78
4- MATERIAIS E MÉTODOS	
4.1 - Análise Experimental	78
4.2 - Equipamentos e Componentes Utilizados	78
4.3 - Materiais Utilizados	87
4.4 - Descrição dos Experimentos	87
Capítulo 5	98
5- RESULTADOS E DISCUSSÕES	
5.1 - Validação Preliminar do Modelo Numérico	98
5.2 - Coeficiente Transitório de Transferência de Calor Metal/Fluido	102
5.3 - Evolução da Solidificação: Resultados Experimentais e Validação dos Modelos Analíticos e Numérico	109
5.4 - Confronto de Perfis de Segregação Inversa: Numéricos, Analíticos e Experimentais	115
5.5 - Influencia do Teor de Solute da Liga no Perfil de Segregação Inversa	119
5.6 - Validação do Modelo Numérico para Ligas Multicomponentes	120
Capítulo 6	124
6- CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA PRÓXIMOS TRABALHOS	
6.1 - Conclusões	124
6.2 - Sugestões para Futuros Trabalhos	126
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	128

ANEXOS I

1A

ANEXOS II

1B

LISTAS DE FIGURAS

CAPÍTULO 1

Figura 1.1 - Correlação entre perfil térmico e perfil de soluto durante a solidificação

Figura 1.2 – Evolução da distribuição de soluto para as situações de (a) microsegregação e de (b) macrosegregação.

CAPÍTULO 2

Figura 2.1 – Representação esquemática do diagrama de equilíbrio de ligas binárias: (A) $k_0 < 1$; (B) $k_0 > 1$; T_{liq} temperatura liquidus e T_{sol} temperatura solidus.

Figura 2.2 – Segregação normal na solidificação de um lingote colunar.

Figura 2.3 – Distribuição de soluto típica de solidificação com frente plana com alterações na velocidade de deslocamento da interface sólido/líquido durante o processo.

Figura 2.4 – Representação esquemática dos fenômenos de macrosegregação normal e inversa.

Figura 2.5 – Configuração das dendritas utilizadas no modelo de Weinberg e colaboradores [Minakawa, Samarasekera e Weinberg, 1985] mostrando o posicionamento dos elementos i e j .

Figura 2.6 – O domínio do problema: (a) Fluido pastoso ($u_s = u_L$); (b) Estrutura colunar dendrítica ($u_s = 0$ ou prescrita); (c) Representação de microestrutura dispersa $\bar{c} = f_s C_s + f_L C_L$; (d) Representação de microestrutura distinta; (d) (i) Difusão infinita (regra da alavanca); (d) (ii) Nenhuma difusão no sólido (regra de Scheil).

Figura 2.7 – Representação esquemática da formação da estrutura dendrítica na zona pastosa para o cálculo dos gradientes de concentração de soluto. A cor vermelha representa região enriquecida e a cor azul região empobrecida para: (A) situação de microestrutura real de geometria complexa e (B) volume elementar representativo desta microestrutura.

Figura 2.8 – Esquema de solidificação vertical ascendente unidirecional apresentado por Voller e Sundarraj [Voller e Sundarraj, 1995] incluindo perfil inverso de concentração de soluto.

Figura 2.9 – Processo de resfriamento direto e a distribuição de soluto comumente observada dos elementos de liga.

Figura 2.10 – Fluxograma do modelo de multi-escala e os respectivos parâmetros passados entre os níveis.

CAPÍTULO 3

Figura 3.1 - (A) Movimento das isoterms liquidus e eutética e (B) distribuição de líquido na zona pastosa (linear f'_L por z' , assumindo $f'_E = 0$).

Figura 3.2 - Seção esquemática de um diagrama de fases segundo o sistema de referência adotado pelo modelo analítico.

Figura 3.3 - Perfil de concentração de soluto analítico para a zona pastosa.

Figura 3.4 - Sistema de referência adotado para o problema de segregação inversa (A), vertical ascendente e (B) vertical descendente.

Figura 3.5 - Disposição dos volumes de controle segundo o arranjo de malha desencontrada.

Figura 3.6 - Fluxo de calor através da interface metal/molde.

Figura 3.7 - Resistências térmicas na interface metal/molde em molde refrigerado.

Figura 3.8 - Distribuição constante da malha ao longo do lingote (A). Distribuição da malha modificada ao longo do lingote (B). Comparação dos perfis térmicos a 5 mm da base com malha constante e variável (C). Comparação dos perfis de concentração de soluto com malha constante e variável (D).

Figura 3.9 - Perfil de concentração de soluto alterando-se as propriedades termofísicas.

Figura 3.10 – Representação esquemática do processo de segregação de soluto no sistema ternário Al-Cu-Si.

CAPÍTULO 4

Figura 4.1 – Fluxograma dos experimentos realizados.

Figura 4.2 - Cadinho de grafita (A); Forno elétrico utilizado na fusão das ligas (B); e balança digital (C).

Figura 4.3 - Lingoteira convencional de aço inox (esquerda) e chapa molde de aço carbono que separa o metal do fluido de refrigeração (direita) (A) e forno de solidificação unidirecional vertical ascendente (B).

Figura 4.4 - Lingoteira bipartida de aço inox (esquerda) e chapa molde de aço carbono ou aço inox que separa o metal do fluido de refrigeração (direita) (A) e ampliação da região através do qual os termopares são introduzidos (B).

Figura 4.5 - Termopar acoplado a um conector microprocessado (A); Sistema de Aquisição de dados (B) e Software utilizado no registro das temperaturas envolvidas nos experimentos (C).

Figura 4.6 – Resultados experimentais do teor de cobre ao longo das amostras determinados por espectrometria de raios X e por espectroscopia de comprimento de onda dispersa (WDS).

Figura 4.7 – Resultados experimentais do teor de cobre ao longo das amostras determinados por espectrometria de raios X e por espectroscopia de comprimento de onda dispersa (WDS).

Figura 4.8 – Relatório original de análise de espectrometria de fluorescência de raios X para os metais componentes das ligas em [%peso de componente]: Alumínio comercialmente puro e (A) Cobre eletrolítico (B). A primeira coluna (à esquerda) representa o elemento presente e a última coluna (à direita) representa a percentagem de cada elemento presente.

Figura 4.9 - Vista em corte do dispositivo de solidificação unidirecional ascendente (A) e (B) representação esquemática do corte longitudinal do dispositivo com ênfase para a posição e profundidade dos termopares e câmara de vazamento segundo o sistema convencional de lingoteiras.

Figura 4.10 - Curva de resfriamento utilizada para quantificar e qualificar a liga Al-8,1%Cu.

Figura 4.11 – Parte do diagrama Al-Cu simulado pelo software Thermo-Calc utilizado na verificação das temperaturas liquidus das ligas bem como na simulação numérica da solidificação

Figura 4.12 – Diagrama Al-Cu-Si simulado construído a partir da combinação linear das linhas liquidus dos binários Al-Cu e Al-Si e pelo cálculo da mínima energia livre para determinação do vale eutético.

Figura 4.13 – Lingote cilíndrico original (A), porção maior do lingote utilizada para obtenção do bloco para leituras de concentração (B), porção menor utilizada para revelação da macrografia (C) e bloco extraído de dimensões 17x17x90 mm (D).

Figura 4.14 - Esquema do processo experimental para obtenção dos parâmetros térmicos e de composição no processo de solidificação unidirecional.

Figura 4.15 – Lingote de Al-8,1%Cu solidificado unidirecionalmente na forma vertical em molde refrigerado a água. (A). Barra de 17 mm x 17 mm x 90 mm extraída da região central do lingote para realização de medida de concentração de soluto (B).

Figura 4.16 – Amostra de 17 mm x 17 mm x 1 mm submetida à espectrometria de fluorescência de raios X.

CAPÍTULO 5

Figura 5.1 - Comparação dos perfis de temperatura semi-analíticos e numéricos correspondentes às simulações de 250, 500 e 1000 segundos.

Figura 5.2 - Comparação das frações de líquido semi-analíticas e numéricas correspondentes às simulações de 250, 500 e 1000 segundos.

Figura 5.3 - Comparação das frações de líquido semi-analíticas e numéricas correspondentes às simulações de 250, 500 e 1000 segundos.

Figura 5.4 - Perfis de concentração de soluto numérico segundo os modelos de Clyne e Kurz e de Wang e Beckermann [Wang e Beckermann, 1993 ; Clyne e Kurz, 1981].

Figura 5.5 - Curvas de resfriamento experimentais e simulação numérica para a liga Al-6,2%Cu simulada com o superaquecimento constante de 20 °C ao longo do lingote (A) ampliação para os dez primeiros segundos (B).

Figura 5.6 – Ajuste de curva proveniente de pontos experimentais em função da posição para obtenção da distribuição inicial de temperatura no lingote ($t = 0$) para Al-6,2%Cu em unidades SI, conforme dados de entrada no programa numérico, para a situação referente à Figura 5.8 (A) ampliação para os dez primeiros segundos (B).

Figura 5.7 – Comparação entre os perfis de h_g obtidos pela simulação numérica dos resultados experimentais apresentados na Figura 5.5 para a liga Al-6,2%Cu considerando distribuição de temperatura inicial constante (curva vermelha) e distribuição inicial de temperatura em função da distância a chapa molde (curva azul).

Figura 5.8 - Curvas de resfriamento experimentais e simulação numérica para a liga Al-4,5%Cu submetida ao superaquecimento de 64 °C.

Figura 5.9 - Curvas de resfriamento experimentais e simulação numérica para a liga Al-6,2%Cu, submetida ao superaquecimento de 20 °C.

Figura 5.10 - Curvas de resfriamento experimentais e simulação numérica para a liga Al-6,2%Cu, submetida ao superaquecimento de 63 °C.

Figura 5.11 - Curvas de resfriamento experimentais e simulação numérica para a liga Al-6,2%Cu, submetida ao superaquecimento de 113 °C.

Figura 5.12 - Curvas de resfriamento experimentais e simulação numérica para a liga Al-8,1%Cu, submetida ao superaquecimento de 22 °C.

Figura 5.13 - Coeficiente global de transferência de calor metal/fluido (h_g) em função do tempo.

Figura 5.14 – Comparações das velocidades das isothermas solidus e liquidus analíticas, numéricas e experimentais em função da posição para a liga Al-4,5%Cu e temperatura inicial do líquido de 63 °C acima da temperatura liquidus.

Figura 5.15 – Comparações das velocidades das isothermas solidus e liquidus analíticas, numéricas e experimentais em função da posição para a liga Al-6,2%Cu e temperatura inicial do líquido de 20 °C acima da temperatura liquidus.

Figura 5.16 – Comparações das velocidades das isothermas solidus e liquidus analíticas, numéricas e experimentais em função da posição para a liga Al-6,2%Cu e temperatura inicial do líquido de 63 °C acima da temperatura liquidus.

Figura 5.17 – Comparações das velocidades das isothermas solidus e liquidus analíticas, numéricas e experimentais em função da posição para a liga Al-6,2%Cu e temperatura inicial do líquido de 113 °C acima da temperatura liquidus.

Figura 5.18 – Comparações das velocidades das isothermas solidus e liquidus analíticas, numéricas e experimentais em função da posição para a liga Al-8,1%Cu e temperatura inicial do líquido de 15°C acima da temperatura liquidus.

Figura 5.19 - Comparação entre os perfis de concentração experimentais WDS e fluorescência de raios X e previsões dos modelos numérico e analítico (A). Macrografia do lingote de composição nominal Al-4,5%Cu com superaquecimento médio de 64 °C (B).

Figura 5.20 - Comparação entre os perfis de concentração experimental obtido por fluorescência de raios X e previsões dos modelos numérico e analítico (A). Macrografia do lingote de composição nominal Al6,2%Cu com superaquecimento médio de 20 °C (B).

Figura 5.21 - Comparação entre os perfis de concentração experimental obtido por fluorescência de raios X e previsões dos modelos numérico e analítico (A). Macrografia do lingote de composição nominal Al-6,2%Cu com superaquecimento médio de 63 °C (B).

Figura 5.22 - Comparação entre os perfis de concentração experimental obtido por fluorescência de raios X e previsões dos modelos numérico e analítico (A). Macrografia do lingote de composição nominal Al-6,2%Cu com superaquecimento médio de 113 °C (B).

Figura 5.23 - Comparação entre os perfis de concentração experimental obtido por fluorescência de raios X e previsões dos modelos numérico e analítico (A). Macrografia do lingote de composição nominal Al-8,1%Cu com superaquecimento médio de 15 °C (B).

Figura 5.24 – Perfis de segregação inversa simulados ao longo de lingotes solidificados de Al-5%Cu, 6% e 7% Cu com 30 mm de comprimento parametrizando o coeficiente global de transferência de calor em $h_g = 11200.t^{-0,022} \text{ W/m}^2.\text{K}$.

Figura 5.25 – (A) Típica resposta térmica experimental em molde refrigerado para a liga Al-8,1%Cu-3%Si comparada com simulação numérica para determinação do perfil transiente de h_g . (B) Macroestrutura direcional

Figura 5.26 – Comparação entre resultados numéricos e experimentais para os perfis de segregação de soluto.

LISTAS DE TABELAS

CAPÍTULO 4

Tabela 4.1 - Propriedades termofísicas das ligas [Quaresma, Santos e Garcia, 2000].

Tabela 4.2 - Relação dos experimentos realizados.

Nomenclatura

Letras latinas

\bar{C}_s = Concentração média do sólido em [% em peso];

\bar{C} = Concentração média em determinado ponto após a solidificação [% em peso];

\dot{T} = taxa de resfriamento [K / s];

$\frac{dg}{dT}$ = coeficiente temperatura-líquido [1/K];

$\langle C_s \rangle$ = volume médio intrínseco utilizado pelo modelo semi-analítico para o cálculo da concentração na zona pastosa;

\dot{m} = vazão do fluido de refrigeração [kg / s];

A = área da seção transversal em [m²] ou soluto hipotético;

a' = constante do coeficiente global de transferência de calor na interface metal/fluido;

a_N = coeficiente norte proveniente da técnica numérica de volumes finitos;

a^{old} = coeficiente proveniente da técnica numérica de volumes finitos no tempo anterior;

a_P = coeficiente polar ou central proveniente da técnica numérica de volumes finitos;

a_S = coeficiente sul proveniente da técnica numérica de volumes finitos;

b = coeficiente utilizado pelo algoritmo TDMA;

b' = constante do coeficiente global de transferência de calor na interface metal/fluido;

B = soluto hipotético;

c = calor específico [J / kg.K];

C = Concentração de soluto em [% peso] ou coeficiente inercial no modelo numérico de Chen e Tsai [Diao e Tsai, 1993] [adimensional];

C_0 = concentração nominal da liga [% em peso];

C_E = concentração eutética do sistema [% em peso] ;

c_L = calor específico do líquido em [J / kg.K];

C_L = percentagens de soluto nas fases líquida em equilíbrio [% em peso];

C_{max} = máxima concentração no lingote solidificado [% em peso];

C_{\min} = mínima concentração no lingote solidificado em [% em peso];
 c_s = calor específico do sólido em [J / kg.K];
 C_s = percentagens de soluto nas fases sólida em equilíbrio [% em peso];
 c_{SL} = calor específico na zona pastosa em [J / kg.K];
 D = difusividade do soluto em [m² / s];
 d = tamanho de grão em [m];
 D_L = difusividade do soluto no líquido [m² / s];
 D_s = difusividade do soluto no sólido [m² / s];
 e_c = espessura do molde [m];
 E_o = Camada virtual [m];
 e_s = espessura da chapa de aço [m];
 f_E = fração eutética [%];
 f_L = fração de mássica de líquido [%];
 f_s = fração de mássica de sólido [%];
 g = fração volumétrica [adimensional];
 G = gradientes térmicos [K / m];
 g_0 = aceleração da gravidade em [m / s²];
 g_L = fração volumétrica de líquido [adimensional];
 G_L = gradiente de temperatura no líquido [K/m];
 g_s = fração volumétrica de sólido [adimensional];
 G_{SL} = gradiente de temperatura na ponta da dendrita [K/m];
 H = entalpia em [J/kg];
 h = entalpia no modelo de Chen e Tsai [Diao e Tsai, 1993] em [J/kg];
 h_g = coeficiente global de transferência de calor [W / m².K];
 h_i = coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde [W / m².K];
 HK = razão entre o coeficiente transmissão de calor por convecção e a condutividade térmica da liga [m];
 h_l = entalpia liquidus [J / Kg];
 h_M = coeficiente de transferência de calor do molde [W / m².K];
 $h_{M/M}$ = coeficiente de transferência de calor entre a superfície do metal e a chapa de aço na base da lingoteira [W / m².K];
 h_s = entalpia solidus [J / Kg];
 h_w = coeficiente de transferência de calor do molde/fluido de refrigeração [W / m².K];
 $k = (k_L + k_s) / 2$ = condutividade térmica média do sistema ou condutividade térmica em função da posição no modelo de Chen e Tsai [Diao e Tsai, 1993] em [W / m.K];
 K = coeficiente de permeabilidade na zona pastosa no modelo numérico de Chen e Tsai [adimensional];
 k_0 = coeficiente de partição de soluto [adimensional];
 k_C = condutividade térmica da chapa molde [W / m.K];
 k_{ef} = coeficiente efetivo de partição de soluto [adimensional];
 k_M = condutividade térmica do material da parede do molde [W / m.K];

k_S = condutividade térmica do molde de aço [W / m K];
 L = calor latente de fusão do material [J / m³] ou [J / kg];
 L_o = camada virtual [m];
 m = raiz quadrada da razão entre as difusividades térmicas da zona pastosa e do líquido [adimensional];
 M = razão entre as difusividades de calor do sólido e do material do molde [adimensional];
 m_1 e m_2 = constantes;
 $m_L = (d T_L / d C_L)$ = coeficiente angular constante da linha liquidus [K / (% peso)];
 N = raiz quadrada da razão das difusividades térmicas do sólido e do material do molde [adimensional];
 n = raiz quadrada da razão das difusividades térmicas do sólido e da zona pastosa [adimensional];
 P = coeficiente utilizado pelo algoritmo TDMA;
 p = pressão em [Pa];
 Q = coeficiente utilizado pelo algoritmo TDMA;
 q = fluxo de calor através da interface metal/molde em [W];
 r = posição radial no sistema de coordenadas cilíndricas [m];
 R = razão das massas específicas do sólido e do líquido no modelo semi-analítico [adimensional];
 S_L = posição da isoterma liquidus a partir da superfície metal/molde [m];
SLOPE = variável responsável pela verificação do estado do sistema quanto à mudança de fase;
 S_o = camada virtual [m];
 S_S = posição da isoterma solidus a partir da superfície metal/molde [m];
 T = temperatura da fase líquida na frente da interface sólido/líquido [K];
 t = tempo de homogeneização [s];
 T^* = campo nodal de temperatura auxiliar [K];
 T_0 = temperatura ambiente ou inicial do molde [K];
 T_{base} = temperatura constante na base do lingote no modelo semi-analítico em [K];
 T^{equ} = temperatura de equilíbrio proveniente do diagrama de fases [K];
 T_{Eut} = temperatura eutética do sistema [K];
 T_F = temperatura de fusão do metal base do sistema [K];
 T_L = distribuição de temperatura no líquido [K];
 t_L = tempo correspondente a posição da isoterma liquidus [s];
 T_{Liq} = temperatura no liquidus da liga [K];
 T_M = temperatura do molde [K];
 t_O = tempo de solidificação [s];
 T_S = distribuição de temperatura no sólido [K];
 t_S = tempo correspondente à posição da isoterma solidus [s];
 T_{SL} = distribuição de temperatura na zona pastosa [K];
 t_{SL} = tempo local de solidificação [s];

T_{Sol} = temperatura da linha solidus da liga [K];
 T_V = temperatura de vazamento [K];
 U = fluxo volumétrico interdendrítico [m / s];
 u = velocidade de deslocamento do sistema no eixo x em [m / s];
 U^* = fluxo volumétrico interdendrítico [adimensional];
 u_L = velocidade de deslocamento da linha liquidus no eixo x em [m / s];
 u_S = velocidade de deslocamento da linha solidus no eixo x em [m / s];
 v = velocidade de deslocamento do sistema no eixo y em [m / s];
 V = velocidade vetorial de deslocamento de isoterma características em [m / s];
 V_F = velocidade do líquido interdendrítico relativa ao sólido em [m/s]
 V_L = velocidade analítica de deslocamento da linha liquidus [m / s];
 v_L = velocidade de deslocamento da linha liquidus no eixo y em [m / s];
 V_O = velocidade de crescimento dendrítico estacionário [m / s];
 V_r = velocidade relativa de crescimento dendrítico entre a fase líquida e a fase sólida em [m / s];
 V_S = velocidade analítica de deslocamento da linha solidus [m / s];
 v_S = velocidade de deslocamento da linha solidus no eixo y em [m / s];
 x = no modelo de Chen e Tsai [Chen e Tsai, 1993] eixo de coordenadas x em [m];
 y = eixo de coordenadas y em [m];
 z = eixo de coordenadas dos modelos analíticos e numérico apresentados neste trabalho em [m];
 z' = posição na zona pastosa no modelo analítico de Flemings e Nereo [Flemings e Nereo, 1967] em [m];
 Z_b = extremidade superior do lingote assumida no modelo analítico como $\rightarrow \infty$ [m];
 Z_{eut} = posição da linha eutética [m];
 Z_{liq} = posição da linha liquidus [m];

Letras Gregas

$\Delta \bar{C}$ = nível de macrossegregação ao longo do lingote em [% peso];
 λ = espaçamentos interdendríticos [μ m] ou variável de similaridade relacionada à distância característica da linha liquidus com relação à base do lingote [adimensional];
 ϕ = fração volumétrica de sólido no modelo semi-analítico [adimensional];
 ρ = massa específica do fluido de refrigeração [kg / m³];
 β = parâmetro de redistribuição de soluto [adimensional] ou coeficiente de contração de solidificação no modelo térmico analítico [adimensional];
 δ = tempo de surgimento da isoterma solidus [s];
 ϕ_1 = constante de solidificação relacionada com a isoterma solidus [adimensional];
 ϕ_2 = constante de solidificação relacionada com a isoterma liquidus [adimensional];

ΔH = calor latente de fusão sendo a diferença entre as entalpias solidus e liquidus em [J/kg];
 α_L = difusividade térmica do líquido em [m²/s];
 ρ_L = massa específica do metal líquido [kg / m³];
 ρ_S = massa específica do metal sólido [kg / m³];
 β_S = coeficiente de expansão de soluto [adimensional];
 α_S = difusividade térmica do sólido em [m²/s];
 β_S = parâmetro que depende do metal do molde e de h_i [s / m];
 ρ_{SE} = massa específica do sólido eutético [kg / m³];
 $\rho_{SL} = (\rho_S + \rho_L) / 2$ = massa específica da zona pastosa no modelo analítico [kg / m³];
 α_{SL} = difusividade térmica da zona pastosa em [m²/s];
 β_T = coeficiente de expansão térmica em [1 / K];
 Δt = intervalo de tempo em [s];
 ΔT_C = superesfriamento na frente colunar [K];
 ΔT_N = superesfriamento efetivo nos pontos de nucleação [K];
 $\Delta T_{SH} = T_V - T_{Liq}$, superaquecimento [K];
 $\Delta T_{SL} = T_{Liq} - T_{Sol}$, intervalo de solidificação de não-equilíbrio [K];
 Δx = elemento considerado na direção x em [m];
 Δy = elemento considerado na direção y em [m];
 Δz = elemento considerado na direção z em [m];
 $[\rho C]$ = campo massa específica de soluto [kg / m³];
 γ = parâmetro de redistribuição de soluto [adimensional];
 κ = difusividade térmica para as regiões sólida, zona pastosa e líquida no modelo semi-analítico [m²/s];
 μ = viscosidade dinâmica em [kg / m.s] ou variável de similaridade relacionada à distância característica da linha solidus com relação a base do lingote [adimensional];
 μ_L = viscosidade dinâmica do líquido em [kg / m.s];
 ε = rugosidade superficial em [μm];
 ξ = variável de similaridade definida em função da posição e do tempo para obtenção das equações diferenciais ordinárias no modelo semi-analítico [adimensional].

Capítulo 1

Introdução

1.1 – Considerações Gerais

Os materiais de um modo geral contêm em sua composição química elementos solutos ou impurezas que, ao longo da solidificação são redistribuídos internamente a partir da superfície de resfriamento. A termodinâmica do processo irá impor uma rejeição de soluto ou de solvente que dependerá da posição relativa da liga no respectivo diagrama de fases, e que terá como consequência um movimento de espécies associado à transferência de calor que acompanha a transformação líquido/sólido. A redistribuição de soluto ocorre a partir de uma fronteira de solidificação que pode ser considerada macroscopicamente plana quando se trata de ligas diluídas, ou de um material com pequeno grau de impurezas, ou a partir da isoterma *solidus* quando se trata da solidificação de ligas mais concentradas. Em ambos os casos, a forma através da qual os solutos/ impurezas são distribuídos é fundamental para as propriedades finais da estrutura bruta de solidificação. A Figura 1.1 mostra uma correlação simplificada entre o perfil térmico e o correspondente perfil de distribuição de soluto para um determinado instante do processo de solidificação. Essa conjunção de transferência de massa e calor irá impor condições que determinarão a morfologia de crescimento e, conseqüentemente, o arranjo microestrutural. A essa microestrutura resultante estará associado um certo nível de segregação com efeitos determinantes sobre as propriedades mecânicas.

Para que se possa atuar sobre as condições operacionais do processo de solidificação, com o intuito de controlar a distribuição do soluto, é importante que se conheçam as relações de dependência entre fluxo de calor e o decorrente fluxo de massa. Isto permite um maior controle sobre os parâmetros que influenciam a segregação e, conseqüentemente, a programação de níveis de concentração de soluto mais adequados a cada situação de aplicação.

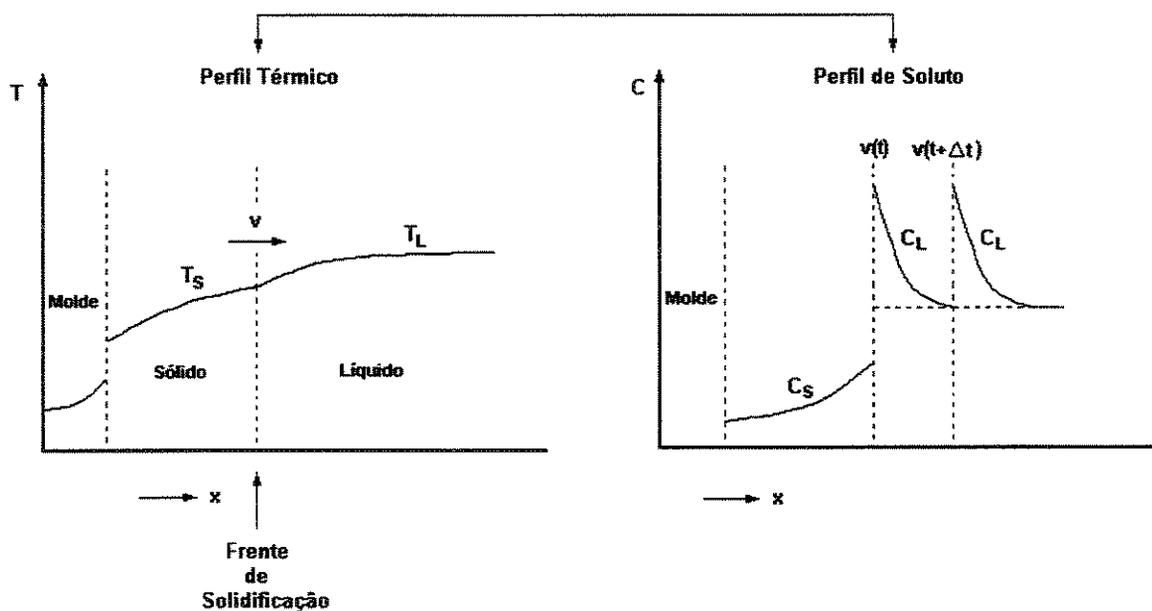


Figura 1.1 - Correlação entre perfil térmico e perfil de soluto durante a solidificação

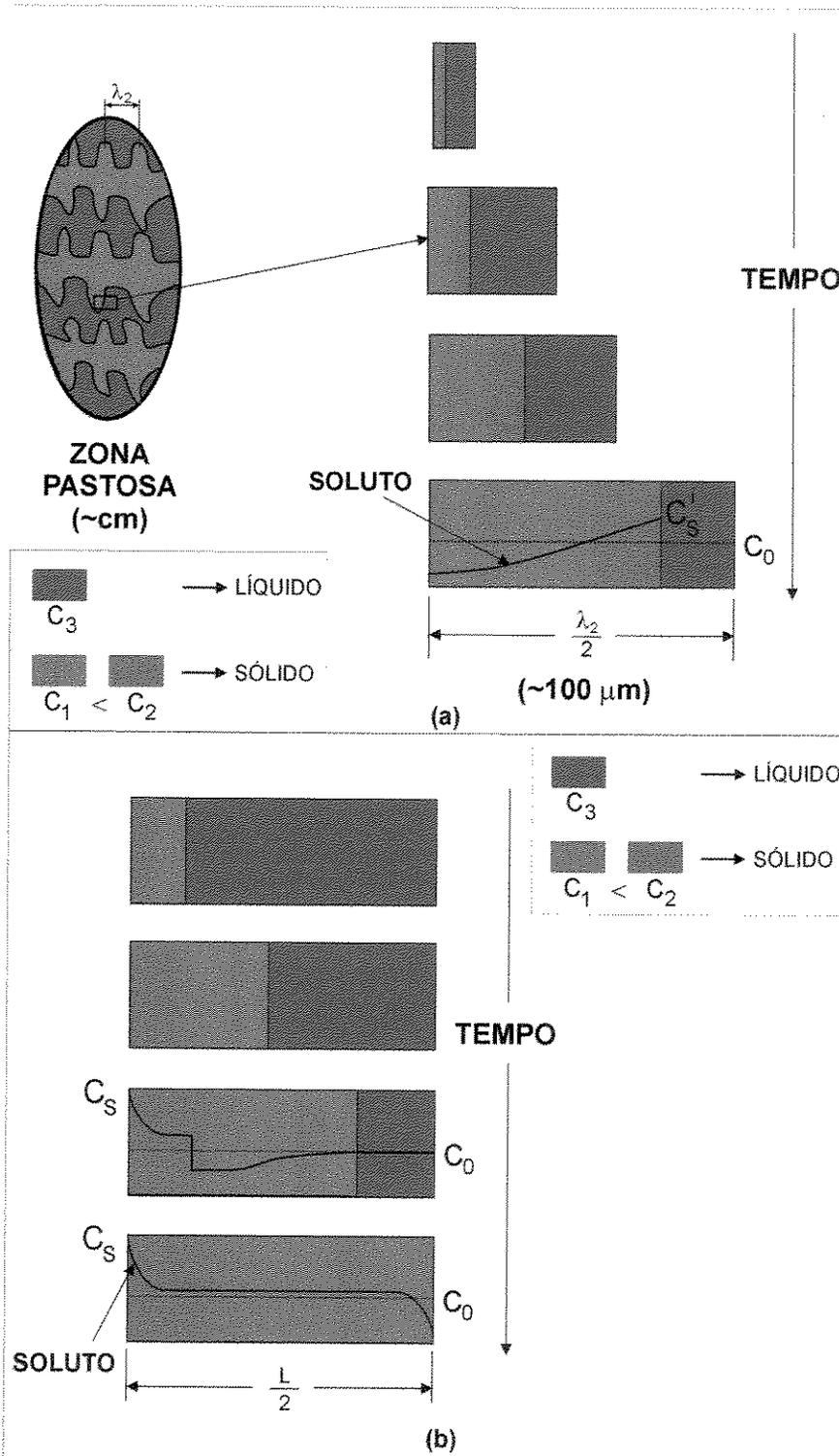


Figura 1.2 – Evolução da distribuição de soluto para as situações de (a) microsegregação e de (b) macrosegregação.

A variação de composição química que ocorre dentro dos limites dos contornos de grão, ou seja, entre ramificações celulares ou dendríticas, é conhecida como microsegregação, e tem sido objeto de intensa investigação no sentido do desenvolvimento de ferramentas de quantificação do fenômeno [Martorano, 1998; Martorano e Capocchi, 2000a, 2000b]. Entre os fatores que mais contribuem para a dificuldade de quantificação desse fenômeno, podem-se citar: o modo de solidificação colunar ou equiaxial, a complexidade da morfologia das ramificações dendríticas, o efeito de diferentes solutos, o engrossamento e refusão de ramos dendríticos, o movimento de soluto no líquido e de retorno no sólido, e a dependência do coeficiente de difusão com a concentração e a temperatura. Já a macrosegregação, ou segregação de longo alcance, é causada pelo movimento de líquido ou soluto de composição química diferente da composição média ou nominal. Podem-se citar como forças motrizes desse movimento, a contração de solidificação, a contração térmica, as variações de massa específica e a deformação da fase sólida devido a tensões mecânicas ou térmicas. [Diao e Tsai, 1993; Lay e Yavari, 1996]. Um tipo particular de macrosegregação, conhecido como macrosegregação inversa, ocorre quando o líquido interdendrítico rico em soluto flui em sentido oposto àquele da evolução da solidificação, devido principalmente à contração de solidificação. Esse tipo de macrosegregação produz composições anormalmente elevadas na superfície da peça. A quantificação desse fenômeno é bastante complexa, e a literatura apresenta alguns modelos que permitem representar a evolução da concentração de soluto da superfície ao centro de peças fundidas.[Ynoue, 1992; Ynoue e Garcia, 1992; Voller, 1997; Voller, 1998; Swaminathan e Voller, 1997; Chung, Lee, Choi e Yoo, 2001]. A Figura 1.2 mostra a evolução da redistribuição de soluto ao longo do tempo para situações de microsegregação e de macrosegregação.

1.2 - Objetivos

Tendo em vista a importância do estudo da macrosegregação, e em particular da segregação inversa, pretende-se estabelecer uma conexão entre a modelagem matemática da transferência de calor e a modelagem matemática do fluxo de espécies durante a solidificação, em condições de fluxo de calor transitório. Para tanto este trabalho está planejado com o objetivo

de desenvolver uma análise teórico-experimental segundo uma seqüência de atividades conforme se segue:

1 – Realizar uma revisão crítica e atualizada da literatura no que diz respeito à modelagem matemática analítica e numérica do fenômeno da macrossegregação de soluto;

2 – Fazer uma revisão da literatura no que diz respeito às técnicas experimentais de determinação do perfil concentração de soluto nas ligas escolhidas como objeto de estudo;

3 – Implementação de um método de determinação do coeficiente transitório de transferência de calor na interface metal/molde, bem como a inserção de refinamentos que se fizerem necessários à termodinâmica envolvida no processo solidificação de ligas binárias e ternárias, no sentido de aumentar a precisão do método adotado;

4 – Aplicação de modelos analíticos e numéricos para a análise da evolução da solidificação com o objetivo de caracterização de variáveis térmicas do processo como gradientes de temperatura, taxas de resfriamento e velocidade de deslocamento das isothermas solidus e liquidus;

5- Proposição de uma abordagem completamente analítica para a determinação de perfis de segregação inversa na solidificação unidirecional de ligas binárias;

6- Implementação de refinamentos conceituais e de técnicas computacionais em um modelo numérico de segregação inversa, no sentido de aumentar sua eficácia na previsão da macrossegregação de ligas binárias;

7- Desenvolver uma extensão do modelo numérico para o tratamento da macrossegregação de ligas multicomponentes;

8- Validação dos modelos propostos frente a resultados experimentais de solidificação unidirecional vertical ascendente de ligas Al-Cu e Al-Cu-Si.

Capítulo 2

Macrossegregação na Solidificação

2.1 - Coeficiente de Redistribuição de Solutos

A incorporação de um soluto a um solvente leva à formação de uma solução binária que pode ser caracterizada através de um coeficiente de distribuição (ou redistribuição de soluto). No caso de soluções que apresentem fases com estados de agregação sólido e líquido em equilíbrio a uma determinada temperatura, pode-se definir o coeficiente de distribuição no equilíbrio k_0 , como a relação entre a concentração de soluto no sólido C_S e a correspondente concentração de soluto no líquido C_L , ou seja:

$$k_0 = \frac{C_S}{C_L}. \quad [2.1]$$

A maioria das situações de solidificação de ligas, como os processos usuais de lingotamento, fundição e soldagem, pode ser tratada como se a interface sólido/líquido estivesse em um estado de equilíbrio, no qual sua velocidade de deslocamento é essencialmente controlada pela taxa de transporte de calor latente para fora da interface. A formação do sólido ocorre em condições tais que o sólido e o líquido junto à interface podem ser considerados em equilíbrio local, e tem suas composições dadas pelo diagrama de fases. Entretanto, em casos como o da solidificação de gotas a partir de líquidos super resfriados, ou da solidificação de camadas de pequena espessura fundidas previamente através de laser, ocorrem velocidades de deslocamento da interface sólido/líquido da

ordem de 100 mm/s ou mais, o que provoca um afastamento das condições locais de equilíbrio. Nestes casos, o valor de k_0 modifica-se com a velocidade da interface, até atingir a unidade quando ocorre solidificação sem redistribuição de soluto.

Os diagramas de fases permitem a determinação do coeficiente de distribuição no equilíbrio em função da concentração de soluto e da temperatura. Para uma situação idealizada, onde as linhas solidus e liquidus são retas, conforme mostra a Figura 2.1, o coeficiente de distribuição de soluto é constante. Embora seja uma simplificação, o fato de se considerar $k_0 = \text{constante}$, facilita as abordagens teóricas sem afetar significativamente as conclusões. No caso em que a solubilidade do soluto no sólido for menor do que no líquido, o coeficiente de distribuição de soluto (k_0), é menor do que a unidade (Figura 2.1A) e, na situação oposta, $k_0 > 1$ (Figura 2.1B).

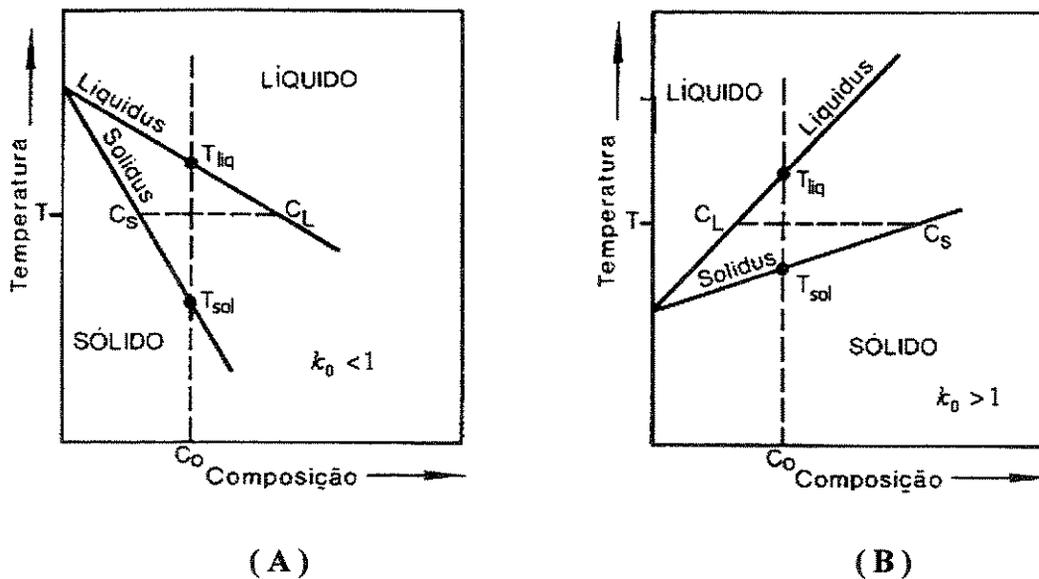


Figura 2.1 – Representação esquemática do diagrama de equilíbrio de ligas binárias: (A) $k_0 < 1$; (B) $k_0 > 1$; T_{liq} temperatura liquidus e T_{sol} temperatura solidus.

Analisando-se o resfriamento de um volume de líquido de composição nominal C_0 , verifica-se que ao se atingir a temperatura liquidus, o primeiro sólido a se formar apresenta uma concentração menor do que a concentração do líquido que o origina, rejeitando conseqüentemente o soluto $k_0 < 1$, ou uma concentração maior que a nominal, rejeitando o solvente $k_0 > 1$. Estas rejeições

provocam um acúmulo de soluto ou solvente junto à interface sólido/líquido. As mobilidades destes constituintes, determinadas pela difusão no sólido e no líquido, pela convecção natural ou forçada no líquido, e pela condição em que se desenvolve a solidificação (equilíbrio ou não), é que determinam a forma final do perfil de concentração de soluto no sólido formado.

2.2 - Macrossegregação

A macrossegregação é a segregação de longo alcance que é causada pelo movimento de líquido ou sólido, e que provoca uma composição química que difere da composição média. Os fatores que influenciam o surgimento desse tipo de segregação são:

- contração da solidificação e movimento de líquido interdendrítico;
- diferenças de massa específica causadas pela formação de uma fase sólida ou por diferenças em composição;
- forças de origem externa ao sistema metal/molde como a ação de forças centrífugas ou a aplicação de campos eletromagnéticos; e
- deformação da fase solidificada por ação de tensões térmicas ou pressão.

A macrossegregação é avaliada normalmente pela relação:

$$\Delta\bar{C} = \bar{C}_s - C_0 \quad [2.2]$$

em que C_0 é a composição inicial da liga e \bar{C}_s é a composição média em determinado ponto após a solidificação. Pode também ser avaliada por um índice de segregação dado por $C_{m\acute{a}x}/C_{m\acute{i}n}$ ou por $(C_{m\acute{a}x} - C_{m\acute{i}n}) / C_0$, ou ainda por um grau de segregação \bar{C}_s/C_0 . A segregação é considerada *positiva* quando $\bar{C}_s > C_0$ e *negativa* quando $\bar{C}_s < C_0$.

2.2.1 - Segregação Normal

Quando a solidificação ocorre com uma interface sólido/líquido plana, o mecanismo de macrossegregação é bastante simples e pode ser descrito por simples conjuntos de equações de distribuição de soluto. Para ligas com $k_0 < 1$, o centro da peça ou lingote apresentará uma concentração de soluto muito mais elevada que a da superfície, decorrente da rejeição de soluto na interface sólido/líquido com a acumulação desse soluto no final da solidificação na região central da peça. Esse tipo de segregação é denominado de segregação normal. A equação (2.3) mostra que o grau de solidificação normal \bar{C}_s/C_0 aumenta com a diminuição da velocidade de crescimento v ou da espessura da camada limite de difusão δ ($k_{ef} \rightarrow k_0$), sendo que esta última diminui com a intensidade do movimento do líquido. Na equação (2.3), k_{ef} é o coeficiente de partição efetivo e D é o coeficiente de difusão de soluto. A variação final de composição da superfície ao centro de um lingote que se espera no caso de segregação normal, está esquematizada na Figura 2.2:

$$k_{ef} = \frac{k_0}{k_0 + (1 - k_0) \exp\left(-\frac{v\delta}{D}\right)} \quad [2.3]$$

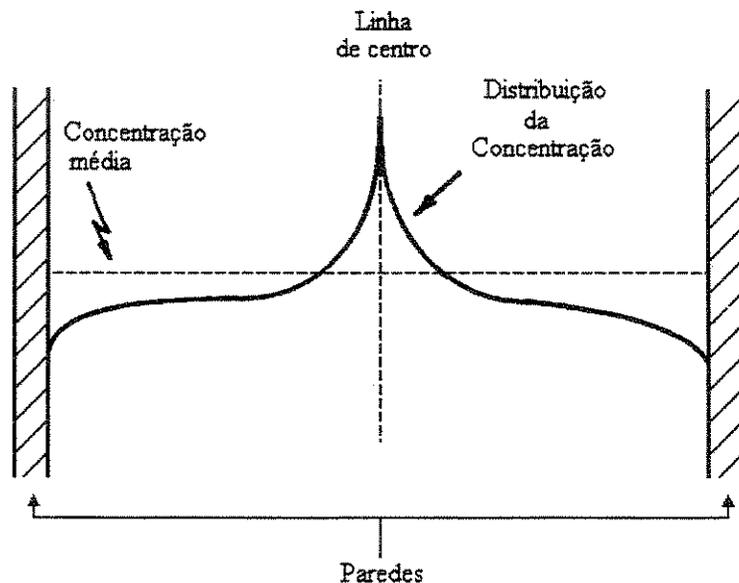


Figura 2.2 – Segregação normal na solidificação de um lingote colunar.

Caso ocorram mudanças súbitas na velocidade de crescimento ao longo da solidificação, essas mudanças terão reflexos no perfil de segregação. Caso a velocidade seja subitamente aumentada, um maior valor de k_{ef} passa a controlar a rejeição de soluto, o que resulta em uma concentração maior do que a concentração média, ou seja, em uma segregação positiva. Por outro lado, caso a velocidade seja subitamente diminuída, somente por um determinado intervalo de tempo, ocorre o inverso e surge uma região de segregação negativa, conforme indicado no esquema da Figura 2.3. Caso ocorram periodicamente alterações em v ou em δ , o perfil de segregação também é modificado de forma periódica, apresentando uma seqüência de regiões de segregação positiva ou negativa.

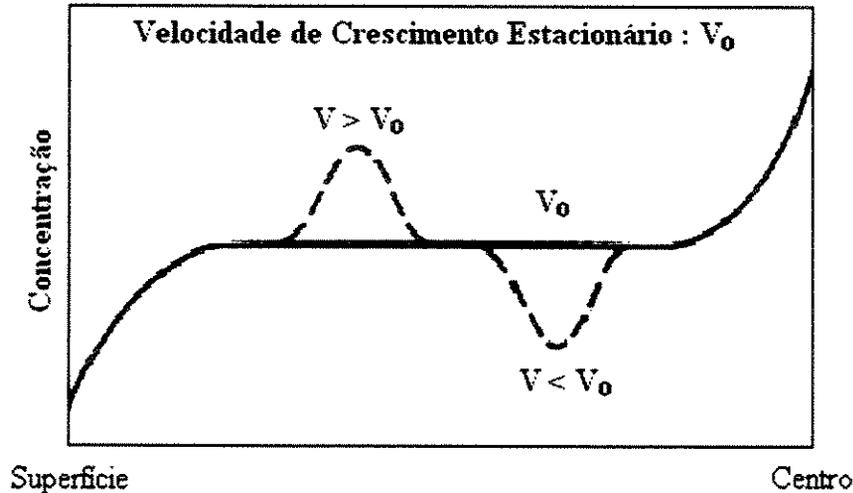


Figura 2.3 – Distribuição de soluto típica de solidificação com frente plana com alterações na velocidade de deslocamento da interface sólido/líquido durante o processo.

Segregação por Gravidade

Quando constituintes líquidos ou sólidos se separam em função de diferenças de massa específica, provocam a formação de um tipo de segregação conhecido como segregação por gravidade. Essas diferenças em massa específica causam a flutuação ou a decantação de fases líquidas ou sólidas de diferentes composições. Ocorrendo, por exemplo, a formação de dendritas

livres, sua massa específica em relação ao líquido em que estão contidas é que determina sua direção de movimento. Se esses grãos dendríticos apresentam massa específica superior à do líquido, eles irão decantar provocando a formação de uma zona de segregação negativa na base da peça (para ligas com $k_0 < 1$), uma vez que os cristais formados inicialmente têm menor concentração de soluto e darão origem a uma região de concentração menor do que a média. Em ligas Sb-Pb, por exemplo, ocorre uma situação inversa já que os cristais primários ricos em antimônio ao nuclearem tendem a flutuar em função de sua menor massa específica em relação à do líquido a partir do qual foram gerados. São vários os exemplos de ligas de interesse industrial em que ocorrem diferenças significativas entre as fases nucleadas e o metal líquido. Em ligas de alumínio pode-se citar o exemplo da formação do composto intermetálico Al_3Ti em ligas Al-Ti e que apresenta uma massa específica cerca de 40 % superior à do metal líquido. Como a massa específica é inerente aos constituintes da liga, a única maneira de impedir esse tipo de segregação consiste em promover uma solidificação suficientemente rápida a ponto de impedir a flutuação ou decantação de cristais.

2.2.2 - Segregação Inversa

A macrossegregação de soluto pode ser causada pela flutuação de cristais, surgimento de grãos equiaxiais, fragmentos de ramificações dendríticas, e também pelo fluxo de líquido interdendrítico enriquecido ou empobrecido de soluto na zona pastosa. Quando uma liga que apresenta coeficiente de partição de equilíbrio menor que a unidade ($k_0 < 1$) se solidifica, espera-se que a última fração de líquido remanescente seja rica em soluto. Todavia, em condições de notável crescimento dendrítico, os canais interdendríticos contêm líquido com elevada concentração de soluto devido à difusão lateral deste elemento constituinte da liga. Para a maioria dos metais, ocorre contração durante a solidificação e o líquido interdendrítico com elevado teor de soluto é compelido a escoar buscando regiões mais frias do sistema, ou seja, em direção à raiz das dendritas, produzindo concentração de soluto anormal nas regiões mais externas do lingote. Esta condição é denominada de segregação inversa, porque a distribuição de soluto é oposta àquela esperada para a segregação normal onde o centro do lingote pode apresentar teores de soluto maiores que a periferia, conforme mostrado na Figura 2.4. A segregação inversa é causada

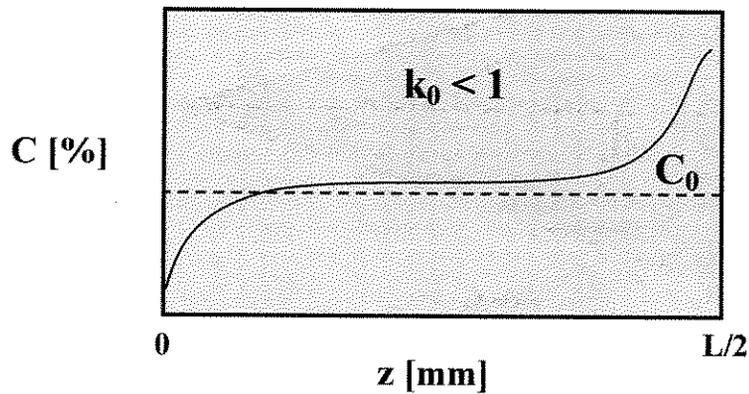
principalmente pela contração de solidificação, e favorecida pelas baixas taxas de resfriamento, por amplos intervalos de solidificação e por espaçamentos dendríticos grosseiros [Flemings, 1974 e Flemings, 2000]. Nas regiões adjacentes às faces externas de lingotes ou de fundidos, o perfil de segregação inversa cai rapidamente com a distância à parede do molde, e diminui com o aumento do superaquecimento no metal líquido e com materiais de molde de menores condutividades térmicas [Minakawa, Samarasekera e Weinberg, 1985].

Outro importante tipo de segregação inversa pode ocorrer quando a superfície semi-sólida externa de peças em solidificação começa a contrair e se separar do molde, deixando um espaço pelo qual o líquido interdendrítico pode fluir. O fluxo é induzido pela queda de pressão decorrente da formação do *gap* de ar entre metal e molde. Uma pequena camada de material altamente segregado, conhecida como exsudação é formada como decorrência na superfície da peça.

Em 1947, Scheil foi o primeiro a tratar a segregação inversa por meio de uma expressão analítica que prevê a máxima segregação na interface metal/molde como função da composição da liga [Scheil, 1947]. Kirkaldy e Youdelis estenderam a equação de Scheil para predizer não somente a máxima segregação, mas também a segregação em função da posição em lingotes unidirecionalmente solidificados [Kirkaldy e Youdelis, 1958]. Outros trabalhos na literatura relatam que o modelo de Kirkaldy-Youdelis permite descrever o perfil experimental de segregação inversa ao longo de lingotes [Youdelis e Colton, 1960; Cahoon e Youdelis, 1964; Prabhakar e Weinberg, 1978; Kato e Cahoon, 1985].

Flemings e colaboradores propõem um modelo assumindo que o líquido interdendrítico flui somente por meio do mecanismo de contração da solidificação e a distribuição dos gradientes de temperatura e de velocidade são medidos ou assumidos. A equação de redistribuição de soluto local encontrada consegue prever com sucesso a formação da macrossegregação, particularmente a macrossegregação inversa para a solidificação unidirecional de ligas de Al-Cu [Flemings e Nereo, 1967; ;Flemings, Mehrabian e Nereo, 1968; Flemings e Nereo, 1968].

Segregação Normal



Segregação Inversa

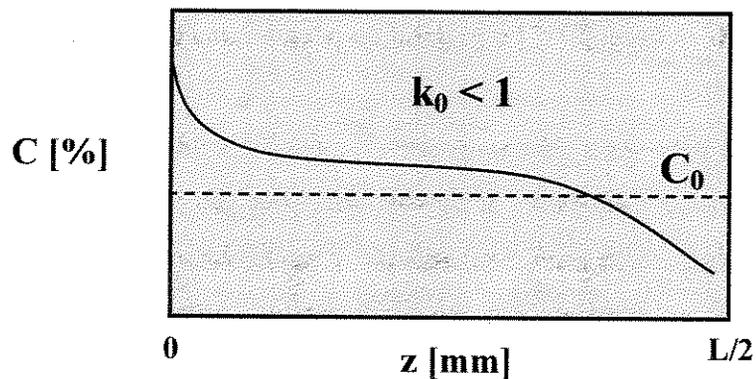


Figura 2.4 – Representação esquemática dos fenômenos de macrossegregação normal e inversa.

Em 1985, Minakawa, Samarasekera e Weinberg desenvolveram uma solução numérica baseada no método de diferenças finitas para calcular os perfis de segregação inversa nas ligas de Al-Cu, Al-Zn e Sb-Bi, nas quais a dependência da temperatura e concentração das velocidades solidus e liquidus é determinada através dos dados de massa específica e da segregação em condições de não-equilíbrio. É considerada a distância da chapa molde na qual a segregação inversa está presente, bem como o efeito que a temperatura de vazamento e a condutividade térmica do material do molde exercem sobre a segregação na interface metal/molde [Minakawa, Samarasekera e Weinberg, 1985]. A Figura 2.5 representa o domínio da solução adotado pelos autores.

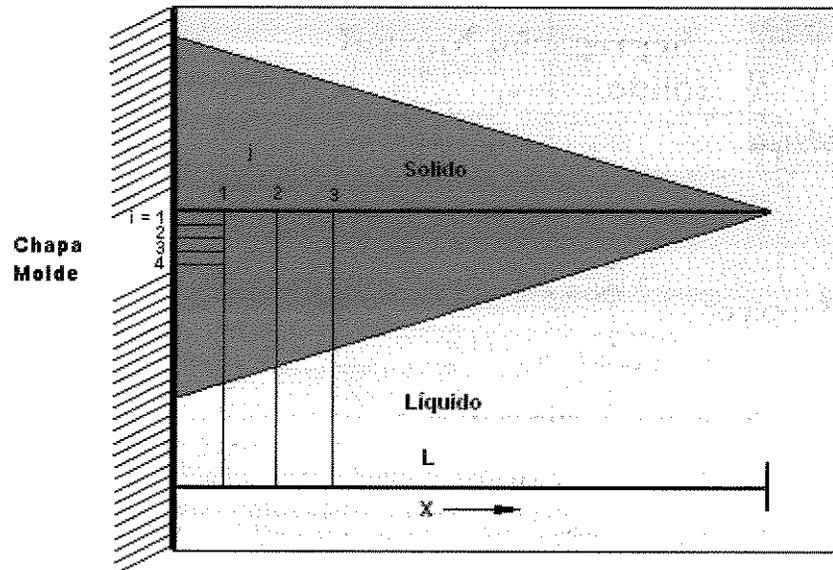
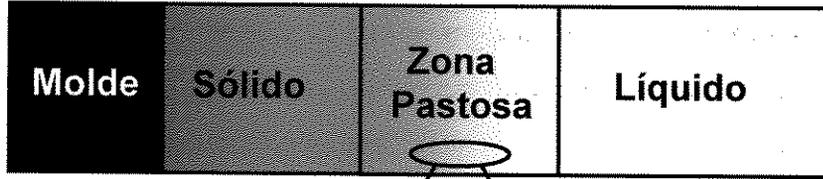


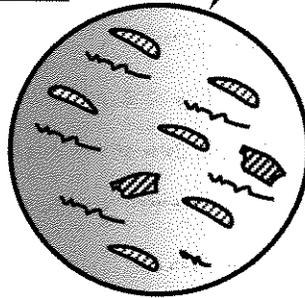
Figura 2.5 – Configuração das dendritas utilizadas no modelo de Weinberg e colaboradores [Minakawa, Samarasekera e Weinberg, 1985] mostrando o posicionamento dos elementos *i* e *j*.

Em 1989, Voller, Brent e Prakash desenvolveram uma solução numérica para equações da energia, da massa e redistribuição de soluto para sistemas binários, baseando-se num modelo bifásico para três casos limites para os quais uma solução geral bifásica se reduza a uma solução monofásica limite: em particular, sistemas que não envolvam estrutura colunar dendrítica como ceras, ou em situações onde as condições de equilíbrio locais não ocorram. O primeiro caso é aplicável a materiais amorfos (como ceras e vidros) e, de forma limitada, à zona equiaxial de um lingote metálico. No modelo de fluido pastoso, o sólido é assumido como sendo completamente disperso dentro do líquido e que se movimenta a mesma velocidade, isto é, velocidade do sistema igual às velocidades solidus e liquidus ($u = u_s = u_L$). No segundo caso, a fase sólida é considerada como sendo distinta da líquida e movimentando-se a uma velocidade prescrita (zero em lingotamento estático e maior que zero em lingotamento contínuo). Fisicamente, este caso aproxima-se de uma zona dendrítica colunar de uma liga metálica solidificando. Para o terceiro caso limite, em escala microscópica, assume-se como sendo idêntico ao segundo, ou seja, a zona pastosa consiste de uma matriz de dendritas colunares, conforme apresentado na Figura 2.6. A microestrutura, no entanto, é representada como uma região sólida e uma líquida distintas [Voller, Brent e Prakash, 1989].

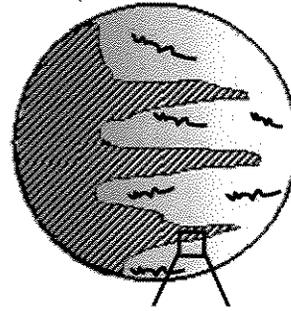
Problema



Nível Macroscópico

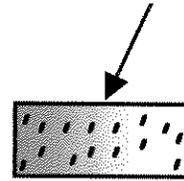


(a) Esquema de fluido pastoso:
 $u_S = u_L$

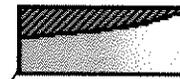


(b) Esquema de estrutura dendrítica colunar:
 $u_S = 0$, ou prescrita.

Nível Microscópico

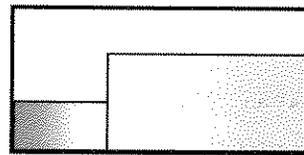


(c) Representação dispersa de microestrutura.
 $\bar{C} = f_S C_S + f_L C_L$

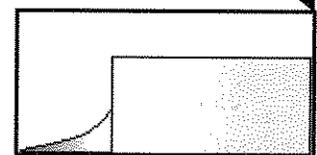


(d) Representação da microestrutura distinta.

Natureza da redistribuição de soluto



(d) (i) Difusão infinita no líquido e no sólido (Regra da Alavanca):
 $\bar{C} = f_S C_S + f_L C_L$



(d) (ii) Difusão zero no sólido (Regra de Scheil):
 $\bar{C} = \int C_S df + f_L C_L$

Figura 2.6 – O domínio do problema: (a) Fluido pastoso ($u_S = u_L$); (b) Estrutura colunar dendrítica ($u_S = 0$ ou prescrita); (c) Representação de microestrutura dispersa $\bar{C} = f_S C_S + f_L C_L$; (d) Representação de microestrutura distinta; (d) (i) Difusão infinita (regra da alavanca); (d) (ii) Nenhuma difusão no sólido (regra de Scheil).

zero (equação de Scheil) e a convecção na zona pastosa se faz presente. Tal modelo pode ser diretamente incorporado em códigos numéricos para solidificação. A consequência física de tal modelo de não-equilíbrio é discutida em termos de condições de equilíbrio na interface líquida durante solidificação e refusão da liga [Rappaz e Voller, 1990].

Em 1991, Ni e Beckermann propuseram um modelo bifásico de transporte de soluto na solidificação utilizando a técnica do volume-médio. As equações desenvolvidas são válidas tanto para o sólido quanto para o líquido, e incorporam diretamente efeitos de não-equilíbrio entre as fases e os diversos super-resfriamentos constitucionais. A forma básica das relações constitutivas para os termos de interação das fases nas equações macroscópicas é também fornecida [Ni e Beckermann, 1991].

Chiang e Tsai, em 1991, desenvolveram um modelo que considera a mudança de domínio causada pela contração durante a solidificação. A solução bidimensional de uma cavidade retangular é baseada num modelo contínuo modificado. Para solução do acoplamento pressão-velocidade os autores utilizam o algoritmo SIMPLEC (Semi-Implicit Pressure-Link Consistent Scheme), e para determinar a mudança no domínio, é empregado um método clássico denominado “Método do Rastreamento da Frente”. Os autores também realizam a comparação numérica considerando a situação onde o efeito da contração é omitido, bem como, segundo os autores, o escoamento induzido por contração aumenta a parcela convectiva no processo de transferência de calor [Chiang e Tsai, 1991].

Considerando as ligas Sn-10%Pb e Pb-15%Sn solidificadas unidirecionalmente, Shahani, Amberg e Fredriksson [1992] analisam tanto numericamente, quanto experimentalmente, os efeitos da convecção natural na formação da macrossegregação. É observada considerável macrossegregação de soluto para ambos os sistemas. Para o sistema Sn-Pb é observada segregação inversa enquanto que para o Pb-Sn segregação normal. Estes dois modos diferentes de convecção observados (térmica e mássica) em ambos os sistemas ocorrem devido aos diferentes gradientes de massa específica na região bifásica. Esta diferença na convecção causa um empobrecimento de chumbo no final do lingote de Sn-10%Pb enquanto que um enriquecimento de estanho no final do lingote contendo a liga Pb-15%Sn. Em outras palavras,

para situações onde o soluto é menos denso que solvente, observa-se segregação normal (Pb-15%Sn), e para casos onde o soluto é mais denso que solvente, por tanto facilitando a presença de convecção mássica além da térmica, verifica-se a ocorrência de segregação inversa [Shahani, Amberg e Fredriksson, 1992].

Em 1992, Chen e Tsai desenvolveram um modelo numérico, utilizando a formulação continua e admitindo que o escoamento de fluido era induzido pela contração de solidificação, para prever os perfis de segregação inversa para ligas de Al-Cu solidificadas unidirecionalmente [Chen e Tsai, 1993].

A formulação básica utilizada por Chen e Tsai é a seguinte:

Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0; \quad [2.4]$$

Momento:

Em x:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} u) = & \nabla \cdot \left(\mu_L \frac{\rho}{\rho_L} \nabla u \right) - \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\mu_L}{K} \frac{\rho}{\rho_L} (u - u_S) \\ & - \frac{C\rho^2}{K^{1/2} \rho_L} |u - u_S| (u - u_S) - \nabla \cdot (\rho f_S f_L \mathbf{V}_r u_r) + \nabla \cdot \left(\mu_L u \nabla \left(\frac{\rho}{\rho_L} \right) \right) \end{aligned} \quad [2.5]$$

Em y:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} v) = & \nabla \cdot \left(\mu_L \frac{\rho}{\rho_L} \nabla v \right) - \frac{\partial p}{\partial y} - \frac{\mu_L}{K} \frac{\rho}{\rho_L} (v - v_S) \\ & - \frac{C\rho^2}{K^{1/2} \rho_L} |v - v_S| (v - v_S) - \nabla \cdot (\rho f_S f_L \mathbf{V}_r v_r) + \nabla \cdot \left(\mu_L v \nabla \left(\frac{\rho}{\rho_L} \right) \right) \\ & + \rho g_0 \left[\beta_T (T - T_0) + \beta_S (f_L^\alpha - f_{L,0}^\alpha) \right]; \end{aligned} \quad [2.6]$$

Energia:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} h) = \nabla \cdot \left(\frac{k}{c_s} \nabla h \right) - \nabla \cdot \left(\frac{k}{c_s} \nabla (h_s - h) \right) - \nabla \cdot [\rho (\mathbf{V} - \mathbf{V}_s)(h_L - h)]; \quad [2.7]$$

Transporte de massa:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho f^\alpha) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} f^\alpha) = \nabla \cdot (\rho D \nabla f^\alpha) - \nabla \cdot [\rho \nabla (f_L^\alpha - f^\alpha)] - \nabla \cdot [\rho (\mathbf{V} - \mathbf{V}_s)(f_L^\alpha - f^\alpha)]; \quad [2.8]$$

Nas equações anteriores, as propriedades do contínuo, ou seja, massa específica (ρ), calor específico (c), condutividade térmica (k), difusividade mássica (D), fração mássica de sólido (f_s), fração mássica de líquido (f_L), velocidade (\mathbf{V}), entalpia (h) e fração mássica do constituinte α (f^α) são definidos da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \rho &= g_s \rho_s + g_L \rho_L, & c &= f_s c_s + f_L c_L, & k &= g_s k_s + g_L k_L, \\ D &= f_s D_s + f_L D_L, & f_s &= \frac{g_s \rho_s}{\rho}, & f_L &= \frac{g_L \rho_L}{\rho}, \\ \mathbf{V} &= f_s \mathbf{V}_s + f_L \mathbf{V}_L, & h &= f_s h_s + f_L h_L, & f^\alpha &= f_s f_s^\alpha + f_L f_L^\alpha. \end{aligned} \quad [2.9]$$

Baseando-se numa solução para a zona pastosa em lingotes unidirecionalmente solidificados, Mo estuda o efeito da segregação de soluto causada pelo fenômeno da exsudação em ligas de Al-Cu. A solução leva em conta o escoamento do líquido interdendrítico induzido pela pressão metalostática através da zona pastosa pela aplicação de equação semelhante à lei de Darcy. Mo conclui que a segregação de soluto na zona pastosa é minimizada como consequência dos efeitos da exudação [Mo, 1993].

Diao e Tsai estendem o modelo baseado na formulação contínua apresentado por Chiang e Tsai, para contemplar a equação do transporte de espécies a fim de investigar a redistribuição de soluto durante o processo de solidificação unidirecional ascendente de ligas de Al-Cu. O modelo é comparado com resultados apresentados por Kato e Cahoon e por Flemings e Nereo [Diao e Tsai, 1993]. Os autores observam segregação positiva (segregação inversa) de espécies nas

regiões próximas da chapa molde, que era seguida de uma zona pastosa apresentando segregação negativa. Também verificam que a formação de segregação positiva no sólido e negativa na zona pastosa se dava pelo escoamento de fluido enriquecido em soluto devido à contração de solidificação. Finalmente, concluem que as elevadas taxas de extração de calor causavam a diminuição da extensão da zona pastosa, o que minimizava a região afetada pela segregação inversa.

Haug, Mo e Thevik estendem o trabalho de Mo para estudo da macrossegregação nas regiões próximas à superfície da chapa molde causados pela exsudação e pela contração de solidificação. Os autores concluem que a exsudação e a macrossegregação associada tornam-se menos severas quando a diferença entre o coeficiente de transferência de calor da chapa molde e da camada de ar intermediária de ar que se forma é reduzida. Também a altura metalostática, a escala de comprimento microscópico característico e o critério de formação de uma camada de ar, possuem influência significativa na distribuição final de soluto [Haug, Mo e Thevik, 1995].

Voller e Sundarraj desenvolvem um modelo numérico para a análise da segregação inversa para ligas binárias de Al-Cu solidificadas unidirecionalmente em molde refrigerado pela base, de acordo com a representação esquemática da Figura 2.8. Este modelo prevê a distribuição de soluto ao longo de todo o lingote, e também considera a formação de porosidade. Neste trabalho, os autores comparam os resultados fornecidos pelo modelo numérico com aqueles fornecidos por comparação com solução analítica e dados experimentais. Voller e Sundarraj concluem que, para a análise correta da segregação inversa ao longo de todo o lingote, faz-se necessária a aplicação de um modelo de formação de microporosidade [Voller e Sundarraj, 1995].

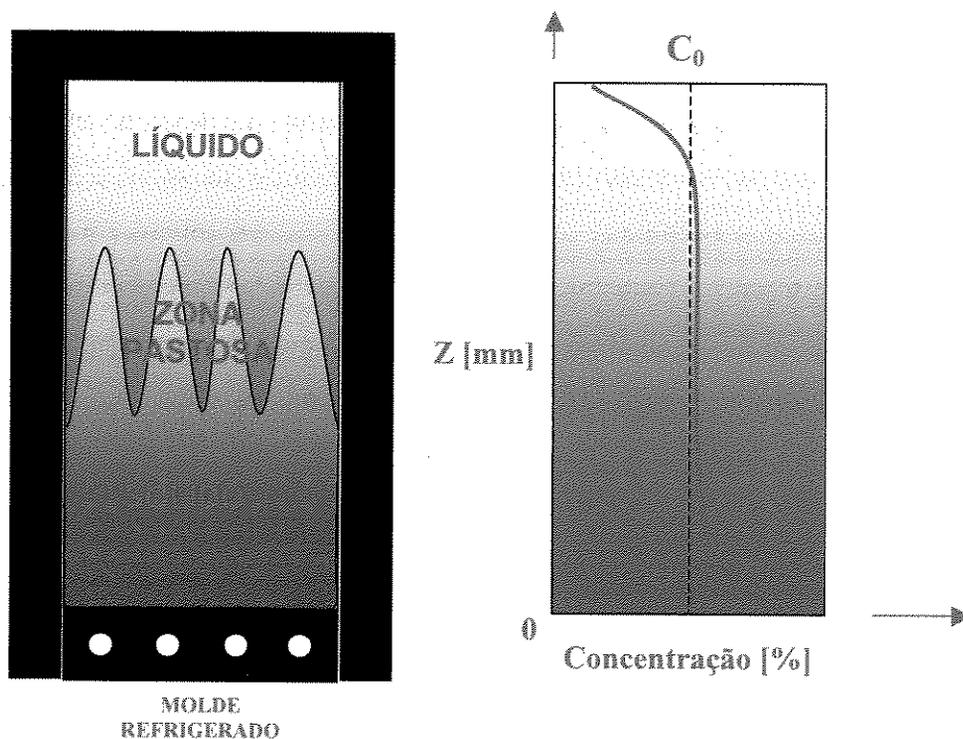


Figura 2.8 – Esquema de solidificação vertical ascendente unidirecional apresentado por Voller e Sundarraj [Voller e Sundarraj, 1995], incluindo perfil inverso de concentração de soluto.

Em 1996, Chang e Stefanescu propuseram um modelo para avaliar a redistribuição de soluto durante o processo de solidificação de ligas metálicas. Os autores aplicam a formulação contínua para descrever o transporte macroscópico de massa, energia e momento, associada a equações de fenômeno do transporte microscópico para sistemas bifásicos. Considera-se que o fluxo de líquido é provocado pela convecção térmica e mássica, bem como, pela contração de solidificação. Um aspecto bastante interessante do modelo é o fato de que o processo de solidificação está dividido em dois estágios. O líquido, inicialmente contendo grãos equiaxiais se movimentando livremente, é descrito por meio do conceito de viscosidade relativa. Então, após a formação de uma rede dendrítica a zona pastosa é tratada como um meio poroso. Este modelo também é aplicado para o estudo probabilístico da formação de porosidade [Chang e Stefanescu, 1996].

Reddy e Beckermann modelam a macrossegregação levando em consideração o fluxo de fluido interdendrítico induzido pela convecção térmica e mássica e pela contração de solidificação durante o processo de lingotamento contínuo de ligas de alumínio. Os autores incorporam descrições da transferência de calor, redistribuição de soluto e convecção térmica e mássica em escala macroscópica, com auxílio de relações microscópica de crescimento dendrítico, super-resfriamento constitucional e microsegregação. Uma conclusão importante dos autores é a de que o fluxo de fluido interdendrítico, que se dá por meio da contração de solidificação, não causa somente a segregação inversa na superfície do lingote, mas também influencia de forma significativa a macrossegregação através da porção central do lingote. Comparações com resultados experimentais apresentam boa concordância [Reddy e Beckermann, 1996].

Thevik e Mo, em 1997, apresentaram uma formulação matemática para o estudo da macrossegregação em regiões próximas da chapa molde de um lingote refrigerado, tendo como principal objetivo qualificar o efeito do fenômeno de micro escala de difusão de soluto e os espaçamentos interdendríticos sobre a macrossegregação final. Utilizam-se do acoplamento da teoria de formação da microestrutura associado ao modelo analítico de transferência de calor, para estimar os espaçamentos dendríticos que seriam posteriormente empregados pelo modelo numérico para determinar coeficientes nas equações de transporte macroscópicas de fluido [Thevik e Mo, 1997].

Em 1997, Krane, Incropera e Gaskell elaboraram um modelo matemático para o tratamento do fenômeno de transporte de espécies que ocorre durante o processo de solidificação de ligas ternárias. As equações de mistura do contínuo para o transporte de massa, energia e espécies são modificadas para considerarem um terceiro elemento. A fim de fechar o modelo, são obtidas relações termodinâmicas suplementares, a partir de um diagrama de equilíbrio de fases ternário, a fim de considerar diversas fases sólidas primárias, vales eutéticos binários, reações eutéticas e peritéticas ternárias e a formação de um componente intermetálico [Krane, Incropera e Gaskell, 1997]. Este trabalho somente apresenta uma descrição teórica detalhada do modelo numérico. A

aplicação do modelo pode ser encontrada para o sistema Pb-Sb-Sn, em trabalho posterior apresentado por Krane e Incropera [Krane e Incropera, 1997].

Em 1997, Voller utilizando-se da técnica analítica da variável de similaridade, desenvolveu uma solução semi-analítica para estudo da macrossegregação de soluto em ligas contendo dois ou mais componentes. Este modelo inclui o acoplamento dos campos de concentração e temperatura na zona pastosa, reação eutética, macrossegregação, microsegregação e escoamento de fluidos para processos de solidificação unidirecionais. Todavia, o autor assume os parâmetros de microsegregação e coeficientes de partição iguais para todos os componentes, ou em outras palavras, o transporte de cada componente não se dá de forma independente. Também despreza a termo convectivo na equação da energia, ou seja, a solução não se aplica a situações de superaquecimentos elevados no metal líquido [Voller, 1997]. Posteriormente, Chung e colaboradores estendem a solução de Voller para incorporar condições mais reais no tratamento dos parâmetros de segregação e do diagrama de fases, como também incluem na equação da energia o termo convectivo para permitir superaquecimento no líquido [Chung, Lee, Choi e Yoo, 2001].

Voller e Swaminathan [Voller e Swaminathan, 1991] desenvolveram um esquema numérico geral para o tratamento da solidificação de ligas que apresentem dois ou mais componentes. O ponto central deste modelo é a descrição do acoplamento concentração-temperatura em sistemas com vários componentes. Neste trabalho, é apresentado um esquema de discretização explícito/implícito das equações que governam o fenômeno, o que vem contribuir no desempenho superior deste esquema com relação àqueles encontrados na literatura. O modelo apresenta tratamento completo do problema de micro escala, englobando a regra de Scheil, a regra da alavanca e a difusão finita no sólido, utilizando as aproximações de Clyne e Kurz [Clyne e Kurz, 1981] ou de Wang e Beckermann [Wang e Beckermann, 1993], para extração da concentração local de soluto de cada componente da liga a partir do campo de massa específica de mistura de soluto.

Massa Específica de soluto da mistura

$$\rho C = \int_0^{1-g} \rho_S C_L d\alpha + g\rho_l C_L. \quad [2.10]$$

Modelo I – Clyne e Kurz

O modelo de Brody e Flemings modificado por Clyne e Kurz é representado por:

$$[C_L]_P = \frac{[\rho C]_P - [\rho C]_P^{old} + [\rho_l g_P^{old} + \beta \rho_S (1 - g_P^{old}) k_0] [C_L]_P^{old}}{\rho_l g_P^{n+1} + \beta \rho_S (1 - g_P^{n+1}) k_0 + (1 - \beta) \rho_S k_0 (g_P^{old} - g_P^{n+1})}, \quad [2.11]$$

em que o parâmetro tome o intervalo $0 \leq \beta \leq 1$. Fazendo $\beta = 1$, obtém-se a regra da alavanca, e tomando $\beta = 0$, fornece a regra de Scheil, sendo estes os casos limites.

Modelo II – Wang e Beckermann

O modelo proposto Wang e Beckermann é representado por:

$$[C_L]_P = \frac{[\rho C]_P - [\rho C]_P^{old} + \rho_l g_P^{old} C_L^{old} + \frac{\Delta t \gamma}{1 - g_P^{n+1}} [\rho C]_P}{\rho_l g_P^{n+1} + \rho_S k_0 (g_P^{old} - g_P^{n+1}) + \frac{\Delta t \gamma}{1 - g_P^{n+1}} (\rho_S k_0 (1 - g_P^{n+1}) + \rho_l g_P^{n+1})} \quad [2.12]$$

em que, para $\gamma = 0$, tem-se a regra de Scheil e para $\gamma \rightarrow \infty$, obtém-se a regra da alavanca.

Simpson e Garimella, utilizando uma representação de vetor-vorticidade potencial resolvem as equações que governam a distribuição de temperatura, concentração, campo de velocidades e pressão durante a solidificação unidirecional de uma liga diluída de Sn-Bi, para a configuração de uma cavidade bi-dimensional retangular. O esquema de alternância de direção implícita (ADI) é empregado para a solução do campo de vorticidade, enquanto que, para solução do vetor

potencial é aplicado o método dos gradientes conjugados. Os resultados numéricos são comparados com experimentos de solidificação unidirecional presentes na literatura [Simpson e Garimella, 1997].

Em 1998, Voller apresentou uma solução numérica baseada em volumes finitos para o fenômeno de segregação inversa durante a solidificação unidirecional de uma liga binária de Al-Cu. O trabalho enfatiza a forma de captura da difusão em escala local de soluto a partir de um modelo microscópico. Voller compara os resultados do modelo numérico com uma solução analítica para a segregação de soluto e realiza um estudo das principais variáveis do modelo numérico bem como a forma que ambos os modelos de micro escala (Wang-Beckermann e Clyne-Kurz) utilizados para captura da concentração local de soluto influenciam nos resultados dos perfis de segregação [Voller, 1998].

Nastac, em 1998, desenvolveu uma solução analítica para descrever a transferência de soluto na região líquida durante a solidificação unidirecional de ligas binárias diluídas na ausência de convecção, ou seja, nenhum escoamento de fluido é admitido. A principal aplicação deste modelo analítico consiste na possibilidade de obtenção de valores precisos de propriedades termofísicas de ligas diluídas na ausência de convecção [Nastac, 1998].

Vreeman, Krane e Incropera apresentam um modelo numérico bidimensional de misturas binárias com o objetivo de descrever o processo de lingotamento contínuo de ligas de alumínio, considerando, para a redistribuição de composição dos componentes de liga, o transporte de dendritas livres flutuantes na zona pastosa. Os autores utilizam equações distintas para a transferência de momento nas regiões bifásicas as quais incluem um fluido pastoso de fragmentos de dendritas flutuando livremente numa matriz sólida rígida [Vreeman, Krane e Incropera, 2000], conforme apresentado na Figura 2.9. Em trabalho posterior, Vreeman e Incropera, apresentam resultados numéricos para ligas de Al-4,5% Cu e Al-6,0% Mg [Vreeman e Incropera, 2000].

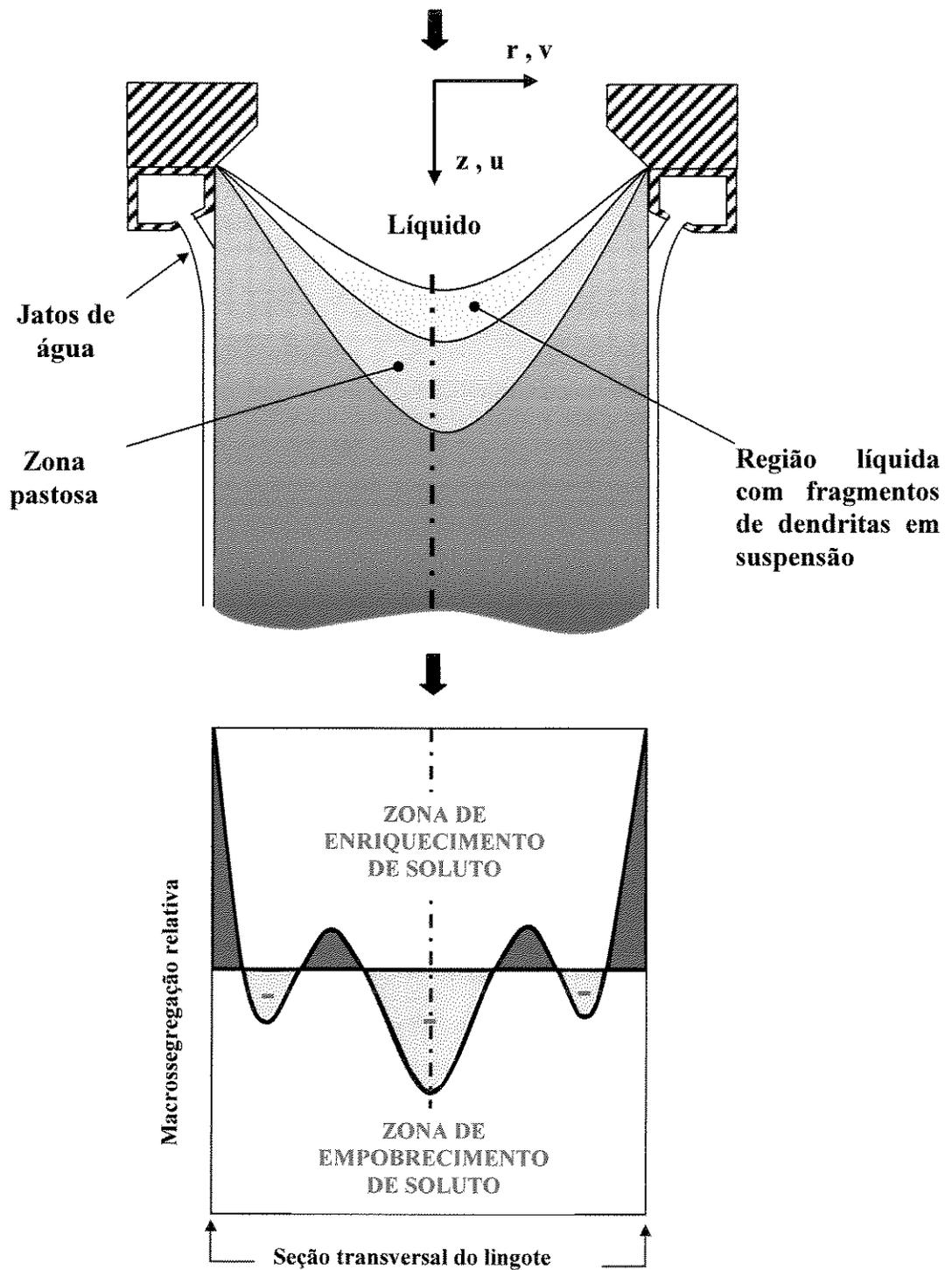


Figura 2.9 – Processo de resfriamento direto e a distribuição de soluto comumente observada dos elementos de liga.

Em 2001, Santos, Quaresma e Garcia apresentaram um método de determinação do coeficiente transiente de transferência de calor na interface metal/molde para a solidificação de metais puros e ligas binárias, variável que é fundamental para uma determinação mais precisa dos perfis de segregação inversa. A técnica numérica empregada para a solução da equação da energia foi a de diferenças finitas. O lingote solidificado apresentava termo sensores em determinadas posições, que por sua vez estavam conectados ao registrador de temperatura e a um computador. O valor do coeficiente de transmissão de calor pode ser obtido pelo melhor resultado do confronto teórico-experimental [Santos, Quaresma e Garcia, 2001].

Kuznetsov e Xiong aplicam o modelo de Voller [Voller, 1998] para o estudo da formação de microporosidade em ligas binárias considerando condições de solidificação unidirecional vertical ascendente, vertical descendente e em condições de microgravidade. A gravidade interfere na pressão local no lingote devido à pressão metalostática, fazendo com que a pressão parcial do gás naquela região seja maior ou menor que o somatório das pressões estática, dinâmica e tensão superficial. Os autores admitem a permeabilidade isotrópica para a solução da equação do momento [Kuznetsov e Xiong, 2002].

Rerko, Groh e Beckermann com o objetivo de estudar os efeitos da convecção no líquido e o transporte de sólido sobre a macrossegregação e estruturas de grãos equiaxiais em ligas de Al-Cu, apresentam um modelo numérico capaz de englobar a convecção térmica e mássica e o transporte de cristais sólidos. Para investigar situações onde a precipitação de grãos é ou não é esperada, realizam um estudo experimental do transporte de sólido e da convecção térmica e mássica e da distribuição de grãos ao longo do lingote. Os autores determinam cuidadosamente as condições de contorno do sistema, os perfis de temperatura e de segregação de soluto, bem como o tamanho de grão para posterior validação do código numérico. As ligas utilizadas são Al-1%Cu e Al-10%Cu, refrigeradas ora por uma chapa molde inferior ora por uma superior [Rerko, Groh e Beckermann, 2003].

Lee, Chirazi, Atwood e Wang, utilizando modelo numérico em elementos finitos para solução da equação de transporte em macro-escala, e pela utilização do modelo em diferenças finitas de automação celular (“diferenças finitas de automação celular” significa a utilização de

figuras simples, como triângulos, em conjunto com operações básicas simples, para o estudo numérico de formas complexas, como fractais, dendritas e o estudo da teoria do caos) para a solução dos problemas de meso-escala, tais como crescimento de poros e grãos, resolvem o problema de microsegregação e microporosidade durante a solidificação tridimensional de ligas de Al-Cu-Si. Neste modelo, os dados termodinâmicos da liga ternária necessários à solução do problema, são fornecidos pelo Thermo-Calc pelo módulo QT, que permite a utilização de uma linguagem de programação como C ou Fortran, para obter dados de simulação termodinâmicos do Thermo-Calc, por meio de funções disponíveis na biblioteca do módulo TQ, e que devem ser compiladas simultaneamente com o modelo numérico [Lee, Chirazi, Atwood e Wang, 2004]. Um esquema representativo deste modelo é apresentado na Figura 2.10, onde T é o campo de temperatura, P o campo de pressão, f_s representa a distribuição de fração de sólido ao longo do domínio e λ o espaçamento interdendrítico.

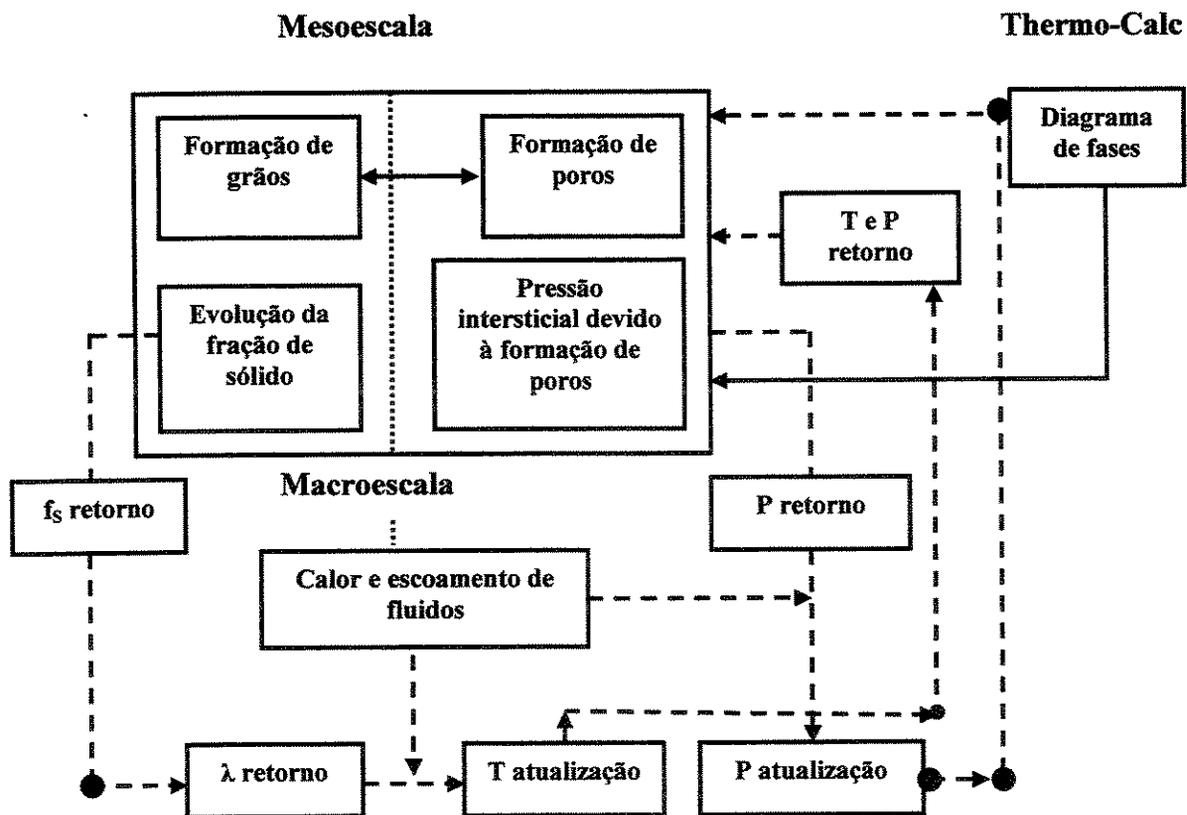


Figura 2.10 – Fluxograma do modelo de multi-escala e os respectivos parâmetros passados entre os níveis.

Em 2004, Krane apresentou um tratamento numérico para movimentos de partículas sólidas que ocorrem durante a solidificação da liga Pb-5%Sb-35%Sn para o estudo dos perfis de macrossegregação e o seu comportamento convectivo. Os efeitos dos caminhos de solidificação sobre o escoamento de fluido e sobre a macrossegregação são comparados a perfis de sistemas binários conhecidos. O principal objetivo deste trabalho era a combinação dos modelos já existentes na literatura para a solidificação de ligas ternárias [Krane, Incropera e Gaskell, 1997; Krane e Incropera, 1997], com modelos de escoamento de fluidos com transporte de sólidos [Vreeman, Krane e Incropera, 2000] para investigar os efeitos dos movimentos de partículas sólidas exercem sobre a macrossegregação [Krane, 2004].

Capítulo 3

Análise Matemática da Segregação Inversa

3.1 - Considerações Preliminares

Na maioria dos lingotes de ligas metálicas, a heterogeneidade da sua composição está freqüentemente relacionada à distribuição de soluto entre as frações de sólido e de líquido durante o processo de solidificação. Baseado na escala do evento de segregação, pode-se classifica-la em dois tipos: microsegregação e macrosegregação. Microsegregação refere-se ao evento que ocorre em nível de escala microscópica (isto é, contornos de grão, estrutura interdendrítica ou intercelular), enquanto a macrosegregação ocorre em nível macroscópico (o próprio lingote). A macrosegregação pode ser também dividida em duas categorias: normal e inversa.

A compreensão da teoria de microsegregação permite o desenvolvimento de uma teoria quantitativa para a macrosegregação. Inúmeros trabalhos que estudam os mecanismos básicos da redistribuição macroscópica de soluto em ligas não-ferrosas, tais como, Al-Cu e Cu-Sn podem ser encontrados na literatura. Todavia, Scheil foi o primeiro que apresenta uma formulação analítica para a análise da microsegregação baseada no fluxo de retorno enriquecido de soluto devido à contração volumétrica em direção oposta a frente de solidificação. O tratamento proposto por Scheil admite as seguintes condições: difusão completa no líquido, nenhuma difusão no sólido, ausência de super resfriamento no líquido antes da nucleação, ausência de transporte macroscópico de massa, e finalmente ausência de porosidade. A consideração de concentração homogênea no líquido é razoável para lingotes pequenos, e a hipótese de nenhuma difusão de

soluto é válida para o caso de elementos que apresentem raios atômicos similares, como por exemplo, o sistema Al-Cu. A formulação proposta para ligas binárias, considerando coeficiente de partição constante k_o e a mudança na fração mássica de líquido f_L , é dada por [Scheil, 1947]:

$$\frac{\partial f_L}{\partial C_L} = -\left(\frac{1}{1-k_o}\right) \frac{f_L}{C_L}, \quad [3.1]$$

ou em termos de composição sólida:

$$C_S = k_o C_o (f_L)^{(k_o-1)}, \quad [3.2]$$

em que C_o e C_L são as composições nominal e do líquido, respectivamente, em percentagem em peso.

Na solidificação direcional vertical ascendente, uma maior quantidade de soluto pode ser encontrada na base do lingote. Este fenômeno é chamado de macrossegregação inversa. Sabe-se que o enriquecimento de soluto da região inicialmente solidificada é devido ao fluxo de retorno de líquido enriquecido para a região inicialmente solidificada (zona pastosa). Este fluxo é causado principalmente pela contração de solidificação devido a diferenças de massa específica do sólido e do líquido, pela geometria, pela deformação sólida, pela gravidade e por forças externas, tais como força centrífuga e campos magnéticos.

Flemings e Nereo [Flemings e Nereo, 1967; Flemings e Nereo, 1968; Flemings, Mehrabian e Nereo, 1968] desenvolvem expressões gerais que descrevem a macrossegregação inversa como resultado do mecanismo de fluxo interdendrítico de soluto enriquecido que alimenta a contração térmica e a contração de solidificação. Estas expressões são equivalentes às aquelas de Scheil [Scheil, 1947] e de Kirkaldy [Kirkaldy e Youdelis, 1958]. Muitos pesquisadores acreditam que os parâmetros principais que favorecem a formação do perfil inverso de soluto são os seguintes: amplo intervalo de solidificação, baixas taxas de resfriamento e espaçamento dendrítico robusto.

Neste contexto, é proposta uma solução analítica desenvolvida por Garcia [Lipton e Garcia, 1982] que acopla as equações analíticas de um modelo de solidificação para ligas binárias [Garcia 2001] com a equação clássica de redistribuição de soluto local proposta por Flemings e Nereo. Mais à frente, é apresentada uma solução semi-analítica desenvolvida originalmente por [Voller, 1998], que inclui o acoplamento dos campos de concentração e temperatura na zona pastosa, reação eutética, macrossegregação, microssegregação e escoamento de fluidos para sistemas com multicomponentes. Embora esta solução apresente um caráter mais geral que a anteriormente proposta por Chiareli e Worster [Huppert e Worster, 1985; Worster, 1986; Chiareli e Worster, 1992], ela necessita de uma solução numérica, baseada no método de Euler ou mais aconselhável Range Kutta de quinta ordem, para a solução dos perfis de temperatura, concentração de soluto, gradientes térmicos e campo de velocidade na zona pastosa. Também possui a restrição das propriedades térmicas (com a exceção da massa específica) serem as mesmas, tanto no sólido quanto no líquido.

3.2 - Modelo Analítico para a Macrossegregação Inversa

3.2.1 - Abordagem analítica de Flemings e Nereo [1968].

Normalmente, determina-se a macrossegregação da seguinte forma:

$$\Delta C = \bar{C}_s - C_o \quad [3.3]$$

em que \bar{C}_s é a composição do meio em cada ponto após a solidificação em percentagem em peso. Também pode-se utilizar como índice de segregação a relação C_{\max}/C_{\min} ou $(C_{\max} - C_{\min})/C_o$ ou por uma taxa de segregação \bar{C}_s/C_o . Se $\bar{C}_s > C_o$, a segregação é denominada de positiva, e negativa quando $\bar{C}_s < C_o$.

A análise quantitativa da macrossegregação inversa pode ser realizada pela conservação de soluto no elemento de volume através do qual flui o líquido interdendrítico [Garcia, 2001], ou seja ::

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\bar{C}) = -\nabla \cdot \rho_L f_L C_L V_F \quad , \quad [3.4]$$

em que $\bar{\rho}$ é a massa específica do meio local em [kg/m³] (sólido+líquido), \bar{C} é a concentração do meio local em percentagem em peso, t é o tempo em [s], ρ_L é a massa específica do líquido e V_F é a velocidade do líquido interdendrítico relativa ao sólido em [m/s].

Flemings propôs um modelo para prever os vários tipos de segregação, e em particular a macrossegregação inversa. Este modelo baseia-se num balanço de massas considerando um elemento de volume pequeno (x, y, z) dentro de um lingote durante o processo de solidificação. As hipóteses simplificadoras assumidas por Flemings são: o elemento é grande o suficiente de tal forma que a fração sólida dentro do mesmo é exatamente a média local, todavia pequeno o suficiente para ser tratado como um elemento diferencial; nenhum material sólido entra ou sai do elemento de volume durante a solidificação; soluto entra e sai do elemento somente por fluxo de líquido interdendrítico para alimentar a contração; a composição e temperatura do líquido dentro de um elemento são uniformes (dentro de um volume médio representativo) em qualquer tempo. A equação de redistribuição de soluto local desenvolvida é dada por [Flemings, 1967]:

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} = -\left(\frac{1-k_o}{1-\beta}\right) \frac{C_L}{f_L} \cdot \frac{\partial f_L}{\partial t} - V_F \cdot \nabla C_L \quad , \quad [3.5]$$

em que $\beta = (\rho_S - \rho_L) / \rho_S$ é o coeficiente de contração de solidificação. Uma expressão similar pode ser escrita, logo:

$$\frac{\partial f_L}{\partial C_L} = -\left(\frac{1-\beta}{1-k_o}\right) \left(1 + \frac{V_F \cdot G}{\dot{T}}\right) \frac{f_L}{C_L} \quad , \quad [3.6]$$

em que G é o gradiente térmico [K/m], \dot{T} é a taxa de resfriamento [°C/s] e z é a variável espacial em [m].

A equação [3.6] é a equação de redistribuição básica de soluto utilizada para prever a formação da macrossegregação inversa por meio de variáveis térmicas calculadas ou medidas experimentalmente, tais como: gradiente de temperatura, taxa de resfriamento e velocidade de deslocamento da isoterma liquidus.

A equação (3.6) é válida para fluxo de calor unidirecional, assumindo que as massas específicas do sólido e do líquido sejam constantes durante o processo de solidificação; ausência de movimento de soluto no líquido por gravidade; ausência de poros e fluxo de metal líquido ocorrendo somente pela contração térmica da solidificação. Para o caso de isotermas planares, em relação ao molde, a velocidade de fluxo líquido de retorno V_{FZ} , pode ser considerada na forma:

$$V_F = -\beta' \cdot V_S \quad \text{sendo} \quad \beta' = \frac{\beta}{1-\beta} \quad , \quad [3.7]$$

em que V_S é a velocidade da isoterma solidus em [m/s].

A integração da equação (3.6) resulta em:

$$\frac{C_L}{C_o} = (f_L)^{\left[\frac{(k_o-1)}{(1-\beta') \left(1 - \frac{V_F \cdot G}{\dot{T}} \right)} \right]} \quad \text{ou} \quad C_S^* = k_o \cdot C_o (f_L)^{\left[\frac{(k_o-1)}{(1-\beta') \left(1 - \frac{V_S \cdot G}{\dot{T}} \right)} \right]} \quad . \quad [3.8]$$

A equação (3.8) permite a análise de algumas situações:

- i. Quando $(v_F \cdot G) / \dot{T} = -\beta' / (1 - \beta')$, a equação (3.8) recai na equação de Scheil, e não ocorre macrossegregação;
- ii. Quando $(v_F \cdot G) / \dot{T} < -\beta' / (1 - \beta')$, C_L torna-se menor que a equação de Scheil, e pode ocorrer macrossegregação negativa;
- iii. Quando $1 > (v_F \cdot G) / \dot{T} > -\beta' / (1 - \beta')$, ocorre macrossegregação positiva; e

iv. Na superfície, $V_F = 0$ [m/s], resulta em:

$$C_S^* = k_o C_o (f_L)^{\left[\frac{k_o-1}{1-\beta}\right]} \quad [3.9]$$

No trabalho de Flemings, a distribuição de fração líquida f'_L , como uma função da posição z' na zona pastosa, é considerada linear, admitindo-se $f_E = 0$ em z_E , é dada por:

$$f'_L = f_E + \frac{(1-f_E)(z'-z_E)}{(z_L-z_E)} \quad , \quad [3.10]$$

e é válida para $z < z_L$, onde z' é a posição dentro da zona pastosa em [m], z_E e z_L são posições das isothermas eutética e liquidus em relação à interface metal/molde [m] e f'_L é a fração de líquido na zona pastosa segundo o modelo linear proposto por Flemings [Flemings e Nereo, 1967] para diferenciar da variável f_L apresentada na equações (3.6) e (3.8). A Figura 3.1 mostra a representação esquemática desta condição.

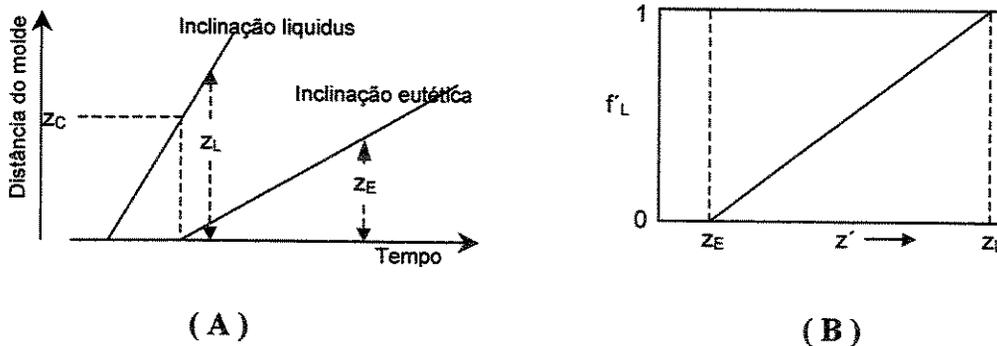


Figura 3.1 - (A) Movimento das isothermas liquidus e eutética e (B) distribuição de líquido na zona pastosa (linear f'_L por z' , assumindo $f_E = 0$).

A concentração de soluto média local \bar{C}_S pode ser obtida por meio das médias das concentrações das fases eutética e dendrítica primária, calculada por:

$$\bar{C}_S = \frac{\rho_S \int_0^{1-f_E} C_S^* \partial f_s + \rho_{SE} f_E C_E}{\rho_S(1-f_E) + \rho_{SE} f_E} \quad [3.11]$$

em que f_E é a fração mássica da fase eutética, C_E é a composição da fase eutética e ρ_{SE} é a massa específica do sólido eutético.

3.2.2 - Modelo Analítico de Solidificação

Um modelo analítico de transferência de calor, que descreve a distribuição de temperatura e a posição das isothermas solidus e liquidus na solidificação unidirecional de ligas binárias, é utilizado para determinar as variáveis térmicas de solidificação para o necessário acoplamento com a solução de Flemings para a determinação de perfis de segregação inversa [Garcia, 2001]. O modelo é uma extensão daquele desenvolvido anteriormente por Prates e Garcia para metais puros em moldes refrigerados, para solidificação de metais puros em moldes maciços, ou para ligas binárias solidificadas em moldes refrigerados ou maciços [Garcia e Prates, 1978, Garcia, Clyne e Prates, 1979]. O modelo aplicado utiliza uma técnica matemática para substituir a resistência térmica interfacial por camadas equivalentes de material, e o calor latente de fusão é levado em conta através do ajuste do calor específico sobre o intervalo de temperatura de solidificação. O lingote é tratado como um problema unidimensional de fronteiras móveis nas pontas e raízes das dendritas. Admite-se que a resistência newtoniana da interface metal/molde é representada por um coeficiente de transferência de calor h_i [W/m²K]. As demais propriedades termofísicas que descrevem o sistema são tratadas como médias dentro do mesmo estado de agregação, da seguinte forma:

$$T > T_{Liq} \quad \left\{ \begin{array}{l} k_L, \rho_L, c_L \end{array} \right. \quad [3.12]$$

$$T_{Sol} < T < T_{Liq} \quad \left\{ \begin{array}{l} k_{SL} = (k_S + k_L)/2, \end{array} \right. \quad [3.13]$$

$$T_{Sol} < T < T_{Liq} \quad \left\{ \begin{array}{l} \rho_{SL} = (\rho_S + \rho_L)/2, \end{array} \right. \quad [3.14]$$

$$T_{Sol} < T < T_{Liq} \quad \left\{ \begin{array}{l} c_{SL} = c_L + [\Delta H / (T_{Liq} - T_{Sol})] \end{array} \right. \quad [3.15]$$

$$T < T_{Sol} \quad \left\{ \begin{array}{l} k_S, \rho_S, c_S \end{array} \right. \quad [3.16]$$

em que k é a condutividade térmica em [W/m.K], c é o calor específico em [J/kg.K], T_{Liq} é a temperatura liquidus em [°C], T_{sol} é a temperatura solidus fora do equilíbrio e ΔH é o calor latente de fusão em [J/kg].

A equação de transferência de calor por condução unidimensional transiente de Fourier é aplicável de forma exata a um sistema virtual metal/molde, sendo a solução obtida inicialmente para o sistema virtual e transposta ao sistema real por meio de algumas relações cartesianas. Sob estas circunstâncias o modelo é completamente descrito no sistema real pelas equações apresentadas seguir [Garcia, 2001]:

3.2.2.1 - Posição da isoterma solidus:

$$t_s = \frac{S_s^2}{4 \alpha_s (\phi_1)^2} + \frac{L_0 S_s}{2 \alpha_s (\phi_1)^2} + \frac{(L_0^2 - S_0^2)}{4 \alpha_s (\phi_1)^2} \quad , \quad [3.17]$$

onde S_s é a posição da isoterma solidus a partir da interface metal/molde em [m], α_s é a difusividade térmica do sólido em [m²/s], ϕ_1 é uma constante de solidificação associada ao deslocamento da isoterma liquidus, S_0 é a espessura de sólido pré-existente adjacente ao metal no sistema virtual [m], e L_0 é a espessura total de material pré-existente adjacente ao metal no sistema virtual (sólido e zona pastosa) em [m].

3.2.2.2 - Posição da isoterma liquidus:

$$t_L = \frac{S_L^2}{4 \alpha_{SL} (\phi_2)^2} + \frac{L_0 S_L}{2 \alpha_{SL} (\phi_2)^2} \quad , \quad [3.18]$$

em que S_L é a posição da isoterma liquidus a partir da interface metal/molde em [m], α_{SL} é a difusividade térmica da zona pastosa e ϕ_2 é a constante de solidificação associada ao deslocamento da isoterma liquidus.

3.2.2.3 - Distribuição de temperatura no molde T_M :

$$T_M = T_0 + \frac{M (T_{Sol} - T_0)}{M + erf(\phi_1)} \left[1 + erf \left(N \phi_1 \frac{z - E_0}{S_S + L_0} \right) \right] , \quad [3.19]$$

em que M é a razão entre as difusividades de calor do sólido e do material do molde, $(k_S c_S \rho_S / k_M c_M \rho_M)^{1/2}$, N é a raiz quadrada da razão das difusividades térmicas do sólido e do material do molde, $(\alpha_S / \alpha_M)^{1/2}$, E_0 é a espessura de metal pré-existente adjacente ao molde no sistema virtual, T_0 é a temperatura ambiente e z é a posição a partir da interface metal/molde.

3.2.2.4 - Distribuição de temperatura no sólido T_S :

$$T_S = T_0 + \frac{(T_{Sol} - T_0)}{M + erf(\phi_1)} \left[M + erf \left(\phi_1 \frac{z + L_0}{S_S + L_0} \right) \right] , \quad [3.20]$$

3.2.2.5 - Distribuição de temperatura na zona pastosa T_{SL} :

$$T_{SL} = T_{Liq} - \frac{(T_{Liq} - T_{Sol})}{erf(\phi_2) - erf(n \phi_1)} \left[erf(\phi_2) - erf \left(\phi_2 \frac{z + L_0}{S_L + L_0} \right) \right] , \quad [3.21]$$

em que é a raiz quadrada da razão das difusividades térmicas do sólido e da zona pastosa, $(\alpha_S / \alpha_{SL})^{1/2}$.

3.2.2.6 - Distribuição de temperatura no líquido T_L :

$$T_L = T_V - \frac{(T_V - T_{Liq})}{1 - \text{erf}(m \phi_2)} \left[1 - \text{erf} \left(m \phi_2 \frac{z + L_0}{S_L + L_0} \right) \right] \quad , \quad [3.22]$$

em que m é a raiz quadrada da razão entre as difusividades térmicas da zona pastosa e do líquido, $(\alpha_{Sl}/\alpha_L)^{1/2}$ e T_V é a temperatura de vazamento.

O balanço térmico realizado na interface sólido/zona pastosa e zona pastosa/líquido permite a determinação das constantes ϕ_1 e ϕ_2 pela resolução simultânea das equações (3.23) e (3.24), logo:

$$\frac{T_{Liq} - T_{Sol}}{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n \phi_1)} = \frac{k_S \exp[(n^2 - 1)\phi_1^2]}{k_{SL} n [M + \text{erf}(\phi_1)]} (T_{Sol} - T_o) \quad , e \quad [3.23]$$

$$\frac{T_{Liq} - T_{Sol}}{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n \phi_1)} = \frac{k_L m \exp[(1 - m^2)\phi_2^2]}{k_{SL} [1 - \text{erf}(m \phi_2)]} (T_V - T_{Liq}) \quad . \quad [3.24]$$

As constantes do sistema virtual S_o , L_o e E_o podem ser expressas em função do coeficiente de transferência de calor metal/molde, h_i , e são dadas respectivamente por:

$$S_o = \frac{2 k_S \phi_1 (T_{Sol} - T_o)}{\sqrt{\pi} (T_{Liq} - T_o) \exp(\phi_1^2) [M + \text{erf}(\phi_1)] h_i} \quad , \quad [3.25]$$

$$L_o = \frac{\phi_2}{n \phi_1} S_o \quad , e \quad [3.26]$$

$$E_o = \frac{S_o}{N} \quad . \quad [3.27]$$

A velocidade da isoterma liquidus ou velocidade das pontas das dendritas pode ser obtida da equação (3.18), sendo expressa por:

$$V_L = \frac{2\alpha_{SL} \phi_2^2}{S_L + L_o} . \quad [3.28]$$

Pela introdução de L_o , definida pela equação (3.26), na equação (3.28), tem-se:

$$V_L = \frac{2\alpha_{SL} \phi_2^2}{\left[\frac{2k_S \phi_2 (T_{Sol} - T_0)}{n\sqrt{\pi} (T_{Liq} - T_0) \exp(\phi_1^2) [M + \text{erf}(\phi_1)] h_i} \right] + S_L} . \quad [3.29]$$

A velocidade da isoterma solidus ou velocidade da raiz das dendritas pode ser obtida da equação (3.17):

$$V_S = \frac{2\alpha_S \phi_1^2}{S_S + L_o} . \quad [3.30]$$

Pela introdução de L_o na equação (3.30), tem-se:

$$V_S = \frac{2\alpha_S \phi_1^2}{\left[\frac{2k_S \phi_2 (T_{Sol} - T_0)}{n\sqrt{\pi} (T_{Liq} - T_0) \exp(\phi_1^2) [M + \text{erf}(\phi_1)] h_i} \right] + S_S} . \quad [3.31]$$

Os gradientes de temperatura imediatamente à esquerda das pontas dendríticas e à direita desta interface podem ser determinados por meio das equações (3.32) e (3.33), sendo dados, respectivamente, por:

$$G_{SL} = \left(\frac{\partial T_{SL}}{\partial x} \right) = \frac{2\phi_2 (T_{Liq} - T_{Sol})}{\sqrt{\pi} [\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)] \exp(\phi_2)^2 (S_L + L_o)} , e \quad [3.32]$$

$$G_L = \left(\frac{\partial T_L}{\partial x} \right) = \frac{2m\phi_2 (T_V - T_{Liq})}{\sqrt{\pi} [1 - \text{erf}(m\phi_2)] \exp(m\phi_2)^2 (S_L + L_o)} . \quad [3.33]$$

e a taxa de resfriamento à frente da isoterma liquidus:

$$\dot{T} = \frac{4 \cdot m \cdot \phi_2 \cdot (T_V - T_{Liq}) \cdot \alpha_L}{\sqrt{\pi} \cdot [1 - erf(m\phi_2)] \cdot \exp(m\phi_2)^2} \cdot V_L^2 \quad [3.34]$$

As velocidades das isothermas liquidus e solidus, o gradiente de temperatura e a taxa de resfriamento, variáveis representadas, respectivamente, pelas equações (3.30), (3.31), (3.33) e (3.34), são utilizadas na equação (3.8) para a determinação analítica do perfil de macrossegregação inversa em função de parâmetros de solidificação metal/molde tais como a temperatura de vazamento e o coeficiente de transmissão de calor metal/molde h_i . Este último coeficiente pode ser introduzido no modelo analítico na forma transitória, bastando adotar um artifício de cálculo [Garcia, 2001].

3.3 - Abordagem do Modelo Semi-Analítico para a Macrossegregação Inversa

3.3.1 - Modelo mais representativo da literatura

No desenvolvimento do modelo semi-analítico de acoplamento das equações de transporte de calor e massa, necessárias à modelagem da segregação inversa, Voller [Voller, 1997] considera as seguintes hipóteses:

- i. A região sólida é fixa, isto é, a morfologia da zona pastosa é colunar dendrítica ou equiaxial consolidada;
- ii. Dentro de um volume elementar representativo (REV) da zona pastosa (da ordem de 10^{-2} a 10^{-3} m) a temperatura é uniforme;
- iii. Na fração de líquido de um volume elementar representativo as concentrações de soluto são uniformes;
- iv. O equilíbrio termodinâmico é mantido na interface sólido/líquido, isto é, na interface sólido/líquido do volume elementar representativo, as concentrações de sólido e líquido de cada espécie são expressas via $C_S = k_0 C_L$, onde k_0 é o coeficiente de partição de soluto no equilíbrio. Isto implica que, a temperatura e as concentrações de soluto do líquido de um volume elementar permanecem na linha liquidus do diagrama de fases; e

- v. A temperatura de fusão sofre uma transformação de escala de modo que a temperatura de fusão T_F do solvente puro se torna zero, e a linha liquidus é expressa por:

$$T_L = -m_L C_L \quad , \quad [3.35]$$

em que $-m_L$ é o coeficiente angular constante da linha liquidus, e T_L é a temperatura da linha liquidus variando com a concentração no diagrama de fases segundo a Figura 3.2 .

Este rescalonamento da temperatura possui as seguintes implicações sobre as temperaturas do processo, assumindo os dados fornecidos pelo trabalho de Voller [Voller, 1997].

Se $T_F = 921,2 \text{ K} \rightarrow T_F - T_F = 0$, $T_{Liq} = 904,2 \text{ K} \rightarrow 904,2 - T_F = -17$, $T_{eut} = 821,2 \text{ K} \rightarrow 821,2 - T_F = -100$, $T_{base} = 621,2 \text{ K} \rightarrow 621,2 - T_F = -300$ e, finalmente, se $T_L = T_F - m_L C_L \rightarrow T_L = T_F - m_L C_L - T_F = -m_L C_L$, onde T_{Liq} é a temperatura liquidus da liga considerada, T_{eut} é a temperatura eutética e T_{base} é a temperatura da base do lingote assumida como constante.

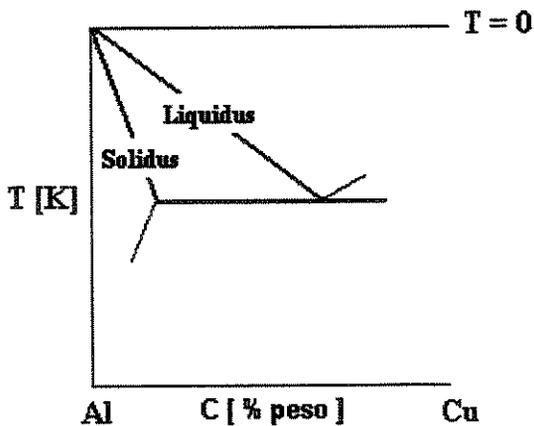


Figura 3.2 - Seção esquemática de um diagrama de fases segundo o sistema de referência adotado pelo modelo analítico.

- vi. Na escala macroscópica (ordem de metros) de um processo de solidificação, a difusão mássica de soluto é desprezível ($D_S = 0$ e $D_L = 0$);

- vii. Na escala microscópica de um volume elementar, a difusão finita de soluto no sólido, é levada em conta pelo emprego da formulação de microsegregação de Clyne e Kurz [Clyne e Kurz, 1981];
- viii. O escoamento do líquido interdendrítico é induzido pela diferença de densidades entre as fases sólida e líquida, permanecendo os valores das massas específicas ρ_s e ρ_l constantes dentro de cada fase;
- ix. São considerados valores baixos de superaquecimento no líquido, de tal forma que a transferência de calor em toda a extensão líquida se dê somente por condução térmica;
- x. Por conveniência de apresentação [Voller, 1997] somente são considerados valores constantes de condutividade térmica, calor específico e calor latente.

De posse das hipóteses anteriormente apresentadas, as equações que governam o processo de solidificação são as seguintes:

Na região líquida, $Z_{liq} \leq z$ ($z = Z_b$ é considerado como bem distante $z \rightarrow \infty$)

□ Calor

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad , \quad [3.36]$$

em que $\kappa = k/\rho_l c$ é a difusividade térmica do líquido.

Na zona pastosa, $Z_{eut} \leq z \leq Z_{liq}$

□ Calor

$$[(1 - \phi) + \phi R] \frac{\partial T}{\partial t} + U \frac{\partial T}{\partial z} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + R \frac{\Delta H}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad , \quad [3.37]$$

em que ϕ é a fração de sólido num volume elementar representativo, R é a razão das massas específicas do sólido e do líquido ρ_s/ρ_l e U é o fluxo volumétrico interdendrítico.

□ Concentração

$$[\beta k_0 R \phi + (1 - \phi)] \frac{\partial C_L}{\partial t} + U \frac{\partial C_L}{\partial z} = (1 - k_0) R C_L \frac{\partial \phi}{\partial t}, \text{ e} \quad [3.38]$$

□ Massa

$$\frac{\partial U}{\partial z} = (1 - R) \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad . \quad [3.39]$$

Na região sólida $0 \leq z \leq Z_{cut}$.

□ Calor

$$\frac{\partial T}{\partial t} = R \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad . \quad [3.40]$$

As condições de contorno assumidas são

Se $z \rightarrow \infty$

$$T = T_{Liq} + \Delta T_{SH}, \quad C_L = C_O, \quad [3.41]$$

em que C_O é a composição inicial da fase líquida, $T_{Liq} = -m_L C_O$ é a temperatura liquidus correspondente a esta composição e ΔT_{SH} é o superaquecimento definido como $\Delta T_{SH} = T_V - T_{Liq}$.

Na fronteira móvel, $z = Z_{liq}(t)$,

$$T = T_{Liq} , \left[\frac{\partial T}{\partial z} \right] = 0 , \phi = 0 \quad [3.42]$$

onde os colchetes indicam descontinuidade através da fronteira.

Na fronteira móvel $z = Z_{eut}(t)$ e $T = T_{eut}$:

$$\kappa \left[\frac{\partial T}{\partial z} \right] = -R(1-\phi) \frac{dZ_{eut}}{dt} \frac{\Delta H}{c} , U = (1-R)(1-\phi) \frac{dZ_{eut}}{dt} . \quad [3.43]$$

em que os dois últimos termos advêm do salto na fração líquida na fronteira eutética.

Em $z = 0$,

$$T = T_{base} < T_{eut} . \quad [3.44]$$

Na zona pastosa, $Z_{eut} \leq z \leq Z_{liq}$, e as equações que governam o processo são aproximadamente aquelas apresentadas por Chiareli e Worster [Chiareli e Worster, 1992]. A solução da equação de soluto, no entanto, é mais generalizada. Estes autores consideram em seu modelo rejeição completa de soluto conforme o sólido se forma ($k_0 = 0$). No modelo de Voller [Voller, 1997], k_0 pode assumir valores finitos entre 0 e 1. Em adição, o modelo aqui apresentado, inclui o termo β , não encontrado no modelo de Chiareli e Worster. Este parâmetro permite a modelagem da microsegregação da fase sólida no elemento elementar representativo, referido comumente como difusão de retorno. Assumindo $\beta = 0$ na equação (3.38), o modelo estabelece difusão de retorno igual a zero no sólido (equação de Scheil). Fazendo $\beta = 1$, o modelo permite difusão completa no estado sólido (regra da alavanca). A utilização deste parâmetro na equação (3.38) também permite a modelagem de difusão de retorno finita no estado sólido, $0 < \beta < 1$, um modelo conforme observado por Swaminathan e Voller [Swaminathan e Voller, 1997], consistente com o modelo de Clyne e Kurz [Clyne e Kurz, 1981].

Um passo crucial na solução numérica deste sistema de equações é o acoplamento dos campos de temperatura e concentração de soluto através da linha liquidus do diagrama de fases. Aproximações numéricas para este acoplamento podem ser utilizadas; todavia, estas são difíceis de se validar. Desta forma, a comparação de uma solução numérica utilizando acoplamento dos campos de concentração e temperatura, com uma solução analítica simples e robusta, não fornece parâmetros suficientes para a comprovação da eficácia do modelo. Tendo este princípio em mente, o principal objetivo do modelo apresentado por Voller [Voller, 1997], é o desenvolvimento de uma solução semi-analítica, para validar os esquemas de acoplamento dos campos temperatura e concentração de soluto. Todavia, é bastante interessante também a inclusão do termo de convecção na região líquida, que levar em conta o superaquecimento no líquido [Chung, Lee, Choi e Yoo, 2001], como forma de comparação com o modelo numérico.

Na solução analítica por similaridade, uma variável de similaridade, que combina as variáveis espacial e temporal, é obtida por meio de transformações das equações diferenciais parciais em um conjunto de equações diferenciais ordinárias, tornando esta nova variável como independente. Em alguns casos, a solução analítica pode ser obtida, isto é, solução de Neumann do problema de fronteiras móveis (problema de Stefan) [Crank, 1984], a solução de Rubinstein para solidificação de ligas de frente plana [Rubinstein, 1971] e a solução incluindo zona pastosa com um perfil de fração líquida linear imposta [Cho e Sunderland, 1969; Goodman, 1967]. No entanto, geralmente a solução numérica das equações diferenciais ordinárias se faz necessária, um passo provavelmente bem mais simples, preciso e menos complicado com relação à solução do sistema original de equações diferenciais parciais. A este respeito, desde que nenhuma aproximação física adicional seja feita, pode-se afirmar com elevado grau de confiabilidade, de que a solução de similaridade desenvolvida fornece uma solução precisa de um dado modelo de solidificação.

Em termos de se obter uma solução de similaridade de um sistema unidirecional de ligas binárias/eutéticas, conforme Figura 3.1, a maioria dos trabalhos utiliza soluções aquosas que exibem solubilidade igual a zero ($k_0 = 0$), isto é, conforme o sólido se forma na zona pastosa, há completa rejeição de soluto. A literatura apresenta trabalhos que utilizam a solução de similaridade comparando-as com resultados experimentais para soluções aquosas [Braga e

Viskanta, 1990]. No modelo aqui citado, a temperatura da base ($z = 0$) é fixada acima da temperatura eutética e considera-se desprezível o escoamento de fluido. Desde que somente duas regiões se formem, a zona pastosa e outra completamente líquida, a reação eutética é evitada e a macrossegregação não necessita ser modelada. No trabalho de Fang et al [Fang, Cheung, Linehan e Pedersen, 1984], apresentam um estudo similar que incluía três fases distintas, a sólida, a zona pastosa (líquido + sólido) e líquida. No entanto, as condições eram tais que a fase eutética não se formava e o escoamento de fluido que conduz a macrossegregação era desprezado. Worster , apresentou uma solução mais completa para a solidificação de um sistema aquoso [Worster, 1986]. Esta solução incluía três fases e reação eutética, porém não levava em consideração o escoamento de fluido nem a macrossegregação. Esta característica foi incorporada em trabalho posterior [Chiareli e Worster, 1992], que incluía o escoamento de fluido e a macrossegregação. Todavia, este modelo não considerava uma fase sólida ou uma reação eutética.

Esta solução por similaridade [Voller, 1997] ainda apresenta características bastante singulares que a distinguem das demais:

- i. o sistema inclui escoamento de fluido e macrossegregação juntamente com reação eutética e uma fase completamente sólida;
- ii. a liga em particular pode exibir solubilidade finita $0 < \beta < 1$, pode apresentar difusão infinita de soluto na fase sólida $\beta = 1$ (Regra da Alavanca) ou mesmo ausência de difusão de retorno no sólido $\beta = 0$ (Regra de Scheil); e
- iii. com interpretação apropriada e simplificações do diagrama de fases, a solução pode ser aplicada a ligas com multicomponentes, ternárias, etc.

3.3.2 - Abordagem de uma Solução por Variável de Similaridade

As equações (3.36) a (3.40) podem ser rescritas conforme a transformação apropriada da variável de similaridade, isto é:

$$\xi = \frac{z}{2\sqrt{\kappa t}} \quad , \quad [3.45]$$

e os movimentos das linhas eutética e liquidus são assumidos pelas seguintes relações,

$$Z_{liq} = 2\lambda\sqrt{\kappa t} \quad \text{e} \quad Z_{eut} = 2\mu\sqrt{\kappa t} \quad , \quad [3.46]$$

tais que no espaço ξ estas frentes sejam fixas em $\xi = \lambda$ e $\xi = \mu$, respectivamente:

Pela definição de um termo de velocidade:

$$U^* = U\sqrt{\frac{t}{\kappa}} \quad , \quad [3.47]$$

as equações diferenciais parciais que governam o fenômeno, [equações (3.36)-(3.40)], podem ser reduzidas a um conjunto de equações diferenciais ordinárias em termos da variável de similaridade, ξ para as diversas regiões do domínio.

Na região líquida $\xi \geq \lambda$:

□ Calor

$$2\xi \frac{\partial T}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} \quad ; \quad [3.48]$$

Na zona pastosa $\mu \leq \xi \leq \lambda$:

□ Calor

$$\frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} = -2\xi[(1-\phi) + \phi R] \frac{dT}{d\xi} + 2U^* \frac{dT}{d\xi} + 2R\xi \frac{\Delta H}{c} \frac{d\phi}{d\xi} \quad , \quad [3.49]$$

□ Concentração

$$\frac{\partial \phi}{\partial \xi} = \frac{\xi[(1-\phi) + \beta k_0 \phi R] - U^*}{(1-k_0)RT\xi} \frac{dT}{d\xi} \quad , \quad [3.50]$$

em que a linha liquidus [equação (3.35)], é utilizada para eliminar a concentração de líquido C_L , em favor da temperatura T . Se necessária a concentração média volumétrica no sólido em cada ponto na zona pastosa pode ser calculada resolvendo a equação diferencial:

$$\frac{d\phi \langle C_s \rangle^s}{d\xi} = -T \frac{k_0}{m} \frac{d\phi}{d\xi} - \beta \phi \frac{k_0}{m} \frac{d\phi}{d\xi} \quad , \quad [3.51]$$

em que $\langle C_s \rangle^s$ é o volume médio intrínseco, e mais uma vez a equação (3.35) e utilizada para eliminar a concentração de líquido.

□ Massa

$$\frac{\partial U^*}{\partial \xi} = (1-R)\xi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \quad . \quad [3.52]$$

Na região sólida $0 \leq \xi \leq \mu$:

□ Calor

$$2\xi \frac{\partial T}{\partial \xi} = R \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} \quad , \quad [3.53]$$

Devido à transformação das variáveis temporal e espacial na variável de similaridade as condições de contorno, tornam-se:

Se $\xi \rightarrow \infty$:

$$T \rightarrow T_{Liq} + \Delta T_{SH} . \quad [3.54]$$

No contorno $\xi = \lambda$:

$$T = T_{Liq} , \quad \left[\frac{dT}{d\xi} \right] = 0 , \quad \phi = 0 \quad , \quad [3.55]$$

No contorno $\xi = \mu$:

$$T = T_{eut} , \quad \left[\frac{dT}{d\xi} \right] = -2R(1-\phi)\mu \frac{\Delta H}{c} , \quad [U^+] = \mu(1-R)(1-\phi) \quad [3.56]$$

Em $\xi = 0$:

$$T = T_{base} . \quad [3.57]$$

Nas regiões completamente líquidas e completamente sólidas, podem ser obtidas soluções analíticas para os perfis de temperatura:

$$T = T_{Liq} + \Delta T_{SH} - \frac{\Delta T_{SH}}{\text{erfc}(\lambda)} \text{erfc}(\xi) \quad , \quad [3.58]$$

e

$$T = T_{base} + \frac{T_{eut} - T_{base}}{\text{erf}(\mu\sqrt{R})} \text{erf}(\mu\sqrt{R}) \quad , \quad [3.59]$$

respectivamente. Destas soluções, os gradientes de temperatura do lado líquido e do lado sólido da zona pastosa são em $\xi = \lambda^-$:

$$\frac{\partial T}{\partial \xi} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\Delta T_{SH}}{\operatorname{erfc}(\lambda)} e^{-\lambda^2}, \quad [3.60]$$

e em $\xi = \mu^-$, tem-se:

$$\frac{\partial T}{\partial \xi} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{R}(T_{ent} - T_{base})}{\operatorname{erf}(\mu\sqrt{R})} e^{-(\mu\sqrt{R})^2}. \quad [3.61]$$

3.3.2.1 - Algoritmo Computacional

Na zona pastosa, as equações de similaridade, [equações (3.53)-(3.56)], são resolvidas numericamente. Adotando e estendendo as aproximações de Chiareli e Worster [Chiareli e Worster, 1992], emprega-se um método iterativo com solução das equações diferenciais ordinárias pelo método de Euler. A zona pastosa, $\mu \leq \xi \leq \lambda$, é dividida em 4000 elementos, e sendo aplicados os seguintes passos iterativos:

- i. são atribuídos os valores de λ, μ e $U^* \Big|_{\xi=\lambda}$;
- ii. para os valores escolhidos de λ e μ , determina-se o tamanho do intervalo de integração;
- iii. utilizando a condição de continuidade do gradiente de temperatura em $\xi = \lambda$ [equação (3.55) e a expressão na equação (3.60)] avalia-se o gradiente no lado da zona pastosa $\xi = \lambda$;
- iv. iniciando em $\xi = \lambda$ e continuando a decrementar até $\xi = \mu$ as equações da zona pastosa [equações (3.49)-(3.52)] são resolvidas como problemas de valores iniciais utilizando o método de Euler;
- v. baseado na diferença entre a temperatura calculada em $\xi = \mu$, o valor dado T_{ent} , é atualizado o valor de λ . Em cada atualização de λ , são repetidos os passos ii-iv, continuando até que a convergência seja alcançada;

- vi. seguindo o passo v, o gradiente de temperatura no lado sólido da zona pastosa $\xi = \mu$ é avaliado com a utilização da equação (3.61). Então utilizando a condição de salto no gradiente de temperatura em $\xi = \mu$ [equação (3.56)] o valor de μ é atualizado;
- vii. se a convergência no passo vi não for alcançada, o gradiente de temperatura calculado no lado da zona pastosa de $\xi = \mu$ e o gradiente calculado pela equação (3.61) falham em satisfazer a condição de salto da equação (3.37) são repetidos os passos ii-vi;
- viii. havendo convergência no passo vii, o valor calculado do fluxo interdendrítico, U^* , em $\xi = \mu$ é comparado com o valor alvo da equação (3.56). A diferença entre o valor calculado e o valor alvo é utilizado como mecanismo para atualizar o fluxo em $\xi = \lambda$;
- ix. a convergência no passo ix fornece a solução completa; e
- x. seguindo a convergência completa da concentração da mistura em cada ponto (passo de integração i), a concentração na zona pastosa é calculada da seguinte forma:

$$[C]_i = \frac{\rho_s (\phi < C_s >^s)_i - \rho_l (1 - \phi)_i \frac{T_i}{m}}{\rho_l \phi_i + \rho_s (1 - \phi_i)}. \quad [3.62]$$

Na parte numérica da rotina de solução, Voller durante sua implementação verifica que alguns passos da solução necessitam de fatores de subrelaxação (coeficientes menores que a unidade) apropriados para se obter a convergência do conjunto de equações diferenciais ordinárias. A solução converge em questão de segundos num computador pessoal Pentium Standard 1.0 GHz. A escolha de 4000 divisões do domínio da zona pastosa muito embora seja um tanto excessivo, no entanto faz-se necessária para obtenção de uma solução precisa e estável, devido à utilização do esquema de Euler de primeira ordem para a solução das equações diferenciais ordinárias. Caso fosse empregado um esquema de ordem mais elevada, por exemplo, Runge-Kutta de quarta ordem, poucas divisões (em torno de cinquenta), e passos (por volta de três) seriam necessários.

3.3.2.2 - Simulação Analítica do Parâmetro Beta do Modelo de Micro-Escala

A Figura 3.3 apresenta alguns resultados para uma liga de alumínio com relação à variação do parâmetro β de difusão de retorno, ou seja, para a regra da alavanca $\beta = 1$, para difusão finita no sólido $\beta = 0,5$ e finalmente para a regra de Scheil $\beta = 0$, utilizando o modelo de Clyne e Kurz.

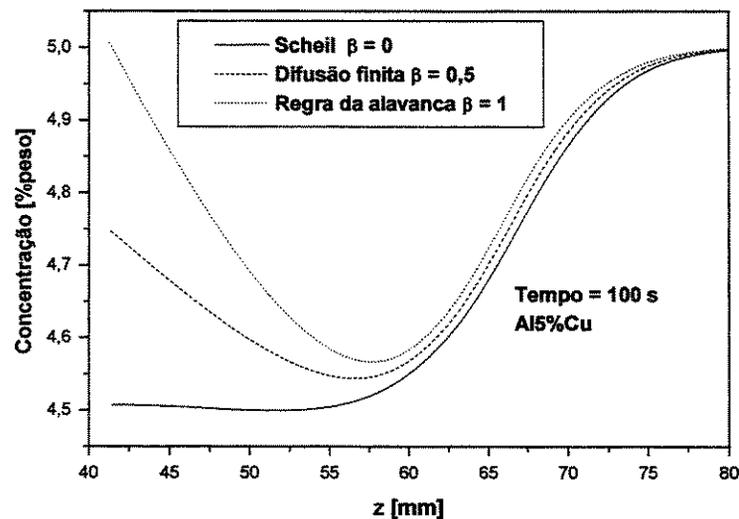


Figura 3.3 - Perfil analítico de concentração de soluto para a zona pastosa.

3.4- Modelo Numérico para análise da segregação inversa

3.4.1 - Considerações Preliminares

No desenvolvimento de ferramentas numéricas para os sistemas de solidificação, há muitas questões abertas. Duas áreas de primordial interesse são:

- i. desenvolvimento de modelos numéricos robustos e eficientes que possam calcular precisamente o acoplamento dos transportes de energia térmica e de espécies em sistemas que apresentem multicomponentes; e

-
- ii. desenvolvimento de estruturas de modelagem que levem em conta simultaneamente uma ampla escala de espaço e tempo que ocorre durante um processo de solidificação [Wang e Beckermann, 1993 ; Ni e Beckermann, 1991].

O presente estudo relata um método numérico recentemente proposto para o acoplamento dos campos de concentração e temperatura [Voller e Swaminathan, 1997; Voller, 1998]. Sob o contexto de um modelo de segregação inversa ocorrendo numa liga, será mostrado que este modelo:

- i. pode lidar com características chaves no acoplamento dos campos térmicos e de soluto, isto é, reações eutéticas e sistemas com multicomponentes; e
- ii. é bastante preciso, isto é, o esquema numérico proposto e o código associado resolvem com precisão as equações diferenciais parciais que governam o referido fenômeno.

O principal interesse será o mecanismo básico do esquema de acoplamento térmico-soluto, e a comparação das previsões numéricas primeiramente com aquelas obtidas utilizando-se uma solução de similaridade sofisticada para o processo de segregação inversa [Voller, 1997] e posteriormente com resultados experimentais. Também, será mostrado como o fenômeno de macro-escala, em particular, a difusão de escala local de soluto, é capturada pelo esquema.

O esquema que se utiliza no presente estudo é uma mistura de esquemas de integração implícitos/explícitos. Isto conduz a uma redução do tempo de computação, e permite um tratamento adequado para fenômenos chaves tal como reações eutéticas.

Na escolha de um problema teste conveniente para o estudo proposto, é observado que os mecanismos envolvidos no acoplamento dos campos de concentração de soluto e temperatura, são independentes da dimensão do problema. Na essência, este acoplamento envolve assumir o valor de um ponto macroscópico (valor nodal) e invocar um modelo de micro escala (que é uma equação constitutiva), a fim de obter campos de concentração e temperatura que sejam consistentes com a termodinâmica do problema. Como tal, a investigação do processo de

solidificação unidirecional é suficiente para estabelecer um bom algoritmo para o acoplamento dos referidos campos.

3.4.2 - Segregação Inversa

Considerando o exposto, a solidificação unidirecional de uma liga eutética binária, é tomada como problema exemplo. Para tempos $t < 0$, a liga encontra-se no estado líquido, a uma concentração nominal C_0 , contida no molde isolado definido por $0 < z < Z_b$, conforme mostra a Figura 3.4. A solidificação inicia-se pelo abaixamento da temperatura na base da lingoteira, isto é, em $z = 0$, abaixo da temperatura eutética T_{eut} . Para tempos $t > 0$, três regiões transientes podem ser identificadas: sólida, sólida+líquida (zona pastosa) e líquida. Durante a solidificação, o soluto é rejeitado na zona pastosa e conseqüentemente redistribuído por escoamento de fluido induzido por contração em direção à base. Isto resulta numa camada rica em soluto na região da base do lingote. O desenvolvimento do perfil de soluto macroscópico na assim chamada região de segregação inversa é o alvo do presente estudo.

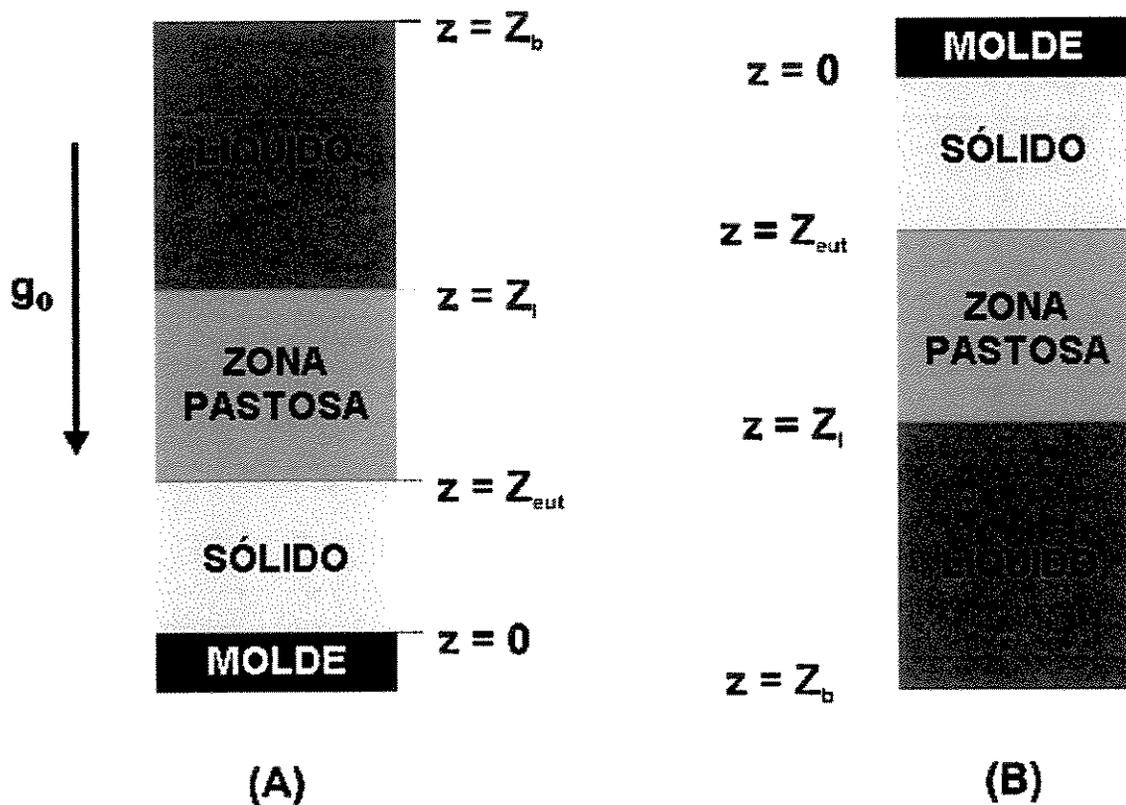


Figura 3.4 - Sistema de referência adotado para o problema de segregação inversa (A), vertical ascendente e (B) vertical descendente.

Hipóteses Assumidas

No desenvolvimento do processo de acoplamento das equações de transporte de calor e massa, necessárias à modelagem da segregação inversa, são utilizadas as seguintes premissas:

- i. o domínio é unidimensional, definido por $0 < z < Z_b$, onde Z_b é um ponto distante fora da região de segregação inversa;
- ii. a região de segregação inversa permanece livre de porosidade [Voller e Sundarraj, 1995];
- iii. a fase sólida é estacionária, ou seja, uma vez formada possui velocidade igual a zero;
- iv. devido à natureza relativamente rápida dos processos de difusão de calor e massa, num elemento microscópico médio representativo (EMMR), a temperatura T , a concentração

C_L , a massa específica líquida ρ_l e a velocidade do líquido u_l , são consideradas como constantes.

- v. no diagrama de fases, o coeficiente angular da linha liquidus m_L e o coeficiente de partição k_0 são assumidos como constantes;
- vi. As condições de equilíbrio existem na interface sólido/líquido, isto é nesta interface,

$$T = T_F - m_L C_L \quad [3.63]$$

e

$$C_S^* = k_0 C_L \quad , \quad [3.64]$$

em que T é a temperatura, C a concentração, T_F é a temperatura de fusão do solvente puro,

$$C_S^* \quad [3.65]$$

é a concentração do sólido na interface, e os índices s e l designam as fases sólida e líquida, respectivamente; e

- vii. os calores específicos, c_s e c_l , as condutividades térmicas, k_s e k_l , e as massas específicas, ρ_s e ρ_l , são constantes dentro de cada fase, porém descontínuas entre as fases sólida e líquida. O calor latente de fusão, ΔH é considerado como a diferença das entalpias das fases em relação a uma temperatura de referência.

Pode-se observar que as suposições v e vii são feitas para simplificar a apresentação deste método. Assim como citado por Voller e Swaminathan [Voller e Swaminathan, 1997], o esquema de acoplamento em questão pode ser facilmente estendido para lidar com comportamento não-linear no diagrama de fases, sistemas com vários componentes, condutividades e massas específicas em função da concentração e temperatura.

3.4.3 - Formulação Matemática para Ligas Binárias.

□ **Energia**

$$\frac{\partial \rho c T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l c_l u T) = \nabla \cdot (k \nabla T) - \rho_s \Delta H \frac{\partial g}{\partial t} \quad ; \quad [3.66]$$

□ **Espécies**

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l u C_L) = 0 \quad ; \quad [3.67]$$

□ **Massa**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l u) = 0 \quad , \quad [3.68]$$

em que,

$$u = g u_l \quad , \quad [3.69]$$

sendo u é a velocidade média volumétrica do fluido e g é a fração volumétrica do líquido.

□ **Massa específica da mistura**

$$\rho = \int_0^{1-g} \rho_s d\alpha + g \rho_l \quad ; \quad [3.70]$$

□ **Massa específica de soluto da mistura**

$$\rho C = \int_0^{1-g} \rho_s C_s d\alpha + g\rho_l C_L \quad , \quad [3.71]$$

em que a condutividade térmica K e o calor específico volumétrico ρc são tomados como médias ponderadas da fração volumétrica.

□ **Condições de contorno**

$$z = 0$$

$$u = 0, \quad k \frac{\partial T}{\partial z} = h_i (T_0 - T|_{x=0}) \quad \text{e} \quad \frac{\partial C_L}{\partial z} = 0 \quad , \quad \text{e} \quad [3.72]$$

$$z = Z_b$$

$$T \rightarrow T_V \quad \text{e} \quad C \rightarrow C_0 \quad . \quad [3.73]$$

□ **Esquema de Solução**

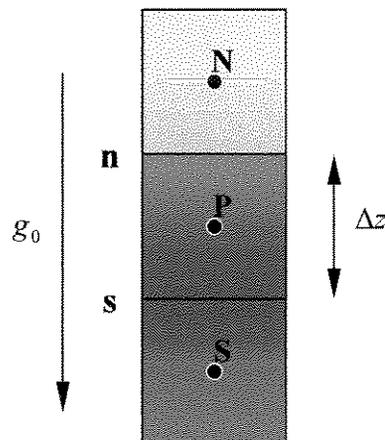


Figura 3.5 - Disposição dos volumes de controle segundo o arranjo de malha desencontrada.

A integração totalmente implícita da equação (3.66) fornece:

$$a_p T_p^{n+1} = a_p^{old} T_p^{old} + a_s T_s^{n+1} + a_N T_N^{n+1} - \rho_s \Delta H (g_p^{old} - g_p^{n+1}) \quad ; \quad [3.74]$$

$$a_s = k_s \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \quad ; \quad a_N = k_N \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} - \frac{\Delta t}{\Delta z} \rho_l c_N u_n \quad ; \quad [3.75]$$

$$a_p = k_s \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} + k_N \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} - \frac{\Delta t}{\Delta z} \rho_l c_p u_s + \rho^{old} c_p^{old} \quad ; \quad e \quad [3.76]$$

$$g_p^{n+1} = g_p^n + \frac{dg}{dT} [T_p^{n+1} - T_p^n] \quad . \quad [3.77]$$

Substituindo a equação (3.75), (3.76) e (3.77) em (3.74) resulta:

$$\left[a_p + \rho_s \Delta H \frac{dg}{dT} \right] T_p^* = a_p^{old} T_p^{old} + a_s T_s^* + a_N T_N^* + \rho_s \Delta H \frac{dg}{dT} T_p^n - \rho_s \Delta H (g_p^{old} - g_p^n) \quad [3.78]$$

Da equação (3.67) de conservação de soluto, utilizando-se a integração temporal totalmente explícita, obtém-se:

$$[\rho C]_p = [\rho C]_p^{old} + \frac{\Delta z}{\Delta t} \left[\rho_l u_s [C_L]_p^{old} - \rho_l u_n [C_L]_N^{old} \right] \quad . \quad [3.79]$$

A conservação da massa [equação (3.68)] apresenta-se na forma discreta como:

$$u_n = u_s + \frac{\Delta z}{\Delta t} \left[\frac{\rho_p^{old} - \rho_p}{\rho_l} \right] \quad , \quad [3.80]$$

em que os valores do membro direito da equação são calculados com os valores da iteração $(n+1)$.

Algoritmo Computacional

Este algoritmo visa resolver o acoplamento das equações (3.66), (3.67) e (3.68), sendo inicialmente proposto por Swaminathan e Voller [Swaminathan e Voller, 1997].

- i. Em problemas que envolvam reação eutética, a escala de temperatura é transladada de modo que $T_{eut} = 0$, que é então utilizada como temperatura de referência.
- ii. Valores para a iteração inicial são assumidos do intervalo de tempo anterior.
- iii. A equação (3.79) é resolvida para o campo nodal $[\rho C]$.
- iv. A equação é resolvida para o campo nodal de temperatura T^* . Este passo requer o cálculo, em cada nó, do coeficiente dg/dT .
- v. Do campo de temperatura T^* , são obtidos os valores atuais da fração líquida, por meio de uma forma apropriada da equação (3.78):

$$g_P^{n+1} = g_P^n + SLOPE [T_P^* - T_P^{equ}] \quad , \quad [3.81]$$

em que:

$$T_P^{equ} = T_F - m_L [C_L]_P^n \quad , \quad [3.82]$$

obtida a partir do diagrama de fases. O termo *SLOPE* na equação (3.81) é definido da seguinte forma,

$$SLOPE = \begin{cases} \frac{dg}{dT} & , \quad 0 < g_P^n < 1 \quad , \quad e \\ \frac{c_l}{\Delta H} & , \quad g_P^n = 1 \text{ ou } g_P^n = 0 . \end{cases} \quad [3.83]$$

Se o nó P estiver submetido a uma mudança de fases (zona pastosa), o valor de $SLOPE$ é tomado como o coeficiente temperatura-líquido $\frac{dg}{dT}$. Se o referido nó estiver fora da zona pastosa $\frac{dg}{dT} = 0$, a fim de permitir o início do processo de mudança de fase, dentro de um intervalo de tempo, portanto, o valor de $SLOPE$ é assumido como $\frac{c_l}{\Delta H}$. Na prática a equação (3.81) é aplicada a todos os nós, seguida de uma correção de forma a permitir que os valores da mesma estejam contidos no intervalo de 0 a 1.

- vi. Um modelo de micro escala é empregado para extrair os valores nodais de concentração do líquido C_L , do campo de massa específica de soluto $[\rho C]$. A variável chave deste cálculo é a fração líquida nodal calculada no passo anterior.

□ **Modelo I – Clyne e Kurz**

Modelo modificado de Brody-Flemings por Clyne e Kurz [Clyne e Kurz, 1981]:

$$[C_l]_P = \frac{[\rho C]_P - [\rho C]_P^{old} + [\rho_l g_P^{old} + \beta \rho_S (1 - g_P^{old}) k_0] [C_L]_P^{old}}{\rho_l g_P^{n+1} + \beta \rho_S (1 - g_P^{n+1}) k_0 + (1 - \beta) \rho_S k_0 (g_P^{old} - g_P^{n+1})} \quad [3.84]$$

em que o parâmetro $0 \leq \beta \leq 1$. Fazendo $\beta = 1$, obtém-se a regra da alavanca, e tomando $\beta = 0$, fornece a regra de Scheil, sendo estes os casos limites.

□ **Modelo II – Wang e Beckermann**

Modelo proposto Wang e Beckermann [Wang e Beckermann, 1993],

$$[C_l]_P = \frac{[\rho C]_P - [\rho C]_P^{old} + \rho_l g_P^{old} C_L^{old} + \frac{\Delta t \gamma}{1 - g_P^{n+1}} [\rho C]_P}{\rho_l g_P^{n+1} + \rho_S k_0 (g_P^{old} - g_P^{n+1}) + \frac{\Delta t \gamma}{1 - g_P^{n+1}} (\rho_S k_0 (1 - g_P^{n+1}) + \rho_l g_P^{n+1})} \quad , \quad [3.85]$$

em que $\gamma = 0$, tem-se a Regra de Scheil e $\gamma \rightarrow \infty$, obtém-se a regra da alavanca.

- vii. Num sistema eutético binário, se a concentração de líquido calculada no passo anterior exceder o valor eutético, esta é reinicializada ao valor do mesmo.
- viii. A temperatura nodal é calculada como:

$$T_P^{n+1} = \begin{cases} T_F - m_L [C_L]_P^{n+1} & , \quad 0 < g_P^n < 1 \quad ; \quad e \\ T_P^* & , \quad g_P^n = 1 \quad \text{ou} \quad g_P^n = 0 \quad . \end{cases} \quad [3.86]$$

Esta equação estabelece o valor de temperatura nodal como sendo aquela de equilíbrio, se o nó P estiver na zona pastosa ou aquela correspondente ao valor auxiliar T_P^* calculado no passo iv se o ponto P não estiver em processo de mudança de fase.

- ix. O último passo no ciclo de iteração é a atualização das constantes térmicas da mistura (condutividade, calor específico, massa específica) e o cálculo do campo de velocidade utilizando a equação (3.80).
- x. No ciclo de iterações os passos iv a ix são repetidos até que a convergência no intervalo de tempo é alcançada, ou seja, quando a mudança máxima na fração nodal de líquido é menor que 10^{-05} .

□ **Alterações introduzidas no modelo proposto originalmente por Voller.**

As mudanças básicas na formulação apresentada por Voller [Voller, 1998], necessárias para comparação com as curvas experimentais, incluem:

- i. coeficiente de transmissão de calor variável na interface metal/molde em função do tempo;
- ii. adaptação do sistema de malhas para minimizar efeitos da não-linearidade da condição de contorno da base do lingote;

- iii. utilização de propriedades termofísicas diferentes para o sólido e para o líquido. Na zona pastosa as propriedades são uma composição das propriedades do sólido e do líquido segundo as respectivas frações;
- iv. alteração do critério de convergência assumido por Voller [Voller, 1997].

□ **Coefficiente de Transmissão de Calor na Interface Metal/Molde**

Para o propósito de uma modelagem matemática precisa, torna-se essencial que sejam estabelecidas as devidas condições de contornos. A transferência de calor na interface metal/molde é uma destas condições, que assume um papel fundamental quando considerada a magnitude da transmissão de calor durante os primeiros estágios da solidificação. A maneira pela qual o calor flui através do lingote e da superfície do molde afeta a evolução da solidificação, sendo de notável importância na determinação das condições de resfriamento no lingote, principalmente na maioria dos sistemas de fundição de elevada difusividade de calor, como em sistemas refrigerados. A perda de calor, inicialmente quando o metal entra em contato com o molde, não é somente regulada pela capacidade térmica de armazenamento do material do molde, mas também pelas condições de transferência de calor dentro do metal e, particularmente, na interface metal/molde. As partículas sólidas encontram-se somente em contato em pontos isolados e a área real de contacto é somente uma pequena fração da área nominal, conforme mostra a Figura 3.6.

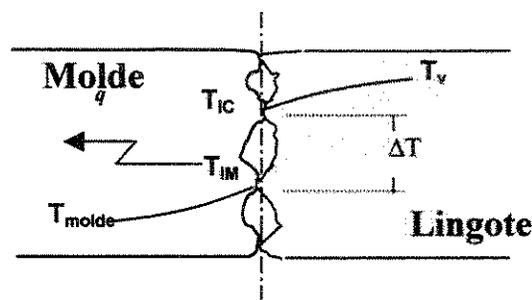


Figura 3.6 - Fluxo de calor através da interface metal/molde.

Parte do fluxo de calor segue os caminhos de contato real; todavia, o calor remanescente deve ser transmitido por meios intersticiais gasosos e não-gasosos entre as rugosidades da superfície. Os interstícios são limitados no tamanho, e desta forma a convecção pode ser

desprezada. Se as diferenças de temperaturas não são extremas, a radiação não é tão significativa e, por conseguinte, a maior parte da energia flui por condução através da área real de contato físico.

O fluxo de calor através da interface metal/molde, conforme mostrado pela representação esquemática da Figura 3.6, pode ser caracterizado por um coeficiente médio macroscópico de transferência de calor da interface metal/molde h_i , dado por:

$$h_i = \frac{q}{A(T_{IC} - T_{IM})} \quad , \quad [3.87]$$

em que q é o fluxo de calor global através da interface em W , T_{IC} e T_{IM} são respectivamente as temperaturas superficiais do lingote e do molde em K , e A é a área. Em moldes refrigerados a água, o fluxo de calor global é afetado por uma série de resistências térmicas, conforme mostrado na Figura 3.7.

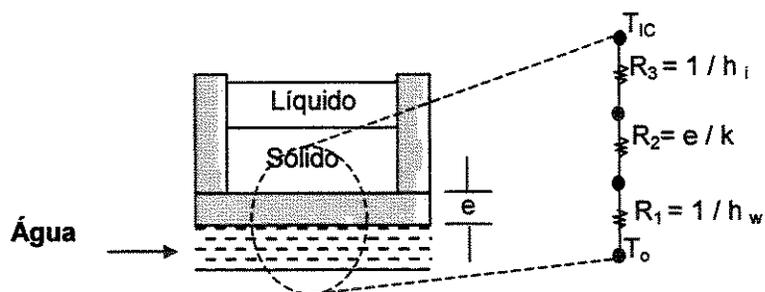


Figura 3.7 - Resistências térmicas na interface metal/molde em molde refrigerado.

A resistência interfacial entre as superfícies do lingote e do molde são geralmente as maiores, e a resistência térmica global $\frac{1}{h_g}$ é expressa por:

$$\frac{1}{h_g} = \frac{1}{h_w} + \frac{e}{k_M} + \frac{1}{h_i} \quad , \quad [3.88]$$

em que h_g é o coeficiente global de transmissão de calor entre a superfície do lingote e o fluido

refrigerante, e é a espessura da base do molde, e finalmente h_W é o coeficiente de transmissão de calor molde/refrigerante. O fluxo de calor médio da superfície do lingote até a água que refrigera o sistema é então dado por:

$$q = h_g(T_{IC} - T_O) \quad , \quad [3.89]$$

em que T_O é a temperatura da água ou T_∞ .

Maiores detalhes sobre o método de determinação do coeficiente de transmissão de calor da interface metal/molde para ligas Al-Cu / Sn-Pb podem ser encontrados em [Santos, Quaresma e Garcia, 2001].

Considerando o problema inicialmente com temperatura fixa na base, tem-se:

$$a_P T_P^{n+1} = a_P^{old} T_P^{old} + a_S T_S^{n+1} + a_N T_N^{n+1} - \rho_S \Delta H (g_P^{old} - g_P^{n+1}) \quad ; \quad [3.90]$$

$$a_S = k_S \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \quad ; \quad a_N = k_N \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} \quad ; \quad [3.91]$$

$$a_P = a_S + a_N + \rho_C P + \rho_S \Delta H \frac{dg}{dT} \quad ; e \quad [3.92]$$

$$b_i = \rho^{old} c_P^{old} T_i^{old} + \rho_S \Delta H \left(g_P^{old} - g_P + \frac{dg}{dT} T_P^n \right) \quad , \quad [3.93]$$

sendo a correção para o escoamento de fluido dada por:

$$a_P = a_P - \rho_i c_P u_P \frac{dt}{dx} \quad ; e \quad [3.94]$$

$$a_N = a_N - \rho_l c_P u_N \frac{dt}{dx} \quad [3.95]$$

As condições de contornos, inicial e final são mostradas a seguir onde o sub-índice n em $b = \{b_1, b_2, \dots, b_n\}$, $P = \{P_1, P_2, \dots, P_n\}$, $Q = \{Q_1, Q_2, \dots, Q_n\}$ e $T = \{T_1, T_2, \dots, T_n\}$ está relacionado ao último nó da malha e por tanto não possuindo qualquer relação com o volume de controle norte, central (polar) e sul, e sim com a nomenclatura das variáveis utilizadas no algoritmo para a solução de matrizes tri-diagonais TDMA (Tri-Diagonal Matrix Algorithm) resultante do processo de discretização das equações diferenciais parciais. Neste trabalho, é mantida a nomenclatura das variáveis encontradas na biblioteca numérica IMSL (International Mathematical and Statistical Library) [Press, 1992] que são padronizadas internacionalmente para facilitar o entendimento e aplicação de algoritmos numéricos, em sua maioria pré-programados e, portanto com variáveis pré-definidas, em diversas linguagens computacionais como C, Fortran e Pascal. É importante ressaltar que os coeficientes a_N , a_P e a_S fazem parte do processo de discretização das equações diferenciais. Portanto seus sub-índices são os dispostos na malha de acordo com as equações (3.91) e (3.92), ou seja, norte, central e sul, respectivamente.

$$b_2 = b_2 + a_{S(2)} T_1 \quad ; e \quad [3.96]$$

$$b_{n-1} = b_{n-1} + a_{S(n-1)} T_n \quad [3.97]$$

Na solução da matriz tri-diagonal TDMA,

$$P_2 = \frac{a_{N(2)}}{a_{P(2)}} \quad , \quad [3.98]$$

$$Q_2 = \frac{b_2}{a_{P(2)}} \quad , \quad [3.99]$$

para $i=3, n-1$

$$P_i = \frac{a_{N(i)}}{(a_{P(i)} - a_{S(i)}P_{i-1})} \quad ; e \quad [3.100]$$

$$Q_i = \frac{b_i + a_{S(i)}Q_{i-1}}{(a_{P(i)} - a_{S(i)}P_{i-1})} \quad . \quad [3.101]$$

com fim do laço dado por:

$$P_{n-1} = 0 \quad , \quad [3.102]$$

para $i=n-1,2,-1$

$$T_p^{aux} = P_i T_{i+1}^{aux} + Q_i \quad , \quad [3.103]$$

fim do laço .

Fim do algoritmo TDMA para temperatura da base fixa.

Considerando o problema com o termo com convecção térmica na base , pode-se obter para os contornos, inicial e final:

$$b_1 = b_1 + a_{S(1)} 2dz H K T_\infty \quad ; \quad [3.104]$$

$$b_{n-1} = b_{n-1} + a_{N(n-1)} T_p^* \quad ; \quad [3.105]$$

$$a_{P(1)} = a_{P(1)} + a_{S(1)} 2 dz HK \quad ; e \quad [3.106]$$

$$a_{N(1)} = a_{N(1)} + a_{S(1)} \quad ; \quad [3.107]$$

sendo,

$$HK = \frac{h_i}{k} \quad ; \quad [3.108]$$

e

$$h_i = a't^{-b'} \quad , \quad [3.109]$$

sendo as constantes a' e b' determinadas experimentalmente pelo confronto experimental e numérico.

Na solução da matriz tri-diagonal TDMA para o termo convectivo, tem-se:

$$P_1 = \frac{a_{N(1)}}{a_{P(1)}} \quad , \quad [3.110]$$

$$Q_1 = \frac{b_1}{a_{P(1)}} \quad , \quad [3.111]$$

para $i=2,n-1$

$$P_i = \frac{a_{N(i)}}{(a_{P(i)} - a_{S(i)}P_{i-1})} \quad ; e \quad [3.112]$$

$$Q_i = \frac{b_i + a_{S(i)}Q_{i-1}}{(a_{P(i)} - a_{S(i)}P_{i-1})} \quad . \quad [3.113]$$

com o fim do laço em

$$P_{n-1} = 0 \quad , \quad [3.114]$$

para $i=n-1,1,-1$

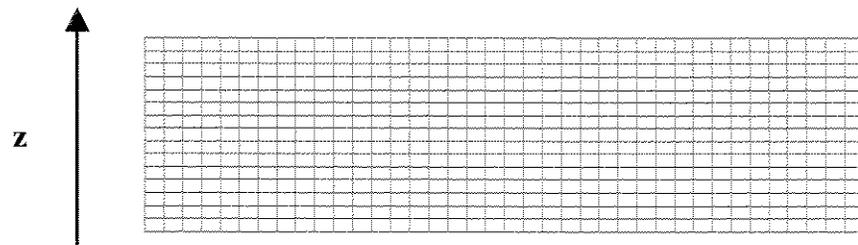
$$T_p^{aux} = P_i T_{i+1}^{aux} + Q_i \quad , \quad [3.115]$$

fim do laço.

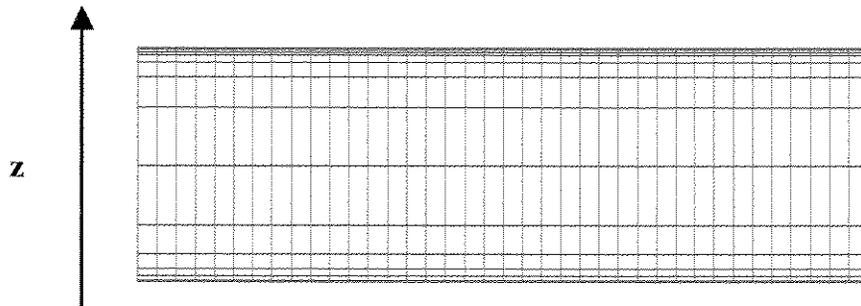
Fim do algoritmo TDMA considerando convecção térmica na base

□ Adaptação do Sistema de Malhas.

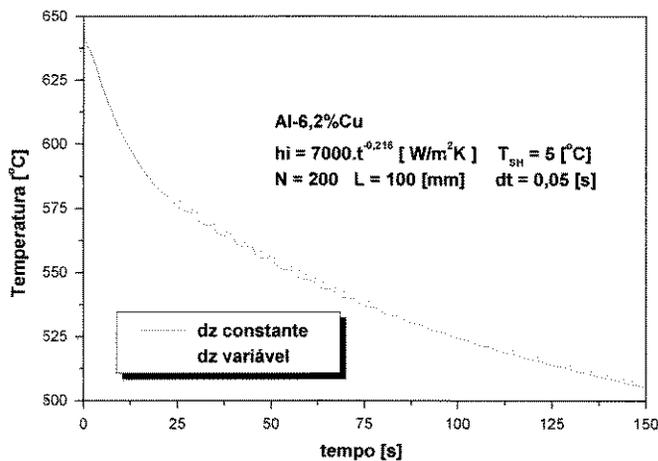
O sistema de malhas que utiliza intervalo espacial dz constante ao longo do lingote é muito prático sob o ponto de vista de implementação computacional. Todavia ao se introduzir um coeficiente de transmissão de calor variável e não-linear no modelo, o sistema de equações originário da equação (3.78) desestabilizaria o algoritmo de solução linear (TDMA) devido a variações do coeficiente global de troca de calor no contorno $z = 0$. Para minimizar os efeitos do comportamento não-linear deste coeficiente, o número N de nós da malha deveria ser bastante elevado [Versteeg e Malalasekera, 1995], em contrapartida implicando no aumento de número de equações a serem resolvidas pelo algoritmo TDMA, o que produziria um baixo desempenho computacional para fins práticos. Assim, optou-se pela utilização do seguinte sistema de discretização em z , apresentado na Figura 3.8:



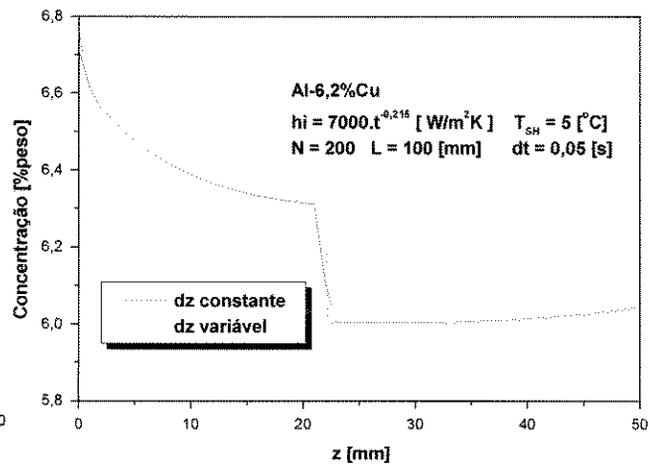
(A)



(B)



(C)



(D)

Figura 3.8 - Distribuição constante da malha ao longo do lingote (A). Distribuição da malha modificada ao longo do lingote (B). Comparação dos perfis térmicos a 5 mm da base com malha constante e variável (C). Comparação dos perfis de concentração de soluto com malha constante e variável (D).

□ Emprego de Propriedades Termofísicas Consistentes

Um aspecto bastante importante na abordagem numérica da solidificação de ligas de Al-Cu hipoeutéticas é a maneira pela qual as propriedades termofísicas das ligas são extraídas da termodinâmica envolvida no problema, ou sejam, dos diagramas de fases em função da temperatura e da concentração de soluto. Uma vez que o mecanismo que controla a segregação de soluto (inversa) é o gradiente térmico, há um elevado grau de sensibilidade da variável concentração de soluto em relação às propriedades termofísicas das ligas. O exemplo a seguir [Figura 3.9] corresponde a resultados de simulação numérica comparando-os com propriedades termofísicas reais e outras aproximadas extraídas do artigo de Voller e Swaminathan [Voller e Swaminathan, 1997].

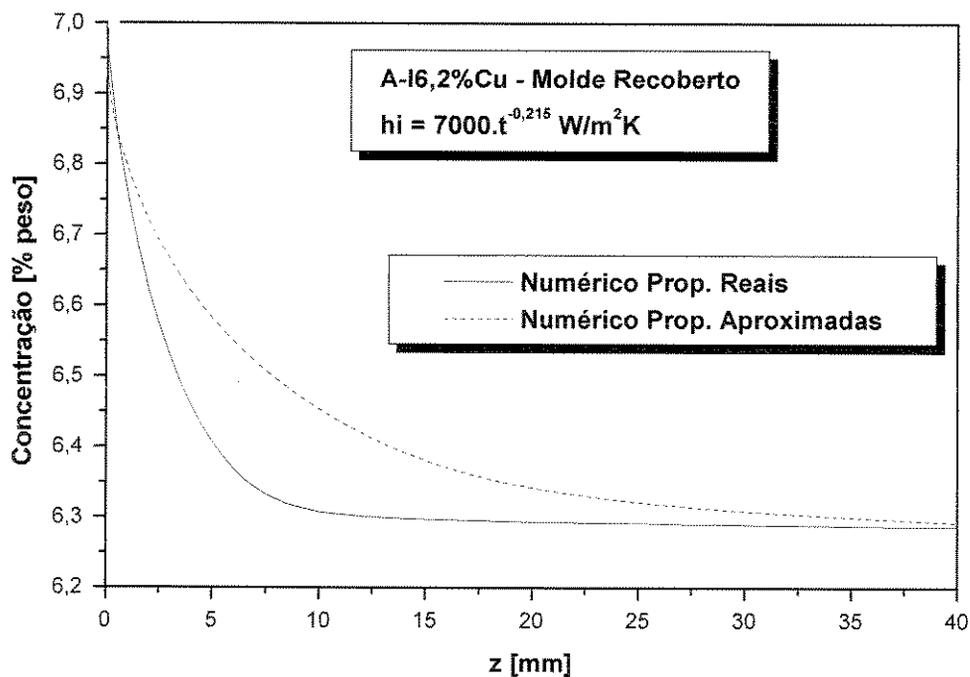


Figura 3.9 - Perfil de concentração de soluto alterando-se as propriedades termofísicas.

As propriedades termofísicas aproximadas corresponderam a uma alteração perfil de concentração real da liga Al-6,2%Cu para um mesmo coeficiente global de transmissão calor.

Observa-se uma diferença considerável entre os valores reais do diagrama de fases e aqueles obtidos por aproximação.

A utilização de rotinas computacionais em Fortran para a Interface TQ-Thermo-Calc, capazes de extrair os valores das propriedades termofísicas (calor latente, calor específico, coeficiente de partição, curva liquidus) do diagrama de fases, mostra-se uma ferramenta de grande importância e utilidade. Assim, pelo emprego desta interface, na versão 3.1, podem-se obter propriedades de maior confiabilidade, melhorando o grau de precisão da solução numérica em questão, pois as propriedades do diagrama de fases não mais seriam aquelas obtidas por interpolação de tabelas termodinâmicas, e sim da própria termodinâmica envolvida no problema (por exemplo, o calor latente da liga é a diferença entre as entalpias do sólido e do líquido, varia com a temperatura e composição da liga, não é exatamente um valor constante durante o processo de solidificação).

□ **Alteração no Critério de Convergência adotado por Voller**

O critério de convergência assumido por Voller [Voller, 1998; Swaminathan e Voller, 1997], segundo o passo x do algoritmo de solução numérica, quando aplicado a situações que apresentem condições de contornos não-lineares na interface metal/fluido, este critério falha quando a diferença entre os valores nodais da fração de líquido é da ordem de 10^{-05} , principalmente na determinação dos gradientes liquidus e taxas de resfriamentos durante o processo de solidificação. O valor assumido para as variações nodais de fração de líquido para todas as simulações presentes neste trabalho de 10^{-8} permite a determinação dos gradientes e taxas confiáveis e livres de quaisquer instabilidades numéricas.

3.4.4 - Formulação Matemática para Ligas Ternárias.

A Figura 3.10 mostra uma representação esquemática para a macrossegregação de soluto para ligas ternárias, no caso exemplificado para o sistema Al-Cu-Si para tempos de solidificação $t = 0$ e $t > 0$. A distribuição de soluto assumida como inversa para o ambos os componentes é apenas sugerida para fins ilustrativos.

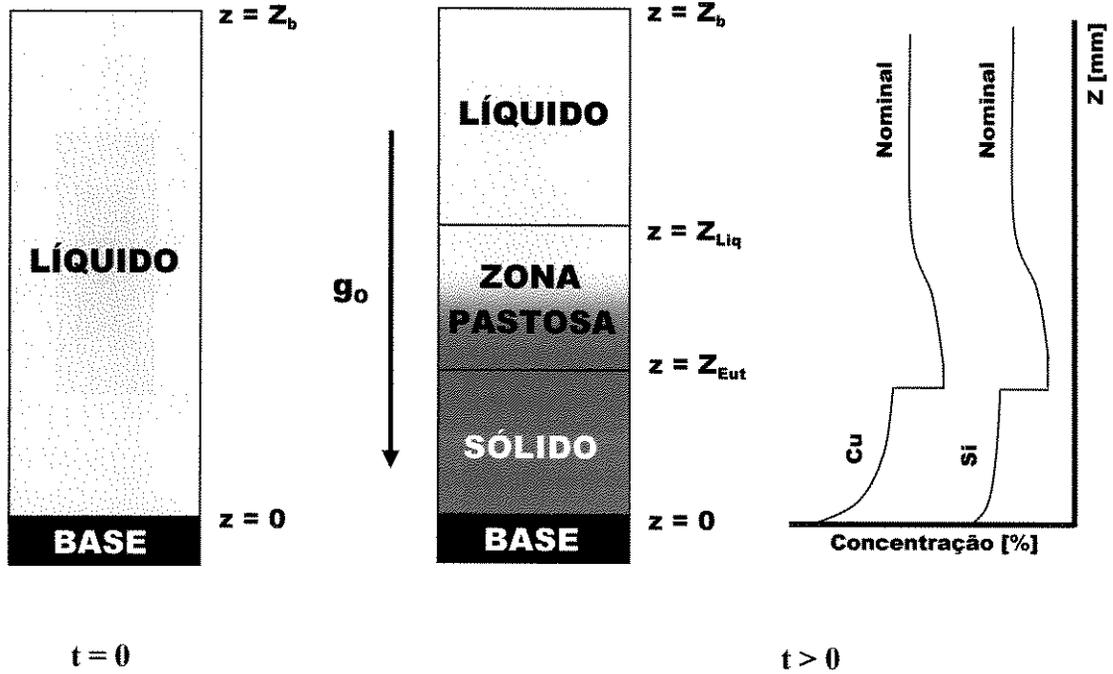


Figura 3.10 – Representação esquemática do processo de segregação de soluto no sistema ternário Al-Cu-Si.

Assumindo sistemas ternários, onde A e B são solutos genéricos, as equações que governam o fenômeno da macrosegregação neste tipo de sistema são as seguintes:

□ **Energia**

$$\frac{\partial \rho c T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l c_l u T) = \nabla \cdot (k \nabla T) - \rho_s \Delta H \frac{\partial g}{\partial t} \quad ; \quad [3.116]$$

□ **Espécies**

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l u C_L^A) = 0 \quad ; \quad [3.117]$$

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l u C_L^B) = 0 \quad ; \quad [3.118]$$

□ **Massa**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l u) = 0 \quad ; \quad [3.119]$$

em que

$$u = g u_l \quad , \quad [3.120]$$

sendo u a velocidade média volumétrica do fluido e g a fração volumétrica do líquido.

□ **Massa específica da mistura**

$$\rho = \int_0^{1-g} \rho_S d\alpha + g \rho_l \quad ; \quad [3.121]$$

□ **Massa específica de soluto da mistura**

$$\rho C^A = \int_0^{1-g} \rho_S C_S^A d\alpha + g \rho_l C_L^A \quad ; e \quad [3.122]$$

$$\rho C^B = \int_0^{1-g} \rho_S C_S^B d\alpha + g \rho_l C_L^B \quad ; \quad [3.123]$$

em que a condutividade térmica K e o calor específico volumétrico ρc são tomados como médias ponderadas da fração volumétrica.

Modelos de micro-escala são empregados para a extração dos valores nodais de concentração líquido C_L do campo de massa específica de soluto $[\rho C]$ para cada um dos solutos constituintes. A variável chave neste cálculo, da mesma forma que no sistema binário, é a fração nodal volumétrica calculada no instante anterior. A discussão acerca da escolha de regra de micro escala (Clyne e Kurz ou Wang e Beckermann) apresentada anteriormente para o sistema binário se faz válida para o sistema ternário, bem como para sistemas com multicomponentes. Para a aplicação no modelo ternário, opta-se, no entanto, pelo modelo proposto por Clyne e Kurz para extração das concentrações nodais [Clyne e Kurz, 1981], isto é:

$$[C_L^A]_P = \frac{[\rho C^A]_P - [\rho C^A]_P^{old} + [\rho_l g_P^{old} + \beta^A \rho_S (1 - g_P^{old}) k_0^A] [C_L^A]_P^{old}}{\rho_l g_P^{n+1} + \beta^A \rho_S (1 - g_P^{n+1}) k_0^A + (1 - \beta^A) \rho_S k_0^A (g_P^{old} - g_P^{n+1})} ; e \quad [3.124]$$

$$[C_L^B]_P = \frac{[\rho C^B]_P - [\rho C^B]_P^{old} + [\rho_l g_P^{old} + \beta^B \rho_S (1 - g_P^{old}) k_0^B] [C_L^B]_P^{old}}{\rho_l g_P^{n+1} + \beta^B \rho_S (1 - g_P^{n+1}) k_0^B + (1 - \beta^B) \rho_S k_0^B (g_P^{old} - g_P^{n+1})} ; \quad [3.125]$$

sendo $0 \leq \beta^{A,B} \leq 1$, fazendo $\beta^{A,B} = 1$, obtém-se a regra da alavanca, e fazendo $\beta^{A,B} = 0$, fornece a regra de Scheil.

O equivalente à equação (3.82) para o sistema ternário é a seguinte:

$$T_P^{equ} = T_F - m_L^A [C_L^A]_P^n - m_L^B [C_L^B]_P^n , \quad [3.126]$$

em que m_L^A e m_L^B são as inclinações das isotermas liquidus.

Por conseguinte:

$$C_S^{*A} = k_0^A C_L^A \quad e \quad C_S^{*B} = k_0^B C_L^B , \quad [3.127]$$

em que k_0^A e k_0^B são coeficientes de partição.

Em termos de um diagrama simplificado para sistemas multicomponentes, ou seja, desprezando as reações secundárias, a equação (3.126) pode ser representada da seguinte forma:

$$T_p^{equ} = T_F - \sum_{i=1}^n m_L^i C_L^i \quad , \quad [3.128]$$

em que n representa o número de constituintes do sistema multicomponente subtraindo-se uma unidade.

É importante salientar que mesmo para sistemas simplificados, o vale eutético (curva ou superfície eutética no diagrama de fases ternário) é obtido pela da construção de tangentes comuns a mínima energia livre dos componentes e fases presentes no sistema, não podendo desta forma ser obtido por simples combinação linear a partir das linhas de reações eutéticas dos diagramas binários, da mesma forma que empregada para a superfície liquidus. Todavia, um outro caminho além da determinação teórica é a determinação experimental dos pontos invariantes durante o processo de solidificação lenta (eutético e peritético no caso do sistema Al-Cu-Si) o que permite determinar para uma liga específica os pontos onde ocorrem tais transformações, que são utilizados pelo programa numérico como se estes fossem reações eutéticas no sistema binário.

Caso este diagrama já existisse nas bases de dados termodinâmicas do programa ThermoCalc, as rotinas padrões em C ou Fortran (TQ-C/Fortran Interface) para captura dos dados termodinâmicos deste programa seriam utilizadas nos lugares que mencionam o diagrama simplificado nesta descrição do modelo numérico. Isto poderia fornecer resultados bastantes confiáveis para as variáveis envolvidas no estudo da macrossegregação normal e inversa neste sistema, inclusive no auxílio da determinação das condições de contornos microscópicas ao redor do grão para fins de simulação da formação da microestrutura em condições reais de solidificação através do acoplamento com um modelo de campo de fases [Nestler e Wheeler, 2000; Nestler, Ratke, Stöcker e Wheeler, 2000].

Capítulo 4

Materiais e Métodos

4.1 - Análise Experimental

A análise experimental deste trabalho pode ser apresentada em três etapas:

- obtenção de lingotes de ligas Al-Cu e Al-Cu-Si solidificados unidirecionalmente com o devido mapeamento térmico durante o processo, conforme diagrama apresentado na Figura 4.1;
- determinação do coeficiente global de transferência de calor metal/fluido de refrigeração (h_g); e
- determinação de variáveis térmicas experimentais como: gradientes térmicos, taxas de resfriamento, velocidade da isoterma liquidus, para cada liga analisada, e os respectivos perfis de concentração de soluto determinados através do método de espectrometria de fluorescência de raios X.

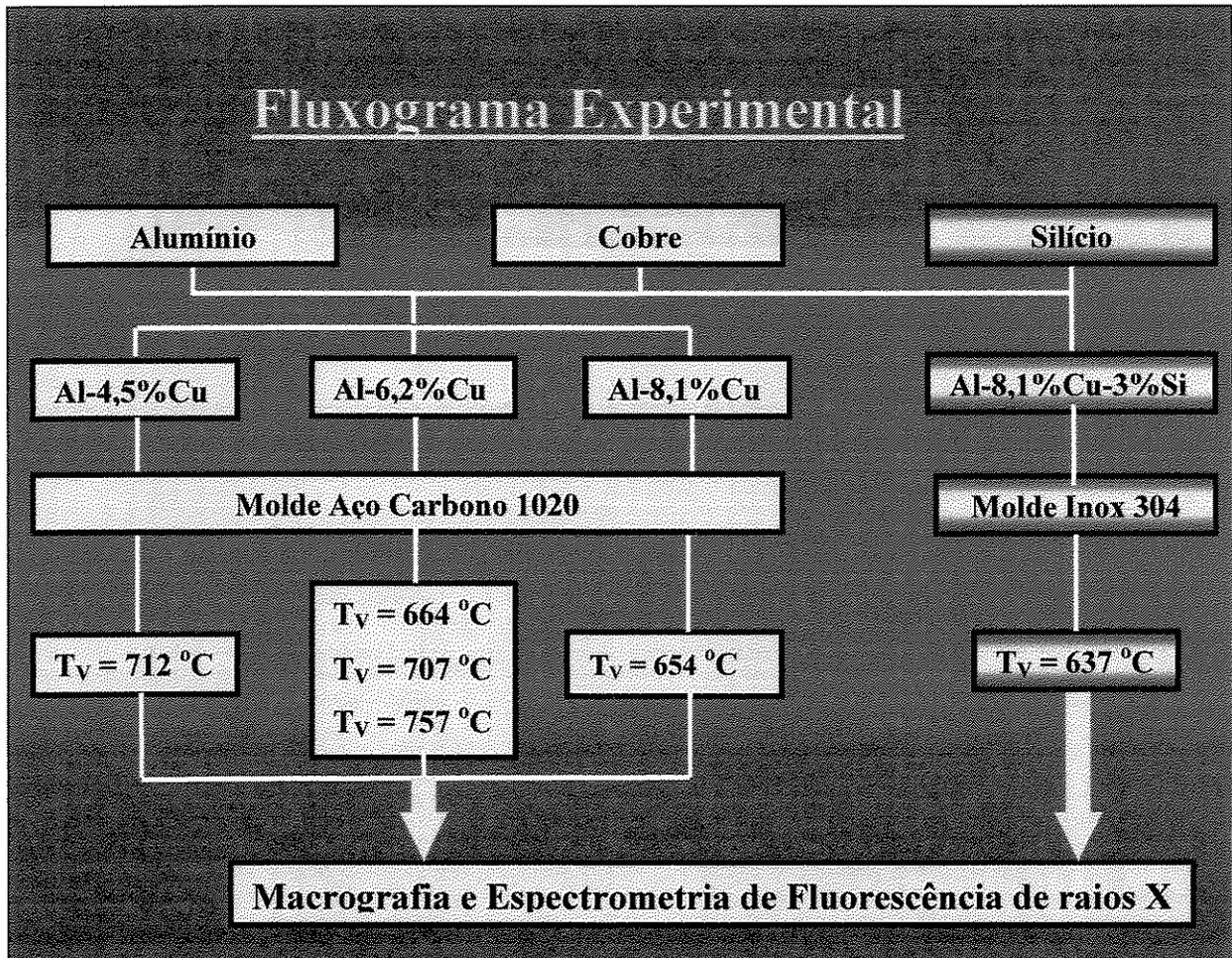
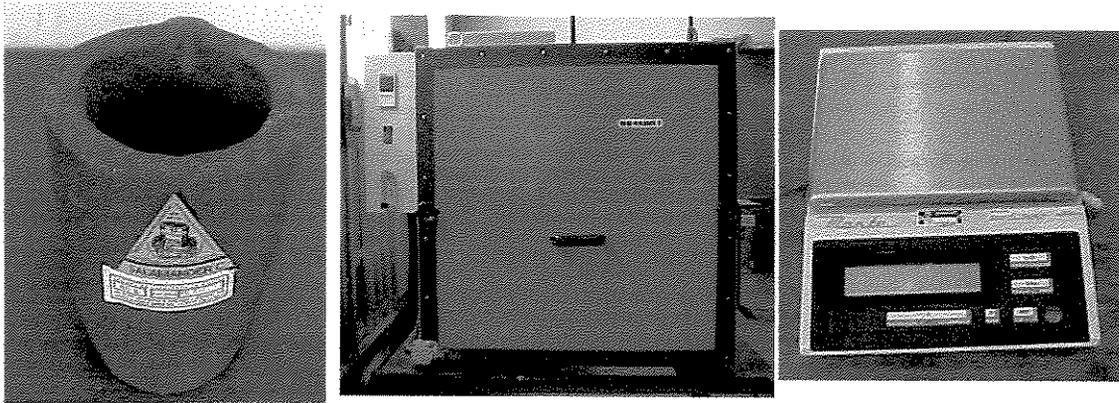


Figura 4.1 – Fluxograma dos experimentos realizados.

4.2 - Equipamentos e componentes utilizados

a) Acessórios e Equipamentos Para Preparação e Solidificação das Ligas

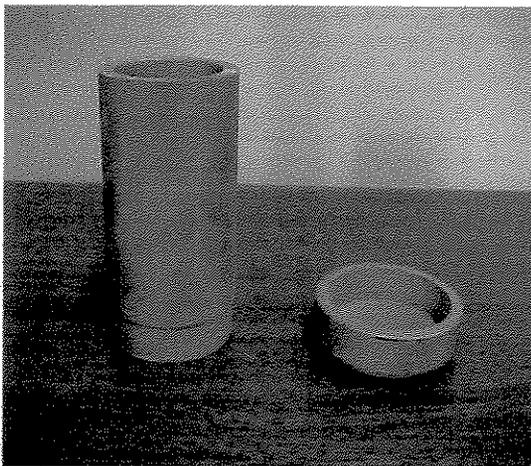


(A)

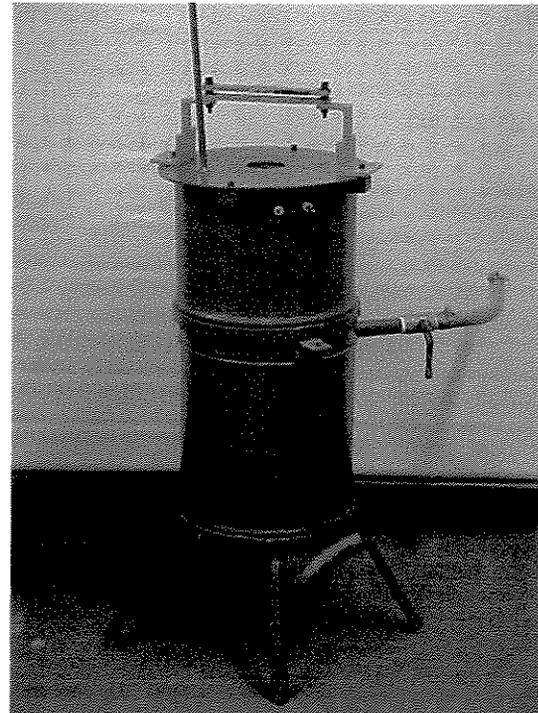
(B)

(C)

Figura 4.2 - Cadinho de grafita (A); Forno elétrico utilizado na fusão das ligas (B); e Balança digital (C).

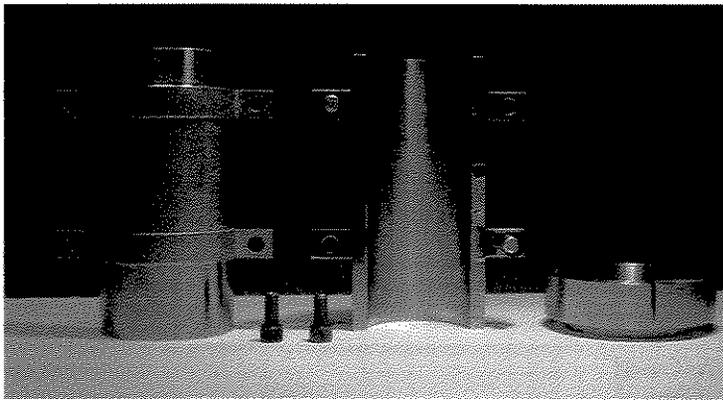


(A)

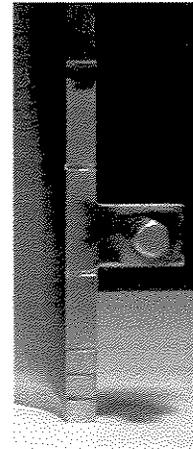


(B)

Figura 4.3 - Lingoteira convencional de aço inox (esquerda) e chapa molde de aço carbono que separa o metal do fluido de refrigeração (direita) (A) e forno de solidificação unidirecional vertical ascendente (B).



(A)



(B)

Figura 4.4 - Lingoteira bipartida de aço inox (esquerda) e chapa molde de aço carbono ou aço inox que separa o metal do fluido de refrigeração (direita) (A) e ampliação da região através do qual os termopares são introduzidos (B).

- **Cadinho de grafita** modelo AS 6 da Carbosil, revestido internamente com camada consistente de tinta refratária da Carborundum modelo QF – 320, para evitar contaminação do banho de metal líquido, além de preservá-lo (Figura 4.2 A).
- **Forno tipo mufla**, marca Brasimet, temperatura máxima 1300 °C, com interior revestido de placas refratárias e controle processado de temperatura (Figura 4.2 B).
- **Balança digital**, marca Marte, utilizada para pesagem dos materiais para obtenção das ligas (Figura 4.2 C).
- **Lingoteira convencional de aço inox** com diâmetro interno de 50 mm, altura de 110 mm e espessura de parede de 5 mm e chapas de fundo de aço 1020 e aço inoxidável 304 com espessura de 3 mm (Figura 4.3 A). A escolha desse material, para a construção da lingoteira, foi feita de forma comparativa em relação a outros tipos de aços, com base em se garantir durabilidade com um melhor isolamento térmico e, por conseguinte, evitar ao máximo as perdas térmicas nas suas laterais durante a solidificação.
- **Forno de solidificação unidirecional vertical ascendente** constituído de resistências elétricas laterais, as quais têm sua potência controlada a fim de permitir a obtenção de níveis de superaquecimento desejados no metal líquido (Figura 4.3 B).

- **Lingoteira bipartida de aço inox** com diâmetro interno de 50 mm, altura de 110 mm e espessura de parede de 5 mm e uma chapa de fundo de aço 1020 ou aço inoxidável 304 com espessura de 3 mm. As entradas de termopares localizam-se especificadamente a 5, 10, 15, 30, 50 e 70 mm da chapa molde (Figura 4.4).

b) Equipamentos e Acessórios Para Controle das Temperaturas

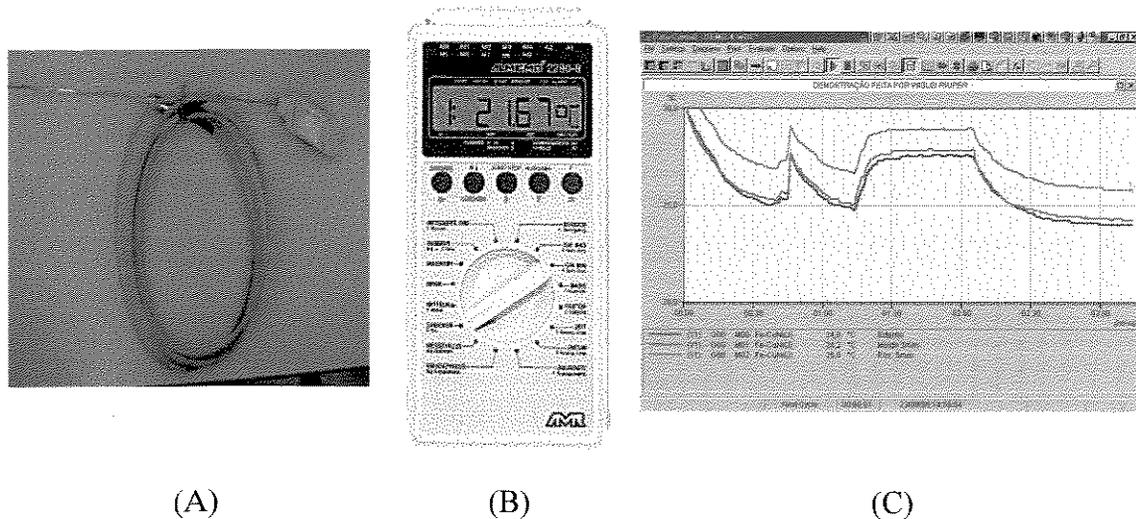


Figura 4.5 - Termopar acoplado a um conector microprocessado (A); Sistema de aquisição de dados (B); e Software utilizado no registro das temperaturas envolvidas nos experimentos (C).

- **Termopares ou termoelementos:** os tipos de termopares comumente usados são identificados por letras segundo a
- , I.S.A (Instrument Society of America) e adotado como padrão americano na ANSI C96 – 1964 (American National Standards Institute). As temperaturas foram registradas com o auxílio de termopares de diâmetro (=1,5 mm) do tipo K, a partir da interface metal/molde (Figura 4.5 A).

Tipo K: Chomel (+) – Alumel (-)

Faixa de utilização: (0 a 1260) °C \equiv (0,000 a 50,990) mV

Potência Termoelétrica: (4,04 mV / 100 °C)

- **Sistema de aquisição de dados**, marca ALMEMO, modelo 2290-8 E (Figura 4.5 B) com possibilidade de programação da leitura e aquisição dos dados térmicos direta de cinco canais de entrada simultaneamente ao longo do tempo, todos com diferentes escalas de temperaturas e dois canais de saída, fato de extrema relevância quando é necessário monitorar diferentes posições do sistema em estudo.
- **Termo-conector (EEPROM)**, marca ALMEMO, modelo ZA 9020 – FSK com sensores de pinos de NiCr-Ni(K), utilizado para transformar a diferença de potencial (DDP) dos termopares ou termoelementos em temperaturas que são registradas no equipamento anterior.
- **AMR-Software**, marca ALMEMO Data-Control (Figura 4.5 C), utilizado para acompanhar, registrar e armazenar os dados obtidos pelos termopares durante o processo de solidificação, além de possibilitar visualização instantânea dos dados medidos em gráfico temperatura versus tempo.

c) Utensílios Operacionais.

- **Haste de aço inoxidável**, revestida com suspensão à base de alumina para homogeneização do banho por agitação.
- **Espátula de aço inoxidável**, revestida com suspensão à base de alumina para retirada da camada de óxido formada na superfície livre do banho, momentos antes do vazamento.
- **Garra metálica**, utilizada para introduzir e/ou retirar os cadinhos de dentro do forno durante as operações de vazamento do banho de metal líquido no molde.
- **Massa refratária QF-180 da Carborundum**, utilizada para revestimento interno dos cadinhos com o objetivo de isolar o material líquido do contato direto com as paredes do cadinho e com isso evitar contaminação do banho.

d) Equipamentos para Corte de Amostras e Medida de Concentração de Solutos.

- **Serra de precisão ISOMET 2000** : velocidade de corte ajustável de 200 a 5000 rpm, carga de corte regulável entre 100 a 1000g. Precisão de avanço de corte de 0,1 mm. Frequência da rede de 50/60 Hz e tensão de 120 V.
- **Espectrômetro de fluorescência de raios X:** marca Rigaku modelo RIX 3100, utilizado no levantamento experimental dos perfis de concentração de soluto.
- **Espectroscópio de comprimento de onda dispersivo WDS** (Wavelength Dispersive Spectroscopy) utilizado para levantamento experimental dos perfis de concentração de soluto para fins de comparação com aqueles fornecidos pelo emprego da espectrometria de fluorescência de raios X. As Figuras 4.6 e 4.7 apresentam comparações entre os perfis experimentais inversos medidos por ambas as técnicas onde foi observada boa concordância entre elas. Em virtude das medidas de WDS serem realizadas na Universidade Federal de São Carlos, optou-se neste trabalho pela técnica de fluorescência de raios X pelo fato dela ser realizada no Laboratório de Caracterização do Departamento de Engenharia de Materiais da Faculdade de Engenharia Mecânica da UNICAMP.

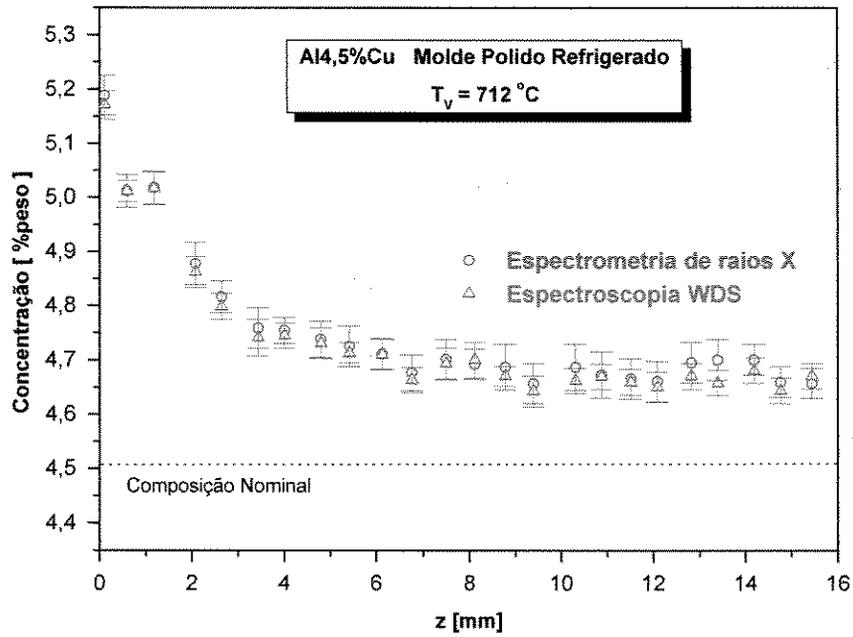


Figura 4.6 – Resultados experimentais do teor de cobre ao longo das amostras determinados por espectrometria de raios X e por espectroscopia de comprimento de onda disperso (WDS).

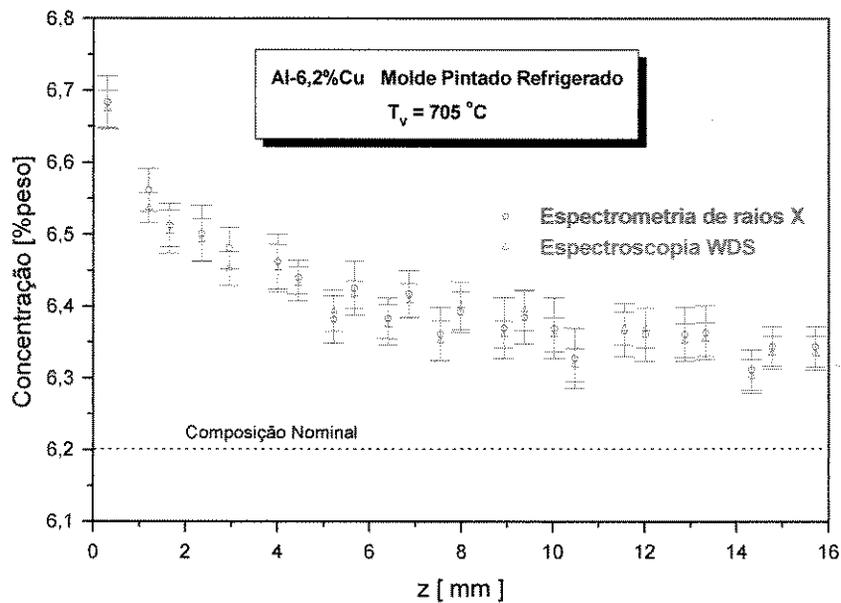


Figura 4.7 – Resultados experimentais do teor de cobre ao longo das amostras determinados por espectrometria de raios X e por espectroscopia de comprimento de onda dispersivo (WDS).

coluna (à direita) representa a percentagem de cada elemento presente.

4.3 - Materiais Utilizados

A escolha do sistema Al-Cu na investigação experimental deve-se não somente à importância que este sistema apresenta na indústria metal/mecânica, mas principalmente pelo fato das ligas hipoeutéticas deste sistema apresentarem tipicamente segregação inversa durante a solidificação. Todas as ligas utilizadas nos experimentos, Al-4,5%Cu, Al-6,2%Cu, Al-8,1%Cu foram preparadas em laboratório e analisados seus dados térmicos e constitucionais. Estas ligas foram preparadas a partir de metais comercialmente puros cujas composições químicas são apresentadas na Figura 4.8. Foi também analisada experimentalmente uma composição ternária, mais especificamente a liga Al 8,1%Cu 3% Si, para estender o espectro experimental a ligas multicomponentes. As propriedades termofísicas das ligas binárias e da ternária utilizadas são apresentadas na Tabela 4.1.

4.4 - Descrição dos Experimentos

Os experimentos foram montados objetivando a comparação dos resultados gerados por modelos analíticos e numéricos de solidificação, com dados obtidos experimentalmente em laboratório. A determinação dos resultados de interesse para a análise comparativa foi feita com o auxílio do aparato experimental de solidificação unidirecional vertical descrito anteriormente. Em todos os casos, foram monitoradas as temperaturas no metal, possibilitando o levantamento do perfil térmico do sistema de solidificação em estudo. Também foram variados parâmetros como, por exemplo, o superaquecimento do metal líquido para a liga Al-6,2%Cu. A Figura 4.9 permite visualizar o aparato experimental montado.

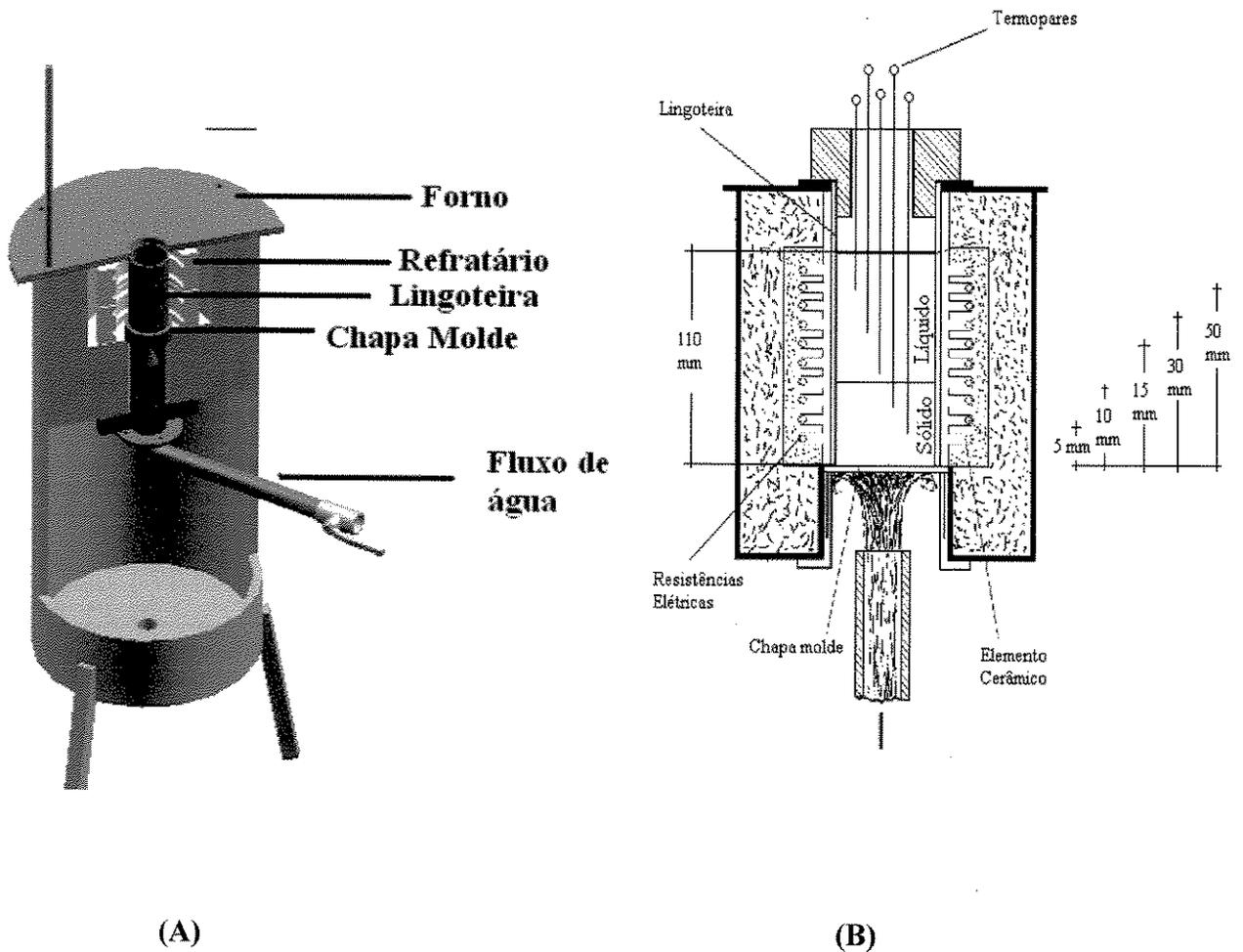


Figura 4.9 - Vista em corte do dispositivo de solidificação unidirecional ascendente (A) e (B) representação esquemática do corte longitudinal do dispositivo com ênfase para a posição e profundidade dos termopares e câmara de vazamento segundo o sistema convencional de lingoteiras.

Tabela 4.1 - Propriedades termofísicas das ligas [Quaresma, Santos e Garcia, 2000].

	Unidade	Al	Al-4,5%Cu	* Al-6,2%Cu	* Al-8,1%Cu	Eutético Al-33%Cu	Al- 8,1%Cu- 3%Si
k_s	[W / m.K]	222	193	190,8	188,4	155	191
k_L	[W / m.K]	92	85	88,1	87	141	88
c_s	[J /kg.K]	1123	1092	1089,1	1088	1070	1089
c_L	[J /kg.K]	1086	1059	1049,7	1039	895	1049
ρ_s	[kg / m ³]	2550	2650	2698,4	2746	2698	2698
ρ_L	[kg / m ³]	2380	2480	2532,8	2580	3240	2532
$\alpha_s (10^{-5})$	[m ² / s]	7,75	6,67	6,49	6,31	5,37	6,51
$\alpha_L (10^{-5})$	[m ² / s]	3,36	3,24	3,31	3,24	4,86	3,26
ΔH	[J/kg]	385000	381900	380554	379264	350000	380554
T_F	[°C]	660				548	660
T_E	[°C]		548	548	548		518,9
T_L	[°C]		645	639	633		616,4
ϵ	[µm]		35	37	33		30
k_o^{**}	-		0,17	0,17	0,17	-	0,1015(Cu) /0,1052(Si)

* Propriedades Interpoladas a partir do eutético.

** Valores calculados diretamente pelo Thermo-Calc.

Os ensaios experimentais consistiram na obtenção de lingotes solidificados unidirecionalmente com os perfis de temperatura devidamente registrados durante o processo. As ligas foram fundidas em forno tipo mufla e, em seguida, vazadas em lingoteira, refundidas no dispositivo de solidificação e, uma vez alcançada a temperatura desejada para o líquido, a refrigeração era acionada. A seguir, são descritas as etapas seqüenciais quando da realização dos experimentos.

- Pesagem dos materiais (Al, Cu, Si) para a composição das ligas;
- Verificação prévia de cada liga por análise térmica, conforme mostra o exemplo da Figura 4.10 para a liga Al 8,1%Cu.

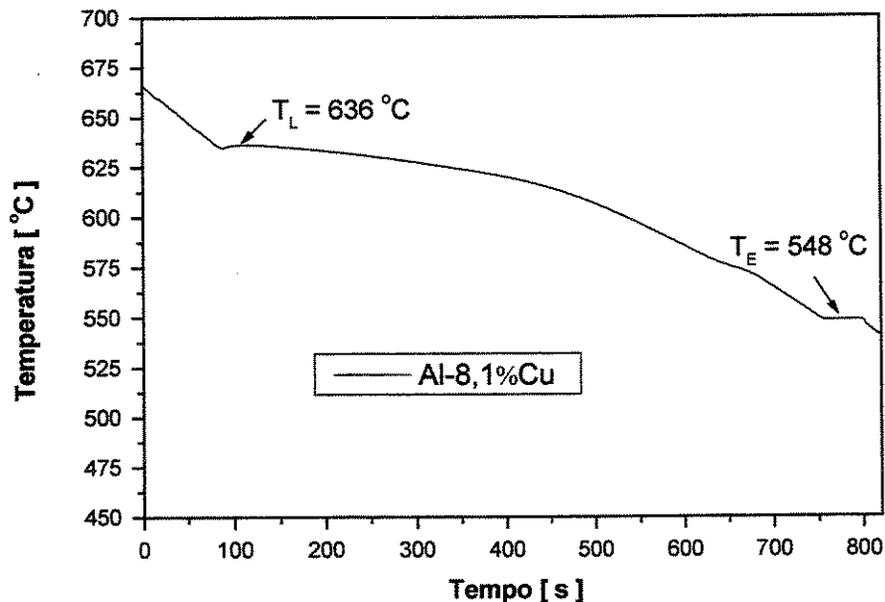


Figura 4.10 - Curva de resfriamento utilizada para quantificar e qualificar a liga Al-8,1%Cu.

- O diagrama de fases Al-Cu utilizado é calculado através do programa de cálculos termodinâmicos Thermo-Calc. A Figura 4.11 mostra o diagrama utilizado para obtenção das temperaturas liquidus das ligas utilizadas neste trabalho.
- O sistema Al-Cu-Si não é um sistema completamente determinado teoricamente pelos modelos teóricos termodinâmicos, sendo que somente a parte rica em alumínio foi completamente mapeada. Por esta razão o programa Thermo-Calc ainda não possui esta base de dados disponível, estando esta em processo de desenvolvimento. A superfície liquidus pode ser obtida por simples combinação linear das curvas liquidus dos diagramas binários. Todavia, esta simplificação não é válida para a determinação do vale eutético ternário, a partir dos diagramas binários. Desta forma, os cálculos da curva eutética ou vale eutético para a liga ternária utilizada nas simulações numéricas neste trabalho foram realizados em conjunto com Prof^a Dra Britta Nestler, do Departamento de Informática da

vale eutético para a liga ternária utilizada nas simulações numéricas neste trabalho foram realizados em conjunto com Prof^a Dra Britta Nestler, do Departamento de Informática da Faculdade Técnica de Karlsruhe, durante a realização, pelo doutorando, de um estágio de pesquisa de um semestre, através do programa de curta duração por meio do Convênio DAAD-FAPESP, na República Federal da Alemanha.

THERMO-CALC (2004.04.19:11.51) :

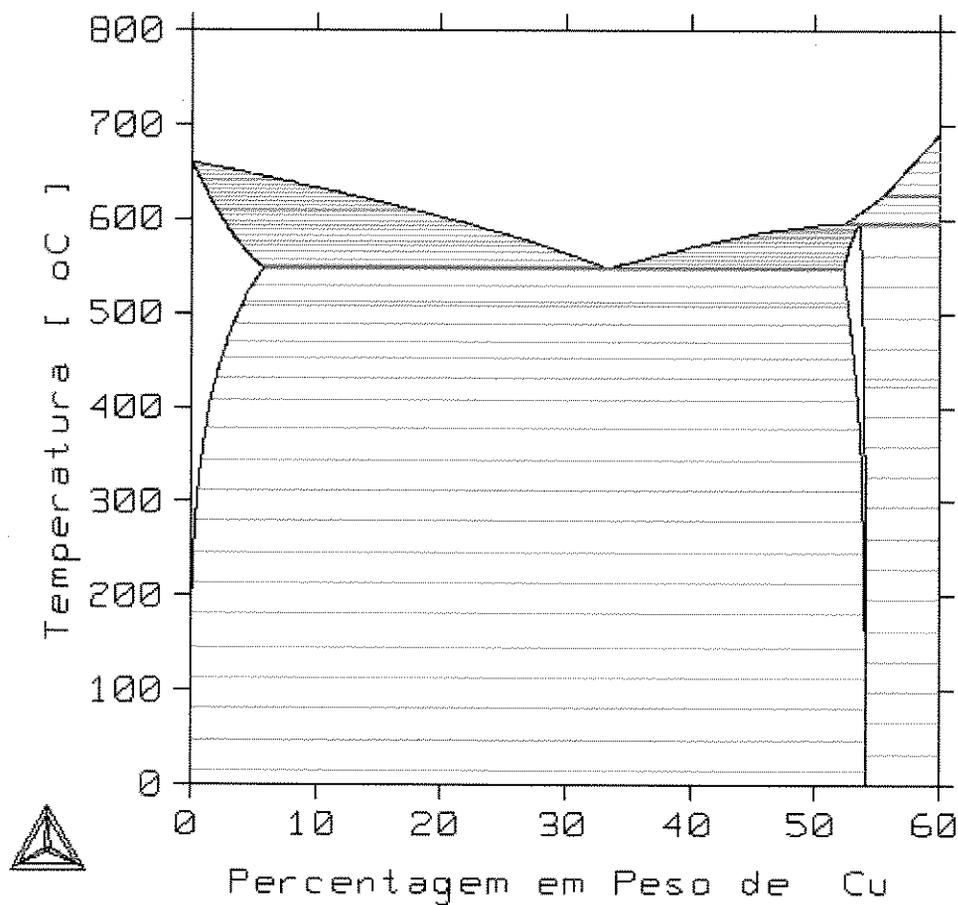


Figura 4.11 – Parte do diagrama Al-Cu simulado pelo software Thermo-Calc, utilizado na verificação das temperaturas liquidus das ligas, bem como na simulação numérica da solidificação.

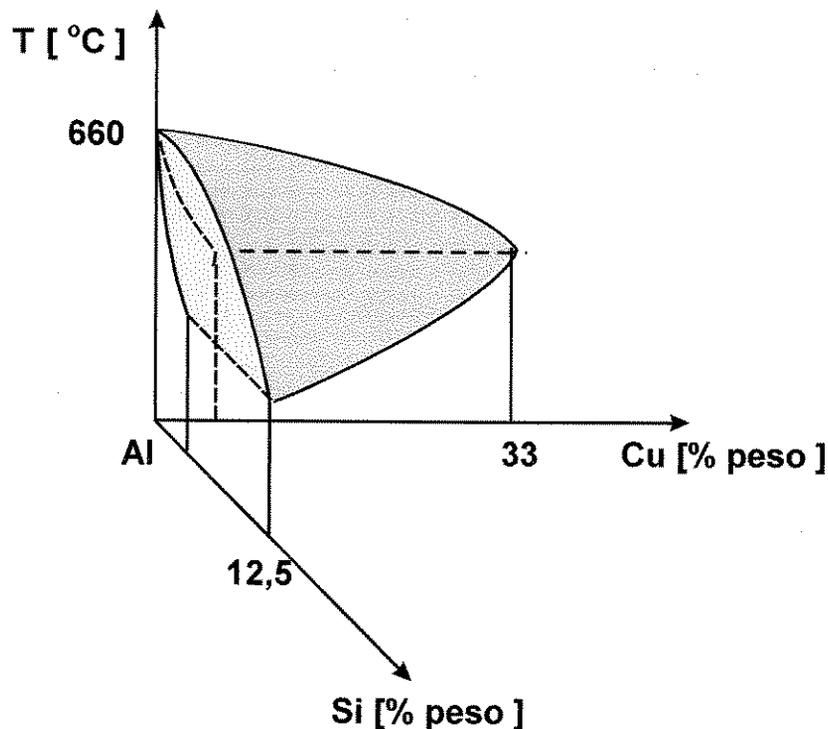


Figura 4.12 – Diagrama Al-Cu-Si simulado construído a partir da combinação linear das linhas liquidus dos binários Al-Cu e Al-Si e pelo cálculo da mínima energia livre para determinação do vale eutético.

- Montagem do sistema experimental e posicionamento dos termopares;
- Fusão do metal em forno tipo mufla até temperaturas maiores que a estipulada para o vazamento;
- Agitação da liga fundida, forçando uma melhor mistura dos componentes e a homogeneização da temperatura e retirada de escória da superfície do banho;
- Vazamento do metal líquido no interior da lingoteira, estando os termopares posicionados na posição central e o registrador devidamente acoplado ao computador, permitindo visualização dos perfis em tempo real. A refusão é realizada no dispositivo de solidificação acionando-se as suas resistências laterais, e que são desligadas ao atingir a

- Acompanhamento e obtenção da evolução térmica dos pontos monitorados;
- Fechamento dos ensaios com as curvas de resfriamento de cada ensaio registradas no sistema de aquisição de dados;
- Corte do lingote em duas secções para revelação da macroestrutura e para leituras de concentração, na proporção conforme a esquema apresentado na Figura 4.13;

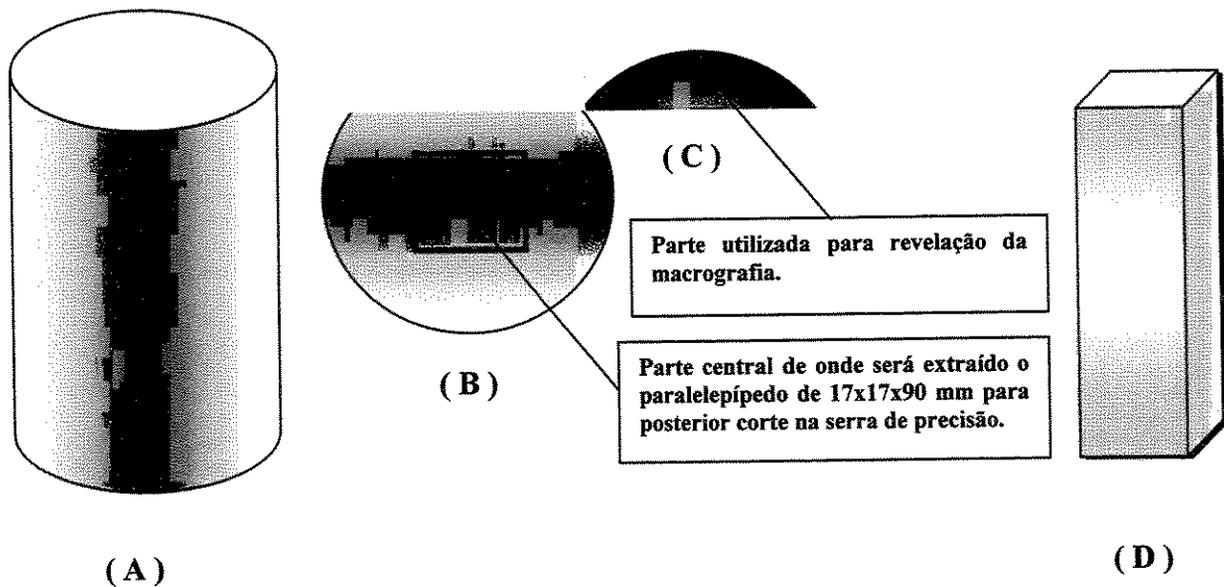


Figura 4.13 – Lingote cilíndrico original (A), porção maior do lingote utilizada para obtenção do bloco para leituras de concentração (B), porção menor utilizada para revelação da macrografia (C) e bloco extraído de dimensões 17x17x90 mm (D);

- Caso a macrografia apresente somente regiões colunares unidirecionais, será então realizado o corte da parte central do lingote maior com as medidas de 17 x 17 x 90 mm;
- Utilizando uma serra de precisão Buehler ISOMET 2000 o bloco é seccionado em peças de 17 x 17 x 1 mm a partir da base;
- As peças são medidas nos quatro cantos pelo emprego de um paquímetro para determinação da espessura média para confirmação da sua espessura inicial em torno de 1 mm;
- Em seguida, estas são lixadas utilizando lixas para materiais não-ferrosos iniciando pela granulometria de 220 até que a 600 seja atingida;

- Submetem-se as peças lixadas ao ultra-som, e em seguida, para evitar a rápida formação de óxido na superfície tratada, são imediatamente submetidas à técnica de espectrometria de fluorescência de raios X;
- A seguir, as peças são medidas novamente pelo emprego de paquímetro nos quatro cantos, para determinar a diminuição da sua espessura devido ao emprego das lixas em ambas as faces;
- E finalmente, com as informações das espessuras provenientes das perdas de corte (disco de diamante) e de lixamento, são determinadas as posições médias de cada face com relação à chapa molde (Figuras 4.13, 4.14, 4.15 e 4.16), para o levantamento de perfil de concentração.

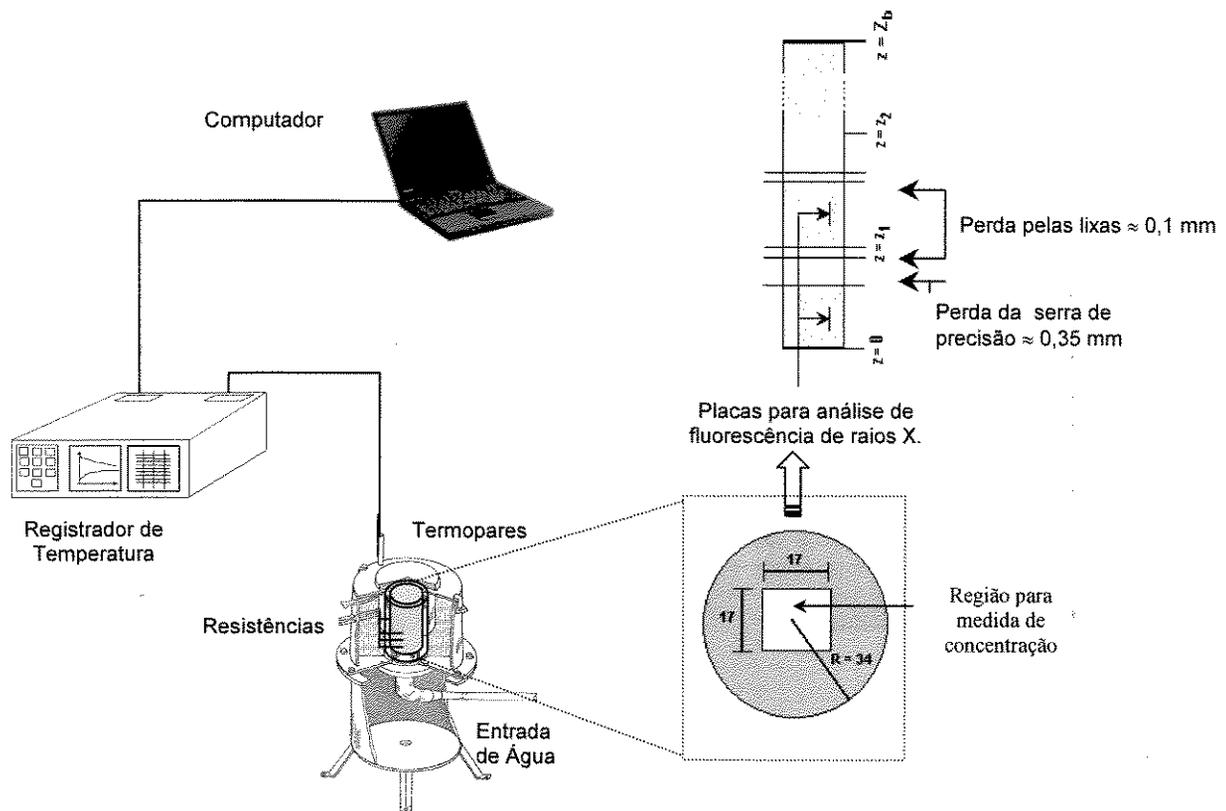


Figura 4.14 - Esquema do processo experimental para obtenção dos parâmetros térmicos e de composição no processo de solidificação unidirecional.

Os lingotes solidificados foram seccionados na proporção apresentada na Figura 4.15, formando duas partes. As partes menores eram utilizadas para revelação das macrografias e as maiores, para obtenção dos lingotes centrais para posterior análise de espectrometria de raios X. Após o corte, as partes menores dos lingotes eram submetidas a lixadeiras manuais com lixas abrasivas de granulação 220 a 600 mesh e, logo em seguida atacadas com reagente químico composto de 15 ml HF; 4,5 ml HNO₃; 9 ml HCl e 271,5 ml H₂O, para ligas Al-Cu para revelação da macroestrutura. A Figura 4.17 mostra o exemplo de uma macroestrutura de um lingote de Al-8,1%Cu, evidenciando a direcionalidade da estrutura colunar. A Figura 4.18 evidencia a amostra submetida à espectrometria de raios X.

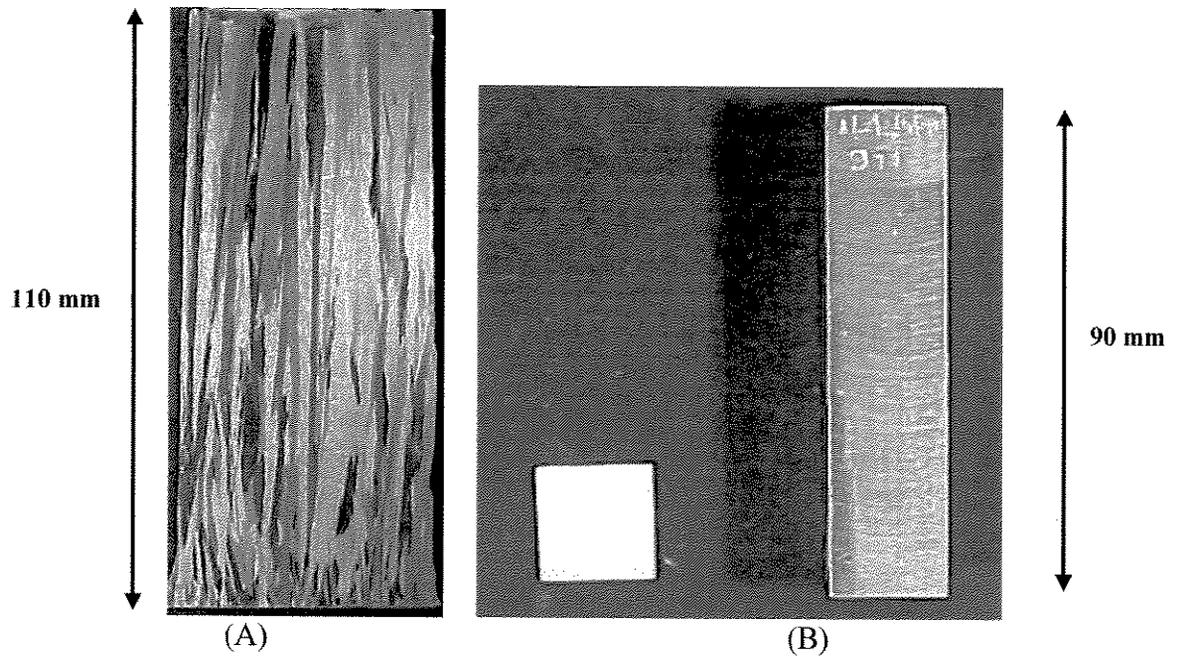


Figura 4.15 – Lingote de Al-8,1%Cu solidificado unidirecionalmente na forma vertical em molde refrigerado a água. (A). Barra de 17 mm x 17 mm x 90 mm extraída da região central do lingote para realização de medida de concentração de soluto (B).

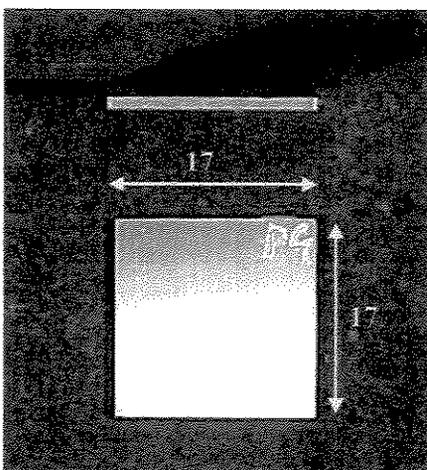


Figura 4.16 – Amostra de 17 mm x 17 mm x 1 mm, submetida à espectrometria de fluorescência de raios X.

A Tabela 4.2 mostra a relação dos experimentos realizados detalhando as condições operacionais.

Tabela 4.2 - Relação dos experimentos realizados.

Ligas	Experimento	Temperatura Vazamento T_V (° C) e Condição Superfície Molde	Temperatura Líquidus (T_{Liq}) * [° C]	Superaquecimento Médio (ΔT) [°C]
Al-4,5%Cu	01	$T_V = 712^\circ\text{C}$ – Molde Aço 1020 Polido	648	64
Al-6,2%Cu	02	$T_V = 664^\circ\text{C}$ – Molde Aço 1020 Polido	644	20
	03	$T_V = 707^\circ\text{C}$ – Molde Aço 1020 Polido		63
	04	$T_V = 757^\circ\text{C}$ – Molde Aço 1020 Polido		113
Al-8,1%Cu	05	$T_V = 654^\circ\text{C}$ – Molde Aço 1020 Polido	639	15
Al-8,1%Cu-3%Si	06	$T_V = 637^\circ\text{C}$ – Molde inox 304 Polido	617	20

Capítulo 5

Resultados e Discussões

5.1 - Validação Preliminar do Modelo Numérico

A fim de validar o modelo numérico em volumes finitos em sua forma básica, opta-se pela implementação computacional da solução semi-analítica desenvolvida por Voller [Voller, 1997] e apresentada no Capítulo 3 para comparação com o modelo numérico em sua forma básica, conforme apresentado por Voller: ausência do coeficiente transiente de transferência de calor na interface metal/molde, temperatura na base do molde prescrita, o calor específico e a condutividade térmica são iguais para o sólido e para o líquido e o intervalo entre os nós da malha constante, uma vez que erros de implementação computacionais são comuns, principalmente erros de lógica de programação, que são de difícil detecção.

Procurando evitar uma exaustiva comparação entre modelos semi-analítico e numérico, realizou-se a reprodução dos resultados apresentados em artigo por Voller [Voller,1997], comparando a distribuição de temperatura, de fração de líquido e de concentração de soluto em função da posição para tempos de solidificação de 250, 500 e 1000 segundos, conforme apresentado nas Figuras 5.1, 5.2 e 5.3, respectivamente.

Voller, com o objetivo de simplificar sua solução semi-analítica, considera as propriedades do sólido iguais às do líquido, com exceção da massa específica, para não desprezar o efeito da contração de solidificação, pois este é o principal mecanismo da macrossegregação inversa.

Deve-se também atentar ao fato de que as equações diferenciais ordinárias decorrentes das equações diferenciais parciais [3.37] e [3.38] seriam bastante complexas se a condutividade térmica e o calor específico fossem diferentes para o sólido e para o líquido, pois termos adicionais apareceriam nas equações diferenciais ordinárias decorrentes, aumentando a complexidade das soluções analíticas, tanto da região sólida quanto da região líquida.

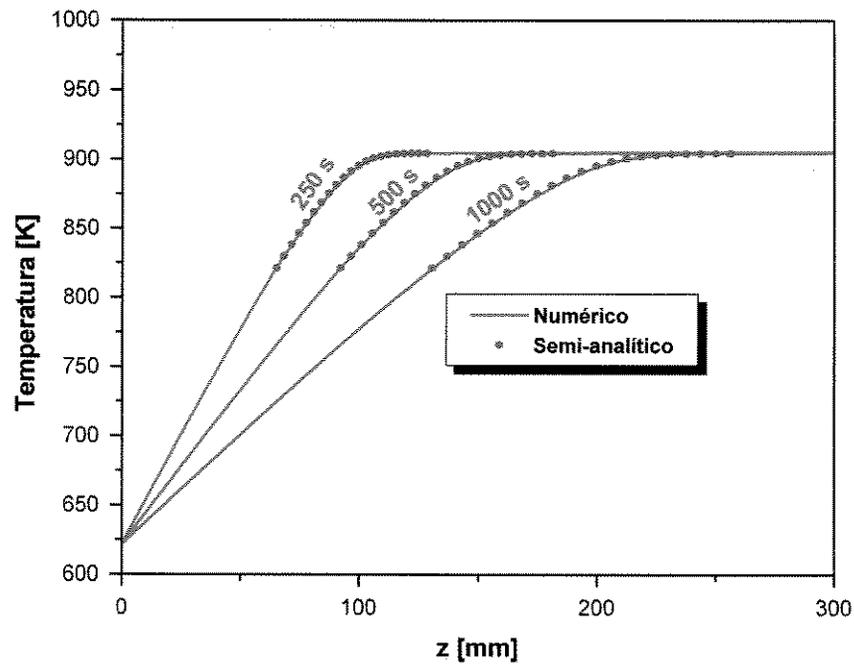


Figura 5.1 - Comparação dos perfis semi-analíticos e numéricos de temperatura correspondentes às simulações de 250, 500 e 1000 segundos.

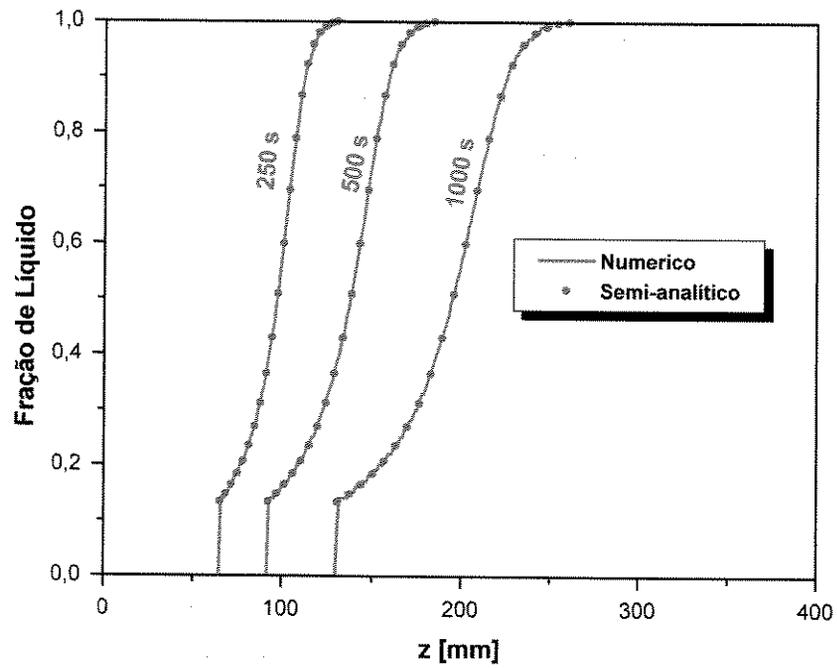


Figura 5.2 - Comparação dos perfis de frações de líquido obtidos pelos modelos semi-analítico e numérico correspondentes às simulações de 250, 500 e 1000 segundos.

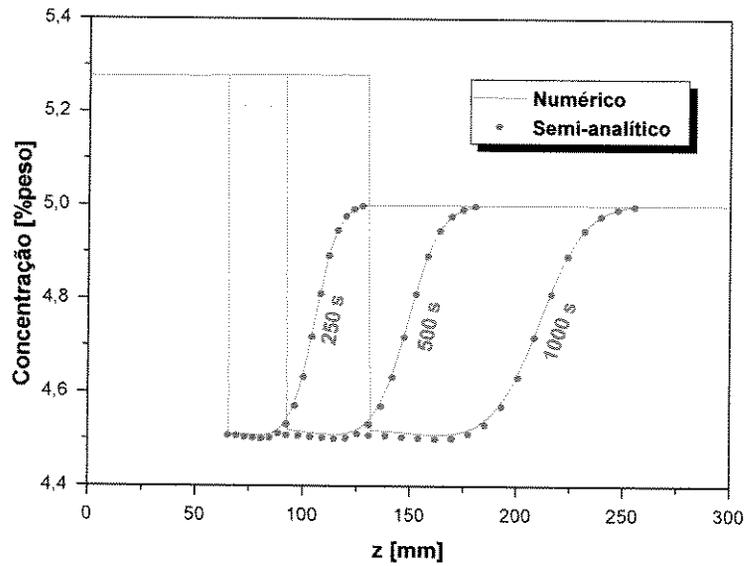


Figura 5.3 - Comparação dos perfis de concentração de soluto obtidos pelos modelos semi-analítico e numérico correspondentes às simulações de 250, 500 e 1000 segundos.

A Figura 5.4 apresenta resultados de perfis de concentração de soluto durante a solidificação, adotando os modelos de redistribuição de soluto de Clyne e Kurz [Clyne e Kurz, 1981] e Wang e Beckermann [Wang e Beckermann, 1993] para a condição de Scheil em que $\beta=0$, de acordo com as equações (3.84) e (3.85) respectivamente. Nenhum comentário adicional é encontrado na literatura sobre a forma de extração da concentração local com relação ao emprego das duas regras, ou seja, em que situação se deve optar pela regra de Clyne e Kurz ou pela de Wang e Beckermann. Voller afirma que as diferenças entre os modelos são tão sutis, que se pode empregar tanto um modelo quanto outro sem maiores prejuízos aos resultados [Voller, 1998]. Todavia, neste trabalho, opta-se pelo modelo de Clyne e Kurz [equação (3.84)] pelo fato do modelo de Wang e Beckermann, segundo a equação (3.85), apresentar em sua formulação o intervalo de tempo Δt . Isto faz com que esta equação seja dependente da espessura da malha temporal, o que numericamente pode comprometer a estabilidade da solução para determinadas escolhas Δz , pois seria uma equação a mais para restringir a escolha do intervalo de tempo para a solução do conjunto de equações diferenciais parciais. Realmente, pode-se observar pequena diferença de comportamento entre os modelos de micro escala na extração da concentração local de soluto na região da zona pastosa, que neste exemplo está compreendida entre 20 e 70 mm.

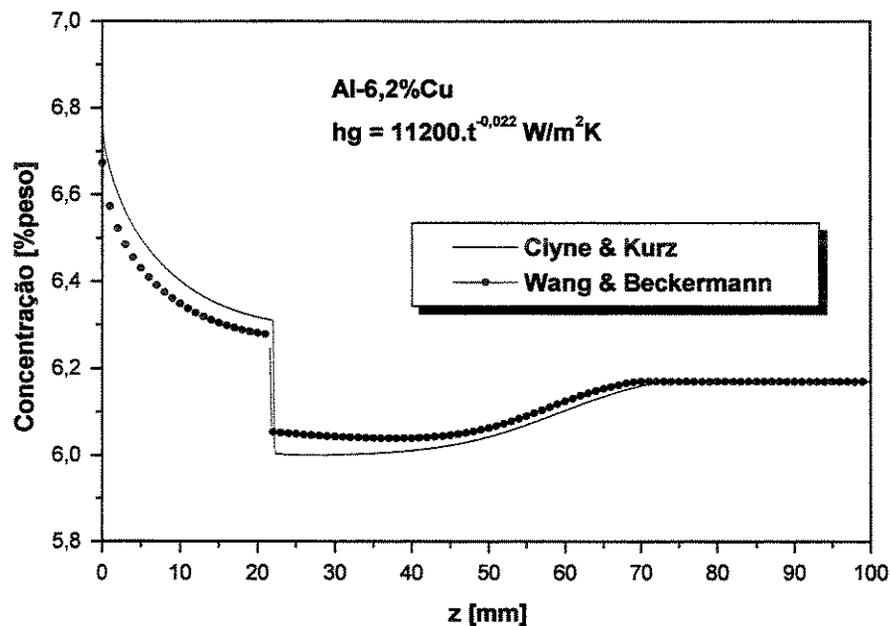


Figura 5.4 - Perfis de concentração de soluto numérico segundo os modelos de Clyne e Kurz e de Wang e Beckermann [Wang e Beckermann, 1993; Clyne e Kurz, 1981].

As comparações mostradas nas Figuras 5.1, 5.2 e 5.3 são importantes, pois funcionam como indicador que a implementação básica do modelo foi realizada de forma correta, o que permite prosseguir na adaptação do modelo numérico a condições de contornos e propriedades termofísicas mais reais que ocorrem durante a solidificação de um sistema ligas binárias em processos práticos.

5.2 - Coeficiente Transitório de Transferência de Calor Metal/Fluido.

A adoção de propriedades termofísicas reais para a liga Al-Cu, bem como da adoção de relações termodinâmicas coerentes provenientes do diagrama de fases, permite determinar o coeficiente global de transmissão de calor em função do tempo, pela comparação com as curvas de resfriamento teórico-experimental.

Discussão mais detalhada sobre a incorporação do coeficiente global de transmissão de calor nos modelos analítico e numérico foi realizada no Capítulo 3. Todavia, a forma analítica assumida para o perfil deste coeficiente é a apresentada na equação (5.1) conforme o trabalho de Santos e colaboradores onde é realizado um estudo mais detalhado deste coeficiente [Quaresma, Santos e Garcia, 2000; Martorano e Capocchi, 2000c; Santos, Quaresma e Garcia, 2001; Garcia, 2001], na forma:

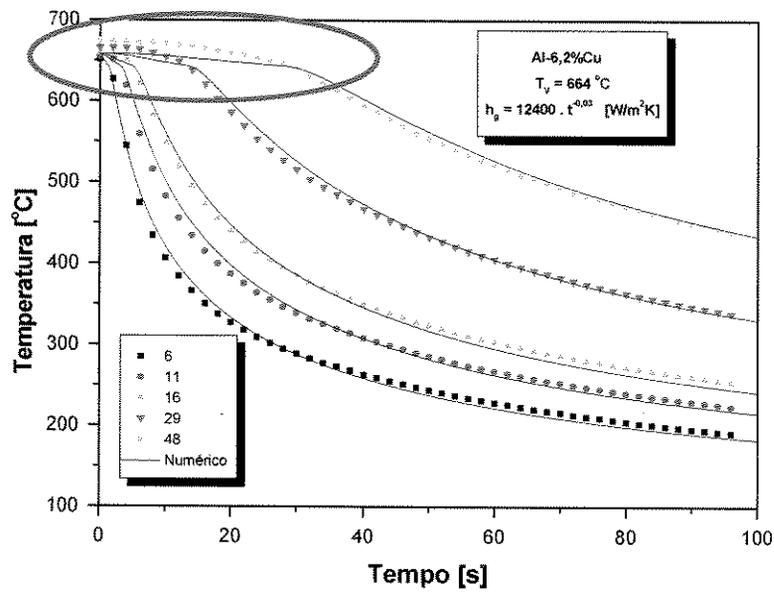
$$h_i = a' t^{-b'} \quad , \quad [5.1]$$

em que a' é um valor real positivo e b' está compreendido $0 \leq b' < 1$, t é o tempo em segundos e h_i em $[W / m^2 K]$. Se $b = 0$, então se obtém um coeficiente global constante.

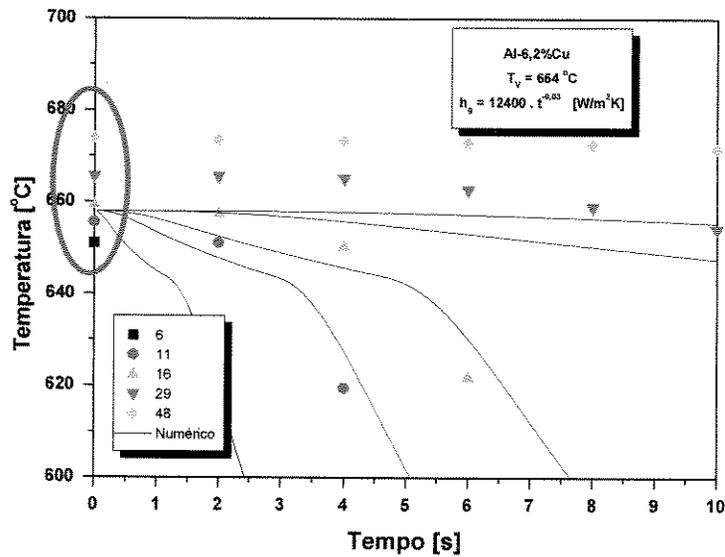
O desenvolvimento do modelo analítico de solidificação no Capítulo 3 já apresenta incorporado em sua formulação o coeficiente global transiente de transferência de calor na interface metal/fluido [Garcia, 2001].

Pelo fato do modelo semi-analítico apresentar uma parte numérica para solução dos gradientes na zona pastosa, que por sua vez está vinculada a soluções dos gradientes nas regiões sólida e líquida analiticamente, é observada muita instabilidade na solução do conjunto de equações diferenciais ordinárias decorrente do processo de mudança de variável, pela incorporação do coeficiente global de transferência de calor na interface metal/fluido nesta solução. Desta forma, é somente utilizada a comparação com dados experimentais do modelo analítico baseado na formulação de distribuição de soluto de Flemings, utilizando os gradientes, taxas e velocidades do modelo analítico de solidificação [Garcia, 2001].

Até o presente trabalho, utilizava-se uma temperatura de superaquecimento constante para ser admitida como condição inicial do sistema ($T_V = T_{Liq} + \Delta T_{SH}$), o que tornava a comparação teórico-experimental menos precisa quanto à escolha de um melhor perfil de h_i . Medições simultâneas de temperatura no lingote em sete pontos, a 5, 10, 15, 30, 50 e 70 mm da base, mostravam que, na verdade, ocorria a formação de um perfil térmico no líquido que se comportava de acordo com uma parábola $T_V(z) = -az^2 + bz + c$ ao longo do eixo z . Para exemplificação, será tomada a liga Al-6,2%Cu, para efeito de comparação dos perfis térmicos numérico e experimental considerando distribuição inicial de temperatura ao longo do lingote constante, conforme observado na Figura 5.5. A Figura 5.6 mostra a equação de distribuição inicial de temperatura obtida a partir de pontos experimentais de temperatura *versus* tempo antes da ativação do processo de resfriamento do molde por meio de jato d'água.

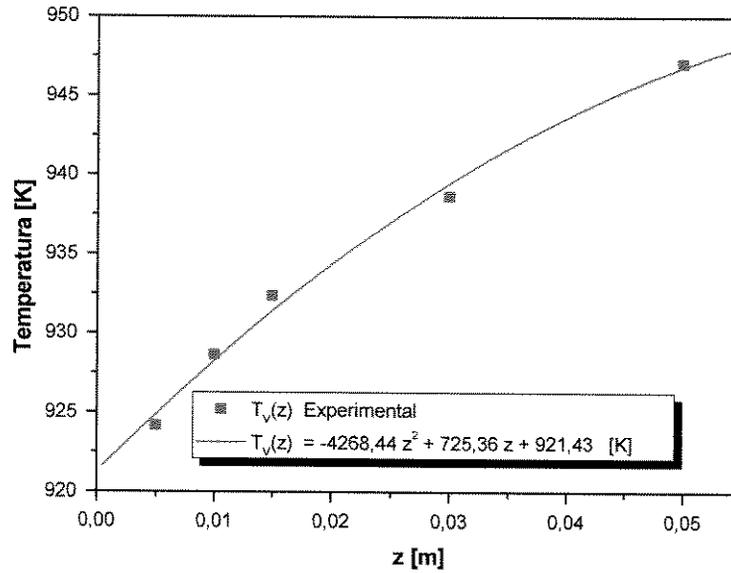


(A)

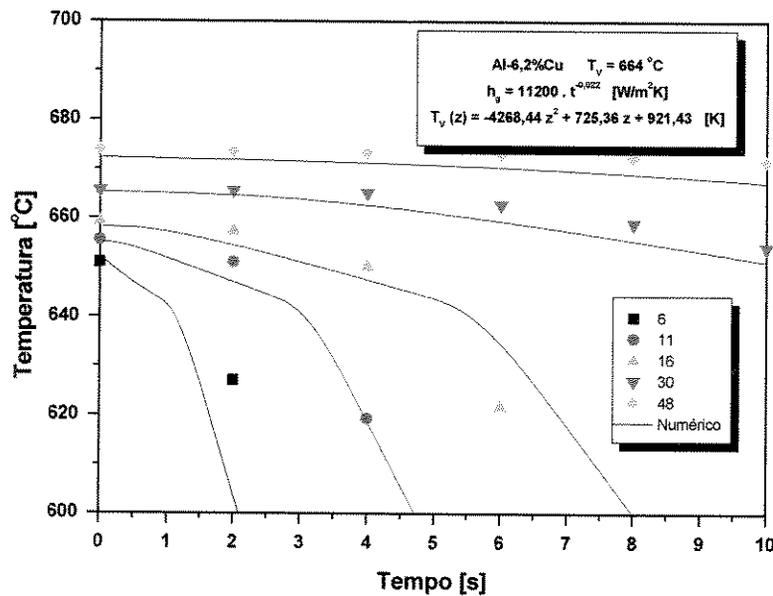


(B)

Figura 5.5 - Curvas de resfriamento experimentais e simulação numérica para a liga Al-6,2%Cu, simulada com o superaquecimento constante de 20 °C ao longo do lingote (A) ampliação para os dez primeiros segundos (B).



(A)



(B)

Figura 5.6 – Ajuste de curva proveniente de pontos experimentais em função da posição para obtenção da distribuição inicial de temperatura no lingote ($t = 0$) para Al-6,2%Cu, em unidades SI, conforme dados de entrada no programa numérico, para a situação referente à Figura 5.8 (A) ampliação para os dez primeiros segundos (B).

Verifica-se na Figura 5.7 que o coeficiente global h_g passou para $11200 t^{-0,022}$ [W/m²K] (apresentado posteriormente na Figura 5.9) para a situação de superaquecimento variável, sendo $12400 t^{-0,03}$ [W/m²K] para a condição de superaquecimento constante. Esta diferença pode comprometer e/ou no mínimo introduzir imprecisões nos resultados fornecidos pelo modelo numérico. Desta forma, neste trabalho emprega-se a distribuição inicial de temperatura em função da posição relativa a chapa molde.

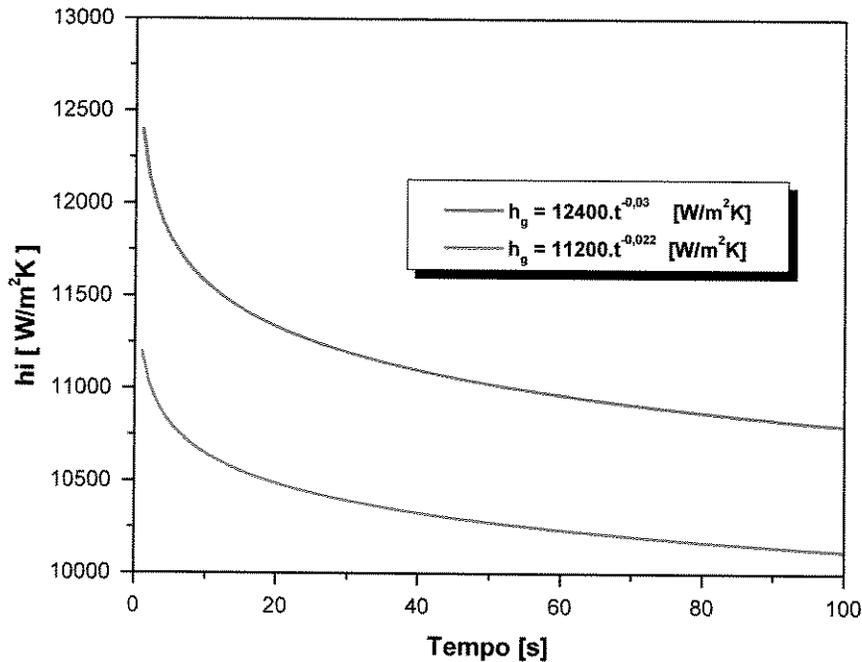


Figura 5.7 – Comparação entre os perfis de h_g obtidos pela simulação numérica dos resultados experimentais apresentados na Figura 5.5 para a liga Al-6,2%Cu, considerando distribuição de temperatura inicial constante (curva vermelha) e distribuição inicial de temperatura em função da distância à chapa molde (curva azul).

As Figuras 5.8 a 5.12 mostram o confronto dos perfis de temperaturas obtidos experimentalmente e aqueles provenientes de simulação teórica utilizados para a determinação do coeficiente global de transferência de calor metal/fluido durante a solidificação unidirecional ascendente de ligas Al-4,5 % Cu, Al-6,2 % Cu e Al-8,1 % Cu em peso, em molde de refrigerado. A liga Al 6,2 % Cu foi submetida a diferentes graus de superaquecimento.

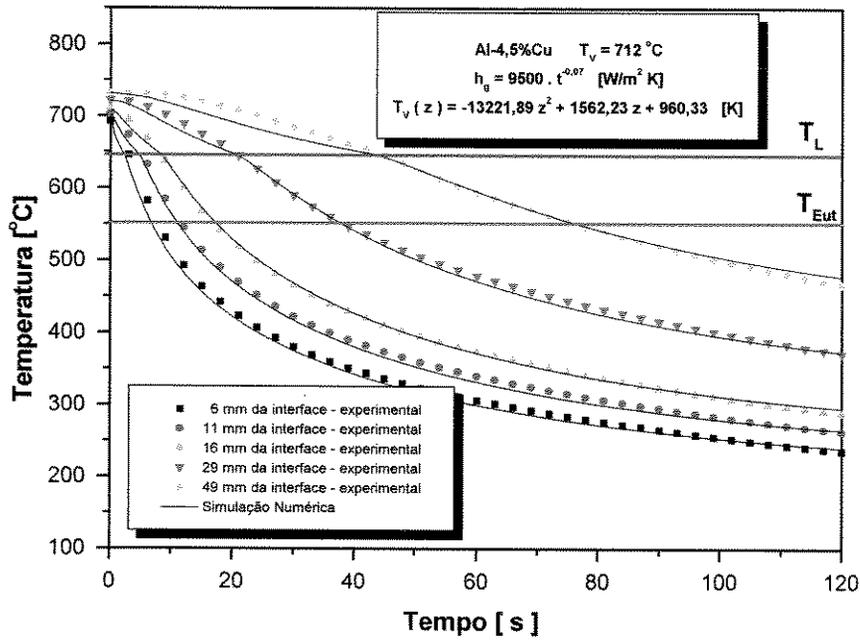


Figura 5.8 - Curvas de resfriamento experimentais e simulação numérica para a liga Al-4,5%Cu submetida ao superaquecimento de 64 °C.

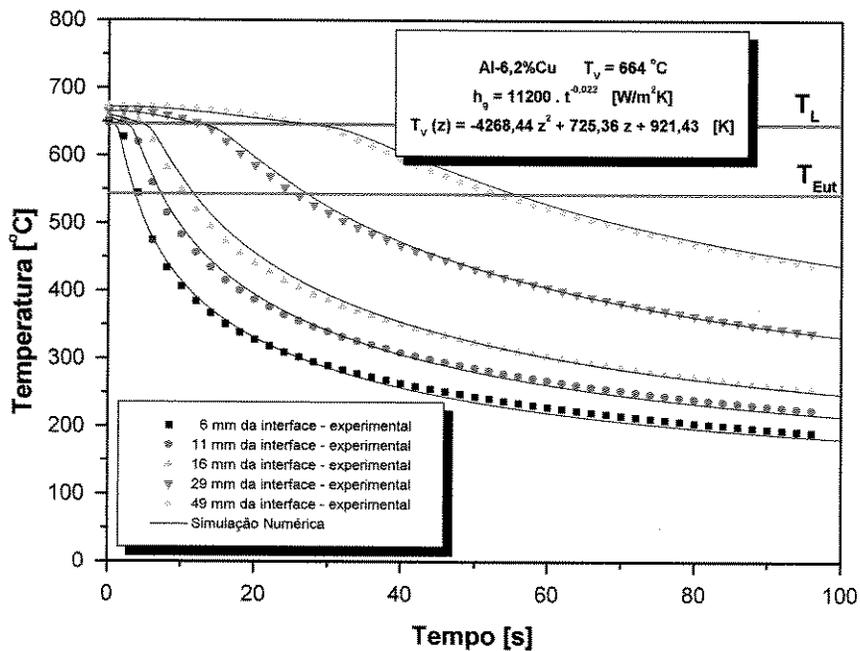


Figura 5.9 - Curvas de resfriamento experimentais e simulação numérica para a liga Al-6,2%Cu, submetida ao superaquecimento de 20 °C.

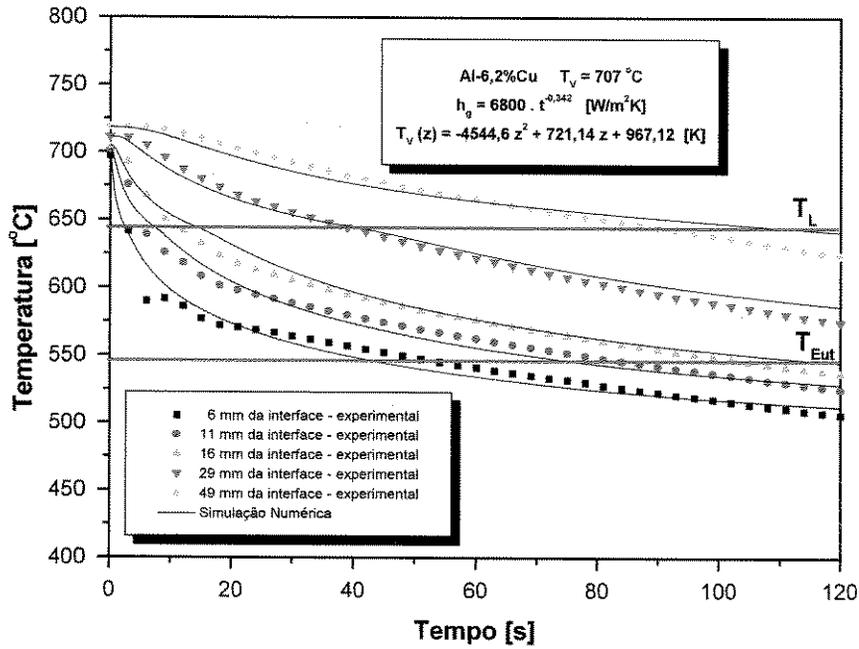


Figura 5.10 - Curvas de resfriamento experimentais e simulação numérica para a liga Al-6,2%Cu, submetida ao superaquecimento de 63 °C.

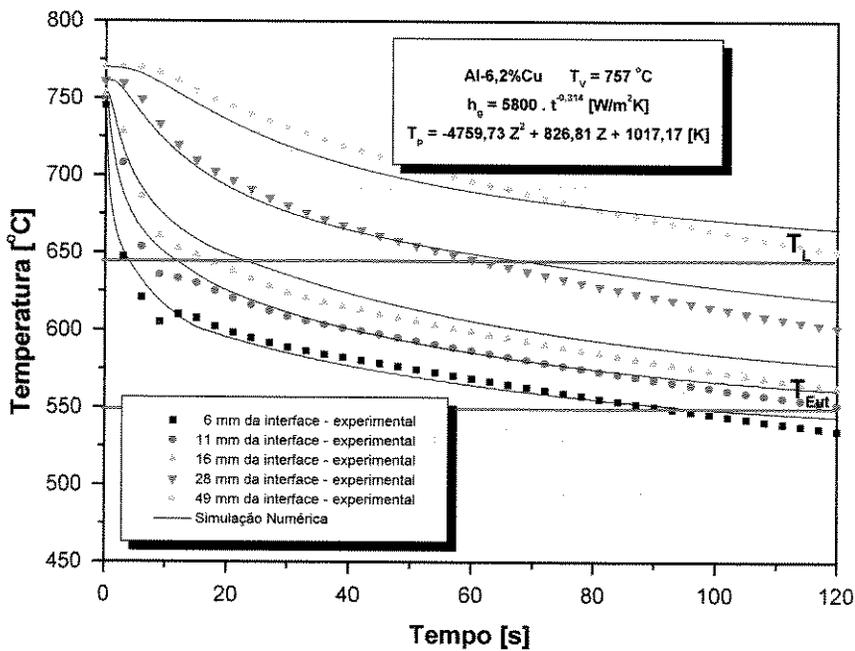


Figura 5.11 - Curvas de resfriamento experimentais e simulação numérica para a liga Al-6,2%Cu, submetida ao superaquecimento de 113 °C.

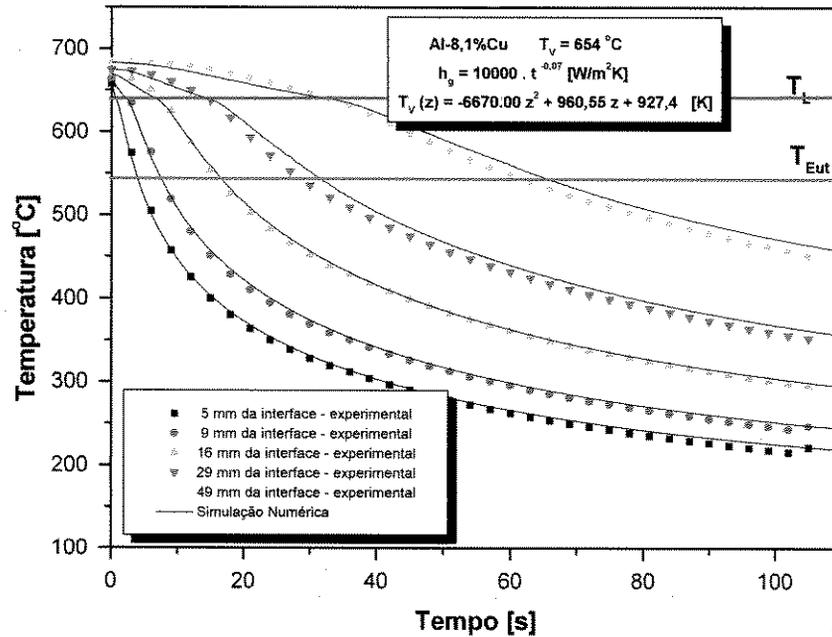


Figura 5.12 - Curvas de resfriamento experimentais e simulação numérica para a liga Al-8,1%Cu, submetida ao superaquecimento de 22 °C.

As comparações teórico-experimentais das Figuras 5.8 a 5.12 demonstram boa concordância do modelo numérico em relação aos resultados experimentais, o que demonstra uma correta implementação computacional do modelo numérico bem como a boa aplicabilidade das modificações sofridas pelo mesmo. Voller e colaboradores [Voller e Swaminathan, 1997] afirmam que a convergência do conjunto de equações diferenciais seria atingida ao obter-se variações dos valores de fração de líquido ao longo da zona pastosa abaixo de 10^{-5} (passo x do algoritmo computacional do modelo numérico descrito do Capítulo 3). Todavia, Voller e colaboradores não implementam qualquer condição de contorno não-linear ou transiente, ou seja, para a situação de temperatura constante na base do lingote este fato é verdadeiro; porém, em situações onde estejam presentes condições de contorno transientes não-lineares no molde este valor deve ser inferior a 10^{-7} , o número de nós no mínimo duas vezes maior e o incremento de tempo de 100 a 1000 vezes menor que aqueles sugeridos por Voller.

Outro fato importante refere-se à posição dos termopares que podem variar em poucos milímetros em virtude de dobramentos em qualquer das direções durante o processo de seu acomodamento no banho. Para assegurar essas medidas, as partes do lingote contendo os termopares eram seccionadas para revelação exata das suas posições.

A Figura 5.13 apresenta os perfis de h_g experimentais para as ligas Al-4,5%Cu, Al-6,2%Cu e Al-8,1%Cu. Conforme pode ser verificado, o aumento do superaquecimento contribui para a diminuição do valor de h_g , tendência esta que é comum para a solidificação unidirecional vertical ascendente, conforme observado em artigos recentes [Siqueira, Cheung e Garcia, 2003; Souza, Cheung, Santos e Garcia, 2004].

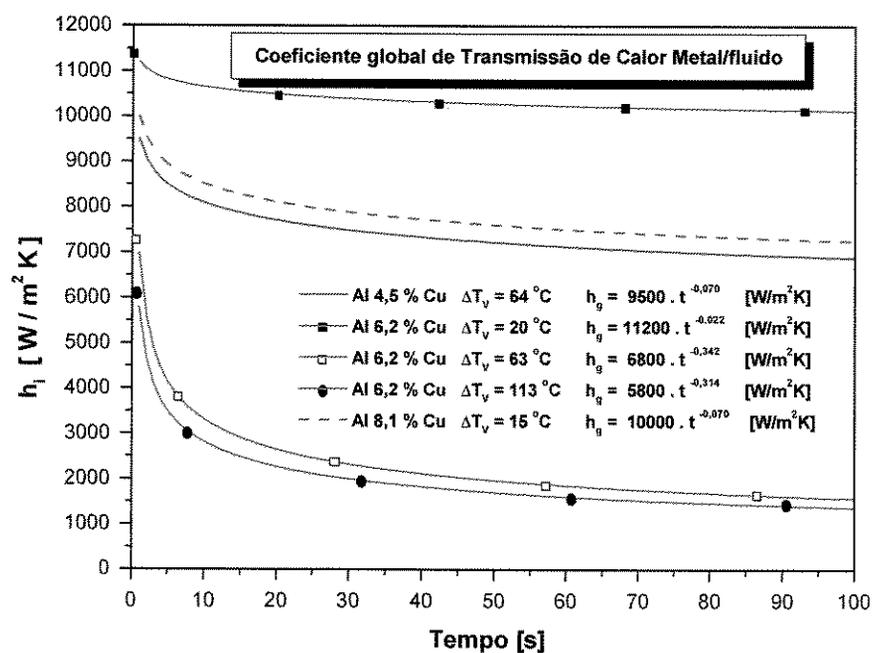


Figura 5.13 - Coeficiente global de transferência de calor metal/fluido (h_g) em função do tempo.

5.3 - Evolução da Solidificação: Resultados Experimentais e Validação dos Modelos Analíticos e Numéricos.

As Figuras 5.14, 5.15, 5.16, 5.17 e 5.18 apresentam a comparação entre as velocidades analíticas, numéricas e experimentais das isothermas liquidus e solidus em função da posição para as ligas Al-4,5%Cu, Al-6,2%Cu e Al-8,1%Cu.

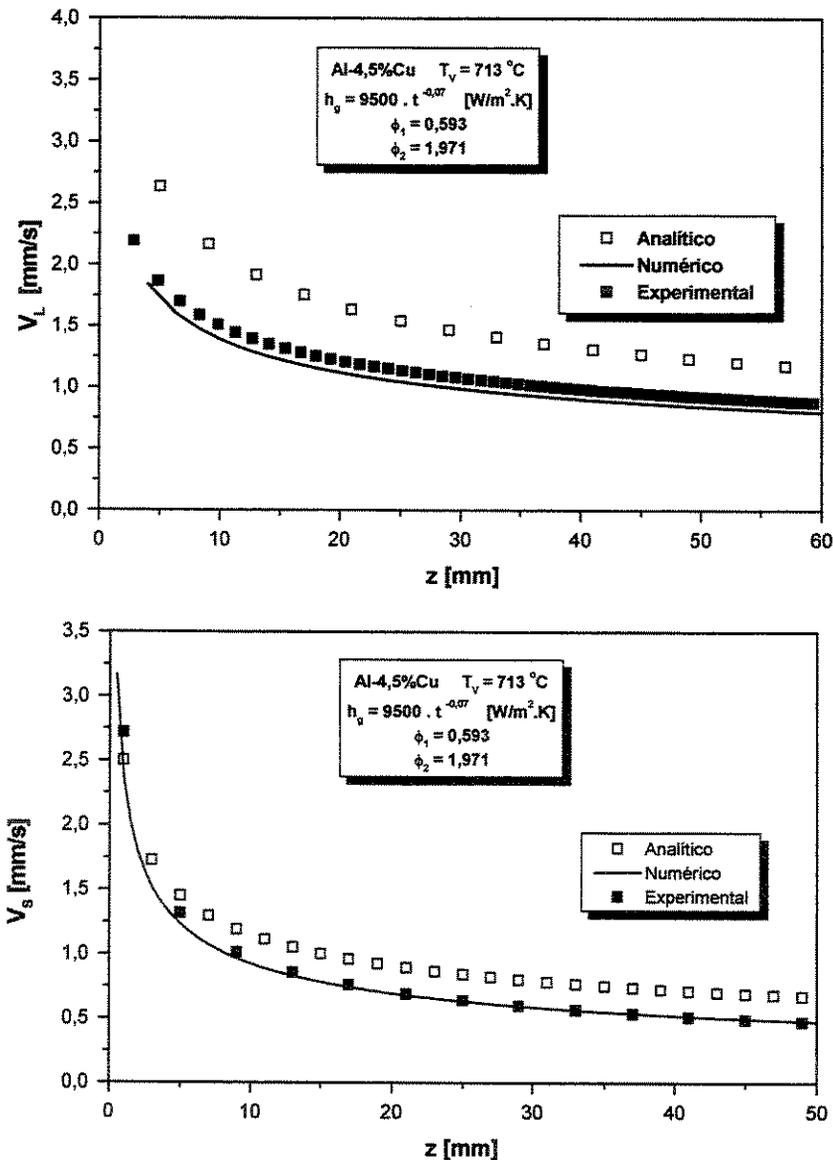


Figura 5.14 – Comparações das velocidades das isothermas solidus e liquidus analíticas, numéricas e experimentais em função da posição para a liga Al-4,5%Cu e temperatura inicial do líquido de 63 °C acima da temperatura liquidus.

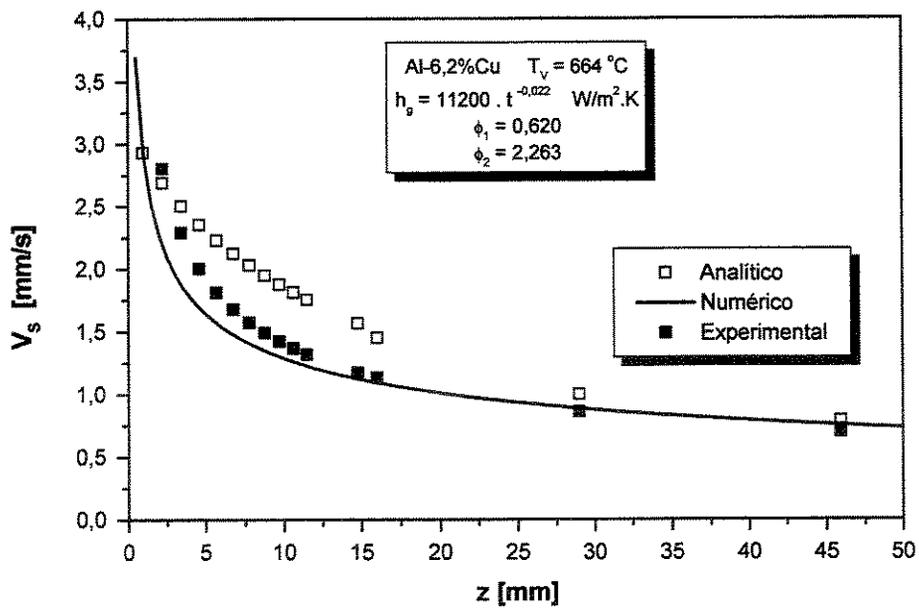
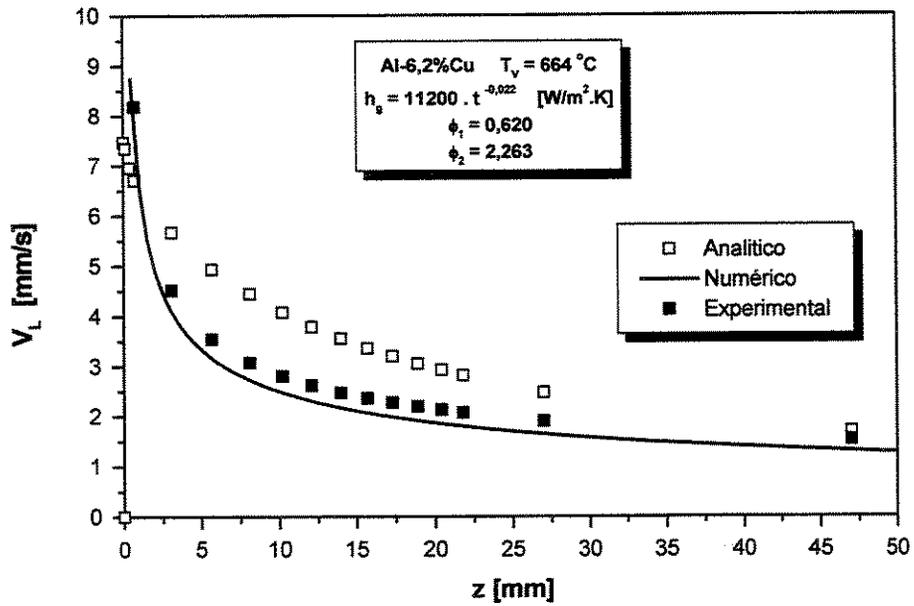


Figura 5.15 – Comparações das velocidades das isothermas solidus e liquidus analíticas, numéricas e experimentais em função da posição para a liga Al-6,2%Cu e temperatura inicial do líquido de 20 °C acima da temperatura liquidus.

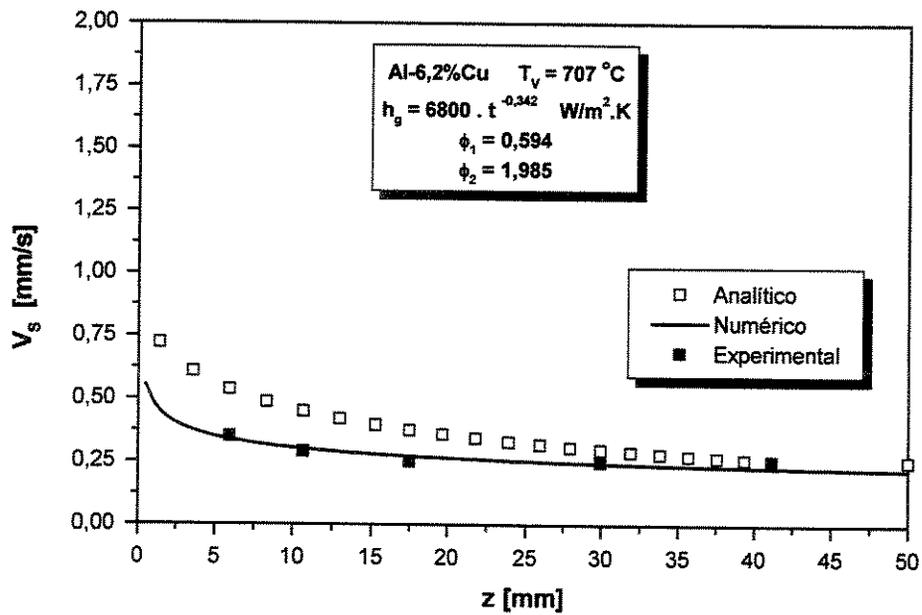
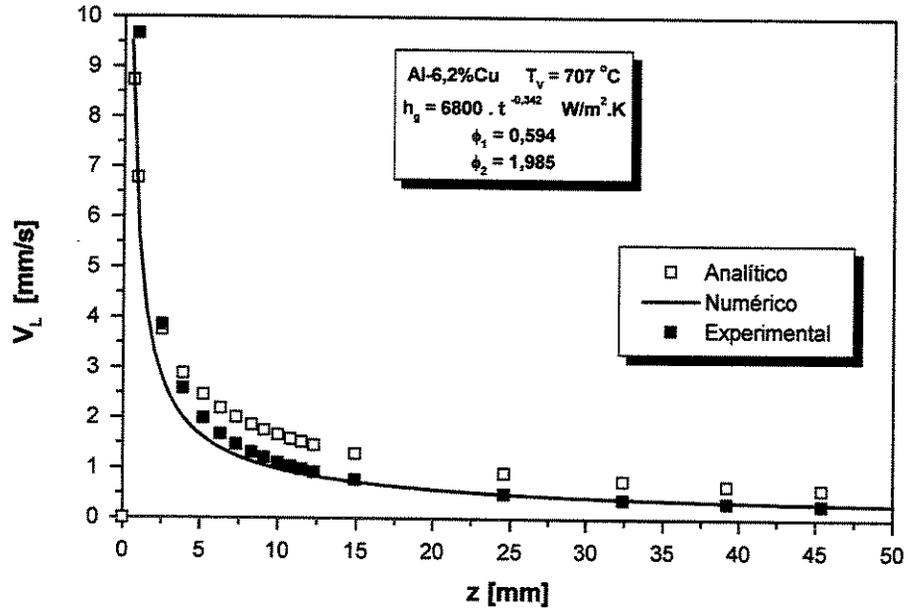


Figura 5.16 – Comparações das velocidades das isothermas solidus e liquidus analíticas, numéricas e experimentais em função da posição para a liga Al-6,2%Cu e temperatura inicial do líquido de 63 °C acima da temperatura liquidus.

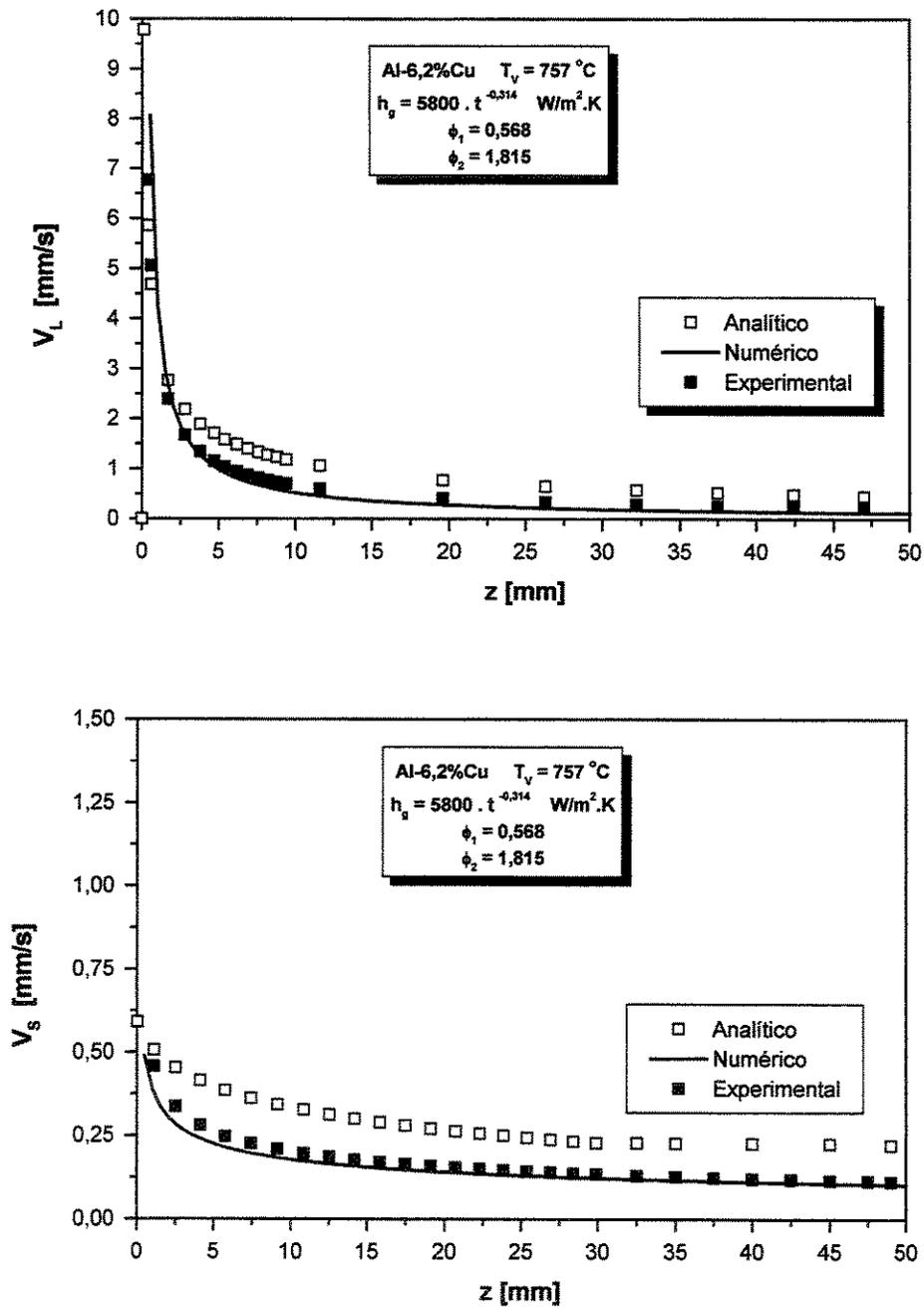


Figura 5.17 – Comparações das velocidades das isothermas solidus e liquidus analíticas, numéricas e experimentais em função da posição para a liga Al-6,2%Cu e temperatura inicial do líquido de 113 °C acima da temperatura liquidus.

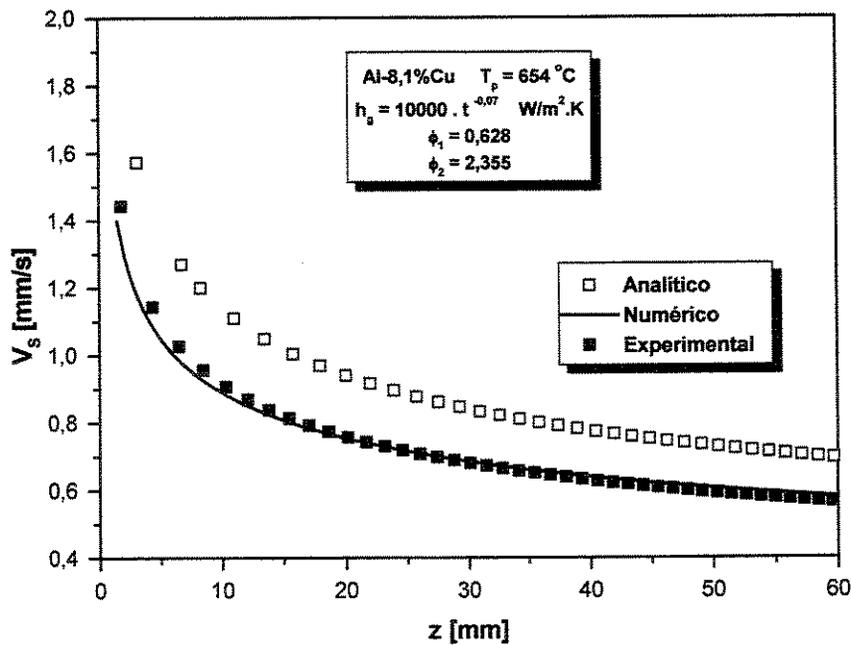
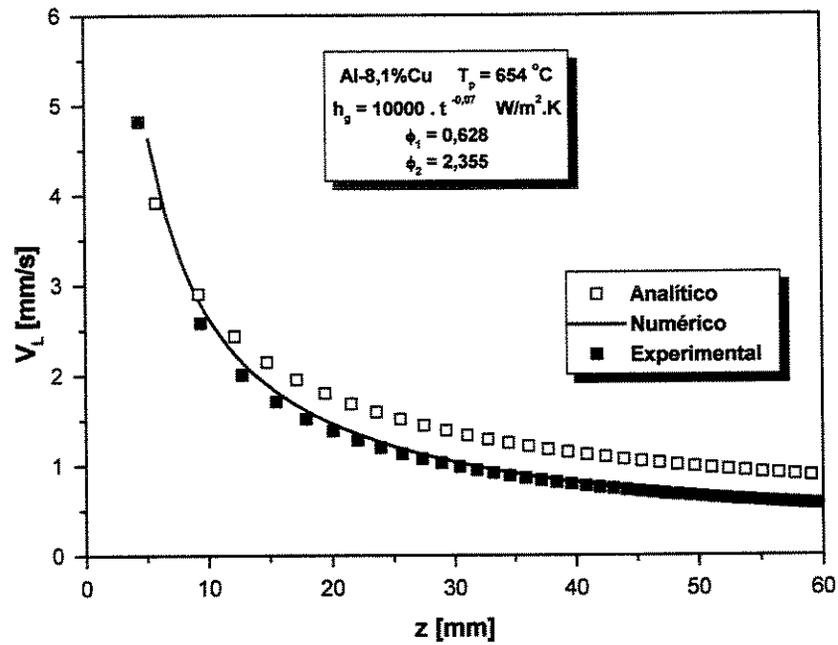


Figura 5.18 – Comparações das velocidades das isothermas solidus e liquidus analíticas, numéricas e experimentais em função da posição para a liga Al-8,1%Cu e temperatura inicial do líquido de 15°C acima da temperatura liquidus.

As Figuras 5.14 a 5.18 apresentam as comparações das velocidades das isothermas solidus, V_S e liquidus, V_L fornecidas pelos modelos analítico e numérico e aqueles obtidos experimentalmente em função da posição para as ligas Al-4,5%Cu, Al-6,2%Cu e Al-8,1%Cu. Pode-se verificar boa concordância para todas as situações experimentalmente analisadas, com melhor concordância para o modelo numérico. Estas variáveis térmicas são aplicáveis aos cálculos analíticos dos perfis de segregação inversa, de acordo com as equações (3.7) e (3.8). Observa-se também, para situações de superaquecimento elevado, há um maior desvio entre resultados experimentais e os calculados analiticamente para os valores de V_L e V_S . Tal fato pode ser explicado principalmente pela forma adotada para a regra de liberação de calor latente. O tratamento de Scheil, mais realista para a presente situação física, é utilizado pelo modelo numérico. Já o modelo analítico, em função de limitações de caráter matemático, adota uma modificação artificial no calor específico da zona pastosa para levar em conta a liberação do calor latente conforme mostra a equação (5.1):

$$c_{SL} = c_L + \frac{\Delta H}{T_{Liq} - T_{Sol}} \quad , \quad (5.1)$$

em que c_{SL} é o calor específico na zona pastosa, c_L o calor específico do líquido, ΔH o calor latente de fusão, T_{Sol} a temperatura solidus e finalmente T_{Liq} a temperatura liquidus da liga. Para situações onde o superaquecimento é elevado, maior quantidade de energia necessita passar através da zona pastosa, e como a forma de liberação de calor latente é simplificada no tratamento analítico, é de se esperar um afastamento maior dos resultados experimentais quando comparada com a expectativa teórica do numérico.

5.4 - Confronto de Perfis de Segregação Inversa: Numéricos, Analíticos e Experimentais.

Como as ligas hipoeutéticas do sistema Al-Cu começam a solidificar na forma vertical ascendente, o soluto rejeitado provoca a formação de um líquido interdendrítico mais denso que o líquido global de composição nominal. Desta forma, gradientes de concentração não poderão induzir convecção natural no líquido. Tanto o modelo analítico quanto o numérico utilizado a

seguir são baseados na estabilidade do líquido quanto a gradientes de concentração, o que está de acordo com o sistema experimental utilizado. As distribuições experimentais inversas de soluto após a solidificação completa dos lingotes são mostradas nas Figuras 5.19 a 5.23 para as composições Al-4,5, 6,2 e 8,1 %Cu em peso, juntamente com as macroestruturas típicas de solidificação unidirecional observadas. Os perfis inversos de concentração de soluto ocorreram na zona colunar nos casos experimentais examinados, onde os canais interdendríticos são bem mais definidos.

O perfil de concentração, mostrado na Figura 5.19, é comparado tanto com resultados obtidos com a técnica WDS (Wavelength Dispersive Spectroscopy), quanto por medidas fornecidas pela técnica de fluorescência de raios X, para assegurar resultados confiáveis.

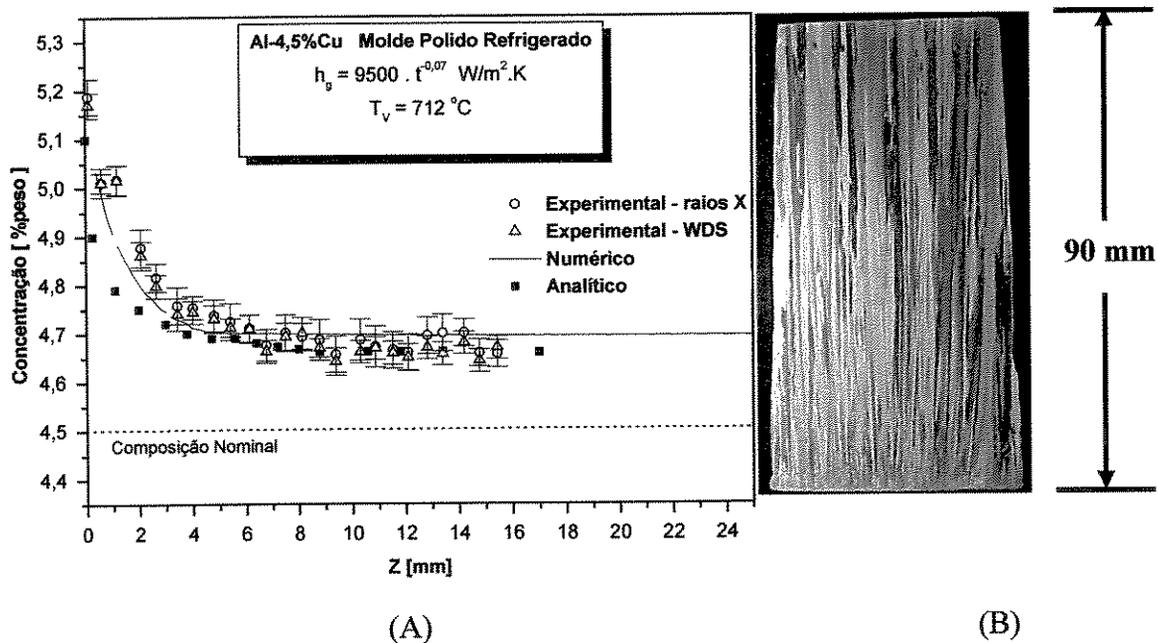


Figura 5.19 - Comparação entre os perfis de concentração experimentais WDS e fluorescência de raios X e previsões dos modelos numérico e analítico (A). Macrografia do lingote de composição nominal Al4,5%Cu com superaquecimento médio de 64 °C (B).

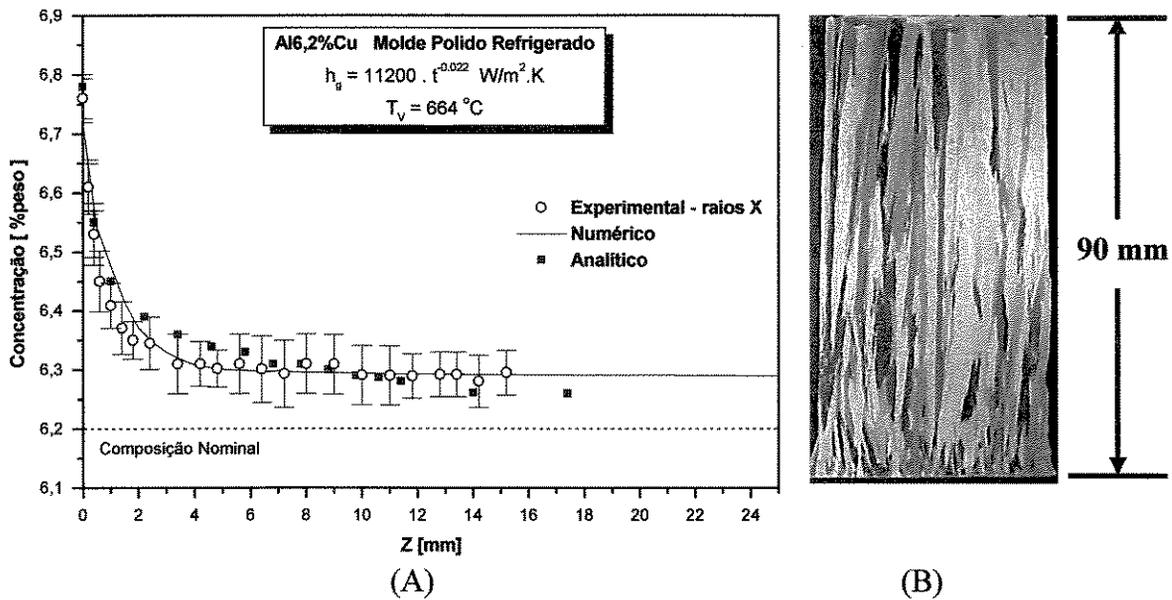


Figura 5.20 - Comparação entre os perfis de concentração experimental obtido por fluorescência de raios X e previsões dos modelos numérico e analítico (A). Macrografia do lingote de composição nominal Al6,2%Cu com superaquecimento médio de 20 °C (B).

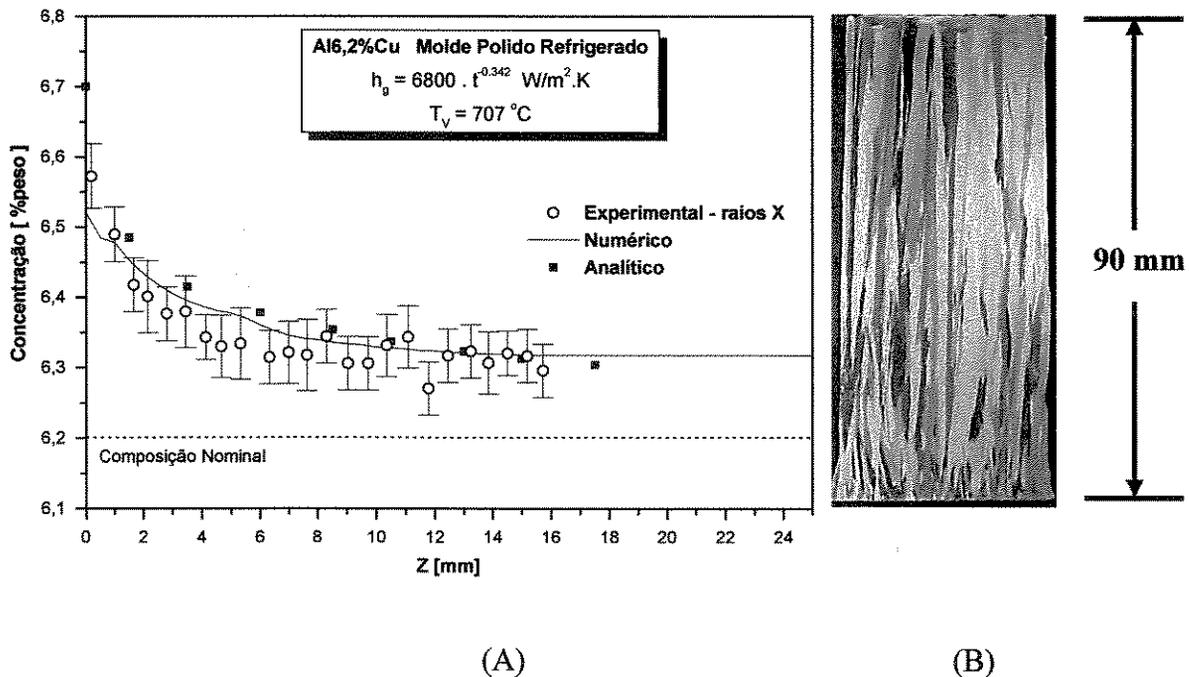


Figura 5.21 - Comparação entre os perfis de concentração experimental obtido por fluorescência de raios X e previsões dos modelos numérico e analítico (A). Macrografia do lingote de composição nominal Al-6,2%Cu com superaquecimento médio de 63 °C (B).

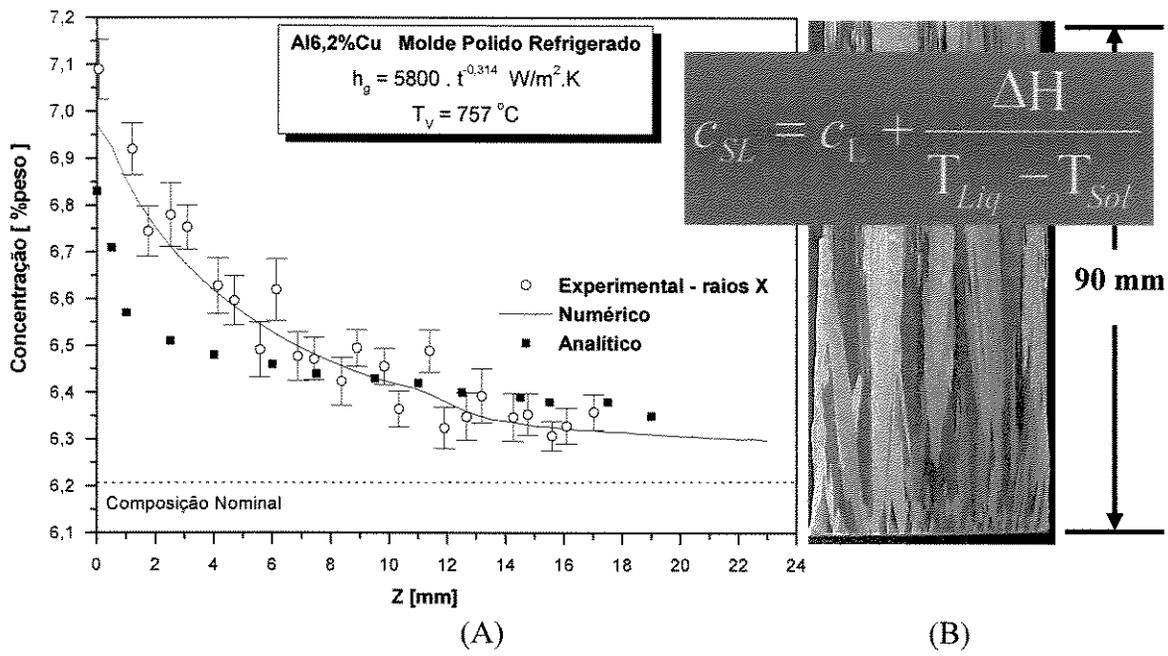


Figura 5.22 - Comparação entre os perfis de concentração experimental obtido por fluorescência de raios X e previsões dos modelos numérico e analítico (A). Macrografia do lingote de composição nominal Al-6,2%Cu com superaquecimento médio de 113 °C (B).

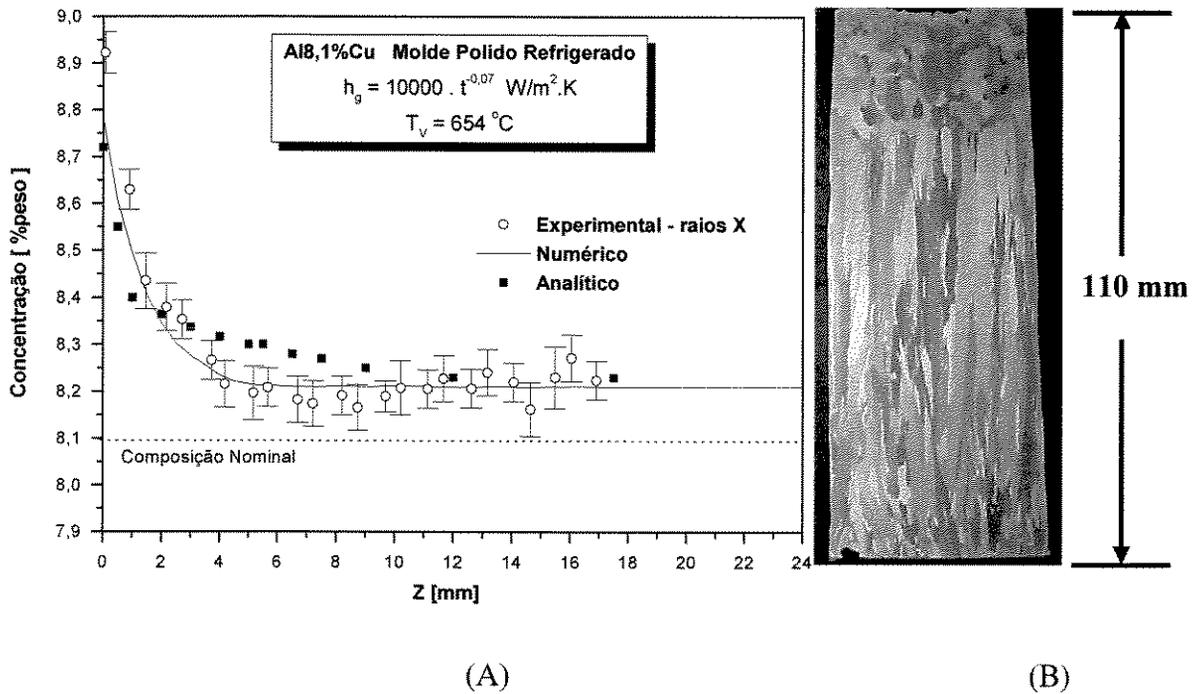


Figura 5.23 - Comparação entre os perfis de concentração experimental obtido por fluorescência de raios X e previsões dos modelos numérico e analítico (A). Macrografia do lingote de composição nominal Al-8,1%Cu com superaquecimento médio de 15 °C (B).

Os perfis experimentais de segregação inversa são comparados nas Figuras 5.19 a 5.23 com aqueles determinados pelos modelos teóricos analítico e numérico. Verifica-se que as previsões numéricas mostram-se em boa concordância com todos os resultados experimentais examinados. As previsões analíticas da segregação de soluto, apesar de sua relativa simplicidade, também representam bem a tendência de evolução dos perfis de segregação experimentais, à exceção do caso de elevado superaquecimento representado pela Figura 5.22, onde o modelo analítico prevê segregação inversa menos severa nas regiões próximas à chapa molde que as previsões experimentais. Tal fato deve-se ao tratamento matemático mais próximo da realidade do fenômeno incorporado pelo modelo numérico.

A influência do superaquecimento inicial sobre a segregação inversa está associada com os perfis de h_g resultantes. Um elevado coeficiente de transmissão de calor h_g , que ocorre para baixos superaquecimentos no líquido, aumenta a taxa de resfriamento e diminui o tamanho da zona pastosa. Por conseguinte, menos soluto é conduzido pelo escoamento de fluido interdendrítico contribuindo para a diminuição da severidade da segregação inversa. Tal fato pode ser melhor observado nas Figuras 5.20, 5.21 e 5.22 na comparação de diferentes perfis de segregação obtidos nos experimentos com ligas Al-6,2%Cu.

5.5 - Influência do Teor de Solute da Liga no Perfil de Segregação Inversa

O modelo numérico permite que perfis de macrossegregação inversa sejam determinados como função das variáveis do processo de solidificação, o que permite conhecer melhor o processo de fundição, através de uma pré-programação da solidificação em termos de níveis particulares de perfis de macrossegregação que se pretenda obter. A Figura 5.24 ilustra a influência do conteúdo de soluto na liga de acordo com a simulação do perfil de segregação nos 30 mm iniciais de lingotes de Al-5%Cu, Al-6%Cu e Al-7%Cu, solidificados em moldes refrigerados, onde o perfil do coeficiente de transferência de calor é parametrizado para todos os casos e igual a $h_g = 11200.t^{-0,022}$ [W /m² K]. Observa-se que, nas regiões adjacentes à chapa molde, a segregação inversa diminui rapidamente com a distância. A inclinação inicial da curva

e, por conseguinte, a taxa de diminuição da concentração é função da quantidade de soluto (Cu) na liga, diminuindo com o aumento da concentração nominal da liga.

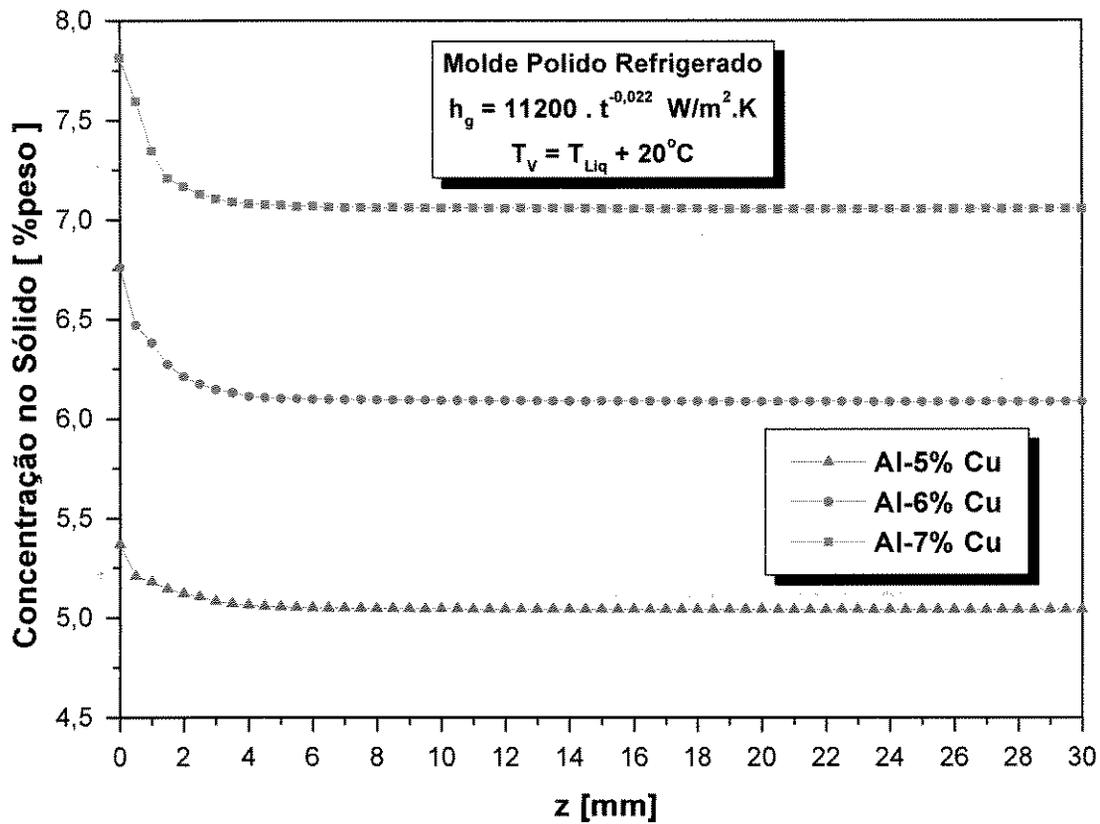


Figura 5.24 – Perfis de segregação inversa simulados ao longo de lingotes solidificados de Al-5%Cu, 6% e 7% Cu com 30 mm de comprimento, parametrizando o coeficiente global de transferência de calor em $h_g = 11200.t^{-0,022} \text{ W/m}^2.\text{K}$.

5.6 - Validação do Modelo Numérico para Ligas Multicomponentes

Os registros de temperaturas experimentalmente monitoradas foram acoplados ao programa numérico de solidificação para determinação do coeficiente h_g da mesma forma que descrito para as ligas binárias. Todavia, o diagrama de fases é simplificado, conforme apresentado no Capítulo 4. A Figura 5.25 mostra os dados de temperatura medidos durante o curso da solidificação vertical unidirecional da liga Al-8,1%Cu-3%Si em molde refrigerado por água. As respostas

térmicas experimentais são comparadas com as predições fornecidas pelo modelo de solidificação numérico e a melhor curva teórico-experimental forneceu o perfil apropriado para o coeficiente transiente h_g .

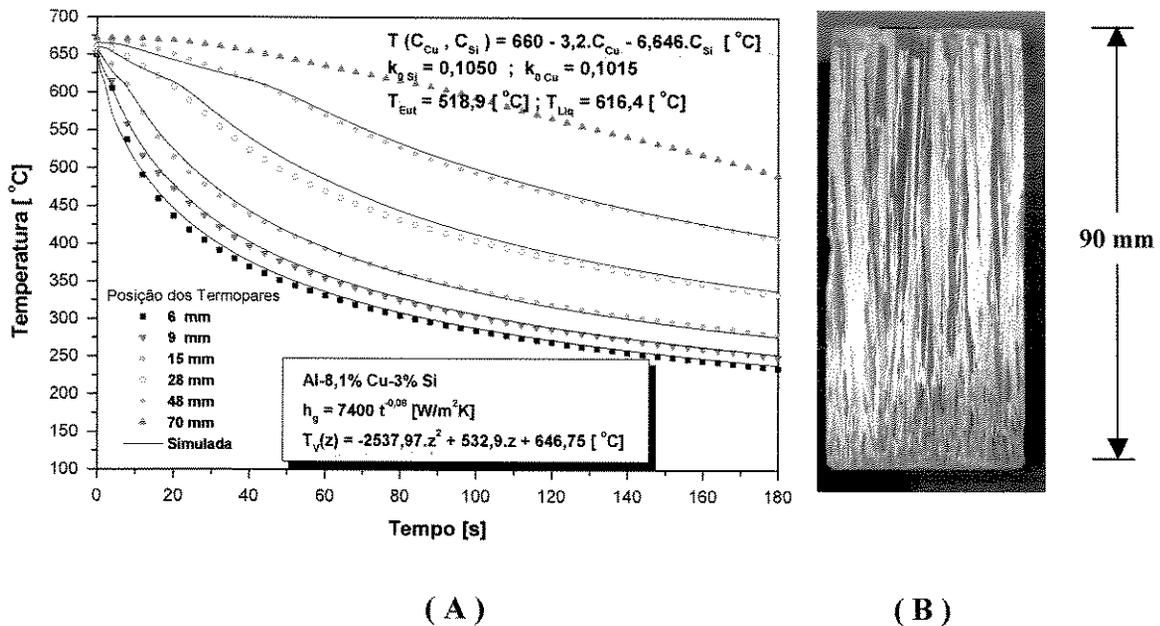


Figura 5.25 – (A) Típica resposta térmica experimental em molde refrigerado para a liga Al-8,1%Cu-3%Si comparada com simulação numérica para determinação do perfil transiente de h_g (B) Macroestrutura direcional.

As propriedades termofísicas da liga e os seus parâmetros de solidificação são utilizados como dados de entrada para as simulações. Para inserir um diagrama de fases ternário específico nos cálculos, são utilizadas duas estratégias diferentes. Em rotina de pré-processamento é calculado iterativamente o diagrama de fases ternário a partir da energia livre, pela construção de tangentes comuns aos pontos de menor energia e pelas chamadas dos dados pré-calculados das isothermas solidus e liquidus durante a simulação. De forma alternativa, é utilizado um programa de base de dados termodinâmicos [Nestler e Wheeler, 2000] (programa em fase de desenvolvimento pela Universidade Técnica de Karlsruhe sob supervisão da Profa. Dra. Britta Nestler), para a resolver este procedimento a cada intervalo de tempo. Os perfis de

macrossegregação estão apresentados na Figura 5.26, onde os resultados experimentais foram comparados com aqueles determinados numericamente.

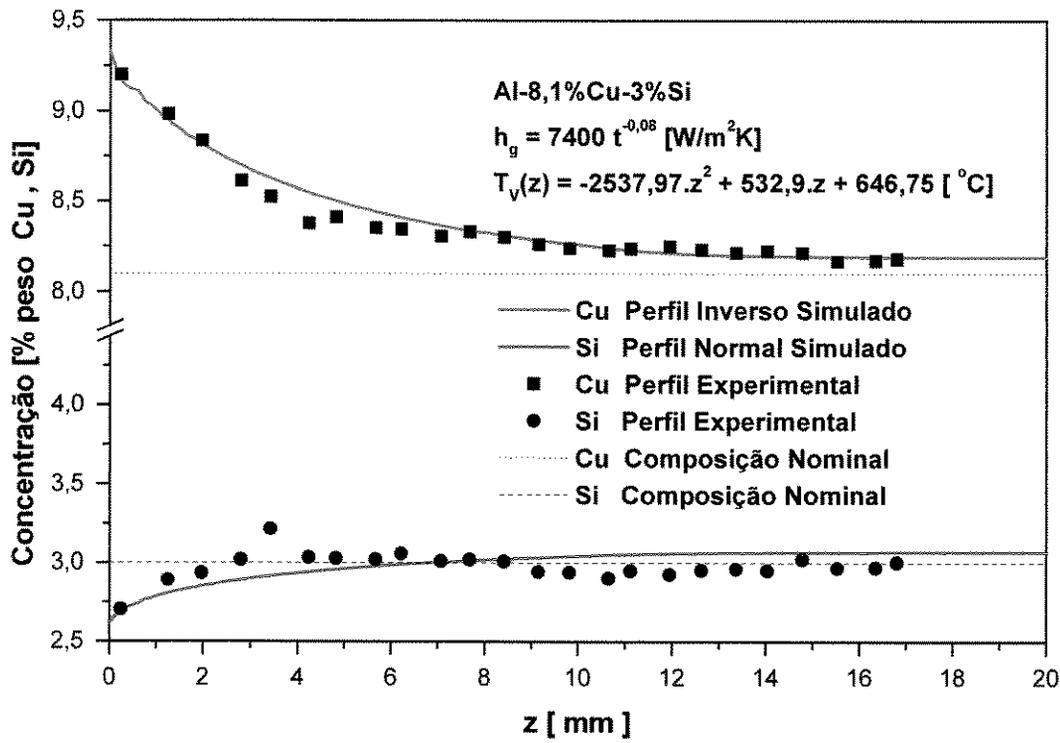


Figura 5.26 – Comparação entre resultados numéricos e experimentais para os perfis de segregação de soluto.

Conforme pode ser observado na Figura 5.26, o modelo calcula o perfil de segregação inversa de soluto (Cu), e verifica-se boa concordância com os resultados experimentais, o que evidencia a aplicabilidade do modelo também a casos de segregação inversa de ligas multicomponentes. Não se observa segregação experimental significativa de silício ao longo do lingote solidificado, à exceção de um pequeno comprimento inicial de segregação negativa, provavelmente associada com a formação e a extensão inicial da zona pastosa. De fato, ao aplicar-se o modelo numérico de solidificação às condições iniciais de solidificação, restringindo a simulação até o ponto de surgimento inicial da isoterma solidus, determina-se um comprimento de zona pastosa inicial compatível com a dimensão da região inicial de segregação negativa de silício.

Capítulo 6

Conclusões e Sugestões para Próximos Trabalhos

6.1 – Conclusões

A análise teórico-experimental desenvolvida neste trabalho, através da implementação de modelos analítico, semi-analítico e numérico, e o confronto com os resultados experimentais, permite que sejam extraídas as seguintes conclusões:

1. É acoplado modelo de solidificação analítico à equação de redistribuição local de soluto proposta por Flemings e Nereo, permitindo uma completa determinação analítica da variação posicional da segregação em função de variáveis térmicas de solidificação como gradientes térmicos, taxas de resfriamento, velocidades das isothermas solidus e liquidus, e os coeficientes de transferência de calor na interface metal/fluido.
2. A solução analítica permite que a segregação inversa seja diretamente correlacionada com parâmetros operacionais da solidificação transitória, isto é, coeficientes de transferência de calor metal/molde, superaquecimento do metal líquido, composição química da liga e características termofísicas do molde.
3. As previsões teóricas decorrentes da abordagem analítica da segregação, apesar de sua relativa simplicidade, mostram boa concordância com os resultados experimentais, exceto para condições de elevado superaquecimento no líquido. Nestas condições, o modelo

analítico prevê segregação inversa menos severa em regiões próximas da superfície do lingote do que o perfil de concentração experimental.

4. As previsões teóricas fornecidas pelo modelo numérico mostram boa concordância com os resultados experimentais de segregação inversa para todos os casos de solidificação de ligas binárias examinados.
5. O modelo numérico mostra-se mais preciso e mais abrangente que o analítico em função das limitações de caráter matemático desta última abordagem, podendo desta forma ser utilizado para englobar condições bidimensionais de transferência de calor, solidificação de ligas multicomponentes pela incorporação adequada do acoplamento pressão-velocidade, estará apto a considerar os efeitos de convecção térmica e mássica, bem como a distribuição de pressão ao longo do domínio, permitindo ampliar os seu espectro de análise a defeitos em peças fundidas.
6. A influência do superaquecimento inicial do metal líquido sobre a segregação inversa está associada com os perfis de h_g resultantes. Um elevado coeficiente de transferência de calor, que ocorre para condições de baixo superaquecimento, aumenta a taxa de resfriamento e diminui o tamanho da zona pastosa. Como consequência, menos soluto pode ser carregado pelo escoamento de fluido induzido por contração de solidificação, diminuindo a severidade da segregação inversa.
7. A inclinação inicial do perfil de segregação inversa é uma função do conteúdo de soluto na liga e decresce com o aumento da concentração.
8. O modelo numérico mostra-se eficiente também na determinação do coeficiente transiente de transferência calor metal/fluido para ligas ternárias.
9. A simulação numérica da distribuição de concentração dos solutos em função da posição para a liga ternária Al-8,1%Cu-3%Si apresenta boa concordância com os resultados observados experimentalmente. Os resultados evidenciam ausência de macrossegregação

de silício durante a solidificação. Somente é observado para o silício um pequeno transiente inicial de segregação negativa que está associado provavelmente à formação inicial da zona pastosa na região próxima da interface metal/molde. Uma simulação realizada com o modelo numérico comprova que o tamanho inicial da zona pastosa coincide com o tamanho da região de segregação negativa.

10. O modelo numérico possibilita a incorporação de um tratamento generalizado para a forma de liberação de calor latente na zona pastosa, podendo ser aplicado tanto para ligas cujo coeficiente de difusão no estado sólido seja desprezível como ligas Al-Cu ($\beta = 0$ - regra de Scheil), para ligas que apresentam difusão finita de retorno no sólido ($0 < \beta < 1$ - difusão finita) sendo estas a grande maioria dos casos práticos e, para casos de elevadíssima mobilidade do soluto como no caso de aços-carbono ($\beta = 1$ - regra da alavanca).

6.2 - Sugestões para Trabalhos Futuros

São apresentados os seguintes tópicos para o prosseguimento deste trabalho:

- Resolver o acoplamento pressão-velocidade através de métodos como SIMPLE, SIMPLEC, SIMPLER, para estender o estudo da macrossegregação inversa de soluto induzida por contração para condições de solidificação em duas e três dimensões;
- Utilizar o presente modelo numérico para estudo da análise teórica da formação de microporosidade em lingotes solidificados nas verticais ascendente e descendente para ligas binárias e ternárias;
- Analisar a macrossegregação em ligas multicomponentes de interesse comercial, uma vez que o modelo apresenta um tratamento generalizado para a forma de liberação de calor latente (aços e metais não ferrosos), que permite sua aplicação a quaisquer sistemas multicomponentes, bastando que haja o devido acoplamento do diagrama de

fases em suas rotinas, por meio de modelos teóricos termodinâmicos como o ThermoCalc; e

- Acoplar o modelo numérico macroscópico com modelos de formação de microestrutura (modelo de campo de fases) para o estudo do desenvolvimento da microestrutura em condições reais de solidificação.

Referências Bibliográficas

Artigos Técnicos/Científicos

- Bennon, W. D., Incropera, F. P. **A Continuum Model for Momentum, Heat and Species Transport in Binary Solid-Liquid Phase Change Systems – 1. Model Formulation.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1987a, vol. 30, pp. 2161-70.
- Bennon, W. D., Incropera, F. P. **A Continuum Model for Momentum, Heat and Species Transport in Binary Solid-Liquid Phase Change Systems – 2. Application to Solidification in Rectangular Cavity.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1987b, vol. 30, pp. 2171-87.
- Braga, S. L. e Viskanta, R. **Solidification of a Binary Solution on a Cold Isothermal Surface.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1990, vol. 33, pp. 745-54.
- Cahoon, J. R. e Youdelis, W. V. **A Computer Analysis of Inverse Segregation.** *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, 1974, vol. 230, p. 1734.
- Chang, S. e Stefanescu, D. M. **A Model for Macroseggregation and its Application to Al-Cu Castings.** *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1996, vol. 27A, pp. 2708-20.
- Chen, J. H. e Tsai, H. L. **Inverse Segregation for a Unidirectional Solidification of Aluminum-Copper Alloys.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1993, vol. 36, pp. 3069-75.

- Chiang, K. C. e Tsai, H. L. **Interaction Between Shrinkage-induced Fluid Flow and Natural Convection During Alloy Solidification.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1992, vol. 35, pp. 1771-78.
- Chiareli, A. O. P., Worster, M. G. **On Measurement and Prediction of the Solid Fraction Within Mushy Layers.** *Journal of Crystal Growth*, 1992, vol. 125, pp. 487-94.
- Cho, S., Sunderland, J. E. **Heat-Conduction Problems with Melting and Freezing.** *Journal of Heat Transfer*, 1969, vol. 91, pp. 421-26.
- Chung, J. D., Lee, J. S., Choi, M. e Yoo, H. **A Refined Similarity Solution for the Multicomponent Alloy Solidification.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 2001, vol. 44, 2483-92.
- Clyne, T. W. e Kurz, W. **Solute Redistribution during Solidification with Rapid State Diffusion.** *Metallurgical Transactions A*, 1981, vol. 12, pp. 965-71.
- Diao, Q. Z. e Tsai, H. L. **Modeling of Solute Redistribution in the Mushy Zone During Solidification of Aluminum-Copper Alloys.** *Metallurgical Transactions A*, 1993, vol. 24A, pp. 963-73.
- Fang, L. J., Cheung, F. B., Linehan, J. H. e Pedersen, D. R. **Selective Freezing of a Dilute Salt Solution on a Cold Ice Surface.** *Journal of Heat Transfer*, 1984, vol. 106, pp. 385-93.
- Flemings, M. C. e Nereo, G. E. **Macrosegregation, Part III.** *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, 1968, vol. 242, pp. 50-55.
- Flemings, M. C. e Nereo, G. E. **Macrosegregation: Part I.** *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, 1967, vol. 239, pp. 1449-61.

- Flemings, M. C., Mehrabian, R. e Nereo, G. E. **Macroseggregation, Part II.** *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, 1968, vol. 242, pp. 41-49.
- Flemings, M. C. **Our Understand of Macroseggregation: Past and Present.** *ISIJ International*, 2000, vol. 40, pp. 833-41.
- Ganesan, S. e Poirier, D. R. **Conservation of Mass and Momentum for the Flow of Interdendritic Liquid During Solidification.** *Metallurgical Transactions B*, 1990, vol. 21B, pp. 173-81.
- Garcia, A. e Prates, M. **Mathematical Model for the Unidirectional Solidification of Metals – 1. Cooled Moulds.** *Metallurgical Transactions B*, 1978, vol. 9B, pp. 449-51.
- Garcia, A., Clyne, T. W. e Prates, M. **Mathematical Model for the Unidirectional Solidification of Metals – 2. Massive Moulds.** *Metallurgical Transactions B*, 1979, vol. 10B, pp. 82-93.
- Goodman, T. R. **Discussion of Heat Transfer Analysis of the Solidification of a Binary Eutectic System.** *Journal of Heat Transfer*, 1967, vol. 89, pp. 230-4.
- Haug, E., Mo, A. e Thevik, H. J. **Macroseggregation Near a Cast Surface Caused by Exudation and Solidification Shrinkage.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1995, vol. 38, pp. 1553-63.
- Huppert, H. E. e Worster, G. **Dynamic Solidification of a Binary Melt.** *Nature*, 1985, vol. 314, pp. 703-7.
- Kato, H. e Cahoon, J. R. **Inverse Segregation in Directionally Solidified Al-Cu-Ti Alloys with Equiaxed Grains.** *Metallurgical Transactions A*, 1985, vol. 16A, pp. 579-87.

- Kirkaldy, J. S. e Youdelis, W. V. **Contribution to the Theory of Inverse Segregation.** *Transactions of Metallurgical Society of AIME*, 1958, vol. 212, pp. 833- 40.
- Krane, M. J. M. e Incropera, F. P. **Solidification of Ternary Metal Alloys – II. Predictions of Convective Phenomena and Solidification Behavior in Pb-Sb-Sn Alloys.** *Int. J. Mass Transfer*, 1997, vol. 40, pp. 3837-47.
- Krane, M. J. M. **Macroseggregation Development during Solidification of a Multicomponent Alloy with Free-Floating Solid Particles.** *Applied Mathematical Modelling*, 2004, vol. 28, pp. 95-107.
- Krane, M. J. M., Incropera, F. P. e Gaskell, D. R. **Solidification of Ternary Metal Alloys – 1. Model Development.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1997, vol. 40, pp. 3827-35.
- Kuznetsov, A. V. e Xiong, M. **Dependence of Microporosity on the Direction of Solidification.** *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, 2002, vol. 29, pp. 25-34.
- Lay, S. e Yavari, R. **Evidence for Disordered Character of Grain Boundaries in a Ni₃Al-Based Alloy During Reordering.** *Acta Mater.* , 1996, vol. 44, pp. 35-41.
- Lee, P. D., Chirazi, R. C., Atwood, R. C. e Wang, W. **Multiscale Modelling of Solidification Microstructures, Including Microseggregation and Microporosity, in Al-Si-Cu Alloy.** *Materials Science and Engineering A*, 2004, vol. A365, pp. 57-65.
- Lipton, J. e Garcia, A. **An Analytical Solution of Directional Solidification with Mushy Zone.** *Archiv für das Eisenhüttenwesen*, 1982, v.53, pp. 469-75.
- Martorano, M. A. e Capocchi, J. D. T. **Mathematical Modelling of Microseggregation in Eutectic and Peritectic Binary Alloys.** *Materials Science and Technology*, 2000a, vol. 16A, pp. 483-90.

- Martorano, M. A. e Capocchi, J. D. T. **Effects of Processing Variables on the Microsegregation of Directionally Cast Samples.** *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2000b, vol. 31A, pp. 3137-47.
- Martorano, M. A. e Capocchi, J. D. T. **Heat Transfer Coefficient at the Metal/Mould Interface in the Unidirectional Solidification of Cu-8%Sn Alloys.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 2000c, vol. 43, pp. 2541-52.
- Minakawa, S., Samarasekera, I. V., Weinberg, F. **Inverse Segregation.** *Metallurgical Transactions B*, 1985, vol. 16B, pp. 595-604.
- Mo, A. **Mathematical Modelling of Surface Segregation in Aluminum DC Casting Caused by Exudation.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1993, vol. 36, pp. 4335-40.
- Nastac, L. **Analytical Modeling of Solute Redistribution During the Initial Unsteady Unidirectional Solidification of Binary Dilute Alloys: Comparison with Experiments.** *Scripta Materialia*, 1998, vol. 39, pp. 985-89.
- Nestler, B. e Wheeler, A. A. **A Multi-phase-field Model of Eutectic and Peritectic Alloys: Numerical Simulation of Growth Structures,** *Physica D*, 2000, vol.138, pp.114-33.
- Nestler, B., Wheeler, A.A., Ratke, L. e Stöcker, C. **Phase-Field Model for Solidification of a Monotectic Alloy with Convection.** *Physica D*, 2000, vol.141, 1-2, pp.133 – 54.
- Ni, J. e Beckermann, C. **A Volume-Averaged Two-Phase Model for Transport Phenomena During Solidification.** *Metallurgical Transactions B*, 1991, vol. 22B, pp. 349-61.
- Prabhakar, B. e Weinberg, F. **Inverse Segregation in Al-10 pct Cu.** *Metallurgical Transactions B*, 1978, vol. 9B, pp. 150-1.

- Quaresma, J. M. V., Santos, C. A. e Garcia, A. **Correlation Between Unsteady-State Solidification Conditions, Dendrite Spacings, and Mechanical Properties of Al-Cu Alloys.** *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2000, vol. 31A, pp. 3167-77.
- Rappaz, M. e Voller, V. **Modeling of Micro-Macroseggregation in Solidification Processes.** *Metallurgical Transactions A*, 1990, vol. 21A, pp. 749-55.
- Reddy, A. V. e Beckermann, C. **Modeling of Macroseggregation Due to Thermosolutal Convection and Contraction-Driven Flow in Direct Chill Continuous Casting of an Al-Cu Round Ingot.** *Metallurgical and Materials Transactions B*, 1997, vol. 28B, pp. 479-89.
- Rerko, R. H., de Groh, H. C. e Beckermann, C. **Effect of Melt Convection and Solid Transport on Macroseggregation and Grain Structure in Equiaxed Al-Cu Alloys.** *Materials Science and Engineering A*, 2003, vol. A347, pp. 186-97.
- Rubinstein, Li. **The Stefan Problem.** *Transaction of Mathematical Monographs*, 1971, vol. 27, American Mathematical Society.
- Santos, C. A., Quaresma, J. M. V. e Garcia, A. **Determination of Transient Interfacial Heat Transfer Coefficient in Chill Mold Castings.** *Journal of Alloys and Compounds*, 2001, vol. 319, pp. 174-86.
- Scheil, E. **Beitrag zum Problem der Blockseigerung.** *Metallforschung*, 1947, vol. 2, pp. 69-75.
- Shahani, H., Amberg, G. e Fredriksson, H. **On the Formation of Macroseggregation in Unidirectionally Solidified Sn-Pb and Pb-Sn Alloys.** *Metallurgical Transactions A*, 1992, vol. 23A, pp. 2301-10.
- Simpson, J. e Garimella, S. V. **An Investigation of the Solutal, Thermal e Flow Fields in Unidirectional Alloy Solidification.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1998, vol. 41, pp. 2485-502.

- Siqueira, C. A., Cheung, N. e Garcia, A. **The Columnar to Equiaxed Transition During Solidification of Sn-Pb Alloys.** *Journal of Alloys and Compounds*, 2003, vol. 351, pp. 126-34.
- Souza, E. N., Cheung, N., Santos, C. A. e Garcia, A. **The Variation of the Metal/Mold Heat Transfer Coefficient Along the Cross Section of Cylindrical Shaped Castings.** *Anais do Inverse Problems, Design and Optimization Symposium*, Março/2004, Rio de Janeiro-RJ (*In Press*).
- Swaminathan, C. R. e Voller, V. R. **Towards a General Numerical Scheme for Solidification Systems.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1997, vol. 40, pp. 2859-68.
- Thevik, H. J. e Mo, A. **The Influence of Micro-Scale Solute Diffusion and Dendrite Coarsening upon Surface Macrosegregation.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1997, vol. 40, pp. 2055-65.
- Voller, V. R. **A Numerical Scheme for Solidification of an Alloy.** *Canadian Metallurgical Quarterly*, 1998, vol. 37, pp. 169-77.
- Voller, V. R. **A Similarity Solution for the Solidification of a Multicomponent Alloy.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1997, vol. 40, pp. 2869-877.
- Voller, V. R. e Prakash, C. **A Fixed Grid Numerical Modelling Methodology for Convection-Diffusion Mushy Region Phase-Changed Problems.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1987, vol. 30, pp. 1709-20.
- Voller, V. R. e Sundarraj, S. **A Model of Inverse Segregation: The Role of Microporosity.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1995, vol. 38, pp. 1009-18

- Voller, V. R. e Swaminathan, C. R. **General Source-Based Method for Solidification Phase Change.** *Numerical Heat Transfer Part B*, 1991, vol. 19, pp. 175-89.
- Voller, V. R., Brent, A. D. e Prakash, C. **The Modeling of Heat, Mass and Solute Transport in Solidification Systems.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1989, vol. 32, pp. 1719-31.
- Vreeman, C. J. e Incropera, F. P. **The Effect of Free-Floating Dendrites and Convection on Macrosegregation in Direct Chill Cast Aluminum Alloys Part II: Predictions for Al-Cu and Al-Mg Alloys.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 2000, vol. 43, pp. 687-704.
- Vreeman, C. J., Krane, M. J. M. e Incropera, F. P. **The Effect of Free-Floating Dendrites and Convection on Macrosegregation in Direct Chill Cast Aluminum Alloys Part I: Model Development.** *Int. J. Heat Mass Transfer*, 2000, vol. 43, pp. 677-86.
- Wang, C. Y. e Beckermann, C. **A Multiphase Solute Diffusion Model for Dendritic Alloy Solidification.** *Metallurgical Transactions*, 1993, vol. 24, pp. 2787-802.
- Worster, G. **Solidification of an Alloy from a cooled Boundary.** *Journal of Fluid Mechanics*, 1986, vol. 167, pp. 481-501.
- Ynoue, M. e Garcia, A. **Modelagem da Macrossegregação Inversa na Solidificação.** *Anais do 47º Congresso Anual da Associação Brasileira de Metais (ABM)*, 1992, vol.2, pp.321-43.
- Youdelis, W. V. e Colton, D. R. **Inverse Segregation in Aluminum-Zinc Ingots.** *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, 1964, vol. 218, pp. 628-31.

Teses

Martorano, M. A. – Efeitos de Algumas Variáveis de Processo na Microsegregação da Liga Cu-8%Sn. Tese de doutorado, Escola Politécnica-USP, São Paulo, 1998.

Ynoue, M. – Modelagem Matemática da Solidificação de Ligas Binárias com Aplicação no Cálculo da Macrossegregação Inversa. Dissertação de mestrado, UNICAMP, Campinas-São Paulo, 1992.

Livros

Flemings, M. C. - **“Solidification Processing”**. Editora McGraw-Hill, New York, 1974.

Garcia, A. - Solidificação: Fundamentos e Aplicação. Editora da Unicamp, Campinas, 2001.

Crank, J. - **“Free and Moving Boundary Problems”**. Clarendon Press, New York, 1984.

Press, W. H. - **“Numerical Recipes in Fortran 90: The art of Parallel Scientific Computing”**.
Cambridge University Press, 1996, pp. 41-54.

Versteeg, H. K. e MalalaSekera, W. – **“An Introduction to Computational Fluid Dynamics, The Finite Volume Method”**. Longman Scientific and Technical, England, 1995, pp. 243-44.

I) Anexos – Função Erro

Definições e propriedades da função erro (erf) e da função erro complementar ($erfc$) [Garcia, 2001].

(a) Definição:

$$erf(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-u^2) du$$

$$erfc(z) = 1 - erf(z) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-u^2) du$$

(b) Propriedades:

$$erf(-z) = -erf(z)$$

$$erf(0) = 0$$

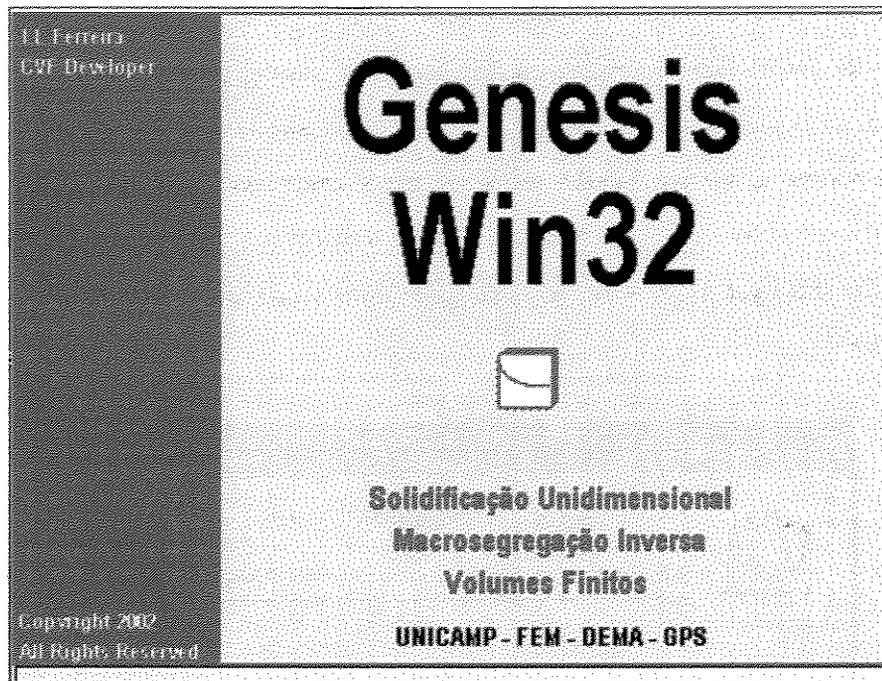
$$erf(\infty) = 1$$

$$erf(-\infty) = -1$$

(c) Derivada:

$$\frac{d}{dz} erf(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-u^2) du$$

GenesisWin32 h_g – Versão 2.0

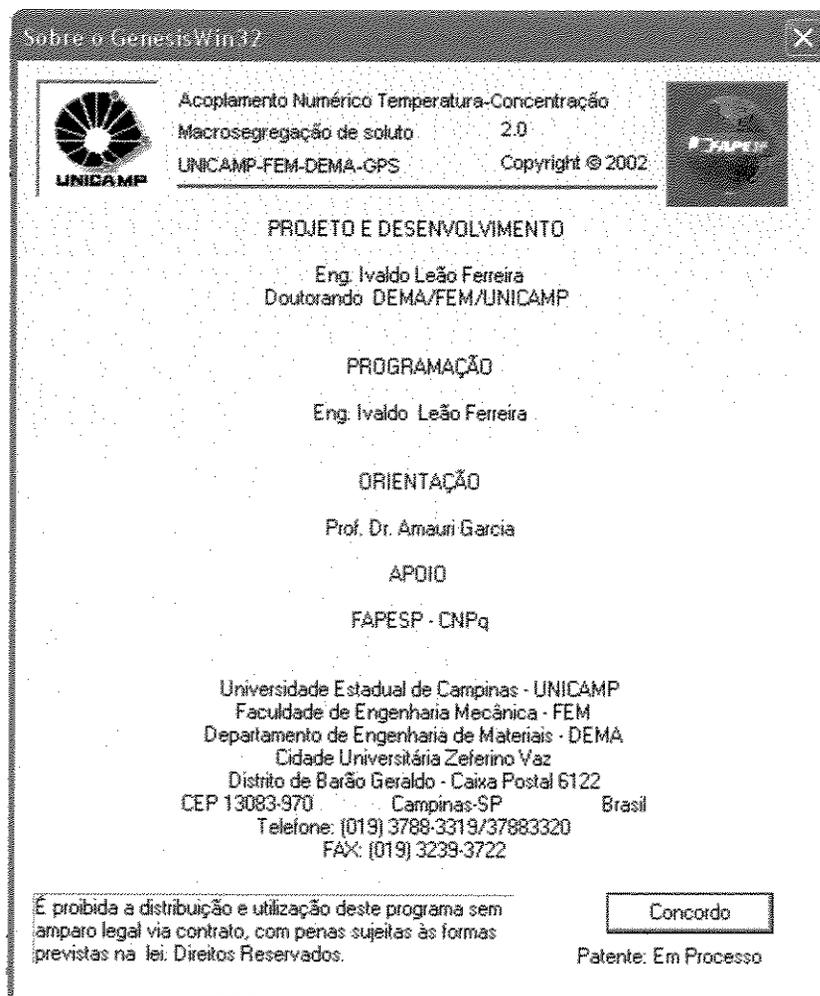


Ivaldo Leão Ferreira

Amauri Garcia

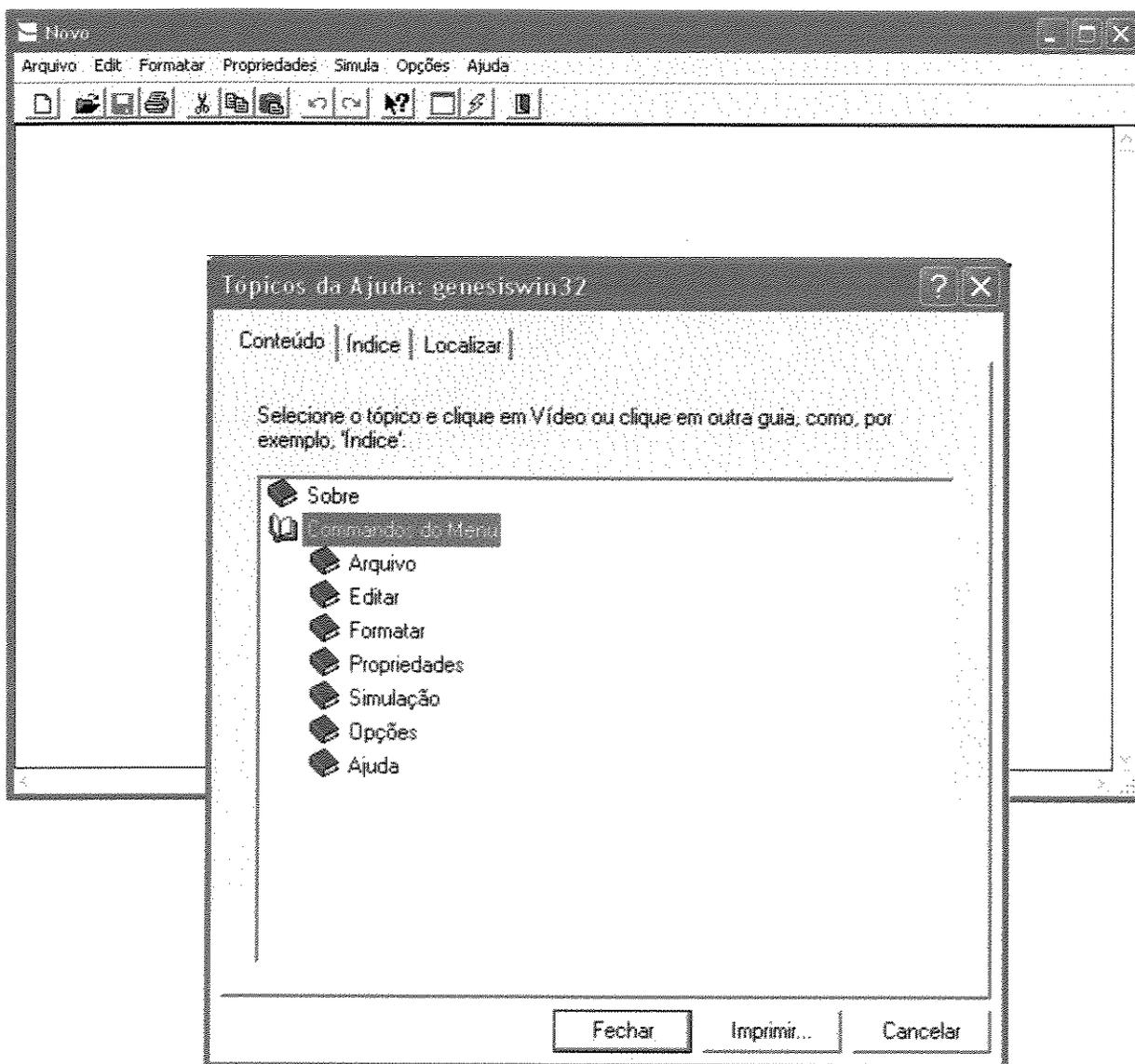
Junho/2004

Este tutorial objetiva instruir o usuário da manipulação do programa **GenesisWin32 h_g**, o que trata de um modelo matemático aplicado ao fenômeno da solidificação unidirecional de ligas binárias, considerando o processo transferência de calor, redistribuição de soluto, campo de velocidade, calculo do coeficiente de transferência de calor metal/fluido e tratamento generalizado da forma de extração da concentração local a partir do campo massa específica de soluto, por meio de um modelo de micro-escala. Todos os passos, procedimentos e parâmetros de entrada para o modelo são descritos a seguir. Os resultados são apresentados na forma de tabelas em diversos arquivos distintos, sendo os dois mais empregados o **win32_evoluc.dat** que apresenta a distribuição de temperatura dos termopares em função do tempo e **win32_concmedia.dat** que representa a saída da distribuição de concentração de soluto em função da posição.



A tela inicial do programa é composta por um editor de texto, onde serão geradas informações de simulação, inclusive data, hora e o tempo de CPU utilizado no processamento.

O programa segue os padrões do Microsoft Windows, com exceção das teclas  que significam propriedades ou escolha das ligas e caixa de diálogo de execução de simulação numérica respectivamente. O programa também é provido de ajuda **online**.



Menu Arquivo:

Novo: Limpa memória e inicia um novo documento. Se houver alguma informação na memória, o programa iniciará a caixa de diálogo para o usuário, se assim o desejar, salvar o documento existente antes que a venha a ser limpa.

Abrir: Abre um arquivo texto existente. O arquivo poderá ser um criado utilizando o editor do **GenesisWin32** ou qualquer editor de texto padrão, contanto que o arquivo tenha sido salvo como arquivo texto.

Fechar: Fecha o arquivo corrente.

Salvar: Salva uma cópia da janela corrente como arquivo texto. O arquivo está no formato ASCII e pode ser aberto pelo **GenesisWin32** (desde que tenha no máximo 128 kb) ou qualquer outro processador de texto padrão.

Salvar Como: Salva como uma cópia da janela corrente aberta com formato de arquivo texto. O arquivo está no formato ASCII e pode ser aberto pelo **GenesisWin32** (desde que tenha no máximo 128 kb) ou qualquer outro processador de texto padrão.

Imprimir: Seleciona a impressora e as opções de impressão que o usuário deseja. Então imprime o arquivo.

Configurar a Página: Muda a aparência do documento impresso. O usuário pode estabelecer as margens e o tamanho do papel. Para imprimir um documento verticalmente, marque a botão **Vertical** e, para imprimir horizontalmente, marque o botão **Horizontal**.

Arquivos Recentes: Uma lista de quatro arquivos que podem ser abertos. Selecione um dos arquivos com o mouse para abri-lo.

Sair: Para a execução do programa. O programa irá abrir uma caixa de diálogo perguntando se o conteúdo da janela é para ser salvo antes que a janela seja fechada.

Menu Editar:

Desfazer: Desfaz a última ação. que pode ser um desfazer de um desfazer, que é na verdade um refazer.

Cortar: Corta o texto selecionado e o coloca na área de transferência de tal forma que pode ser colocado em outro lugar.

Copiar: Copia o texto selecionado para a área de transferência para colar em outro lugar.

Colar: Passa o conteúdo da área de transferência dentro de um texto na posição corrente do cursor. O texto que se encontra na área de transferência será proveniente de uma ação de cópia ou corte anterior.

Apagar: Apaga qualquer texto selecionado.

Selecionar Tudo: Seleciona o texto inteiro num documento.

Procurar: Utilizado para encontrar um conjunto de caracteres específicos ou palavras. A procura se dá da posição corrente do cursor para baixo.

Substituir: Caractere ou palavra num texto a ser encontrado e substituído por outro. Pressione **Substituir** para substituir a próxima ocorrência. Pressione **Substituir Tudo** para substituir todas as ocorrências em somente uma operação

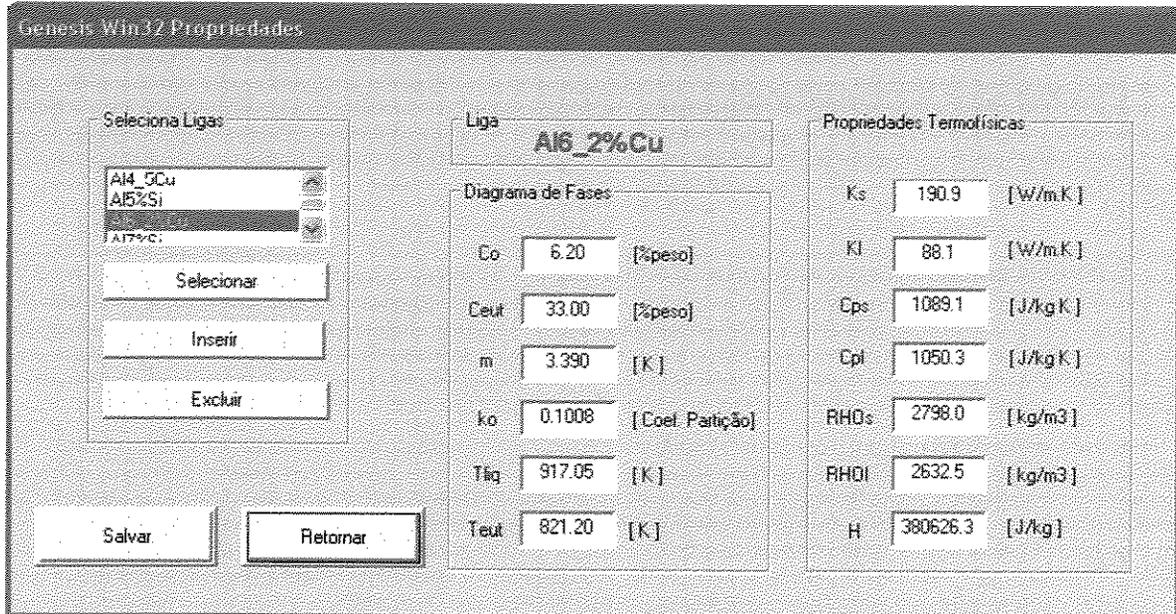
Menu Formatar:

Fonte: Utilizado para selecionar o tipo, o tamanho e os efeitos da fonte. A amostra de fonte selecionada é impressa numa caixa de diálogo conforme seleção do usuário.

Menu Propriedades:

Dados Termofísicos: Utilizado para selecionar, adicionar e apagar arquivos de ligas. Também permite alterar as propriedades termodinâmicas das ligas.

A tela **Seleciona Ligas** é constituída de um menu que permite selecionar ligas já existentes, incluir novas ligas e apagá-las. A tela **Liga** mostra a liga selecionada e permite inclusão de novas ligas toda vez que o botão **Incluir** for pressionado. A tela **Diagrama de Fases** permite alterar os valores referentes ao diagrama de fases. A tela **Propriedades Termofísicas** permite alterar as propriedades da referida liga. O botão **Salvar**, permite salvar as propriedades alteradas. O botão **Retornar**, volta ao menu principal salvando somente na memória as alterações realizadas.



□ *Co*

Concentração nominal da liga em *%peso* de elemento de liga.

- C_{eut}
Concentração no ponto eutético em $\%peso$ de elemento de liga.
- m
Coeficiente angular da linha liquidus em K .
- k_o
Coeficiente de partição. É a relação entre a concentração do sólido e a concentração do líquido.
- T_{liq}
Temperatura liquidus da liga em K .
- T_{eut}
Temperatura eutética da liga em K .
- k_s
Condutividade térmica do sólido em W/mK .
- k_l
Condutividade térmica do líquido em W/mK .
- C_{ps}
Calor específico do sólido em J/kgK .
- C_{pl}
Calor específico do líquido em J/kgK .

- C_{eut}
Concentração no ponto eutético em %*peso* de elemento de liga.

- m
Coeficiente angular da linha liquidus em K .

- k_o
Coeficiente de partição. É a relação entre a concentração do sólido e a concentração do líquido.

- T_{liq}
Temperatura liquidus da liga em K .

- T_{eut}
Temperatura eutética da liga em K .

- k_s
Condutividade térmica do sólido em W/mK .

- k_l
Condutividade térmica do líquido em W/mK .

- C_{ps}
Calor específico do sólido em J/kgK .

- C_{pl}
Calor específico do líquido em J/kgK .

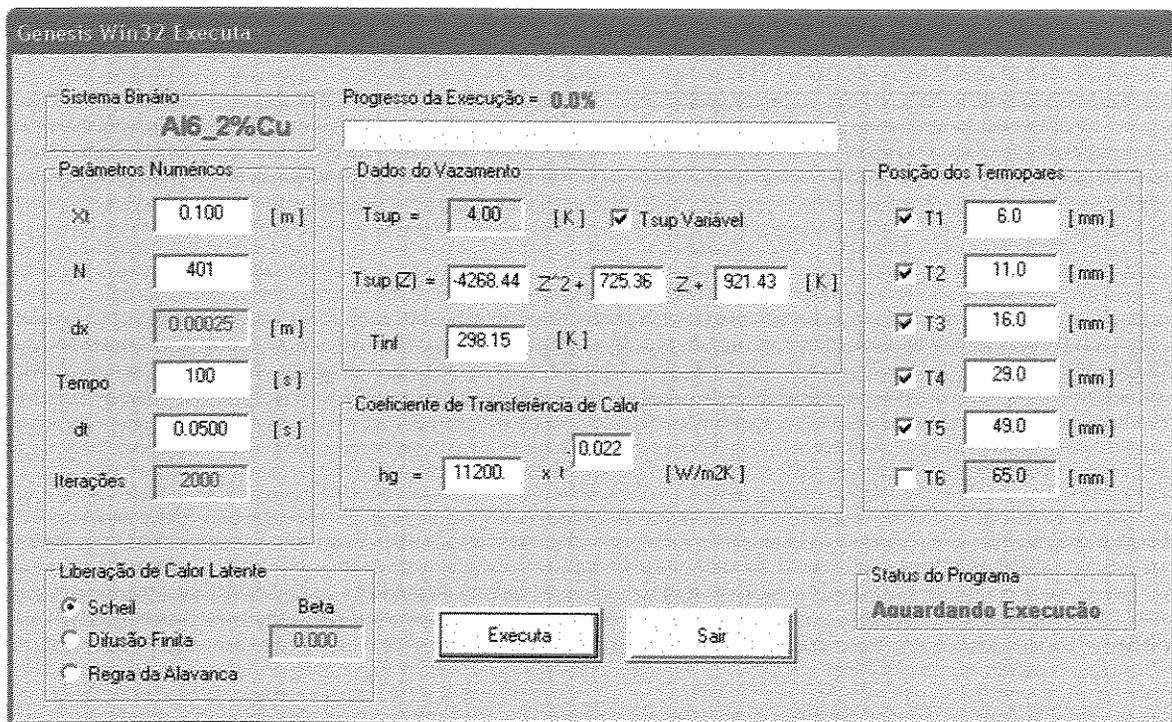
- ***RHOs***
Massa específica do sólido em kg/m^3 .

- ***RHOl***
Massa específica do líquido em kg/m^3 .

- ***ΔH***
Calor latente em J/kg .

Menu Simulação:

Executar: Utilizado para estabelecer os parâmetros numéricos envolvidos na simulação e para iniciar e acompanhar o processo de simulação. A tela **Sistema Binário** mostra o sistema binário selecionado anteriormente. A tela **Parâmetros Numéricos** contém dados referentes ao modelo de elementos finitos quanto a discretização ou divisão espacial e temporal. A tela **Liberção de Calor Latente**, possui informação relacionada a forma com a qual o calor latente é liberado, a regra da alavanca possui beta igual a um, a regra de Scheil possui beta igual a zero, e a difusão finita possui parâmetro beta maior que zero e menor que 1.0, estando relacionado com a difusão de retorno no sólido. A caixa de diálogo **Liberção de Calor Latente** aplica um valor de beta igual a 0,5 automaticamente. Todavia, ao aplicar difusão finita, o edit Box **Beta** é habilitado podendo desta forma o usuário alterar o valor do referido parâmetro. Os itens **Progresso da Execução** e a **Barra de Progresso** estão relacionados ao avanço temporal da execução do modelo numérico. A tela **Status do Programa** fornece o estado que se encontra a simulação.



- Xt
Comprimento total da placa em metros.
- N
Número de divisões espaciais da placa, deve ser um número a mais que o de divisões. Ex. 10 divisões $\rightarrow N=11$. N nunca deve ser menor que 101 nós, para que haja convergência do modelo e os resultados fornecidos aproximem-se dos experimentalmente obtidos.
- dx
Incremento infinitesimal de espaço. Este valor é apresentado somente para leitura.

- ***Tempo***
 - Duração do total ou parcial do processo de solidificação fornecido pelo usuário. Para se obter o gradiente e a posição da isoterma liquidus, aconselha-se que esta isoterma alcance pelo menos 70 % da extensão total do lingote.

- ***dt***
 - Incremento infinitesimal de tempo em segundos.

- ***Iterações***
 - Número de iterações temporais. Este valor não está relacionado ao processo iterativo total da solução do conjunto de equações diferenciais apresentados por Voller, 1998. O valor total de iterações pode ser encontrado no arquivo de saída do programa “C:\temp\Win32_var.dat”.

- ***Tsup***
 - É a diferença entre a temperatura de vazamento e a temperatura liquidus.

- Botão ***Tsup Variável***
 - Habilita o superaquecimento variável permanecendo a diferença entre a faixa de temperatura (temperatura obtidas experimentalmente nos termopares em relação a base) de vazamento e a temperatura liquidus.

- ***Tsup (z)***
 - É a diferença entre a faixa de temperatura de vazamento (temperaturas obtidas experimentalmente nos termopares em relação à base) e a temperatura liquidus. A distribuição de temperatura ao longo dos termopares foi verificada experimentalmente como sendo uma quadrática.

- ***Tinf***
 - Temperatura do fluido refrigerante em kelvin.

□ h_g

Coefficiente de global de transferência de calor em W/m^2K . Os coeficientes são multiplicador, valor inicial do h_g , e o expoente, grau de inclinação do coeficiente .

□ $T1$ a $T6$

Permite que sejam habilitados seis termopares, nas posições em [mm] selecionadas pelo usuário na tela **Posição dos Termopares**. Deve-se obedecer ao comprimento máximo da placa Xt , digitado na tela **Parâmetros Numéricos**.

Menu Opções:

Molde: Escolha quanto ao tipo de molde, ou seja, se é finito ou semi-infinito.

Menu Ajuda:

Conteúdo: Mostra informação concernente ao **Menu de Comandos** para a plataforma **GenesisWin32**.

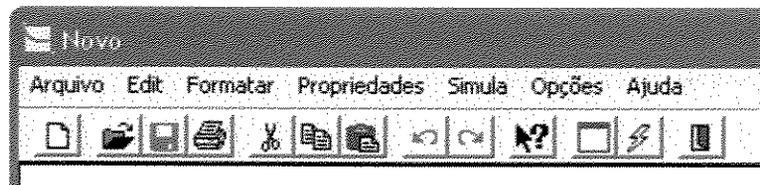
Procurar Ajuda sobre: Procura itens relacionados ao programa e ao modelo numérico, tais como variáveis e arquivos.

Como usar a Ajuda: Ensina passo a passo como se deve utilizar o arquivo de ajuda.

Sobre o Genesiswin32: Mostra os direitos de propriedade do programa bem como endereço e telefones de contato do Grupo de Pesquisa em Solidificação da Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP.

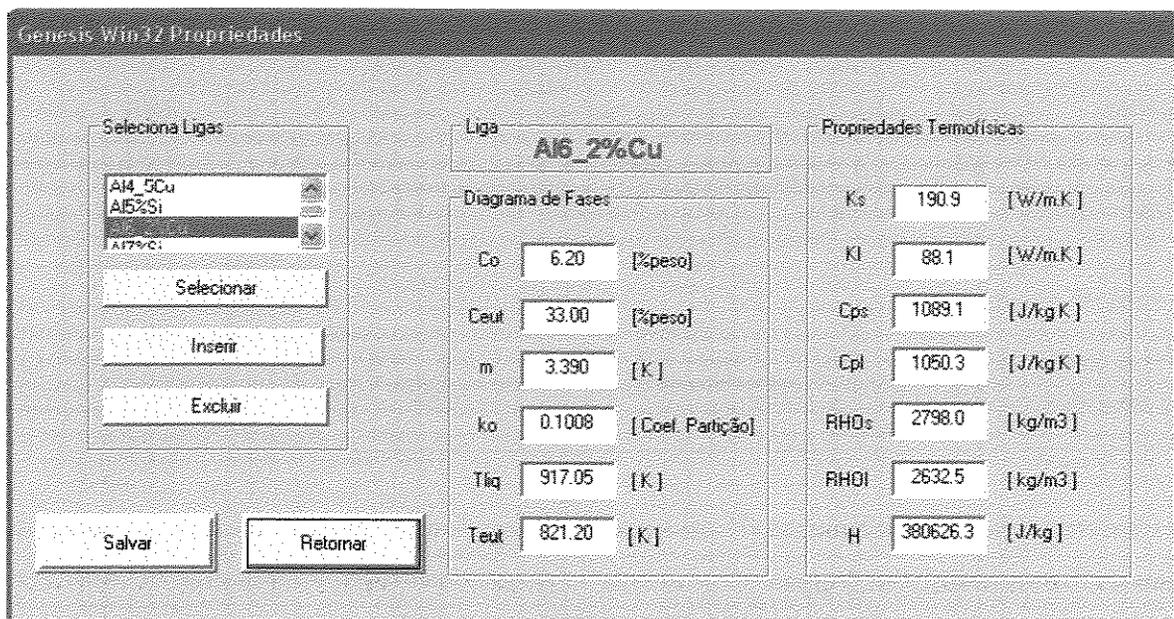
Barra de Ferramentas

A barra de ferramentas é dotada de ícones que têm as mesmas funções dos itens da barra cascata, sendo em ordem da esquerda para a direita: novo, abrir, salvar, impressora, recortar, copiar, colar, desfazer, refazer, informação, propriedades, executar e sair. Para facilitar, quando se passa o mouse devagar sobre estes ícones, a sua função aparece automaticamente.



Cadastramento de Ligas

Antes de entrar com os dados operacionais para a simulação, é interessante primeiramente cadastrar os materiais para o molde e para o metal, segundo ilustra a figura a seguir.

A screenshot of the 'Genesis Win32 Propriedades' dialog box. It is divided into three main sections: 'Seleciona Ligas', 'Liga', and 'Propriedades Termofísicas'.
1. 'Seleciona Ligas': A list box containing 'Al4_5Cu', 'Al5%Si', and 'Al7%Cu'. Below the list are buttons for 'Selecionar', 'Inserir', and 'Excluir'.
2. 'Liga': A text box containing 'Al6_2%Cu'. Below it is a 'Diagrama de Fases' section with several input fields:
- Co: 6.20 [%peso]
- Ceut: 33.00 [%peso]
- m: 3.390 [K]
- ko: 0.1008 [Coef. Partição]
- Tliq: 917.05 [K]
- Teut: 821.20 [K]
3. 'Propriedades Termofísicas': A table of physical properties:
- Ks: 190.9 [W/m.K]
- Kl: 88.1 [W/m.K]
- Cps: 1089.1 [J/kg.K]
- Cpl: 1050.3 [J/kg.K]
- RHOs: 2798.0 [kg/m3]
- RHOl: 2632.5 [kg/m3]
- H: 380626.3 [J/kg]
At the bottom of the dialog are 'Salvar' and 'Retornar' buttons.

Para a inserção de uma nova liga basta somente pressionar inserir e o campo “liga” se tornará um caixa de edição que permite a entrada do nome da nova liga. Quanto aos botões **excluir** e **selecionar** são auto-explicativos. O primeiro exclui uma determinada liga selecionada e o segundo selecionar uma determinada liga para a simulação.

As suas propriedades devem ser inseridas no Sistema Internacional de Unidades (SI), segundo as unidades mostradas ao lado de cada entrada.

Ao finalizar pressiona-se a tecla **Salvar** e em seguida a tecla **Retornar**.

Simulação de Solidificação

A tela abaixo mostra as opções de simulação conforme descritas anteriormente na seção **Menu de Execução**:

The screenshot shows the 'Genesis Win32 Executa' window. At the top, it displays 'Sistema Binário' as 'Al6_2%Cu' and 'Progresso da Execução = 0.0%'. The interface is divided into several sections:

- Parâmetros Numéricos:** Includes fields for X_l (0.100 [m]), N (401), dx (0.00025 [m]), **Tempo** (100 [s]), dt (0.0500 [s]), and **Iterações** (2000).
- Dados do Vazamento:** Shows $T_{sup} = 4.00$ [K] with a checkbox for 'Tsup Variavel'. Below it, a quadratic equation for $T_{sup}(Z)$ is displayed: $T_{sup}(Z) = -4268.44 Z^2 + 725.36 Z + 921.43$ [K]. The T_{inf} is set to 298.15 [K].
- Coefficiente de Transferências de Calor:** Shows $h_g = 11200 \times t^{0.022}$ [W/m²K].
- Posição dos Termopares:** A list of six temperature points (T1 to T6) with their positions in mm: T1 (6.0), T2 (11.0), T3 (16.0), T4 (29.0), T5 (49.0), and T6 (65.0). All are checked.
- Liberção de Calor Latente:** Three radio buttons: 'Scheil' (selected), 'Difusão Finita', and 'Regra da Alavanca'. A 'Beta' field is set to 0.000.
- Status do Programa:** A box indicating 'Aguardando Execução'.
- Buttons:** 'Executa' and 'Sair' buttons are located at the bottom center.

O sistema binário selecionado é mostrado em azul. Logo abaixo se tem os **menu de parâmetros numéricos**, relacionados ao tamanho da malha espacial e temporal, ao tempo de simulação e ao comprimento do lingote.

O menu seguinte relaciona-se a que tipo de regra de liberação de calor latente está presente na zona pastosa: se regra de Scheil (Al-Cu), regra da alavanca (Aços) e difusão finita no sólido (a grande maioria dos sistemas binários).

O progresso da execução é medida por uma barra percentual e por um valor explicitado acima da mesma.

O menu **dados de vazamento** diz respeito ao superaquecimento em que a liga foi vazada (se constante ou variável ao longo do lingote) e a temperatura do fluido de refrigerante.

Quanto ao coeficiente global de transferência de calor metal/fluido deve-se observar a unidade de entrada e a forma descrita neste trabalho, ou seja, $h_g = a^{t-b'}$ em [W /m² K], onde a' e b' são constantes reais e positivas.

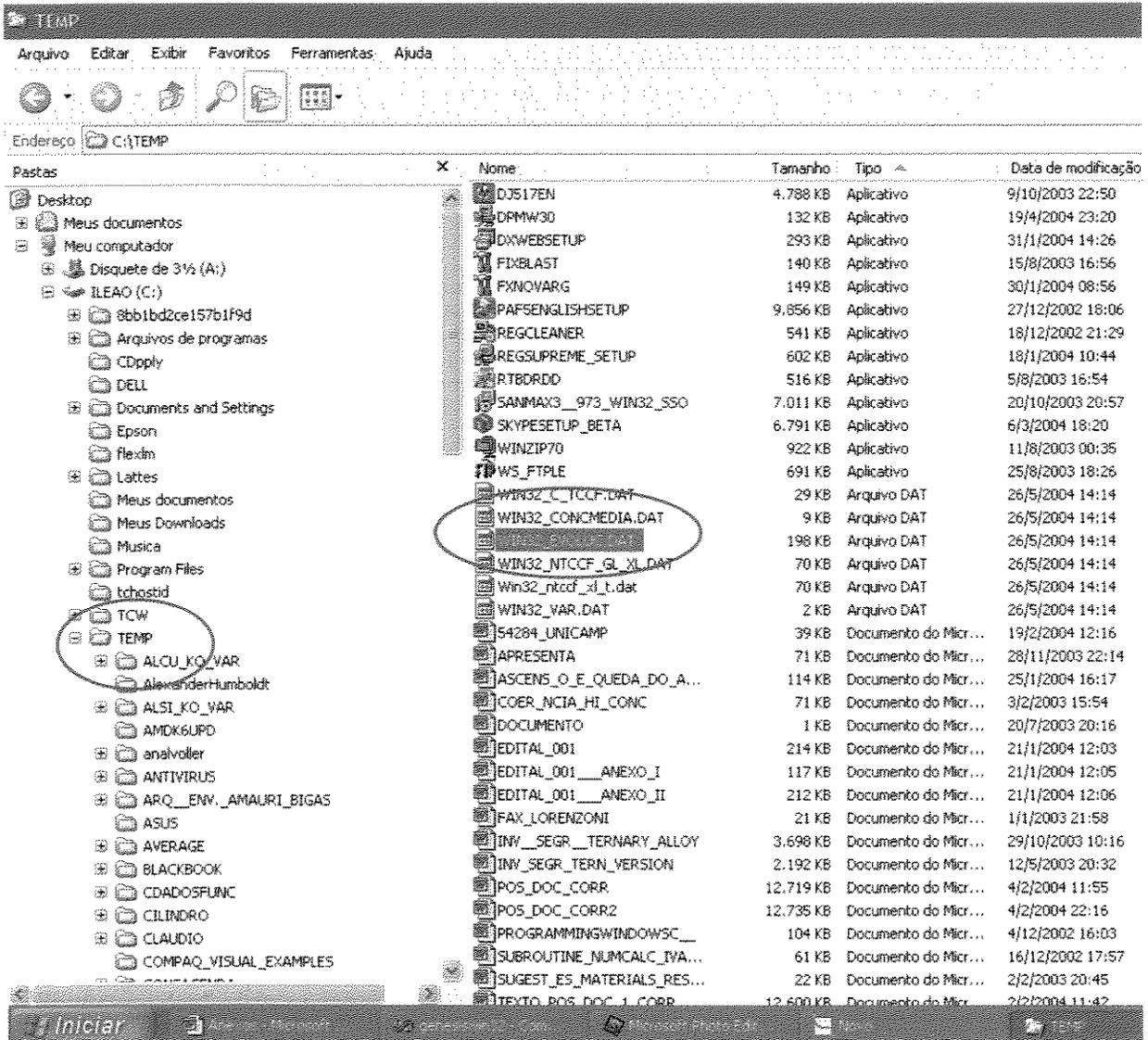
As ativações das posições dos termopares, bem como os seus valores ao longo do lingote, estão disponíveis no **menu de termopares**, onde, por questão de praticidade, optou-se pela entrada das posições em milímetros [mm].

Finalmente, tem-se a última caixa de texto que está relacionada ao status do sistema em vermelho, podendo ser três: “Aguardando Simulação”, “Simulação em Andamento” e finalmente “Simulação Concluída”.

Pós-Simulação

Os resultados calculados são apresentados na forma de vários arquivos sendo: temperaturas em “Win32_evoluc.dat”, concentração de soluto no sólido em “Win32_concmedia.dat”, gradiente liquidus em função da posição em “Win32_ntccf_gl_xl.dat”, posição da isoterma liquidus em função do tempo em “Win32_ntccf_xl_t”, todas as variáveis provenientes da solução das equações diferenciais estão no arquivo “Win32_c_tccf.dat” e, finalmente, o resumo da simulação encontra-se no arquivo “Win32_var.dat”.

Os arquivos são criados no diretório **C:\TEMP**. No caso dos perfis térmicos, o arquivo **“Win32_evoluc.dat”** apresenta a primeira coluna como sendo o tempo em [s], a segunda coluna corresponde à temperatura em [°C] do termopar da primeira posição que foi introduzida na tela de entrada de dados, a terceira coluna a temperatura do segundo termopar, e assim por diante.



Realizada uma simulação, é necessário re-nomear o arquivo resultado gerado Win32_evoluc.dat antes de rodar outra simulação, caso contrário, o resultado da nova simulação irá ser salvo em cima do resultado anterior.

