

TESE DEFENDIDA POR JOSÉ MARIA DO VALE
Quaresma E APROVADA PELA
COMISSÃO JULGADORA EM 02/02/1999.

Amauri Garcia
Prof. AMAURI GARCIA
Matric. 03607-2
FEM UNICAMP

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA

Correlação entre Condições de Solidificação, Microestrutura e Resistência Mecânica

Autor: José Maria do Vale Quaresma
Orientador: Prof. Dr. Amauri Garcia

04/99

1999

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE MATERIAIS

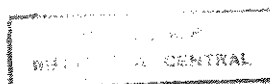
Correlação entre Condições de Solidificação, Microestrutura e Resistência Mecânica

Autor: **José Maria do Vale Quaresma**
Orientador: **Prof. Dr. Amauri Garcia**

Curso: Engenharia Mecânica
Área de Concentração: Materiais e Processos de Fabricação

Tese de Doutorado apresentada à Comissão de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia Mecânica, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Campinas, 1999
S.P. - Brasil



UNIDADE	BC
N.º CHAMADA:	
V.	
TOMOD B.	37938
PROC.	229/99
D	☒
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	17/06/99
N.º CPD	

CM-00124353-3

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

Q26c

Quaresma, José Maria do Vale

Correlação entre condições de solidificação,
microestrutura e resistência mecânica / José Maria do
Vale Quaresma.--Campinas, SP: [s.n.], 1999.

Orientador: Amauri Garcia.

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

1. Solidificação. 2. Microestrutura. 3. Calor –
Transmissão – Modelos matemáticos. 4. Materiais –
Deformações. 5. Deformações (Mecânica). I. Garcia,
Amauri. II. Universidade Estadual de Campinas.
Faculdade de Engenharia Mecânica. III. Título.

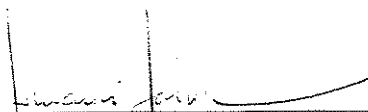
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE MATERIAIS

TESE DE DOUTORADO

**Correlação entre Condições de Solidificação,
Microestrutura e Resistência Mecânica**

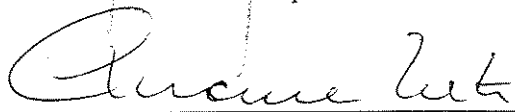
Autor: José Maria do Vale Quaresma

Orientador: Prof. Dr. Amauri Garcia



Prof. Dr. Amauri Garcia, Presidente

Universidade Estadual de Campinas – Faculdade de Engenharia Mecânica



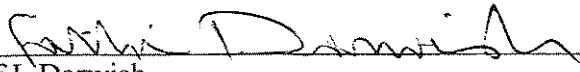
Prof. Dr. Carlos de Moura Neto

Instituto Tecnológico de Aeronáutica – ITA



Prof. Dr. Francisco Cristovão Lourenço de Mello

Centro Técnico Aeroespacial – CTA



Prof. Dr. Fathi Aref I. Darwish

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro – PUC/RIO



Profa. Dra. Maria Clara Filippini Ierardi

Universidade Estadual de Campinas – Faculdade de Engenharia Mecânica

Campinas, 02 de fevereiro de 1999

Dedicatória

Dedico este trabalho à memória de meu pai e grande amigo,

Sátiro Araújo Quaresma,

à minha mãe que cuidou de mim com grande carinho,

Lauriveis Maria do Vale Quaresma,

à minha amada esposa e paciente companheira,

Emília Adelaide Christino Quaresma,

e a meus filhos muito queridos e treinadores da minha paciência,

Alexandre José Christino Quaresma

José Maria do Vale Quaresma Júnior.

Agradecimentos

Ao longo desta jornada, que acredito vitoriosa, interfaciei com os mais variados e diferentes tipos de indivíduos, que em alguns momentos cheguei até a estigmatizar. Entretanto, ao terminá-la contemplo os momentos de convívio e percebo a minha ingratidão e egoísmo. Hoje, quatro anos mais maduro e agradecido pela ajuda recebida, sou consciente de que, se mais não me foi dado, deve-se ao meu pouco merecimento.

Portanto, agradeço a todos aqueles que direta ou indiretamente contribuíram para o meu atual sucesso.

À **CAPES/PICD/UFPa**, pela minha liberação e apoio financeiro.

À **FAEP e FAPESP** pelo apoio financeiro dado aos projetos de pesquisa coordenados pelo **Prof. Dr. Amauri Garcia do DEMA/FEM/UNICAMP** e dos quais fiz parte e recebi todo apoio.

Ao **Prof. Dr. Amauri Garcia**, pelo tema abrangente e interessante, pela orientação, apoio, incentivo e principalmente pela amizade demonstrada ao longo do desenrolar dos trabalhos.

Aos professores do **DEMA** que pelo interesse comum e amizade estiveram sempre próximos, **Maria Clara Ierardi, Roberto Assumpção, Cecília Zavaglia, Resende dos Santos**.

Aos funcionários da **FEM** nas Secretarias da Pós Graduação e do **DEMA** e no Laboratório de Metalografia e Oficina Mecânica.

Aos amigos e companheiros **Carlos A. Santos, Noé Cheung e Wislei R.R. Osório**, pelas valiosas colaborações, discussões, sugestões e apoio no desenvolvimento dos experimentos.

Aos amigos **Wilton Furquim**, pela dedicação na elaboração dos desenhos, e **Marco Olivio Sotelo**, pela dedicação na elaboração das transparências e no manuseio do *datashow* na defesa da tese.

Ao **Dr. Jaime A. Spim Júnior**, pela elaboração do programa que permitiram as simulações numéricas.

Aos amigos **André, Enrico, Plínio, Tácito, Luiz Carlos, Ulisses** e todos os outros, que por muitas vezes contribuíram com idéias ou com seu companheirismo, inestimável espírito de solidariedade e agradável convívio diário.

Ao meu mentor espiritual que ao longo deste meio século de existência tem laboriosamente me regido e guardado maravilhosamente a despeito de minhas teimosia e intransigência.

A **DEUS** por tudo.

PODES

Só **Deus** é a Providência,
Mas podes ser o auxílio,

Só **Deus** é a luz,
Mas podes ser a lâmpada,

Só **Deus** é o Amor integral,
Mas podes ser a bênção,

Só **Deus** é a alegria Perfeita,
Mas podes ser o sorriso,

Só **Deus** é a sabedoria,
Mas podes ser a boa palavra,

Só **Deus** é Tudo no bem,
Mas podes ser a migalha.

EMMANUEL

Sumário

	Paginas
Capítulo 1	1
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Considerações Gerais	1
1.2 Objetivos do Trabalho	8
Capítulo 2	10
2 MICROESTRUTURA DE SOLIDIFICAÇÃO	10
2.1 A Partição de Solute	14
2.1.1 Solidificação sob condições de equilíbrio	16
2.1.2 Solidificação fora de equilíbrio	19
A) Redistribuição de soluto no líquido apenas por difusão	20
B) Redistribuição de soluto por mistura completa no líquido	24
B ₁) sem difusão de retorno no sólido	24
B ₂) com difusão de retorno no sólido	28
B _{2.1}) quando se considera a velocidade da interface sólido/líquido constante	30
B _{2.2}) quando se considera a velocidade da interface sólido/líquido parabólica	32
C) Redistribuição de soluto no líquido por difusão parcial	37

2.2	A Estabilidade da Interface Sólido/Líquido	41
2.2.1	CrITÉrio de de Estabilidade do Superesfriamento	
	Constitucional (SRC)	41
2.2.2	CrITÉrio de Estabilidade Morfológica de Mullins/Sekerka	46
2.3	Formação da Microestrutura	52
2.4	Modelos de Crescimento Dendrítico	60
2.4.1	Espaçamento Dendrítico Primário (EDP)	61
	A) Modelos teóricos para espaçamento	
	dendrítico primário (EDP)	62
	Modelo de Hunt	62
	Modelo de Kurz	63
	Modelo de Trivedi	64
	Modelo de Bouchard/Kirkaldy	64
	B) Modelos experimentais para espaçamento	
	dendrítico primário (EDP)	65
	Modelo de Young/Kirkwood	65
	Modelo de McCartney/Hunt	65
	Modelo de Bouchard/Kirkaldy	66
2.4.2	Espaçamento Dendrítico Secundário (EDS)	66
	A) Modelos teóricos para espaçamento	
	dendrítico secundário	68
	Modelo de Kurz/Fisher	68
	Modelo de Feurer	70
	Modelo de Kirkwood	72
	Modelo de Bouchard/Kirkaldy	72
	Modelo de Trivedi	73
	Modelo de Mortensen	74
	Modelo de Voorhees	75
	B) Modelos experimentais para espaçamento	
	dendrítico secundário (EDS)	76
	Modelo de Suzuki	76

Modelo de Bower et al	76
Modelo de Jacobi	77

Capítulo 3	78
------------	----

3	MODELAGEM MATEMÁTICA DA SOLIDIFICAÇÃO	78
3.1	Modelos Análogos	83
3.2	Modelos Experimentais	84
3.2.1	Modelo de Pires, Prates e Biloni	85
3.2.2	Modelo de Santos e Prates	86
3.2.3	Modelo de Gulyeaev	87
3.3	Modelos Analíticos	88
3.3.1	Modelos Analíticos Exatos	88
A)	Modelo de Schwarz	93
B)	Modelo de Neumann	93
C)	Modelo de Lightfoot	93
D)	Modelo de Lyubov	94
E)	Modelo de Stefan	94
F)	Modelo de Chvorinov	95
3.3.2	Modelos Analíticos Aproximados	96
G)	Modelo de Adams London/Seban	99
H)	Modelo de Mergelin e Hills	100
I)	Modelo de Hrycak	100
3.4	Modelos Numéricos	101
3.5	Modelo Analítico para Análise da Solidificação Unidirecional de Ligas Binárias em Moldes Maciços	106
3.5.1	Hipóteses Básicas de Caráter Físico Assumidas	108
3.5.2	Correlação entre o Sistema Virtual e o Sistema Real	108
3.5.3	Condições de Contorno aplicadas ao Sistema	109
3.5.4	Cinética de Solidificação	110
3.5.4.1	Evolução da Isoterma Solidus	110

3.5.4.2	Evolução da Isoterma Liquidus	111
3.5.5	Determinação dos Perfis Térmicos durante a Solidificação	113
3.5.5.1	Perfil Térmico no Molde	113
3.5.5.2	Perfil Térmico no Metal Sólido	115
3.5.5.3	Perfil Térmico na Região Pastosa ou Mushy Zone	116
3.5.5.4	Perfil Térmico no Metal Líquido	118
3.5.6	Determinação da Temperatura de Equilíbrio na Interface Metal/Molde (T_i)	119
3.5.7	Determinação de S_0 , L_0 e E_0	121
3.5.8	Determinação das Constantes ϕ_1 e ϕ_2	126
3.5.9	Taxa de Resfriamento (T) [*]	130
3.5.9.1	Cinética de deslocamento das Isotermas Solidus e Liquidus	131
3.5.9.2	Gradientes Térmicos (G)	132
I-	Metal Líquido Vazado com Superaquecimento ($\Delta T > 0$)	133
II-	Metal Vazado sem Superaquecimento ($\Delta T = 0$)	135
3.5.9.3	Taxa de Resfriamento no Metal Sólido [*] (T_1)	137
3.5.9.4	Taxa de Resfriamento na Região Pastosa [*] (T_2)	139
3.5.9.5	Taxa de Resfriamento no Metal Líquido [*] (T_3)	141
3.6	Inserção de Parâmetros Térmicos em alguns Modelos de Crescimento Dendrítico	143
3.6.1	Modelo de Hunt	143

i)	para vazamento com superaquecimento ($\Delta T > 0$)	143
ii)	para vazamento sem superaquecimento ($\Delta T = 0$)	144
3.6.2	Modelo de Kurz/Fisher	145
iii)	para vazamento com superaquecimento ($\Delta T > 0$)	145
iv)	para vazamento sem superaquecimento ($\Delta T = 0$)	145
3.6.3	Modelo de Bouchard/Kirkaldy	146
3.6.4	Modelos baseados no Tempo Local de Solidificação (t_{SL})	147
3.6.4.1	Modelo de Feurer	151
a)	caso geral de ligas binárias com qualquer intervalo de solidificação	151
b)	caso de ligas binárias com intervalo de solidificação (ΔT_{SL}) curto	151
3.6.4.2	Modelo de Kurz/Fisher	152
c)	caso geral de ligas binárias com qualquer intervalo de solidificação	152
d)	caso de ligas binárias com intervalo de solidificação (ΔT_{SL}) curto	152
3.7	Modelos Numéricos Aplicados na Solidificação Unidirecional de Ligas Binárias	154
3.7.1	Considerações Gerais	154
3.7.2	Formulação do Modelo Numérico	157
2.7.2.1	Formação da Malha do Modelo de Diferenças Finitas	160
3.7.2.2	Substituição das Derivadas Parciais por Diferenças Finitas	161
3.7.2.3	O Método de Diferenças Finitas no Modo Explícito	165
3.7.2.4	Tratamento da Transformação de Fase	166
3.7.2.5	Analogia entre Sistemas Térmicos e Circuitos Elétricos	169
3.7.2.6	Tratamento das Condições de Contorno	173

Capítulo 4	175
-------------------	------------

4	COEFICIENTES DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR M/M E M/AMB	175
4.1	Definição das Resistências Térmicas na Solidificação	175
4.2	Formação do " Gap " de Ar na Interface Metal/Molde	181
4.3	Determinação de h_i por meio de Cinética de Solidificação Unidirecional	184
4.4	Determinação de h_i por meio de Medidas dos Espaçamentos Dendríticos Secundários	188
4.5	Determinação de h_i por meio de Medidas de temperaturas e Vazão em Moldes Refrigerados	191
4.6	Determinação de h_i por meio de Confronto Teórico/Experimental de Perfis Térmicos	195
4.7	Interface Molde/Ambiente	197

Capítulo 5	202
-------------------	------------

5	ANÁLISE EXPERIMENTAL	202
5.1	Aparato experimental de uso comum	202
5.2	Aparato experimental para determinação de h_{Amb} e h_i	205
5.3	Aparato experimental para determinação de EDS e σ_u	207
5.4	Desenvolvimento experimental para determinação de h_{Amb} e h_i	211
5.4.1	Procedimento experimental com molde de espessura variável	212
5.4.2	Procedimento experimental com superaquecimento (ΔT) variável no metal líquido	212
5.4.3	Procedimento experimental com variação na composição química	212
5.5	Procedimento experimental para determinação de EDS e σ_u	213

Capítulo 6	217
6 RESULTADOS E DISCUSSÕES.	217
6.1 Determinação dos Coeficientes de Transferência de Calor na Interface Molde/Ambiente (h_{Amb})	217
6.2 Determinação dos Coeficientes de Transferência de Calor na Interface Metal/Molde (h_i) para Moldes com Espessura Variável	220
6.3 Determinação dos Coeficientes de Transferência de Calor na Interface Metal/Molde (h_i) para Superaquecimento (ΔT) Variável	224
6.4 Determinação dos Coeficientes de Transferência de Calor na Interface Metal/Molde(h_i) para Composição Química Variável	227
A) Sistema Sn - Pb	227
B) Sistema Al - Cu	229
6.5 Determinação de EDS e σ_u	235
Capítulo 7	253
7 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA PRÓXIMOS TRABALHOS	253
7.1 Conclusões	253
A) Sistema Sn - Pb	253
B) Sistema Al - Cu	255
7.2 Sugestões para próximos trabalhos	260
Referências Bibliográficas	261
Apêndice A	1A
Apêndice B	1B

Lista de Figuras

Capítulo 1

Figura 1.1 - Correlação entre taxa de resfriamento e microestrutura resultante.

Figura 1.2 - Representação esquemática de microestrutura de fundidos.

Capítulo 2

Figura 2.1 - Ilustração esquemática dos dois tipos de interface sólido/líquido e as respectivas morfologias de crescimento dos cristais a partir do núcleo sólido formado (A) interface difusa e (B) interface facetada [Flemings,1974; Prates/Davies, 1978; Kurz/Fisher,1984].

Figura 2.2 - Partes de um diagrama de equilíbrio de ligas binárias ilustrando em (A) caso onde o soluto diminui o ponto de fusão do metal base e em (B) caso onde o soluto eleva o ponto de fusão do metal base [Prates/Davies,1978].

Figura 2.3 - Ilustração esquemática da variação do teor de soluto durante solidificação em equilíbrio em (A) região do diagrama de fases para uma liga de composição C_0 com $K_0 < 1$ e em (B) progresso das proporções e composições do sólido e do líquido [Prates/Davies,1978]..

Figura 2.4 - Esquema ilustrativo da redistribuição de soluto no líquido apenas por difusão em regime permanente.

Figura 2.5 - Ilustração do perfil de soluto para regime permanente e redistribuição de soluto somente por difusão [Prates/Davies,1978].

Figura 2.6 - Esquema ilustrativo da redistribuição de soluto na solidificação com difusão completa no líquido sem difusão de retorno no sólido [Flemings,1974; Kurz/Fisher,1992].

Figura 2.7 - Esquema ilustrativo da interface sólido/líquido para apoio do balanço massa na condição redistribuição de soluto no líquido apenas por difusão.

- Figura 2.8** - Esquema ilustrativo da evolução da interface sólido/líquido para distribuição de soluto por mistura completa no líquido com difusão de retorno no sólido (região A_3) **Kurz/Fisher,1992]**..
- Figura 2.9** - Ilustração da distribuição de soluto na solidificação de ligas binárias com frente de solidificação plana **[Zin,1992]**..
- Figura 2.10** - Esquema ilustrativo do superesfriamento constitucional, (A) Perfil de concentração à frente da interface sólido/líquido decrescente, (B/C) Perfil de temperaturas liquidus à frente da interface sólido/líquido crescente e (D) Região superesfriada constitucionalmente à frente da interface sólido/líquido.
- Figura 2.11** - Arranjo esquemático para análise do critério de estabilidade constitucional em (A) parte de um diagrama de equilíbrio de fases e em (B) balanço de massa na interface sólido/líquido para regime estacionário e sem difusão de soluto no sólido.
- Figura 2.12** - Esquema ilustrativo da propagação das perturbações em uma interface de crescimento estável segundo Mullins e Sekerka **[Mullins/Sekerka, 1964;1965]**.
- Figura 2.13** - Critério de estabilidade versus parâmetro adimensional A **[Mullins/Sekerka, 1964;1965]**.
- Figura 2.14** - Evolução esquemática da morfologia da interface sólido/líquido,(A) sistema com ($K < 1$), (B) gradiente térmico da interface maior do que gradiente térmico da temperatura liquidus, (B_1) interface sólido/líquido associada à condição (B), (C) gradiente térmico da interface menor do que gradiente térmico da temperatura liquidus (situação que ilustra SRC), (C_1) interface sólido/líquido associada à condição (C), segundo Viskanta e Kurz/Fisher **[Viskanta,1988; Kurz/Fisher,1984]**.
- Figura 2.15** - Esquema ilustrativo dos tipos básicos das frentes de solidificação para sistemas metálicos com dois ou mais componentes **[Viskanta,1988]**.
- Figura 2.16** - Variação da microestrutura de ligas Sn-Pb diluídas. Seqüência (A - E) liga Sn- 0,006%Pb (A) interface plana, (B) estrutura difusa, (C) células alongadas (D) células interrompidas (E) células hexagonais e (F) dendritas celulares para liga Sn- 0,2%Pb **[Chalmers,1964]**.
- Figura 2.17** - Variação esquemática da morfologia microestrutural com a velocidade da interface sólido/líquido (V), V_C - velocidade crítica de mudança da interface plana para celular, V_a - velocidade absoluta, quando a morfologia passa de dendrítica para plana **[Kurz/Fisher,1992]**.

Figura 2.18 - Evolução esquemática da morfologia da interface sólido/líquido (A) interface plana, (B) interface passando de plana para não plana [Kurz / Fisher, 1992].

Figura 2.19 - Direções de crescimento esquemáticas (A) morfologia celular (B) morfologia de transição celular dendrita. Tanto o fluxo de calor como o crescimento possuem direções coincidentes e (C) morfologia dendrítica, onde a direção de crescimento é definida por fatores cristalográficos [Flemings,1974; Kurz/Fisher,1992].

Figura 2.20 - Aspecto microestrutural obtidos em seções transversais de lingotes de aço maraging grau 1900 MPa, ilustrando presença de dendritas primárias[Rocha, 1995].

Figura 2.21 - Aspecto microestrutural obtido em seções longitudinais de lingotes de aço maraging grau 1900 MPa, ilustrando presença de dendritas secundárias[Rocha,1995].

Figura 2.22 - Esquema ilustrativo do aspecto morfológico de crescimento dendrítico unidirecional em (A) indicação dos espaçamentos dendríticos primários (λ_1), secundários (λ_2) e terciários (λ_3); e em (B) indicação do aspecto das seções transversais dos planos indicados pelas letras maiúsculas[Rocha,1995].

Figura 2.23 - Ilustração esquemática da etapa de dissolução do fenômeno de engrossamento dos ramos secundários [Flemings,1970; Kurz/Fisher,1984].

Figura 2.24 - Esquema ilustrativo da formação das regiões ricas em soluto no fenômeno do coalescimento dos ramos dendríticos secundários [Chien/Kattamis,1970; Flemings,1974].

Figura 2.25 - Variação da constante M com o percentual em peso de elemento de liga para algumas ligas de alumínio [Feurer,1977].

Tabela 2.1 - Valores de características físicas de ligas de alumínio utilizadas na determinação do parâmetro M [Feurer,1977].

Capítulo 3

Figura 3.1 - Esquema ilustrando detalhes de um sistema metal/molde (A) ação das correntes convectivas no metal líquido, (B) localização de um elemento de referência para a análise da transferência de calor, (C) elemento de referência associado aos modos de transferência de calor durante a solidificação [Prates/Davies,1978].

- Figura 3.2** - Perfis térmicos esquemáticos para sistemas metal/molde (A) $t = 0$ e (B) $t > 0$.
- Figura 3.3** - Perfis térmicos para sistemas metal/molde conforme solução obtida por (A) Schwarz, (B) Neumann e Lightfoot e (C) Lyubov.
- Figura 3.4** - Distribuição esquemática de temperaturas em sistema metal/molde segundo a solução (A) Stefan e (B) Chvorinov.
- Figura 3.5** - Perfil de temperaturas do sistema metal/molde evidenciando o fluxo de calor nas interfaces metal/molde e sólido/líquido.
- Figura 3.6** - Distribuição de temperaturas esquemático em sistema metal/molde segundo as hipóteses assumidas nas soluções de (A) London e Seban, (B) Adams, Mergelin e Hills, e (C) Hrycak.
- Figura 3.7** - Perfil térmico esquemático para sistema metal/molde segundo proposta de A. Garcia [Garcia,1978].
- Figura 3.8** - Evolução esquemática das isotermas solidus e liquidus segundo proposta de A. Garcia [Garcia,1978].
- Figura 3.9** - Perfil térmico esquemático da interface metal/molde para ligas binárias utilizado na determinação de E_0 , S_0 e L_0 segundo a proposta de A. Garcia [Garcia,1978].
- Figura 3.10** - Ábaco esquemático para determinação das constantes ϕ_1 ϕ_2 , segundo proposta de A. Garcia [Garcia,1978].
- Figura 3.11** - Tipos de análise para modelagem do processo de solidificação e suas vantagens [Overfelt,1992].
- Figura 3.12** - Representação da malha de nós num sistema metal/molde unidimensional.
- Figura 3.13** - Representação geométrica das diferenças finitas, (A) Diferença Finita de Avanço do ponto(i), (B) Diferença Finita de Retorno do ponto(i), (C) Diferença Finita centrada no ponto(i).
- Figura 3.14** - Arranjo esquemático ilustrando posições conhecidas e desconhecidas em uma malha de Diferenças Finitas.
- Figura 3.15** - Caracterização Esquemática da Similaridade entre Circuito Térmico (B) e um Circuito Elétrico (C). Em (A) é apresentado esquema ilustrando um elemento de malha e um ponto nodal.

Figura 3.16 - Distribuição esquemática dos elementos do sistema metal/molde, associando aos elementos de malha do MDF, às respectivas resistências térmicas bem como ao conjunto de equações.

Capítulo 4

Figura 4.1 - Esquema ilustrando (A) o sistema metal/molde e as formas de transferência de calor e (B) o perfil térmico ao longo do elemento de estudo associado às formas de transferência de calor em cada caso.

Figura 4.2 - Esquema ilustrativo da evolução da formação do *gap* de ar formado, durante o processo de solidificação, entre o metal e o molde.

Figura 4.3 - Esquema ilustrativo dos instantes iniciais da solidificação. $\Delta T = 0$; $t = 0$.

Figura 4.4 - Esquema ilustrativo para determinação experimental de h_i (A) posição dos termopares em relação ao molde. (B) perfis térmicos relativos às posições dos termopares, $\Delta T = 0$. (C) representação gráfica da média dos valores de t/S em função de S .

Figura 4.5 - Esquema da determinação experimental de h_i a partir de valores de λ_2 . (A) metalografia e medidas de λ_2 por microscopia óptica. (B) variação de λ_2 da superfície ao centro da peça. (C) variação de t_{SL} da superfície ao centro da peça e (D) determinação de h_i a partir de valores de t_{SL} , utilizando-se modelos matemáticos de solidificação.

Figura 4.6 - Esquema ilustrando as resistências térmicas do sistema metal/molde com molde refrigerado.

Figura 4.7 - Ilustração esquemática do procedimento para determinação de h_i através do confronto de perfis térmicos experimentais e simulados.

Figura 4.8 - Esquema de distribuição de temperatura através do molde (A) molde semi-infinito, (B) molde refrigerado e (C) molde com parede fina.

Figura 4.9 - Ilustração esquemática dos modos de transferência de calor na interface molde/ambiente. h_{Amb} = Coeficiente de transferência de calor no resfriamento da interface molde/ambiente [$W/m^2.K$]; h_{rad} = Coeficiente de transferência de calor por radiação [$W/m^2.K$]; h_{conv} = Coeficiente de transferência de calor por convecção [$W/m^2.K$].

Capítulo 5

- Figura 5.1** - Cadinho de grafita (A), Forno elétrico (B) utilizados na fusão das ligas e Cavidade de vazamento (C) destinada a receber o metal líquido.
- Figura 5.2** - Termopar (A) e Registrador gráfico de temperaturas (B) utilizado no registro das temperaturas envolvidas nos experimentos.
- Figura 5.3** - Esquema ilustrativo da sistema metal/molde (A) vista superior evidenciando o plano de calor da leitura térmica e a posição dos termopares relativa ao molde e (B) vista lateral do sistema com ênfase para a espessura do molde; posição e profundidade dos termopares e funil e câmara de vazamento.
- Figura 5.4** - Diagrama de equilíbrio do sistema Sn-Pb (A) [Van Vlack, 1984] e Curvas de resfriamento de três ligas do sistema Sn-Pb (B) obtida para qualificar quimicamente as ligas utilizadas e velocidade de impressão ($= 600 \text{ mm / h}$).
- Figura 5.5** - Esquema ilustrativo do sistema metal/molde (A) Vista superior com destaque para a posição dos termopares no metal relativa a interface metal/molde e (B) Vista lateral destacando o alcance da profundidade da leitura térmica.
- Figura 5.6** - Diagrama de equilíbrio do sistema Al-Cu [Van Vlack, 1984] (A) e as Curvas de resfriamento utilizadas para quantificar e qualificar as duas ligas estudadas (B) liga Al- 4,5% Cu e (C) liga Al- 15% Cu.
- Figura 5.7** - Solubilidade do hidrogênio no alumínio em função da temperatura[Zoqui,1995].
- Figura 5.8** - Esquema ilustrando a localização da retirada dos corpos de prova para ensaios de tração e análise metalográfica enfatizando a direção e sentido da retirada do fluxo de calor.
- Figura 5.9** - Corpo de prova para ensaio de tração produzido segundo norma ASTM E 8M, no qual $A = 36 \text{ mm}$; $D = R = 6 \text{ mm}$ e $G = 30 \text{ mm}$.

Capítulo 6

- Figura 6.1** - Perfis térmicos obtidos para a liga Sn-10%Pb para espessuras variáveis de molde de aço (A) 6 mm; (B) 17 mm; (C) 28 mm; (D) 39 mm e (E) 50 mm.

- Figura 6.2** - Variação do coeficiente de transferência de calor molde/ambiente para a liga Sn- 10% Pb vazada em moldes de aço com espessuras de parede variáveis.
- Figura 6.3** - Confronto de perfis térmicos teóricos e experimentais para liga Sn- 10% Pb vazada com superaquecimento $\Delta T = 40\text{ }^{\circ}\text{C}$ em moldes de aço com espessuras de (A) 6 mm; (B) 17 mm; (C) 28 mm; (D) 39 mm e (E) 50 mm.
- Figura 6.4** - Correlação entre as curvas que representam o comportamento de h_i , obtidas para liga Sn- 10% Pb vazada com superaquecimento $\Delta T = 40\text{ }^{\circ}\text{C}$ em moldes de aço com espessuras de paredes variáveis. Encontram-se também representadas as respectivas equações de h_i para cada caso.
- Figura 6.5** - Confronto de perfis térmicos teóricos e experimentais para a liga Sn- 10% Pb vazada em molde de aço com espessura de 50 mm com diferentes superaquecimentos (A) $\Delta T = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$; (B) $\Delta T = 40\text{ }^{\circ}\text{C}$; (C) $\Delta T = 70\text{ }^{\circ}\text{C}$; (D) $\Delta T = 100\text{ }^{\circ}\text{C}$.
- Figura 6.6** - Correlação entre as curvas que representam o comportamento de h_i obtidas para liga Sn- 10% Pb vazada com superaquecimentos variáveis em molde de aço com espessura de parede de 50 mm. Encontram-se também representadas as respectivas equações de h_i para cada caso.
- Figura 6.7** - Confronto de perfis térmicos teóricos e experimentais para ligas do sistema Sn-Pb, vazadas em molde de aço com espessura de 50 mm e com $\Delta T = 0,2T_L$ (ou T_F) (A) liga Sn- 5% Pb; (B) liga Sn- 10% Pb; (C) liga Sn- 20% Pb; (D) liga eutética SnPb e (E) estanho puro.
- Figura 6.8** - Correlação entre as curvas que representam o comportamento de h_i obtidas para cinco ligas do sistema Sn-Pb vazadas em molde de aço com espessura de 50 mm e $\Delta T = 0,2T_L$ (ou T_F).
- Figura 6.9** - Confronto de perfis térmicos teóricos e experimentais para ligas do sistema Al-Cu, vazadas em molde de aço com espessura de 63 mm e com $\Delta T = 0,1T_L$ (ou T_F) (A) liga Al- 4,5% Cu; (B) liga Al- 15% Cu; (C) liga eutética AL-Cu e (D) alumínio puro.
- Figura 6.10** - Correlação entre as curvas que representam o comportamento de h_i obtidas para quatro composições químicas do sistema Al-Cu vazadas em molde com espessura de 63 mm e $\Delta T = 0,1T_L$ (ou T_F). As setas indicam o tempo total para ocorrer a solidificação.

- Figura 6.11** - Confronto de perfis térmicos para o alumínio vazado em molde de aço com 63 mm de espessura e superaquecimento variável (A) $\Delta T = 0,2T_F$ e (B) $\Delta T = 0,1T_F$.
- Figura 6.12** - Correlação entre as curvas que representam o comportamento de h_i obtidas para o alumínio solidificado em molde de aço com espessura de 63 mm e vazado com diferentes superaquecimentos.
- Figura 6.13** - Resultados obtidos a partir de dados experimentais obtidos do vazamento da liga Al- 4,5% Cu em molde de aço de espessura 63 mm, em presença de argônio (A) ajuste matemático da posição monitorada como função do tempo e (B) perfil para V_L como função da posição.
- Figura 6.14** - Resultados obtidos a partir de dados experimentais obtidos do vazamento da liga Al- 15% Cu em molde de aço de espessura 63 mm, em presença de argônio (A) ajuste matemático da posição monitorada como função do tempo e (B) perfil para V_L como função da posição.
- Figura 6.15** - Evolução da velocidade da isoterma liquidus em função da posição relativa à interface metal/molde (A) liga Al- 4,5%Cu e (B) liga Al- 15%Cu.
- Figura 6.16A-** Relação das micrografias para a liga Al- 4,5%Cu conforme posições ilustradas na Figura 5.8. Ataque com eletrólito composto de 800 ml de etanol, 40 ml de água destilada e 60 ml de ácido perclórico ($HClO_4$) por 15 segundos. As posições são relativas à interface metal/molde e correspondem a: posição 1 = 7mm (EDS = 24 μ m); posição 4 = 22mm (EDS = 42 μ m); posição 7 = 37mm (EDS = 51 μ m) e posição 10 = 53mm (EDS = 57,7 μ m).
- Figura 6.16B-** Relação das micrografias para a liga Al- 15%Cu conforme posições ilustradas na Figura 5.8. Ataque com eletrólito composto de 800 ml de etanol, 40 ml de água destilada e 60 ml de ácido perclórico ($HClO_4$) por 15 segundos. As posições são relativas à interface metal/molde e correspondem a: posição 1 = 7mm (EDS = 21 μ m); posição 4 = 22mm (EDS = 44,4 μ m); posição 7 = 37mm (EDS = 56 μ m) e posição 10 = 53mm (EDS = 62,2 μ m).
- Figura 6.17** - Comparação entre a evolução de EDS teórico e experimental para ligas do sistema Al-Cu vazada em molde de aço com espessura de 63 mm (A) liga Al- 4,5%Cu e (B) liga Al- 15%Cu.

- Figura 6.18** - Relações tensão-deformação para a liga Al- 4,5% Cu obtidas a partir de CPs retirados do lingote fundido nas posições relativas à interface metal/molde, ilustradas na Figura 5.8, e associadas às microestruturas (A) posição 1 a 7mm da interface metal/molde (EDS = 24 μ m); (B) posição 10 a 53mm da interface metal/molde (EDS = 57,7 μ m) e (C) comparação da evolução do desempenho dos dois CPs avaliados.
- Figura 6.19** - Relações tensão-deformação para a liga Al- 15% Cu obtidas a partir de CPs retirados do lingote fundido nas posições relativas à interface metal/molde, ilustradas na Figura 5.8, e associadas às microestruturas (A) posição 1 a 7mm da interface metal/molde (EDS = 21 μ m); (B) posição 10 a 53mm da interface metal/molde (EDS = 62,2 μ m) e (C) comparação da evolução do desempenho dos dois CPs avaliados.
- Figura 6.20** - Relação entre o EDS e (A) posição do termopar e (B) alongamento específico para as duas ligas estudadas.
- Figura 6.21** - Relação do limite de resistência à tração (LRT) com espaçamento dendrítico secundário (EDS) para (A) liga Al- 4,5%Cu e (B) liga Al- 15%Cu vazadas em molde de aço de espessura 63 mm e $\Delta T = 0,1 T_L$.
- Figura 6.22** - Relação entre V_L obtido experimentalmente e calculado pela Equação 6.2, para as ligas (A) Al- 4.5%Cu e (B) Al- 15%Cu vazadas em molde maciços de aço.
- Figura 6.23** - Curvas para determinação das constantes de solidificação, ϕ_1 e ϕ_2 , para diferentes superaquecimentos e moldes (1 - molde refrigerado; 2 - molde maciço de cobre e 3 - molde maciço de aço).
(A) Al- 4,5% Cu e (B) Al- 15% Cu [Ynoue, 1992]

Lista de Tabelas

Capítulo 3

Tabela 3.1 - Equivalência elétrica de propriedades térmicas.

Tabela 3.2 - Valores das constantes y_1 e y_2 na Equação 3.5.

Tabela 3.3 - Valores experimentais do parâmetro **P** para o sistema metal/mole.

Capítulo 4

Tabela 4.1 - Relação de equações e/ou valores do Coeficiente de Transferência de Calor na Interface Metal/Molde.

Capítulo 5

Tabela 5.1 - Características termofísicas dos materiais investigados [Touloukian,1970; Mondolfo,1976; Pehlke,1990; Berry,1991; Hammouda,1992; Bouchard/Kirkaldy,1997].

Nomenclatura

Letras latinas

A = área unitária [m^2];

A = estabilidade absoluta de Mullins/Sekerka;

$A_T = \Delta y \cdot \Delta z$, área de passagem do fluxo de calor ou área de troca térmica [m^2];

a , b e C = constantes do capítulo 1;

a , b e c = valores que, segundo **Ohnaka**, dependem do tempo;

a , b e Q = constantes;

B = constantes de integração;

c = calor específico [$J / kg \cdot K$];

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

c_f = calor específico do fluido de refrigeração [$J / kg \cdot K$];

C_L = percentagens de soluto nas fases líquida em equilíbrio ou concentração de soluto no líquido a uma distância x da interface sólido/líquido [%];

C_L^* = composição constante dada pelo diagrama para a temperatura T [%];

C e n = são constantes que dependem da liga considerada do capítulo 4;

C_p = calor específico de **Voorhees** [$J / kg \cdot K$];

C_S = percentagens de soluto nas fases sólida em equilíbrio [% - em peso];

$c(T)$ = calor específico do material [$J / kg \cdot K$];

C_{Ti} = capacidade térmica do elemento " i " [W / K];

C_0 = concentração nominal da liga [%];

C_2 = parâmetro de **Mortensen** [$(m^3 / s) \times 10^{-16}$];

C_3 = parâmetro de **Voorhees** [$(m^3 / s) \times 10^{-15}$];

C_∞ = composição equalizada do volume de líquido [%];

d = tamanho de grão [m];

D = difusividade de soluto [m^2 / s];

D_L = difusividade de soluto no líquido [m^2 / s];

D_S = difusividade no sólido [m^2 / s];

$d_s = \rho(T)$ = massa específica do material [kg / m^3];

dS = espessura infinitesimal de sólido formada [m];

e = metade da dimensão principal [m];

f = fator de forma do sistema, varia de (0,47 a 1,0);

F_S = fração de sólido [%];

G = gradientes térmicos [K / m];

G_C = gradiente de soluto no líquido [kg / m];

G_L = gradiente térmico à frente da isoterma liquidus ou no líquido [K / m];

G_{LS} = gradiente térmico médio na interface sólido/líquido ou mushy zone [K / m];

G_S = gradiente de temperatura no sólido [K / m];
 g_1 e g_2 = constantes, identificadas como fator de calibração;
 g = aceleração da gravidade [= 9,81 m / s²];
 h_{Amb} = coeficiente de transferência de calor na interface molde/ambiente [W / m² K];
 h_c = coeficiente de transferência de calor convectivo do gás [W / m².K];
 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];
 h_M = coeficiente de transferência de calor do molde [W / m².K];
 h_R = coeficiente de transferência de calor radiativo [W / m².K];
 h_S = coeficiente da transferência de calor da camada solidificada [W / m².K];
 $i, (i + 1)$ e $(i - 1)$ = subíndices que indicam respectivamente o nó estudado, o nó posterior e o nó anterior no espaço considerado;
 $k = (k_L + k_S) / 2$ = condutividade térmica média do sistema [W / m K];
 K_0 = coeficiente de partição de soluto [adimensional];
 K_E = coeficiente partição efetivo de soluto [%];
 k_f = condutividade térmica do fluido de refrigeração [W / m K];
 $k_{gás}$ = condutividade térmica do gás do *gap* [W / m K];
 k_L = condutividade térmica do líquido [W / m K];
 k_{lb} = condutividade térmica do lubrificante [W / m K];
 k_M = condutividade térmica no material da parede do molde [W / m K];
 k_S = condutividade térmica do sólido ou metal sólido [W / m K];
 $k(T)$ = condutibilidade térmica do material [W / m.K];
 L = calor latente de fusão do material [J / m³] ou [J / kg];
 ℓ = largura ou diâmetro do canal de refrigeração [m].
 $L(\partial F_S / \partial T)$ = parâmetro associado à liberação de energia na forma de calor, devido à mudança de fase [J / kg.K];
 M = parâmetro de engrossamento;
 m_1 e m_2 = constantes;
 $m_L = (d T_L / d C_L)$, inclinação da linha liquidus;
 m = vazão do fluido de refrigeração [kg / s].
 n e $(n + 1)$ = índices usados para mostrar a dependência da temperatura com o tempo;
 p = fator que depende do metal e do molde.;
 Pr = número de Prandtl;
 q_0 = fluxos de calor na interface metal/molde [W / m²];
 q_S = fluxos de calor na interface sólido/líquido [W / m²];
 $\dot{q}$ = termo de geração interna de calor, associado à transformação de fase de um material [J / m³ K s];
 R_C = resistência térmica devido à convecção do ar atmosférico [m² K / W];
 Re = número de Reynolds;
 R_i = resistência térmica da interface metal/molde [m² K / W];
 R_L = resistência térmica da camada líquida [m² K / W];
 R_M = resistência térmica da parede do molde [m² K / W];
 $R_{M/A} = R_C + R_R$, resistência térmica da interface molde/ambiente [m² K / W];
 R_R = resistência térmica devido à radiação do ar atmosférico [m² K / W];
 R_S = resistência térmica da camada solidificada [m² K / W];

R_g ($R_g = 1/ h_g$) = resistência térmica global do sistema [$m^2 K / W$];

R_1 ($R_1 = 1/ h_1$) = resistência térmica entre o fluido de refrigeração e a superfície do molde [$m^2 K / W$];

$S(A;K_0)$ = parâmetro de estabilidade de Mullins/Sekerka;

S_L = posição da isoterma liquidus a partir da superfície metal/molde [m];

S_s = posição da isoterma solidus a partir da superfície metal/molde [m];

S_0 = espessura do sólido no sistema virtual [m];

t = tempo de homogeneização [s];

t_∞ e t_0 = valores ideais de tempo de solidificação, correspondentes respectivamente aos casos extremos e opostos de solidificação em molde semi-infinito e solidificação em ausência total de molde [s];

t_{SL} = tempo local de solidificação [s];

T = temperatura da fase líquida na frente da interface sólido/líquido [K];

T_0 = temperatura ambiente ou inicial do molde [K];

T_{EM} = temperatura da superfície externa do molde [K];

T_{Eut} = temperatura eutética do sistema [K];

T_F = temperatura de fusão do metal base do sistema [K];

T_{fe} = temperatura do fluido na saída do circuito de refrigeração [K];

T_{fs} = temperatura do fluido na entrada do circuito de refrigeração [K];

T_i^n = temperaturas atuais (anteriores) [K];

T_i^{n+1} = temperaturas nodais posteriores [K];

T_{is} = temperatura da superfície do lingote [K];

T_L = temperatura da linha liquidus da liga [K];

T_m = temperatura de equilíbrio do elemento puro com a interface sólido/líquido [K];

T_{mf} = temperatura média do fluido de refrigeração [K];

T_R = temperatura real [K];

T_s = temperatura da linha solidus da liga [K];

T_v = temperatura de vazamento [K];

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

*

T = taxa de resfriamento do sólido junto à interface sólido/líquido [K / s];

$\dot{T}_1$ = taxa de resfriamento no metal sólido [K / s];

$\dot{T}_2$ = taxa de resfriamento na região pastosa [K / s];

$\dot{T}_3$ = taxa de resfriamento no metal líquido [K / s];

V = velocidades de deslocamento de isothermas características [m / s];

V = velocidade constante da interface sólido/líquido [m / s];

V = velocidade da interface sólido/líquido de Kurz/Fisher [m / s];

V_{abs} = velocidade de estabilização absoluta de Kurz/Fisher [m / s];

V_C = velocidade crítica de Kurz/Fisher [m / s];

V_L = velocidade de deslocamento da isoterma liquidus [m / s];

V_L = velocidade local de crescimento de Mullins/Sekerka [m / s];

V_L = velocidade de deslocamento da ponta da dendrita de Hunt [m / s];
 V_m = volume molar de Voorhees [m³];
 V_m / V_p = representa a relação entre o volume do molde e o volume da peça;
 V_S = velocidade de deslocamento da isoterma solidus [m / s];
 V_{Trans} = velocidade de transição de interface celular a dendrita de Kurz [m / s];
 $V = A_T \cdot \Delta x_i$ corresponde ao volume do elemento finito "i" [m³];
 $w = 2\pi$, comprimento de onda da perturbação senoidal da interface de Mullins/Sekerka [rad];
 w = constante que varia de 1/3 a 1/2 para λ_2 e sendo próximo de 1/2 para λ_1 ;
 w_f = velocidade do fluido de refrigeração [m / s];
 x = distância a partir do centro da dendrita [m];
 $x = S$, interface sólido/líquido;
 $x = S_L$, interface zona pastosa/líquido;
 χ = dimensão característica da superfície, referente ao percurso feito pelo fluido de refrigeração ao passar pela superfície do corpo [m];
 X_{gap} = espessura do *gap* de ar [m];
 X_{lb} = espessura da camada de lubrificante [m];
 X_M = espessura da parede do molde [m];
 X_S = espessura da camada solidificada [m];
 y_1 = constante que leva em consideração somente a geometria do molde;
 y_2 = constante que leva em conta tanto a geometria como o material do molde;

Letras Gregas

α' = parâmetro de **Clyne/Kurz** para perfil exponencial de distribuição de soluto no sólido;
 α'' = parâmetro de **Ohnaka** para perfil integral de distribuição de soluto no sólido;
 α = parâmetro que depende das propriedades termofísicas do metal, do molde e da temperatura de vazamento [s / m²];
 α_L = parâmetro que depende das propriedades termofísicas do metal líquido, do molde e da temperatura de vazamento [s / m²];
 α_L = difusividade térmica do líquido [**Equação 2.82a**];
 α_S = parâmetro que depende das propriedades termofísicas do metal sólido, do molde e da temperatura de vazamento [s / m²];
 β = parâmetro que depende do metal do molde e de h_i [s / m];
 β_L = parâmetro que depende do metal do molde e de h_i [s / m];
 β_S = parâmetro que depende do metal do molde e de h_i [s / m];
 δ = tempo de surgimento da isoterma solidus[s];
 δ = grau de homogeneização [%];
 δ = característica de ductilidade, como o alongamento específico [%];
 δ_s = espessura da camada limite ou distância característica [m];

$\Delta t \leq \tau_{QDi}$, critério de estabilidade do sistema para a equação de solução do M.D.F. na forma explícita de trabalho;

Δt = intervalo de tempo [s] ;

$\Delta T = T_V - T_L$, superaquecimento [K];

$\Delta T_{LE} = T_L - T_{Ent}$, intervalo de transformação líquido/sólido [K];

$\Delta T_{SL} = T_L - T_S$, intervalo de solidificação de não equilíbrio [K];

Δx = distância percorrida pelo fluxo de calor entre os pontos centrais [m];

Δx = elemento de volume considerado [m³];

ε = fator de escala para tensão superficial;

ε = emissividade do material do molde;

ϕ = constante de solidificação

ϕ_1 = constante de solidificação relacionada com a isoterma solidus;

ϕ_2 = constante de solidificação relacionada com a isoterma liquidus;

λ = representa a variação ou mudança de temperatura do material equivalente ao calor liberado devido à transformação de fase, e serve como um fator de acumulação para determinar o tempo necessário para que ocorra a solidificação em determinado ponto, proposto por Dusimberre;

λ = espaçamentos interdendríticos [μm];

λ_1 = espaçamento dendrítico primário (EDP) [μm];

λ_2 = espaçamento dendrítico secundário (EDS) [μm];

σ = constante de Stefan-Boltzman [=5,672 x 10⁻⁸ W / m².K⁴];

σ = tensão [Pa]

σ_e = limite de escoamento [Pa];

σ_{SL} = energia livre de superfície [J / m²];

σ_u = limite de resistência à tração [Pa];

Ω = comprimento solidificado [m];

Ω_1 = parâmetro de solidificação parabólica;

Ω_2 = parâmetro de difusão de retorno;

$\zeta^* = G_L (k_L / k)$ = gradiente térmico generalizado no líquido [K / m];

$\zeta = G_S (k_S / k)$ = gradiente térmico generalizado no sólido [K / m];

$\Gamma = (\sigma_{SL} T_F / L)$ = constante de capilaridade ou de Gibbs Thomsom [m K];

γ = coeficiente de expansão térmica volumétrica do fluido de refrigeração, para gases pode ser aproximado por ($\gamma = 1 / T_0$) [K⁻¹];

ρ = massa específica do fluido de refrigeração [kg / m³];

ρ_f = massa específica do fluido de refrigeração [kg / m³];

ρ_s = massa específica do metal sólido [kg / m³];

η = viscosidade dinâmica do fluido de refrigeração [kg / m s];

η_f = viscosidade do fluido de refrigeração [kg / m s];

η e υ = constantes dependentes do formato e dimensões da peça a ser solidificada;

η = depende fundamentalmente da capacidade de extração de calor do sistema metal/molde;

υ = depende do grau de superaquecimento utilizado;

$\nabla T = \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\partial T}{\partial z}$, derivada direcional da temperatura;

$\partial F_s / \partial t$ = variação da fração de sólido no tempo;

$\frac{\partial T}{\partial t}$ = taxas de resfriamento ou aquecimento [K / s].

Resumo

QUARESMA, José Maria do Vale , Correlação entre Condições de Solidificação, Microestrutura e Resistência Mecânica, Campinas: Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 1999. Tese (Doutorado).

A imposição de uma ampla gama de condições operacionais em processos de fundição e lingotamento tem como decorrência direta a geração de uma diversidade de estruturas de solidificação. Parâmetros estruturais como tamanho de grão e espaçamento interdendrítico são bastante influenciados pelo comportamento térmico do sistema metal/molde durante a solidificação, impondo, conseqüentemente, uma correlação estreita entre este e a microestrutura resultante.

As propriedades mecânicas de uma liga em seu estado bruto de solidificação dependem do arranjo microestrutural que se define no processo de solidificação. Nestas condições, tamanho de grão, espaçamentos interdendríticos, eventuais porosidades, produtos segregados e outras fases, é que irão definir o comportamento mecânico da liga, representado por tensões e/ou deformações. Expressões que correlacionam o comportamento mecânico com parâmetros da microestrutura são muito úteis para se buscar uma forma de planejamento prévio das condições de solidificação, em função de um determinado nível de resistência mecânica que se pretenda alcançar, ou seja, estabelecer um caminho de programação da microestrutura e das propriedades mecânicas. Neste particular, a literatura apresenta relações entre o limite de escoamento do material com o tamanho de grão, como a conhecida equação de Hall-Petch. Este trabalho avança nessa direção na busca de relações entre comportamento mecânico no campo plástico, espaçamentos dendríticos secundários e condições de solidificação.

Para a análise de uma importante variável da solidificação em moldes de boa difusividade de calor, qual seja o coeficiente de transferência de calor metal/molde (h_i), foram escolhidas como base de estudo ligas do sistemas Sn-Pb com composições Sn- 5% Pb, Sn- 10% Pb; Sn- 20% Pb; Sn- 38,1% Pb (eutética) além do elemento estanho. Essa escolha decorreu da facilidade de manipulação dessas ligas em laboratório e principalmente por possuírem propriedades termofísicas conhecidas. Neste particular foram investigadas as influências das seguintes condições operacionais sobre h_i : espessura do molde, superaquecimento do metal líquido e magnitude do intervalo de solidificação. O confronto de resultados experimentais relativos à distribuição de temperaturas no metal e no molde durante a solidificação e resultados de simulação com um modelo numérico permitiram a obtenção de expressões, para cada caso, relacionando h_i em função do tempo. Foi também analisada a transferência de calor da superfície externa do molde para o meio ambiente e desenvolvidas expressões que correlacionam o coeficiente de transferência de calor molde/ambiente (h_{Amb}), também em função do tempo.

Para a correlação de parâmetros de estrutura dendrítica e propriedades mecânicas foram escolhidas as seguintes ligas do sistema Al-Cu: Al- 4,5% Cu; Al- 15% Cu. A mesma análise referente a h_i e h_{Amb} já mencionada foi estendida a essas ligas incluindo a liga de composição eutética (Al- 33% Cu) e o alumínio puro. Apoiados em resultados de ensaios de solidificação padronizados, espaçamento dendrítico secundário (EDS), e apoiados em modelos matemáticos de transferência de calor e de crescimento dendrítico, desenvolveram-se expressões correlacionando o limite de resistência à tração (σ_u) e o alongamento específico (δ) como função de variáveis do sistema metal/molde, estabelecendo-se um caminho de programação da estrutura dendrítica e do nível de resistência como função de condições operacionais pré-estabelecidas no processo de solidificação.

Palavras Chave:

Solidificação, Microestrutura, Condutância térmica Metal/Molde e Molde/Ambiente, Modelagem Matemática e Resistência Mecânica.

Abstract

QUARESMA, José Maria do Vale, Correlation among Solidification Conditions, Microstructure and Mechanical Behavior, Campinas: Faculty of Mechanical Engineering, State University of Campinas, 1999. Doctorate Thesis.

The imposition of a wide range of operational conditions in foundry and static casting generates, as a direct consequence, a diversity of solidification structures. Structural parameters such as grain size and interdendritic spacings are highly influenced by the thermal behavior of the metal/mold system during solidification, consequently imposing a close correlation between the described system and the resulting microstructure.

The mechanical properties of an alloy in its crude state of solidification depend on the microstructural arrangement defined in the solidification process. Under the circumstances, the mechanical behavior of the alloy, represented by stresses and/or strains, will be defined by grain size, interdendritic spacings, casual porosities, segregated products and other phases. Expressions correlating the mechanical behavior with microstructural parameters are very useful in order to search for a type of previous planning of the solidification conditions in terms of a determined level of mechanical resistance which is intended to be attained, e.g. to settle a way of programming the microstructure and the mechanical properties as well. Particularly, the literature in this field presents relations between the yield strength of the material and the grain size, such as the renowned Hall-Petch's equation. The present work advances in that direction, in search of relations among mechanical behavior in the plastic field, secondary dendritic spacings and solidification conditions.

In order to analyze an important variable of solidification in molds with good heat diffusivity, like the metal/mold heat transfer coefficient, alloys of the Sn-Pb system - with compositions Sn- 5%Pb, Sn- 10%Pb, Sn- 20%Pb, Sn- 38,1%Pb (eutectic) - besides the element tin, were chosen.

The choice was made because such alloys are easily handled in laboratory and chiefly because their thermophysical properties are well known. Particularly the influences of the following operational conditions on h_i were investigated: mold thickness, liquid metal superheating and magnitude of the solidification range. Experimental results related to the distribution of temperatures in metal and mold during solidification, as compared with the results of simulation with a numerical model, made it possible to attain of expressions, for each case, by relating h_i in terms of time. Heat transfer from the external surface of the mold to the environment was also analyzed; in the same manner, expressions were developed correlating the mold/environment heat transfer coefficient (h_{Amb}) in terms of time as well.

To correlate parameters of dendritic structures and mechanical properties, the following alloys of the Al-Cu system were chosen: Al- 4,5%Cu; Al- 15%Cu. The same aforementioned analysis referring to h_i and h_{Amb} was extended to those alloys including the one of eutectic composition (Al- 33%Cu) and pure aluminum. Based upon results of standardized solidification tests, secondary dendritic spacing (EDS) and upon mathematical models of heat transfer and dendritic growth, expressions were developed correlating the ultimate tensile strength (σ_u) and specific elongation (δ) as a function of variables of the metal/mold system. Thus it was a way towards the programming of the dendritic structure and the level of resistance as a function of pre-established operational conditions in the solidification process.

Keywords:

Solidification, microstructure, metal/mold and mold/environment thermal conductance, mathematical modeling and mechanical resistance.

Capítulo 1

1 INTRODUÇÃO

1.1- Considerações Gerais

Em operações industriais de fundição e lingotamento, a possibilidade de implantação de uma ampla gama de condições operacionais tem como decorrência direta a geração de uma diversidade de estruturas de solidificação. Parâmetros estruturais como tamanho de grão e espaçamentos interdendríticos são bastante influenciados pela taxa local de resfriamento, impondo, conseqüentemente, uma correlação estreita entre o comportamento térmico do sistema metal/molde durante a solidificação e a microestrutura resultante. A Figura 1.1 mostra esquematicamente essa correlação para uma faixa de taxas de resfriamento ($\dot{T}$) que cobre desde processos convencionais até situações de solidificação ultra-rápida. A taxa de resfriamento pode ser correlacionada com parâmetros térmicos da solidificação como velocidades de deslocamento de isoterms características (V) e gradientes térmicos (G), que por sua vez estão relacionados com parâmetros operacionais como temperatura de vazamento (T_v) e coeficientes de transferência de calor nas interfaces metal/molde (h_i) e molde/ambiente (h_{Amb}).

As propriedades mecânicas de uma liga em seu estado bruto de solidificação dependem do arranjo microestrutural que se define no processo de solidificação. Nessas condições, tamanho de grão, espaçamentos interdendríticos, a forma, tamanho e espalhamento de eventuais porosidades, produtos segregados e outras fases irão

determinar o comportamento mecânico da liga representado por tensões e/ou deformações.

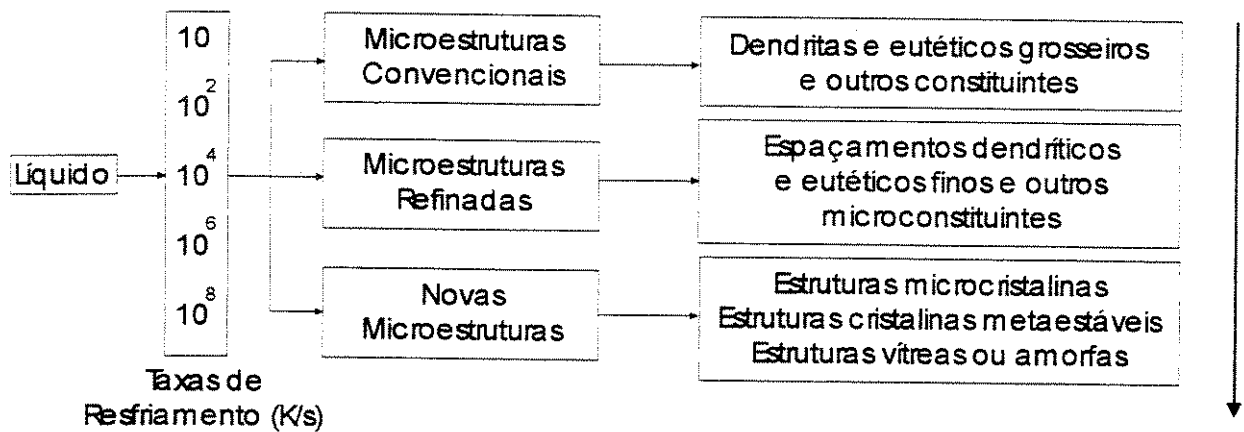


Figura 1.1 - Correlação entre taxa de resfriamento e microestrutura resultante

Expressões que relacionem propriedades mecânicas com parâmetros da microestrutura são úteis para se buscar uma forma de programação da microestrutura por meio da fixação prévia das condições de solidificação, em função de um determinado nível de resistência mecânica que se pretenda alcançar. Dentre as propriedades mecânicas com forte dependência com a microestrutura do material, citam-se o limite de escoamento, limite de resistência à tração, alongamento, tenacidade, limite de resistência à fadiga, resistência à fluência, à corrosão e ao desgaste e as condutividades térmica e elétrica. Nesse particular, a literatura apresenta a relação de Hall-Petch [Hall, 1951; Petch, 1953] que correlaciona o limite de escoamento (σ_e) com o tamanho de grão (d), mas não mostra nenhum tipo de correlação quantitativa entre parâmetros da microestrutura bruta de solidificação e tensões ou deformações no campo plástico. Sabe-se que existe a dependência do arranjo microestrutural sobre as propriedades mas não o quanto serão alteradas por modificações na microestrutura bruta de solidificação.

Em estruturas brutas de solidificação, estabelecer correlações entre microestrutura e as propriedades mecânicas decorrentes, é uma tarefa complexa e que se inicia pela análise dos diferentes aspectos microestruturais, conforme mostra a representação esquemática da Figura 1.2.

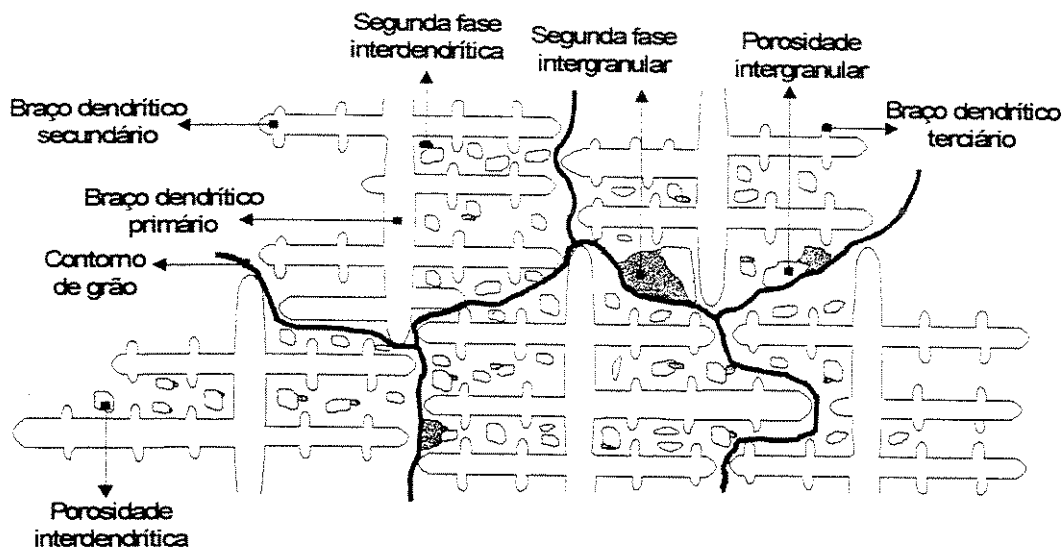


Figura 1.2 - Representação esquemática de microestrutura de fundidos

No interior de cada grão cristalino existe uma rede de ramificações dendríticas caracterizada por baixas concentrações de soluto nas ramificações propriamente ditas, e ricas de soluto nos interstícios das ramificações dendríticas o que pode conduzir à formação de uma segunda fase, mesmo se a composição nominal da liga indique a presença de uma única fase. Isso ocorre, por exemplo, com ligas de alumínio com concentrações até 4,5%, onde as condições de solidificação fora do equilíbrio provocam a precipitação interdendrítica do composto intermetálico Al_2Cu . Se existir a presença de gases dissolvidos no metal líquido, as regiões interdendríticas são particularmente adequadas à nucleação de bolhas, principalmente devido à contração que ocorre por conta da solidificação de líquido aprisionado entre braços dendríticos. É evidente que a interface externa dessa rede dendrítica, constituída pelo contorno de grão, também serão regiões preferenciais para ocorrência de porosidades e precipitação de segundas fases ou eutéticos. Inclusões não-metálicas também estarão igualmente associadas aos contornos de grão e regiões interdendríticas. Adicionalmente aos obstáculos intergranulares ao escorregamento, existirão os obstáculos presentes entre os braços dendríticos.

Tanto para aplicações com estrutura bruta quanto para estruturas que serão submetidas a tratamentos, como solubilização e precipitação, é importante o grau de refino da estrutura dendrítica. No primeiro caso, a distribuição mais uniforme possível de segundas fases e outros obstáculos ao escorregamento favorece as propriedades mecânicas, enquanto no segundo caso maximiza o potencial do tratamento. A quantificação do refino dendrítico é determinada pelos espaçamentos interdendríticos (λ), principalmente os de segunda ordem, ou secundários. No caso do tratamento de solubilização de ligas Al-4,5%Cu, a literatura mostra a dependência do tempo de tratamento com o espaçamento secundário, por meio da expressão:

$$\delta = \frac{D \cdot t}{\lambda^2} , \quad 1.1$$

onde D é o coeficiente de difusão do cobre no solvente alumínio à temperatura do tratamento, t é o tempo de homogeneização em segundos, e λ o espaçamento interdendrítico. Valores de δ bem maiores que a unidade são indicados para uma homogeneização mais eficiente.

Alguns trabalhos da literatura afirmam que o tamanho do espaçamento interdendrítico é mais importante que o próprio tamanho de grão para as propriedades mecânicas que resultam do arranjo microestrutural. Nessas condições, seria extremamente interessante dispor de expressões que correlacionassem esse parâmetro estrutural com determinadas características mecânicas, na forma:

$$\sigma \text{ ou } \delta = f(\lambda_2) , \quad 1.2$$

onde σ é uma tensão característica do campo plástico do material, como por exemplo o limite de resistência à tração, e δ uma característica de sua ductilidade, como o alongamento.

Por outro lado, os espaçamentos dendríticos dependem das condições térmicas durante o processo de solidificação, e daí a importância de se poder contar com uma forma quantitativa que permita expressar essa interdependência. Esses tipos de modelos quantitativos têm sido alvo de estudos de diversos pesquisadores nas últimas cinco décadas. Assim, existem na literatura muitos trabalhos nessa direção, sendo esses agrupados em dois tipos de modelo: os de natureza teórica, baseados nos parâmetros térmicos e em relações geométricas; e os de natureza experimental, de caráter mais específico. Dentre aqueles que apresentam abordagens teóricas, merecem destaque o modelo de Hunt para ramificações celulares ou dendríticas primárias [Hunt, 1979], o modelo de Feurer para espaçamentos dendríticos secundários [Feurer, 1977] e os modelos de Kurz & Fisher e Bouchard & Kirkaldy para espaçamentos primários e secundários [Kurz, 1989; Bouchard, 1997].

No que se refere à abordagem experimental, pode-se citar como exemplo as propostas de Bower, relacionando o espaçamento secundário com o tempo local de solidificação para ligas Al-Cu e a proposta de Suzuki, que relaciona espaçamento secundário com taxa de resfriamento do sistema metal/molde para aços carbono [Bower, 1966; Suzuki, 1969].

As leis de crescimento dendrítico relacionam espaçamentos com parâmetros térmicos durante a solidificação, tais como: taxa de resfriamento ($\dot{T}$), gradiente térmico à frente da isoterma liquidus (G_L) e pela velocidade de deslocamento de uma interface característica, como por exemplo a própria isoterma liquidus (V_L), na forma:

$$\lambda_{1,2} = C \cdot G_L^{-a} \cdot V_L^{-b}, \quad 1.3$$

onde: C, a, b = constantes;

λ_1 = espaçamento dendrítico primário; e

λ_2 = espaçamento dendrítico secundário,

ou ainda na forma:

$$\lambda_{1,2} = C.(\dot{T})^{-a} . \quad 1.4$$

Outra forma de se expressar os espaçamentos dendríticos com as condições de solidificação do sistema é em função do tempo local de solidificação (t_{SL}), sendo dada por [**Flemings, 1974**]:

$$\lambda_{1,2} = C.t_{SL}^w , \quad 1.5$$

onde: C: constante dependente do material;

w: constante que varia de 1/3 a 1/2 para λ_2 e sendo próximo de 1/2 para λ_1 , e t_{SL} é tempo local de solidificação, sendo representado pelo intervalo de tempo correspondente à passagem das isothermas solidus e liquidus em uma determinada posição, ou mais precisamente, a passagem da ponta e da raiz da dendrita para o caso de solidificação unidirecional.

Assim sendo, a eventual ligação de uma propriedade mecânica com a estrutura, fica agora também conectada com as condições térmicas, por expressões do tipo:

$$\sigma = f(\lambda) = f(G^{-a} V^{-b}) . \quad 1.6$$

Por outro lado, esses parâmetros térmicos dependem das condições de solidificação impostas por parâmetros operacionais, como por exemplo a temperatura de vazamento do metal líquido e pela natureza e condições do sistema metal/molde.

Pode-se mostrar que para condições unidirecionais de solidificação, G_L e V_L característicos da isoterma liquidus são dados por [Garcia, 1983]:

$$V_L = (2\alpha_L \cdot S_L + \beta_L)^{-1}, \quad 1.7$$

e

$$G_L = F(V_L), \quad 1.8$$

onde S_L é a posição da isoterma liquidus a partir da superfície, α_L é uma constante para cada sistema metal/molde e que depende das propriedades termofísicas de metal e molde e da temperatura de vazamento e β_L um parâmetro que depende do coeficiente de transferência de calor metal/molde (h_i).

Nessas duas últimas expressões estão contidas as influências das propriedades termofísicas de metal e molde, da temperatura de vazamento e do coeficiente de transferência de calor metal/molde, h_i , que na maioria das situações práticas é variável durante a solidificação e deve ser determinado experimentalmente. Vê-se que as variáveis V_L e G_L dependem de condições que são impostas, e conseqüentemente conhecidas, como a composição química da liga, o tipo de molde utilizado e a temperatura com a qual o metal líquido será vazado, mas também de uma variável desconhecida que é h_i . Ao se pretender estabelecer uma ligação entre as condições de solidificação, microestrutura e as propriedades mecânicas, no sentido de se estabelecer um caminho de programação da microestrutura e conseqüentemente de propriedades, vê-se que será necessária também uma avaliação da real variação de h_i durante a solidificação.

1.2 - Objetivos do Trabalho

Tendo em vista a importância dessa interligação em série entre condições de solidificação, microestrutura e resistência mecânica definiu-se um plano de trabalho que prioriza as seguintes metas:

1- Revisão crítica e atualizada da literatura no que diz respeito aos modelos de crescimento dendrítico e aos métodos matemáticos da análise do processo de solidificação;

2- Revisão crítica e atualizada no que diz respeito à caracterização da transferência de calor nas interfaces metal/molde e molde/ambiente;

3- Definição de um método particular para a determinação dos coeficientes de transferência de calor na interface metal/molde (h_i), e de outro para avaliação do coeficiente molde/ambiente (h_{Amb});

4- Adaptação de um modelo numérico apropriado para análise da evolução da solidificação unidirecional de metais e ligas binárias para simulações do campo térmico do sistema metal/molde durante a solidificação;

5- Determinação experimental de h_i e h_{Amb} para as seguintes condições:

Ligas do sistema metálico binário Sn-Pb e molde de aço com (A) cinco diferentes espessuras; (B) quatro diferentes superaquecimentos e (C) cinco diferentes composições químicas;

6- Determinação experimental de h_i e h_{Amb} para as ligas do sistema binário Al-Cu e molde de aço com (A) dois diferentes superaquecimentos e (B) quatro diferentes composições químicas visando a obtenção dos perfis de evolução do espaçamento dendrítico secundário;

7- Determinação de expressões analíticas de correlação entre parâmetros térmicos da solidificação e parâmetros da estrutura dendrítica, e validação experimental com resultados obtidos com as ligas Al- 4,5% Cu e Al- 15% Cu;

8- Execução dos ensaios de tração visando relacionar o Limite de Resistência à Tração (σ_u) e o alongamento específico (δ) com o espaçamento dendrítico secundário (EDS);

9 - A partir de toda a análise realizada desenvolver expressões analíticas finais de correlação entre limite de resistência à tração (σ_u) e alongamento específico (δ) e condições do sistema metal/molde como: composição química de liga binária, material do molde, coeficiente de transferência de calor metal/molde e temperatura de vazamento do metal líquido.

Capítulo 2

2 MICROESTRUTURAS DE SOLIDIFICAÇÃO.

As substâncias de um modo geral podem assumir até (3) três estados de agregação : **o gasoso, o líquido e o sólido**. O estado sólido, por aquecimento, **vem a ser substituído pelo estado líquido** mudança de estado conhecida como **fusão** e ocorre na **temperatura de fusão**. Nos **metais puros** e em **ligas eutéticas**, tais mudanças ocorrem em temperaturas fixas e definidas cujos valores são dependentes da pressão.

O caminho contrário ao da **fusão** por resfriamento é possível e conhecido por **solidificação** e que pode ser entendido como sendo **a mudança do estado líquido para o estado sólido de uma substância**. Esta mudança tem início com o aparecimento de pequenas partículas de nova fase, que crescem até que a transformação se complete. O aparecimento e o crescimento posterior dessas partículas é que identifica o modo de formação da microestrutura em metais e ligas metálicas em momentos sucessivos de tal modo que aspectos cinéticos, térmicos, químicos e termodinâmicos estão fortemente relacionados.

Independente da relevância da abordagem dada ao estudo da solidificação de materiais, do ponto de vista do fenômeno, normalmente podem ser contemplados os seguintes aspectos:

- **a nucleação;**
- **o crescimento;**
- **a partição de soluto;**
- **o superesfriamento constitucional; e**
- **a estabilidade da interface.**

A **nucleação** pode ser entendida como sendo a etapa da **solidificação** que descreve o modo de formação do **núcleo sólido estável** no seio da massa líquida.

No geral a nucleação pode envolver as seguintes etapas:

- **a movimentação de átomos por difusão ou outro tipo de movimento,**
- **a mudança da estrutura original em uma ou mais estruturas intermediárias instáveis e**
- **a formação dos núcleos da nova fase.**

Uma vez formados um ou mais embriões da fase sólida, a solidificação prossegue por **crescimento do núcleo ou núcleos** a partir desses embriões.

As teorias de crescimento do embrião da fase sólida são de difícil comprovação experimental, em virtude das dificuldades que se têm em mensurá-las. Entretanto, existem conceitos que dão conta de que a forma do crescimento do núcleo sólido formado homogênea ou heterogeneamente a partir da fase líquida é fortemente influenciado pela estrutura atômica da interface sólido / líquido. Neste aspecto existe o fator cinético de acomodação ou empilhamento de átomos que pode ser apresentado em três categorias principais:

- **a cinética de adição de átomos à interface sólido/líquido;**
- **a cinética de transporte de calor e**
- **a cinética de transporte de massa à frente da interface sólido/líquido.**

A natureza do sistema é determinante pela predominância de um deles sobre os demais.

A cinética de adição de átomos da fase líquida à interface sólido/líquido é função da estrutura atômica desta interface, que é definida por um modelo teórico que prevê a existência da interface difusa (rugosa) e plana/facetada (lisa) vistas na Figura 2.1, com suas respectivas direções favoráveis de crescimento e associada a cada estrutura cristalina [**Flemings,1974; Prates/Davies, 1978; Kurz/Fisher,1984**].

i) interface difusa, caracterizada pela existência de uma região mista sólido / líquido (ordem / desordem) espessa, formada por algumas camadas de átomos, que separa a fase sólida da fase líquida, expondo grande quantidade de sítios favoráveis à adição de átomos. Típica dos metais e que se encontra esquematizada na Figura 2.1a.

ii) interface facetada/plana, caracterizada pela existência de uma região mista sólido / líquido (ordem / desordem) formada por uma camada delgada de átomos, pouco favorável à adição de átomos provenientes da fase líquida, uma vez que os átomos da superfície do cristal sólido são fortemente ligados aos demais, determinando uma transição brusca entre as fases sólidas e líquidas e, conseqüentemente, interfaces facetadas(Figura 2.1b). Neste caso, a etapa controladora do processo de crescimento é a cinética de adição de átomos à interface sólido/líquido, que por ser dificultada é a mais lenta. Típica dos cerâmicos. Os semicondutores podem apresentar uma mistura destes dois tipos de interface. As interfaces difusas crescem muito mais rápidas que as facetadas.

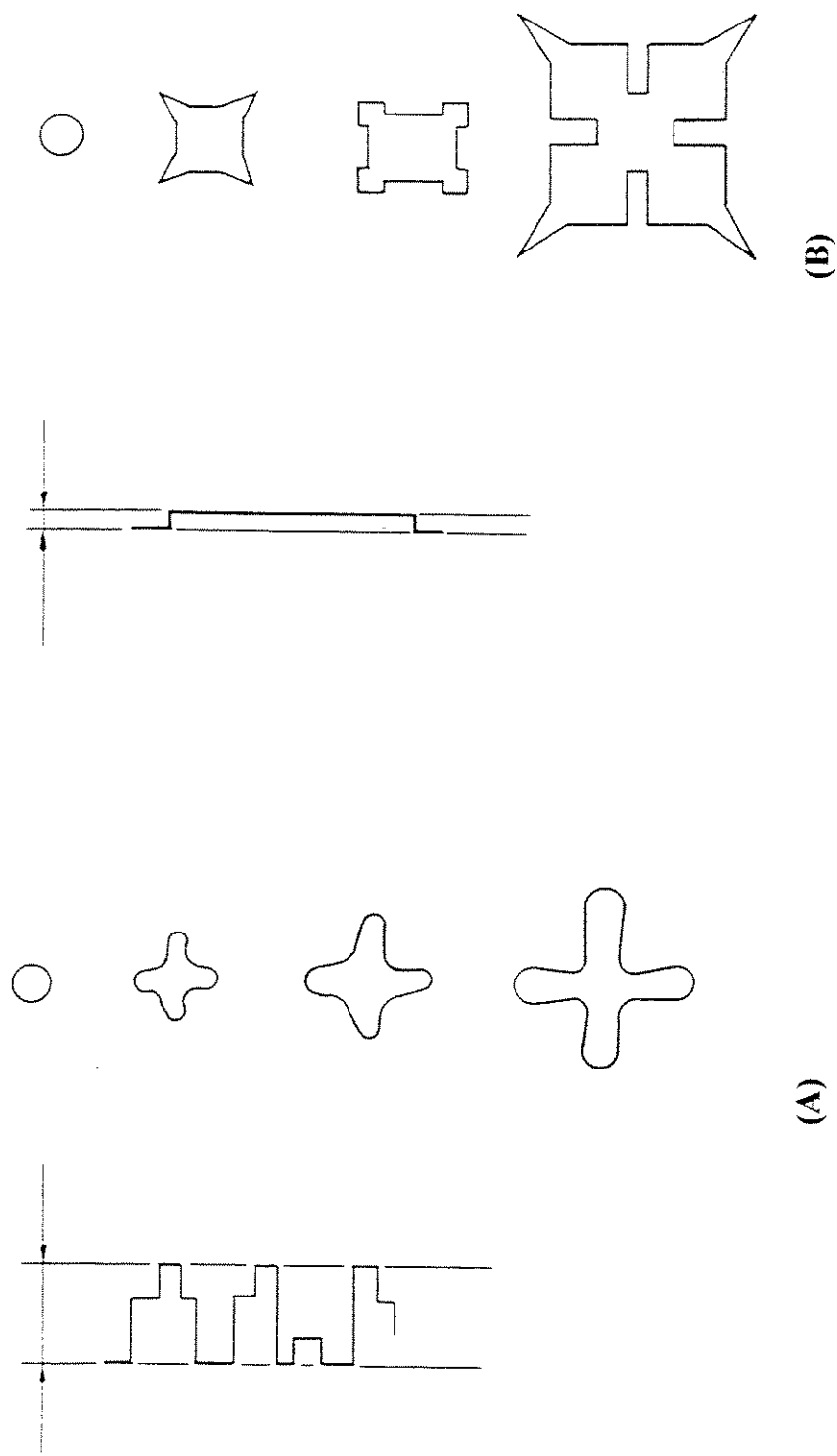


Figura 2.1 - Ilustração esquemática dos dois tipos de interface sólido/líquido e as respectivas morfologias de crescimento dos cristais a partir do núcleo sólido formado **(A)** interface difusa e **(B)** interface facetada [**Flemings, 1974; Prates/Davies, 1978; Kurz/Fisher, 1984**].

2.1 - A Partição de Solutos

A solidificação das ligas metálicas envolve fenômenos mais complexos do que a solidificação de metais puros. São sempre analisados a partir do pressuposto de que, na interface sólido/líquido, pode ser considerado o equilíbrio entre ambos e, desta forma, para cada temperatura, suas composições químicas são as determinadas pelo diagrama de equilíbrio [Flemings,1974; Lesout,1988] uma vez que o fenômeno está regido pelo intervalo de solidificação que favorece a rejeição seletiva das diferentes espécies químicas que podem ser segregadas ou incorporadas pela mesma. Tal hipótese é válida para os processos comuns de solidificação, onde as velocidades de resfriamento envolvidas são relativamente baixas.

O equilíbrio entre um sólido cristalino e um líquido é convenientemente representado num diagrama de equilíbrio binário por meio de duas linhas, a linha liquidus e a linha solidus. O fato destas duas linhas não coincidirem, exceto para metais puros e, em casos excepcionais, de fusão congruente e eutéticas, indica que a composição química das fases que representam são diferentes no equilíbrio. Como consequência tem-se que, quando o líquido, inicialmente com uma composição uniforme, por resfriamento solidifica progressivamente, a composição do sólido não será uniforme; a distribuição do soluto no sólido, quando a solidificação estiver completada será diferente da distribuição no líquido, embora a quantidade total de soluto mantenha-se constante.

Nas ligas binárias, essa diferença de composição do líquido para o sólido pode ser expressa pelo coeficiente de distribuição de soluto no equilíbrio (K_0) :

$$K_0 = \frac{C_s}{C_L} \quad , \quad 2.1$$

onde:

C_s e C_L são respectivamente, as percentagens em peso de soluto nas fases sólida e líquida, em equilíbrio, a uma determinada temperatura do intervalo de solidificação

É conveniente na discussão da redistribuição do soluto [Chalmers,1964], considerar aproximações nas quais as linhas solidus e liquidus sejam retas, como ilustrado na Figura 2.2, admitindo-se que K_0 seja constante na análise, mesmo existindo uma real variação com as linhas do diagrama de fases.

Portanto, considerando-se um sistema onde o coeficiente de partição de soluto seja menor que a unidade ($K_0 < 1$), a solidificação ocorrerá com uma contínua rejeição de soluto da fase sólida para a fase líquida e o transporte deste soluto nesta última é que deve ser considerado.

Classicamente, o transporte do soluto rejeitado durante a solidificação de ligas com $K_0 < 1$ é tratado matematicamente em duas condições de contorno bem definidas (sempre considerando a interface sólido/líquido morfologicamente plana) [Flemings,1974; Kurz/Fisher,1984; Garcia, 1997] que são as seguintes:

- Solidificação sob condições de equilíbrio

e

- Solidificação fora de equilíbrio.

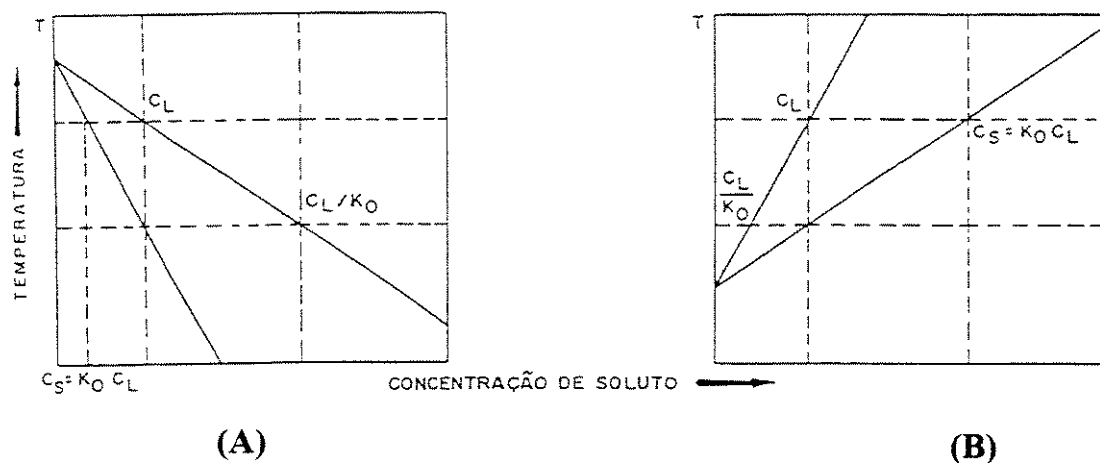


Figura 2.2 - Partes de um diagrama de equilíbrio de ligas binárias ilustrando em (A) caso onde o soluto abaixa o ponto de fusão do metal base ($K_0 < 1$) e em (B) caso onde o soluto eleva o ponto de fusão do metal base ($K_0 > 1$) [Prates/Davies,1978].

2.1.1- Solidificação sob condições de equilíbrio

Como o nome sugere, é aplicável para processos de solidificação suficientemente lentos, no qual tanto o gradiente de temperatura como a taxa de solidificação no sistema sólido/líquido sejam insignificantes, de tal forma que os gradientes de impurezas, sejam eliminados por processos de difusão.

Esse tratamento encontra pequena aplicação prática, pois somente sob condições muito bem controladas há esta completa homogeneidade das fases sólida e líquida, tendo em vista que a ocorrência deste fenômeno dá-se por difusão de soluto, tanto na fase líquida quanto na fase sólida, fato que exige velocidades de resfriamento muito baixas.

A Figura 2.3 ilustra as variações de composição química que ocorrem durante a solidificação sob condições de equilíbrio. A parte (a) contém setor de um diagrama de fases de equilíbrio para uma liga de composição C_0 . A parte (b) contém as variações progressivas nas proporções e composições do sólido e do líquido, com o decréscimo da temperatura.

Neste caso, a solidificação se processa obedecendo à **regra da alavanca** e a fração de sólido (F_S) pode ser calculada pela Equação 2.2 que, em termos das concentração envolvidas, assume a forma:

$$F_S = \left(\frac{C_s - K_0 C_0}{C_s} \right) \left(\frac{1}{1 - K_0} \right) \quad , \quad 2.2$$

ou na forma da Equação 2.3, em termos das temperaturas envolvidas:

$$F_S = \left(\frac{T_L - T}{T_F - T} \right) \left(\frac{1}{1 - K_0} \right) \quad , \quad 2.3$$

sendo

T_F = temperatura de fusão do metal base do sistema [K];

T_L = temperatura da linha liquidus da liga [K];

T = temperatura da fase líquida na frente da interface S/L [K]; e

C_0 = concentração nominal da liga [%].

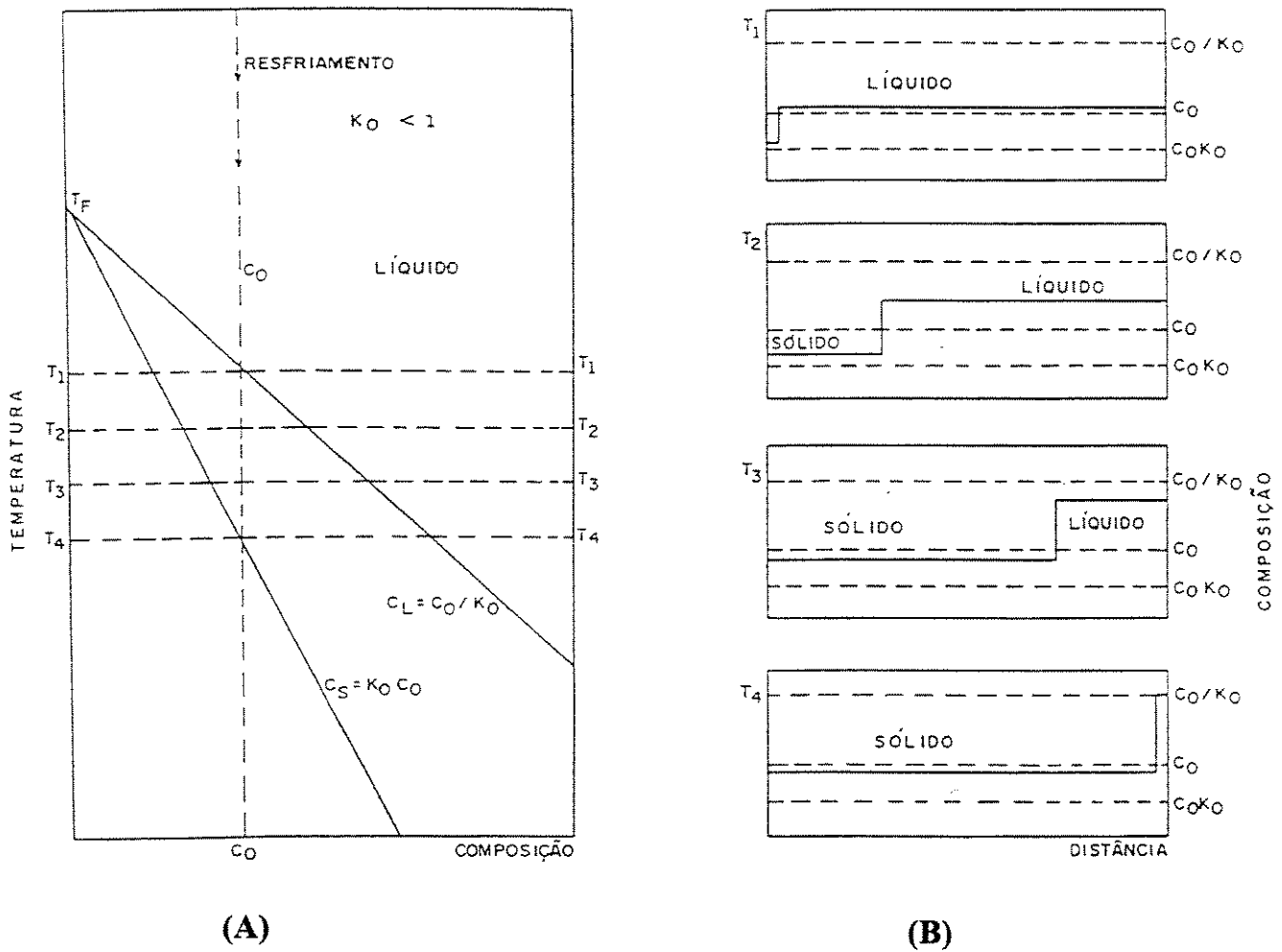


Figura 2.3 - Ilustração esquemática da variação do teor de soluto durante solidificação em equilíbrio em (A) região do diagrama de fases para uma liga de composição C_0 com $K_0 < 1$ e em (B) progresso das proporções e composições do sólido e do líquido [Prates/Davies,1978].

É importante destacar que a regra da alavanca é aplicável em situações práticas de solidificação de ligas cujo soluto é um intersticial de alta mobilidade, como o caso do carbono nas ligas Fe-C.

2.1.2- Solidificação fora de equilíbrio

Na solidificação fora de equilíbrio, a redistribuição do soluto pode ser abordada das seguintes maneiras:

A) Redistribuição de soluto no líquido apenas por difusão;

B) Redistribuição de soluto por mistura completa no líquido;

B₁) sem difusão de retorno no sólido,

B₂) com difusão de retorno no sólido,

B₂₁) quando se considera a velocidade da interface sólido/líquido constante,

B₂₂) quando se considera a velocidade da interface sólido/líquido parabólica,

C) Redistribuição de soluto no líquido por mistura parcial.

A) Redistribuição de soluto no líquido apenas por difusão

Considerando-se a solidificação de uma liga de composição C_0 ($K_0 < 1$), como a da Figura 2.3, condições de regime permanente de concentração de soluto (velocidade de rejeição é igual a velocidade de difusão) e as condições de contorno que podem ser retiradas da Figura 2.4, a equação do perfil de concentração de soluto, do elemento Δx considerado, pode ser escrita na forma da equação do balanço de massa, como mostrado a seguir:

$$\{D_L A \rho \left[\left(\frac{\partial C_L}{\partial x} \right)_{x+\Delta x} - \left(\frac{\partial C_L}{\partial x} \right)_x \right] \Delta t\}_{(1)} + \{V A \rho [(C_L)_{x+\Delta x} - (C_L)_x] \Delta t\}_{(2)} = \{A \rho \Delta C_L \Delta x\}_{(3)}, \quad 2.4$$

onde

ρ = massa específica do líquido [kg/m^3],

D_L = difusividade de soluto no líquido [m^2/s],

A = área unitária,

Δt = infinitesimal de tempo [s],

V = velocidade da interface [m/s], e

Δx = elemento de volume considerado [m^3].

que feitas as simplificações matemáticas possibilita obter a equação diferencial abaixo:

$$\left[\frac{\partial C_L}{\partial t} \right]_{(3)} = [D_L \left(\frac{\partial^2 C_L}{\partial x^2} \right)]_{(1)} + [V \left(\frac{\partial C_L}{\partial x} \right)]_{(2)}, \quad 2.5$$

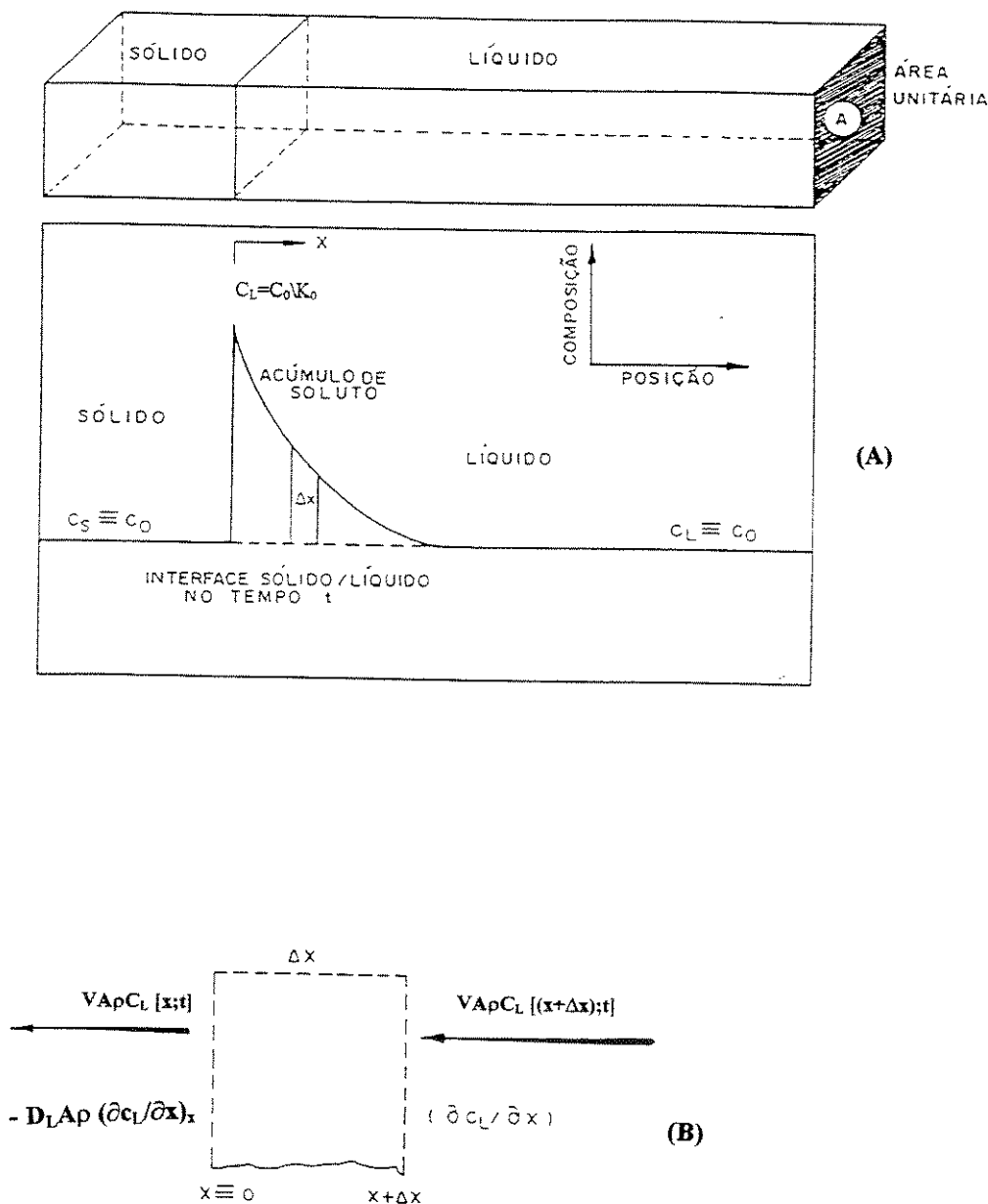


Figura 2.4 - Esquema ilustrativo da redistribuição de soluto no líquido apenas por difusão em regime permanente (A) perfil de distribuição de soluto no líquido à frente da interface sólido/líquido, (B) balanço de massa no elemento ΔX à frente da interface sólido/líquido [Prates/Davies,1978; A. Garcia,1995].

com

- (1) diferença entre a quantidade de soluto por unidade de tempo que entra e a quantidade de soluto que sai do elemento de volume devido ao fluxo por difusão;
- (2) variação da quantidade de soluto no elemento de volume por unidade de tempo devido ao movimento da interface sólido/líquido;
- (3) variação da quantidade de soluto no elemento de volume por unidade de tempo.

A Equação 2.5 pode ser rescrita fazendo-se o limite de $\Delta x \Rightarrow 0$:

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} = D_L \left(\frac{\partial^2 C_L}{\partial x^2} \right) + V \left(\frac{\partial C_L}{\partial x} \right) \quad , \quad 2.6$$

que, após um transiente inicial, atinge-se o regime permanente $0 = \frac{\partial C_L}{\partial t}$ e então

$$0 = D_L \left(\frac{\partial^2 C_L}{\partial x^2} \right) + V \left(\frac{\partial C_L}{\partial x} \right) \quad , \quad 2.7$$

cuja solução é do tipo

$$C_L = A \exp(m_1 x) + B \exp(m_2 x) \quad , \quad 2.8$$

e m_1 e m_2 são raízes de

$$D_L m^2 + Vm = 0 \quad (a) \quad ; \quad m_1 = 0 \quad \# \quad m_2 = - (V / D_L) \quad (b) \quad , \quad 2.9$$

Permitindo-se obter a equação da solução geral na forma:

$$C_L = b + B \exp\left(-\frac{V}{D_L} x\right) \quad , \quad 2.10$$

na qual

C_L = concentração de soluto no líquido a uma distância x da interface sólido/líquido;

b e B , constantes de integração obtidas com o auxílio das condições de contorno

$$x = 0 \quad , \quad C_L = C_0 / K_0 \quad , \quad (a)$$

2.11

$$x = \infty \quad , \quad C_L = C_0 \quad , \quad (b)$$

com as quais se rescreve a equação da solução geral na forma da Equação 2.12 :

$$C_L = C_0 \left[1 + \left(\frac{1 - K_0}{K_0} \right) \exp\left(-\frac{V}{D_L} x\right) \right] \quad 2.12$$

No final da solidificação haverá outro transiente correspondendo ao encontro da camada limite com a extremidade do cadinho.

Geralmente, as soluções dos transientes são bastante complexas. Entretanto, para pequenos valores de K_0 , já se tem uma equação simplificada para o transiente inicial:

$$C_S = C_0 \left[1 - (1 - K_0) \exp\left(-K_0 \frac{V}{D_L} x\right) \right] \quad 2.13$$

A Figura 2.5 ilustra o perfil de concentração de soluto correspondente ao movimento somente por difusão: (A) para o caso de uma liga com $K_0 < 1$ e (B) para o caso de uma liga com $K_0 > 1$.

B) Redistribuição de soluto por mistura completa no líquido

B₁) sem difusão de retorno no sólido

Esta abordagem encontra-se ilustrada na Figura 2.6, na qual podem ser observados gráficos que esquematizam os perfis de composição química das fases sólida e líquida, durante a solidificação unidirecional de uma barra de uma liga cujo diagrama de equilíbrio hipotético está representado na parte (D). Observa-se que, enquanto a fase líquida apresenta composição C_L^* (dada pelo diagrama para a temperatura T), a fase

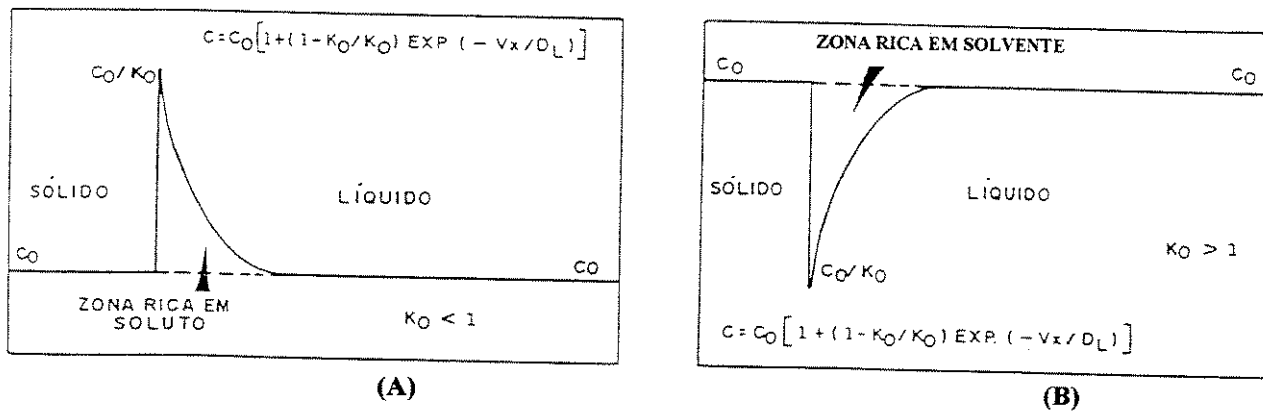


Figura 2.5 - ilustração do perfil de soluto para regime permanente e redistribuição de soluto somente por difusão (A) rejeição de soluto e (B) rejeição de solvente [Prates/Davies,1978].

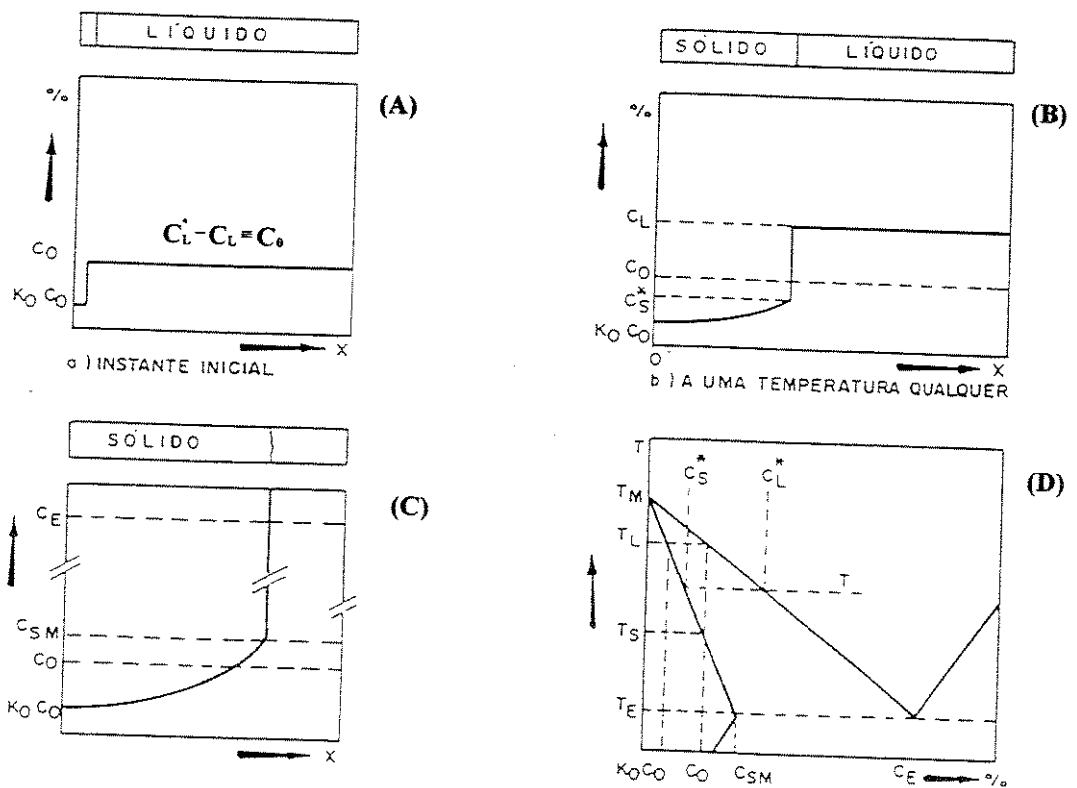


Figura 2.6 - Esquema ilustrativo da redistribuição de soluto na solidificação com difusão completa no líquido sem difusão de retorno no sólido (A) instante inicial (B) a uma temperatura qualquer (C) depois da solidificação (D) parte do diagrama de fases [Flemings,1974; Prates/Davies,1978; Kurz/Fisher,1992].

sólida é enriquecida em soluto à medida que a interface avança e permanece heterogênea dada a impossibilidade de transporte de soluto. Estas circunstâncias exigem a existência ou da convecção forçada ou da agitação mecânica no líquido para que sua concentração permaneça constante.

O tratamento matemático pode ser feito partindo do balanço de massa, feito com o auxílio da Figura 2.7, que permite obter a Equação 2.14,

$$_{(1)}[C_L dF_S] - _{(2)}[C_S dF_S] = _{(3)}[(1 - F_S) dC_L] \quad 2.14$$

- 1. Quantidade de soluto em dF_S antes da solidificação;**
- 2. Quantidade de soluto em dF_S depois da solidificação;**
- 3. Variação da quantidade de soluto no líquido ;**

com a qual chega-se a:

$$\frac{dF_S}{(1 - F_S)} = \frac{dC_L}{(C_L - C_S)} \quad , \quad 2.15$$

e considerando que a concentração de soluto na interface sólido/líquido pode ser dada pela Equação 2.16 .

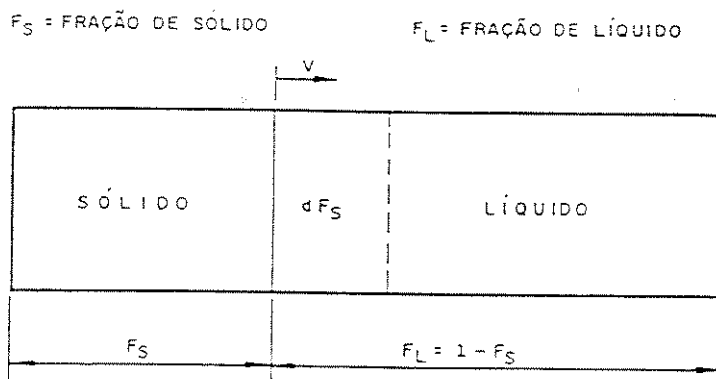


Figura 2.7 - Esquema ilustrativo da interface sólido/líquido para apoio do balanço massa na condição redistribuição de soluto por mistura completa no líquido.

$$C_S = K_0 C_L \quad , \quad 2.16$$

que levada na equação 2.15 permite escrever a Equação 2.17,

$$\int_0^{F_S} \frac{dF_S}{(1 - F_S)} = \int_{C_0}^{C_L} \frac{dC_L}{(1 - K_0)C_L} \quad , \quad 2.17$$

cuja solução permite escrever a fração de sólido (F_S) em termos das concentrações envolvidas na forma da Equação 2.18.

$$F_S = 1 - \left(\frac{C_S}{K_0 C_0} \right)^{\left(\frac{1}{K_0 - 1} \right)} \quad , \quad 2.18$$

ou na forma da Equação 2.19 , em termos das temperaturas envolvidas

$$F_S = 1 - \left(\frac{T_F - T}{T_F - T_L} \right)^{\left(\frac{1}{K_0 - 1} \right)} \quad 2.19$$

As Equações 2.18 e 2.19, são conhecidas como Equação de Scheil [Flemings,1974; Poirier et al,1987; Jong/Hwang,1992 e Voller/Swaminathan,1991], por ter sido um dos primeiros pesquisadores a apresentar uma formulação analítica para o estudo da microsegregação tendo por base uma condição extrema, a da máxima segregação. Estas equações não levam em conta a contração no sólido e podem ser usadas com bons resultados em sistemas substitucionais onde a difusão no sólido pode ser ignorada.

B₂) com difusão de retorno no sólido

Partindo da hipótese de que nas condições práticas podia se esperar resultados intermediários que poderiam estar entre os obtidos pela Equação de Equilíbrio e a Equação de Scheil, Brody-Flemings [Brody-Flemings,1966;Bower,1966; Wanqi,1994] abriram a teoria de Scheil a fim de incluir os efeitos da difusão de retorno de soluto no sólido.

Essa abordagem encontra-se ilustrada na Figura 2.8 e é muito importante quando se está considerando um sistema com apreciável movimentação de soluto no estado sólido.

Nestas circunstâncias, o balanço de massa junto à interface sólido/líquido é o que está representado pela Equação 2.20,

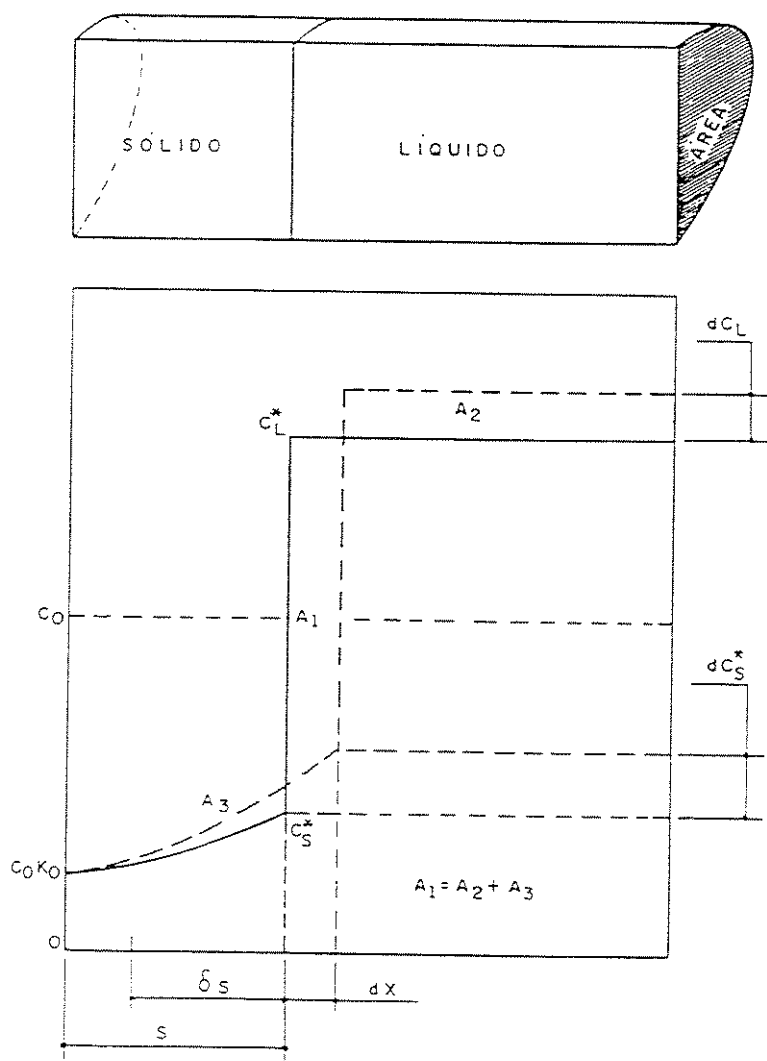


Figura 2.8 - Esquema ilustrativo da evolução da interface sólido/líquido para distribuição de soluto por mistura completa no líquido com difusão de retorno no sólido (região A_3) [Kurz/Fisher,1992].

$$[(C_L - C_S)dF_S]_{(A_1)} = [(1 - F_S)dC_L]_{(A_2)} + \left[\frac{\delta_s}{2\Omega}dC_S\right]_{(A_3)} \quad 2.20$$

B_{2.1}) quando se considera a velocidade da interface sólido/líquido constante

Na Equação 2.20, o termo adicional que modifica a Equação 2.15, foi obtido de observações experimentais que levaram a seguinte conclusão:

$$\delta_s = 2 (D_S / V) = 2 \left(\frac{D_S \cdot t_{SL}}{\Omega} \right) \quad , \quad 2.21$$

na qual δ_s = espessura da camada limite[m],

$V = (\Omega/t_{SL})$, velocidade da interface S/L constante[m/s],

D_S = difusividade no sólido[m²/s],

Ω = comprimento solidificado[m],

t_{SL} = tempo local de solidificação[s].

O tratamento matemático pode ser feito partindo-se da consideração de que a concentração de soluto na interface sólido/líquido é dada pela Equação 2.22 :

$$C_L = C_S / K_0 \quad , \quad (a) \quad 2.22$$

$$dC_L = (1/K_0) dC_S \quad , \quad (b)$$

que levadas na equação do balanço de massa resulta na Equação 2.23 :

$$\left(\frac{C_s}{K_0} - C_s\right)dF_s = (1 - F_s)\frac{dC_s}{K_0} + \frac{D_s}{\Omega V}dC_s, \quad 2.23$$

na qual $U = (D_s / \Omega.V)$. 2.23a

O parâmetro de difusão de retorno Ω_2 é dado pela equação 2.24, que levado à Equação 2.23 permite a obtenção da Equação 2.25 :

$$\Omega_2 = (D_s / \Omega^2).t_{SL}, \quad 2.24$$

$$\frac{dC_s}{C_s} = \frac{(1 - K_0)}{(1 - F_s) + \Omega_2 K_0} dF_s \quad 2.25$$

integrando-se nos limites propostos assume a forma da Equação 2.26 :

$$\int_{K_0 C_0}^{C_s} \frac{dC_s}{C_s} = (1 - K_0) \int_0^{F_s} \frac{dF_s}{(1 - F_s) + \Omega_2 K_0}, \quad 2.26$$

e apresenta como solução a Equação 2.27b :

$$\ln\left(\frac{C_s}{K_0 C_0}\right) = -(1 - K_0) \ln\left[\frac{(1 - F_s) + \Omega_2 K_0}{1 + \Omega_2 K_0}\right], \quad (a)$$

2.27

$$\frac{C_s}{K_0 C_0} = \left[\frac{(1 - F_s) + \Omega_2 K_0}{1 + \Omega_2 K_0}\right]^{(K_0 - 1)} \quad (b)$$

O rearranjo da Equação 2.27b, permite que se escreva:

$$F_S = (1 + \Omega_2 K_0) \left\{ 1 - \left[\frac{C_S}{K_0 C_0} \right]^{\left(\frac{1}{K_0 - 1} \right)} \right\} , \quad 2.28$$

que, em termos das temperaturas envolvidas, toma a forma da Equação 2.29 ,

$$F_S = (1 + \Omega_2 K_0) \left\{ 1 - \left[\frac{T_F - T}{T_F - T_L} \right]^{\left(\frac{1}{K_0 - 1} \right)} \right\} , \quad 2.29$$

B_{2.2}) quando se considera a velocidade da interface sólido/líquido parabólica

Para o crescimento parabólico de uma barra tem-se :

$$S_0 = \Omega_1 (t)^{1/2}, \quad \text{onde } \Omega_1, \text{ é o parâmetro de solidificação parabólica} \quad . \quad 2.30$$

Considerando uma espessura solidificada qualquer da barra a velocidade da interface é dada por:

$$V = \frac{dS_0}{dt} = \frac{\Omega_1}{2\sqrt{t}} , \quad 2.31$$

$$\Omega = \Omega_1 (t_{SL})^{1/2} . \quad 2.32$$

Com a barra totalmente solidificada define-se o valor de Ω_1 , que deverá ser levado à equação da velocidade, Equação 2.31, para se obter a nova equação para a mesma, descrevendo o perfil parabólico (Equação 2.33):

$$V = \frac{\Omega}{2\sqrt{t}\sqrt{t_{SL}}} \quad 2.33$$

Mas $U = (D_S / \Omega.V)$. (Equação 2.23a) cuja substituição da Equação 2.33 na Equação 2.23a leva à construção de uma nova equação para Ω_2 na Equação 2.26, possibilitando que ela passe a descrever um movimento parabólico para a frente de solidificação :

$$U = \frac{2D_S\sqrt{t}\sqrt{t_{SL}}}{\Omega^2} \Rightarrow U = \frac{2D_S\sqrt{t}\sqrt{t_{SL}}}{\Omega^2} \frac{\sqrt{t_{SL}}}{\sqrt{t_{SL}}} \Rightarrow U = \frac{2D_S t_{SL}}{\Omega^2} \frac{\sqrt{t}}{\sqrt{t_{SL}}} \quad 2.34$$

levando naturalmente a

$$U = 2\Omega_2 \frac{\sqrt{t}}{\sqrt{t_{SL}}} \Rightarrow \Rightarrow \text{com } F_S = (t / t_{SL})^{1/2} \Rightarrow \Rightarrow U = 2\Omega_2 F_S \quad 2.35$$

Aplicando-se este resultado à Equação 2.26 chega-se à Equação 2.36:

$$\int_{K_0 C_0}^{C_S} \frac{dC_S}{C_S} = (1 - K_0) \int_0^{F_S} \frac{dF_S}{(1 - F_S) + 2\Omega_2 K_0 F_S} = (1 - K_0) \int_0^{F_S} \frac{dF_S}{1 - (1 - 2\Omega_2 K_0) F_S} \quad (a)$$

2.36

$$C_S = K_0 C_0 [1 - (1 - 2\Omega_2 K_0) F_S]^{\left(\frac{K_0 - 1}{1 - 2\Omega_2 K_0}\right)} \quad (b)$$

Rearranjando-se a Equação 2.36b, obtém-se a Equação 2.37,

$$F_s = \left[\frac{1 - \left(\frac{C_s}{K_0 C_0} \right)^{\left(\frac{1-2\Omega_2 K_0}{K_0-1} \right)}}{1 - 2\Omega_2 K_0} \right] , \quad 2.37$$

que reflete o perfil parabólico para o crescimento da interface sólido/líquido em função das concentrações de soluto envolvidas, ou na forma da Equação 2.37a :

$$F_s = \left[\frac{1 - \left(\frac{T_F - T}{T_F - T_L} \right)^{\left(\frac{1-2\Omega_2 K_0}{K_0-1} \right)}}{1 - 2\Omega_2 K_0} \right] , \quad 2.37a$$

refletindo este perfil parabólico em função das temperatura envolvidas, segundo a proposta de **Brody-Flemings**.

Esta equação aproxima-se da Equação de Scheil quando $\Omega_2 = 0$. Por outro lado, quando $\Omega_2 = 1/2$, o perfil de composição de soluto no sólido aproxima-se ao descrito pela Equação de Equilíbrio , o que só poderia acontecer para $\Omega_2 = \infty$. Esse erro deve-se à aproximação na consideração da área triangular (A_3) da Figura 2.8 . Assim seus resultados apresentam boa confiabilidade para valores até $\Omega_2 = 0,1$.

Por esta razão, pesquisas posteriores [Clyne/Kurz,1981;Ohnaka,1986] propuseram novas equações que eliminaram a inconsistência física da Equação de **Brody/Flemings** .

Para melhorar a solução de **Brody/Flemings** , **Clyne/Kurz** propuseram a substituição do parâmetro Ω_2 por outro que eliminasse o erro introduzido na consideração triangular da área (A_3) . Desta forma, descreveram o perfil de distribuição de soluto no sólido por meio de uma função exponencial para satisfazer às duas condições limites, chegando à seguinte equação:

$$\alpha' = \Omega_2 \left[1 - \exp\left(-\frac{1}{\Omega_2}\right) \right] - \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{1}{2\Omega_2}\right) \quad , \quad 2.38$$

valor que deve substituir Ω_2 na Equação de **Brody/Flemings** para que a mesma passe a representar a proposta de **Clyne/Kurz** .

A proposta de **Ohnaka** tem por base a hipótese de que a distribuição de soluto no sólido pode ser representada por uma curva quadrática do tipo,

$$C_S = a + bx + cx^2 \quad , \quad 2.39$$

onde **a**, **b** e **c**, são valores dependentes do tempo e **x** é a distância a partir do centro da dendrita. A geometria da dendrita é colunar e a solução da Equação de Difusão pode ser feita pelo método do Perfil Integral da seguinte forma,

$$\int_0^x \left(\frac{dC_S}{dt} \right) dx = D \int_{C_0}^{C_S} \left(\frac{d^2 C_S}{dx^2} \right) dx \quad , \quad 2.40$$

chegando à equação 2.40a, cujo valor deve substituir Ω_2 na Equação de **Brody/Flemings**.

$$\alpha'' = [\Omega_2 / (1 + 2\Omega_2)] \quad 2.40a$$

Tanto a Equação de **Clyne/Kurz** como a de **Ohnaka** aproximam-se da Equação de **Scheil** ou da Equação de Equilíbrio nos limites $\Omega_2 = 0$ e $\Omega_2 = \infty$ permitindo o uso de qualquer uma.

Mais recentemente, Kobayashi [**Kobayashi, 1988**] apresentou uma solução exata do modelo de solidificação de **Brody/Flemings**, com velocidade de crescimento parabólica, cuja equação é dada por,

$$C_s(F_s, z) = K_0 C_0 \sum_{n=0}^{\infty} \zeta_n \frac{F[-\frac{n}{2}, \frac{1}{2}, -z]}{F[-\frac{n}{2}, \frac{1}{2}, -z]} F_s^n, \quad 2.41$$

que, na interface, assume a forma:

$$C_s^i = K_0 C_0 \sum_{n=0}^{\infty} \zeta_n F_s^n \quad 2.42$$

Segundo **Kobayashi**, apesar de se ter obtido a solução exata de modelo de **Brody/Flemings**, existem ainda, vários problemas a serem resolvidos para uma fácil e correta aplicação do modelo nos processos de solidificação. Esses problemas podem ser resumidos como:

1. há dificuldade no cálculo da solução exata, pois esta contém uma série infinita de funções hipergeométricas confluentes,
2. não há um método que estime realisticamente a velocidade de solidificação ou o tempo local de solidificação. Em seu modelo, a velocidade de

solidificação é dada como sendo independente da redistribuição de soluto, o que não parece ser realístico, pois um método mais realístico deveria calcular a Equação de Difusão e a Equação de Condução de Calor de modo acoplado,

3. a suposição de velocidade de solidificação parabólica pode não ser razoável.

Com base no desenvolvimento da solução exata, **Kobayashi** apresenta, em outro trabalho [**Kobayashi, 1988**], duas soluções aproximadas.

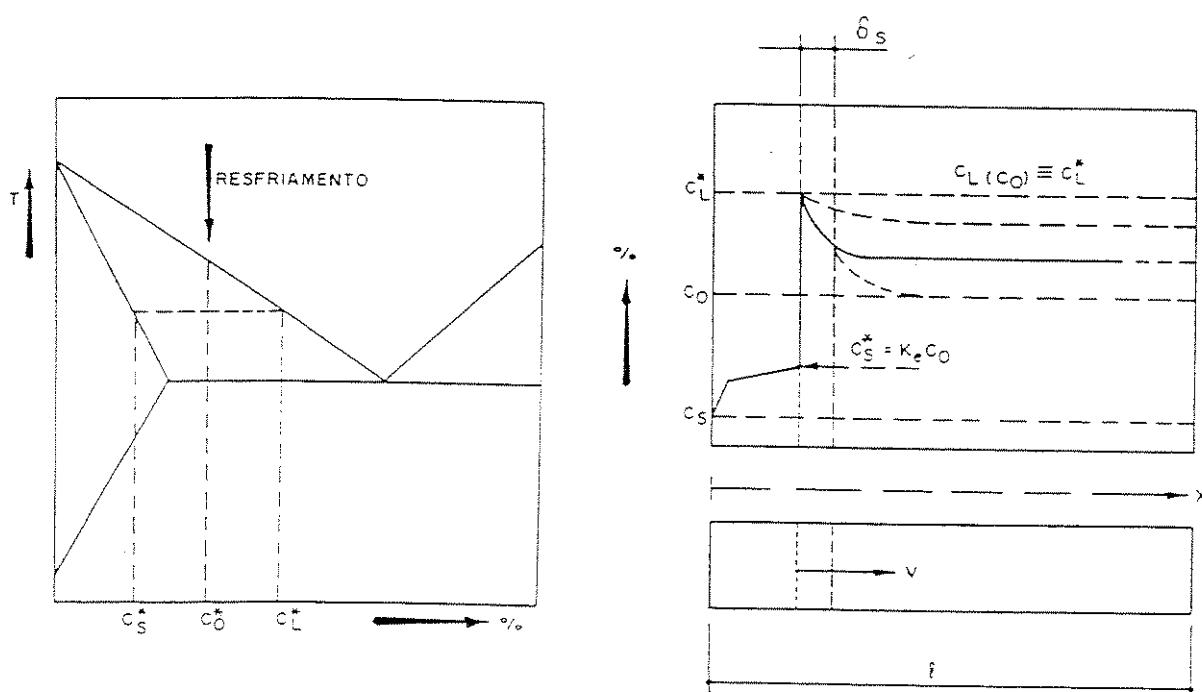
C) Redistribuição de soluto no líquido por mistura parcial

Como ilustração de uma condição normal de solidificação as temperaturas e as composições químicas obedecem a um diagrama do tipo visto na Figura 2.9a. Na ausência de outros efeitos, uma liga de composição C_0 solidificará formando o primeiro sólido com composição C_S . Na medida que a interface avança uma quantidade de soluto, dada em cada instante pela diferença ($C_0 - C_S$), será rejeitada para o líquido. Dependendo da taxa de difusão e movimentos convectivos a distribuição de soluto ao longo do metal segue um perfil muito próximo daquele mostrado na Figura 2.9b. A distância característica (δ_S) delimita uma camada na qual o transporte é controlado unicamente por difusão. A partir daí a composição varia conforme os movimentos convectivos, podendo até ser uniforme ao longo do líquido. Devido a esses efeitos define-se um coeficiente partição efetivo de soluto(K_E).

$$K_E = C_S^* / C_0$$

Portanto, junto à interface sólido/líquido haverá ação de movimento por difusão e por convecção ou seja :

- formação de uma camada limite onde o movimento ocorre somente por difusão,
- fora da camada limite a composição do líquido é mantida constante por convecção (no caso de meio líquido extenso $\approx C_0$).



(A)

(B)

Figura 2.9 - Ilustração da distribuição de soluto na solidificação de ligas binárias com frente de solidificação plana em (A) representação do diagrama de equilíbrio e em (B) representação da distribuição de soluto no líquido[Zin,1992].

O balanço de massas, feito com o auxílio da Figura 2.4, possibilita escrever uma equação, levando em conta condições simplificadoras tais como: solidificação unidirecional e estado estacionário e sem distribuição de soluto no sólido.

Nessas circunstâncias, a Equação 2.7 é a que governa a distribuição de soluto no líquido :

$$D_L \left(\frac{d^2 C_L}{dx^2} \right) + V_s \left(\frac{dC_L}{dx} \right) = 0 .$$

Com o apoio das seguintes condições de contorno,

$$C_L = C_L^* \quad , \quad \text{para } x = 0 \quad (a)$$

2.44

$$C_L = C_0 \quad , \quad \text{para } x = \delta \quad (b)$$

apresenta como solução a Equação 2.45 [Burton et al,1953]:

$$(C_L^* - C_S^*) = (C_0 - C_S^*) \exp\left(\frac{V\delta_s}{D_L}\right) . \quad 2.45$$

Entretanto, para $x = \delta_s$ tem-se que:

$$C_S^* = K_E C_0 \quad , \quad (a)$$

2.46

$$C_S^* = K_0 C_L^* \quad . \quad (b)$$

O arranjo matemático das equações 2.45 e 2.46 permite escrever as Equações 2.47 e 2.48

$$K_E = \frac{K_0}{K_0 + (1 - K_0) \exp\left(-\frac{V\delta_s}{D_L}\right)} \quad 2.47$$

O coeficiente de partição efetivo de soluto K_E deve substituir K_0 na equação de Scheil

$$C_S^* = K_E C_0 [1 - F_S]^{(K_E - 1)} \quad 2.48$$

Se

$$\frac{V\delta_s}{D_L} \Rightarrow 0 ; \quad K_E = K_0 \quad [\text{mistura completa no líquido (Equação de Scheil) }]$$

$$\frac{V\delta_s}{D_L} \Rightarrow \infty ; \quad K_E = 1 \quad [\text{mistura somente por difusão }]$$

indicando que

$$K_0 \leq K_E \leq 1$$

2.2- A Estabilidade da Interface Sólido/Líquido

A estabilidade da interface sólido/líquido é resultado do balanço entre os superesfriamentos devido a:

Campo de soluto	:	tende a instabilizar,
Forças de capilaridade	:	tendem a estabilizar,
Campo térmico	:	tende a:
		estabilizar se $G_{LS} > 0$
		instabilizar se $G_{LS} < 0$

Para metais puros com interface plana o único fator desestabilizador é o campo térmico que, para os critérios de estabilidade a seguir examinados, é expresso pelo gradiente térmico médio na interface sólido/líquido (G_{LS}) [Laxmanan,1989-1997].

2.2.1 Critério de Estabilidade do Superesfriamento Constitucional (SRC)

Esse critério foi introduzido inicialmente por Tiller [Tiller,1953], e posteriormente por Winegard/Chalmers [Winegard/Chalmers,1954]. Segundo suas propostas a interface instabilizar-se-á toda vez que o gradiente térmico no líquido, na frente da interface sólido/líquido, seja menor do que o gradiente da linha liquidus, em função do acréscimo de soluto na frente da interface sólido/líquido devido à partição e ao acúmulo de soluto no líquido. Esta situação encontra-se esquematizada na Figura 2.10, na qual é considerada constitucionalmente superesfriada a porção de líquido na frente da interface, cuja temperatura liquidus (T_L) esteja acima da temperatura real (T_R), segundo o gradiente térmico vigente, isto é, do ponto A até o ponto B.

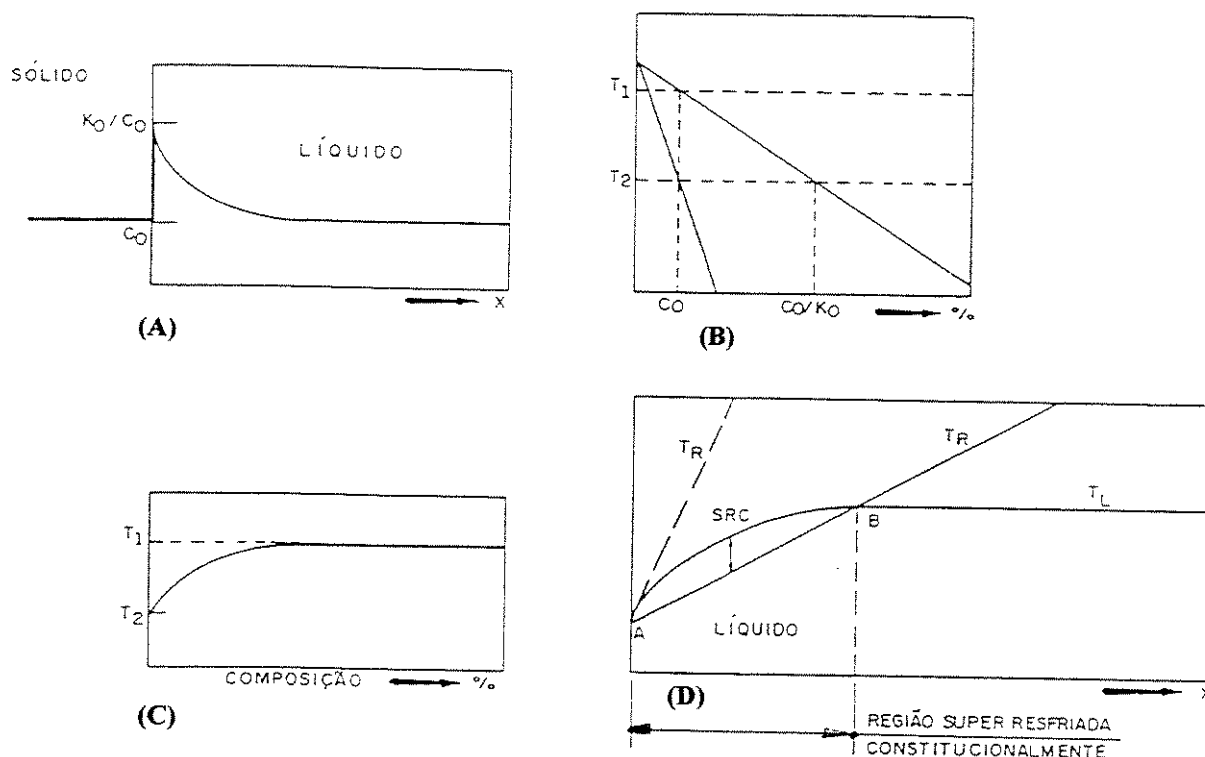


Figura 2.10 - Esquema ilustrativo do superesfriamento constitucional, (A) Perfil de concentração à frente da interface sólido/líquido decrescente, (B/C) Perfil de temperaturas liquidus à frente da interface sólido/líquido crescente e (D) Região superesfriada constitucionalmente à frente da interface sólido/líquido.

No que se refere à solidificação de ligas, o SRC apresenta-se como o maior responsável pela instabilidade da interface sólido/líquido respondendo pela transição de interface estável para instável.

Esta proposta pode ser melhor avaliada com o apoio da Figura 2.11B e com o desenvolvimento matemático apresentado a seguir:

Sabe-se que:

$$\left(\frac{dC_L}{dx}\right)_{x=0} = -\left(\frac{V}{D_L}\right)(C_L^* - C_S^*)$$

Entretanto, com $C_s^* = K_0 C_L^*$ [Equação 2.46b], a Equação 2.49 pode ser reescrita na forma:

$$\left(\frac{dC_L}{dx}\right)_{x=0} = -\frac{V}{D_L} C_L^* (1 - K_0). \quad 2.49a$$

Por outro lado, o gradiente da linha liquidus é dado por:

$$\frac{dT_L}{dx} = \frac{dT_L}{dC_L} \cdot \frac{dC_L}{dx} \quad 2.50$$

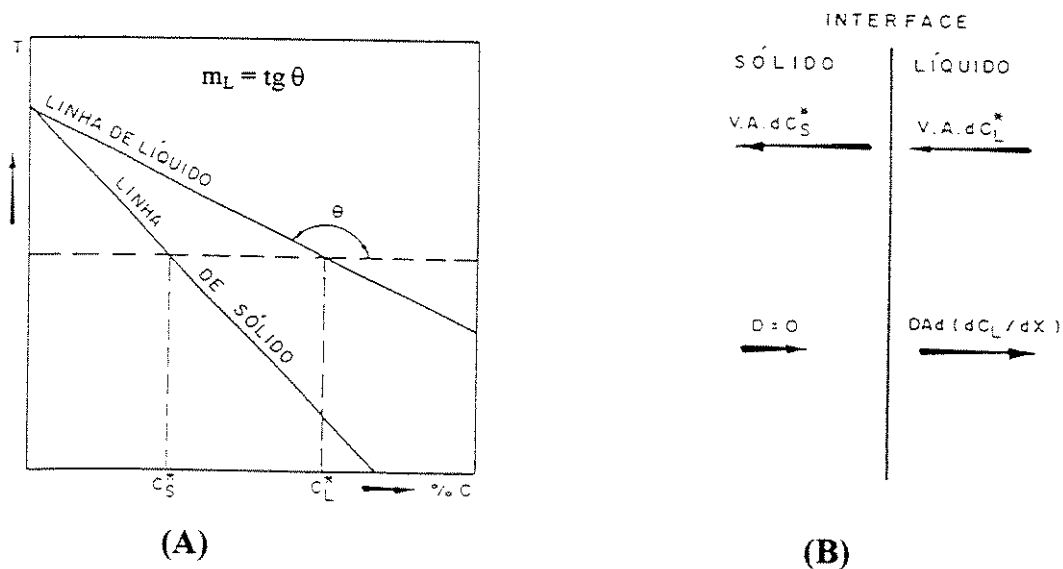


Figura 2.11 - Arranjo esquemático para análise do critério de estabilidade constitucional em (A) parte de um diagrama de equilíbrio de fases e em (B) balanço de massa na interface sólido/líquido para regime estacionário e sem difusão de soluto no sólido.

na qual $m_L = (dT_L / dC_L)$ é a inclinação da linha liquidus. Em $x = 0$, a Equação 2.50 pode ser rescrita, com o auxílio da Equação 2.49a, como,

$$\left(\frac{dT_L}{dx}\right)_{x=0} = -m_L \frac{VC_L^*(1-K_0)}{D_L} \quad 2.50a$$

Para que não ocorra superesfriamento constitucional, por ser o mesmo fator de instabilidade, é necessário que o gradiente de temperatura da fase líquida na frente da interface sólido/líquido seja maior ou igual ao gradiente da linha liquidus, isto é,

$$G_L = \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{x=0} \geq \left(\frac{dT_L}{dx}\right)_{x=0} \quad 2.51$$

que pode ser reescrita com a contribuição da Equação 2.50a, e da condição $C_S^* = K_0 C_L^*$ [Equação 2.46b] onde se tem o valor de C_L^* , na forma,

$$G_L \geq -\frac{m_L C_S^*(1-K_0)V}{K_0 D_L} \quad 2.51a$$

A Equação 2.51^a [Hunt,1979; Kurz/Fisher,1992; Laxmanan,1997/1998], é aplicável independentemente da convecção no líquido, por considerações paralelas que podem ser feitas com a concentração da fase sólida na interface sólido/líquido, tais como:

- **No caso de ocorrer convecção no líquido**

A concentração na fase sólida será dada por [notas de aula, disciplina IM-121]

$$C_s^* = \frac{K_0 C_0}{K_0 + (1 - K_0) \exp\left(-\frac{V\delta}{D}\right)} \quad . \quad 2.52$$

- **No caso de regime estacionário e ausência de convecção no líquido**

A concentração na fase sólida será dada por

$$C_s^* = C_0 \quad . \quad 2.53$$

- **No caso de mistura completa no líquido**

Esta situação caracteriza-se pela presença de forte convecção no líquido. Ainda assim, é insuficiente para inibir um pequeno perfil de acumulação de soluto com gradiente de concentração finito que pode ser dado por,

$$G_L \geq -\frac{mC_\infty(1-K_0)V}{D_L} \quad , \quad 2.54$$

com C_∞ sendo a composição equalizada do volume de líquido.

A principal crítica ao critério de estabilidade da interface sólido/líquido a partir do conceito de superesfriamento constitucional reside no fato de ele não levar em conta o efeito da tensão superficial, que pode ser significativo em virtude do aumento da área

da interface causado pela formação de uma perturbação [Kurz/Fisher,1984; Lesoult,1988].

2.2.2 Critério de Estabilidade Morfológico ou de Mullins/Sekerka.

Proposto por [Mullins/Sekerka,1964;1965], está baseado nas seguintes hipóteses:

Equilíbrio na interface,
Energia superficial isotrópica,
Convecção nula, e
Campo térmico e difusional independente do tempo.

Aborda a estabilidade segundo aspectos cinéticos, resolvendo simultaneamente as equações que descrevem o campo térmico e difusional sob condições estacionárias. Neste caso, para o crescimento estável as perturbações tendem a se propagar paralelamente à interface com comprimento de onda (λ_0) com pequena amplitude, conforme ilustrado na Figura 2.12. Para pequenas amplitudes, a forma senoidal representará a maioria genérica das perturbações, podendo-se assim, supor ser um termo da série de Fourier descrita para qualquer perturbação.

Com estas suposições, **Mullins/Sekerka** mostraram que durante a solidificação de ligas binárias, com velocidade constante, a interface plana sólido/líquido será estável quando:

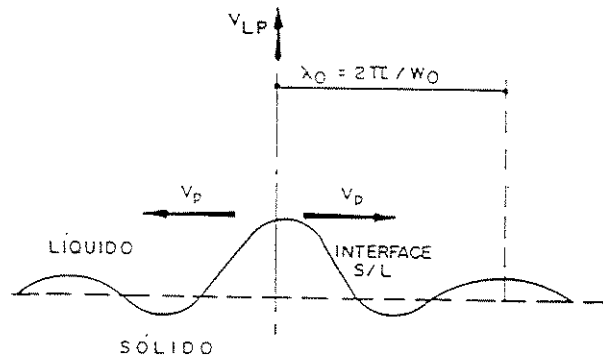


Figura 2.12 - Esquema ilustrativo da propagação das perturbações em uma interface de crescimento estável segundo Mullins e Sekerka [Mullins/Sekerka, 1964;1965]

$$\frac{1}{2}(\zeta^* + \zeta) + m_L G_C \langle h, \quad 2.55$$

que é a equação que expressa o referido critério e sendo

$$h = | \max.f(w) |, \quad 2.56$$

$$f(w) = -T_F \Gamma w^2 + m_L G_C \frac{(-2K_0)}{[1 + (\frac{2wD_L}{V_L})^2] - 1 + 2K_0}, \quad 2.57$$

onde,

G_L = gradiente de temperatura no líquido[K/m],

G_C = gradiente de soluto no líquido[kg/m],

G_S = gradiente de temperatura no sólido[K/m],

$\zeta^* = G_L (k_L / k) =$ gradiente térmico generalizado no líquido[K/m],

$\zeta = G_S (k_S / k) =$ gradiente térmico generalizado no sólido[K/m],

k_L = condutividade térmica do líquido[W/mK],

k_S = condutividade térmica do sólido[W/mK],

$k = (k_L + k_S) / 2 =$ condutividade térmica média do sistema[W/mK],

L = calor latente de fusão volumétrico do solvente puro[J/m³],

V_L = velocidade local de crescimento[m/s],

$w = 2\pi$, por comprimento de onda da perturbação senoidal da interface,

σ_{SL} = energia livre de superfície[J/m²],

$\Gamma = (\sigma_{SL} T_F / L) =$ constante de capilaridade ou de Gibbs Thomsom[mK]

Desta equação tem-se que, se $f(w)$ for positivo para qualquer valor de (w) , a perturbação de interface aumentará. Se for negativo para todos os valores de (w) , a perturbação desaparecerá e a interface torna-se-á estável.

Para a estabilidade da interface propuseram a inequação

$$\frac{2k_L}{k_S + k_L} \frac{K_0}{1 - K_0} \left[\frac{L}{2k_L} + \frac{G}{V_L} \right] \frac{D_L}{(-m_L)C_0} > S(A; K_0) \quad , \quad 2.58$$

onde $S(A; K_0)$ é uma função de K_0 e de um parâmetro adimensional de estabilidade (A) que considera a energia da interface,

$$A = \frac{K_0^2}{1-K_0} \frac{\Gamma V_L}{D_L} \frac{T_F}{(-m_L)C_\infty} = K_0 \frac{\Gamma V_L}{D_L} = \frac{T_F V_L}{m_L G_C D_L} \quad 2.59$$

A Figura 2.13 ilustra a relação entre $S(A; K_0)$ e (A) e, observa-se a existência de dois limites de estabilidade para a interface:

- um inferior
- e
- outro superior.

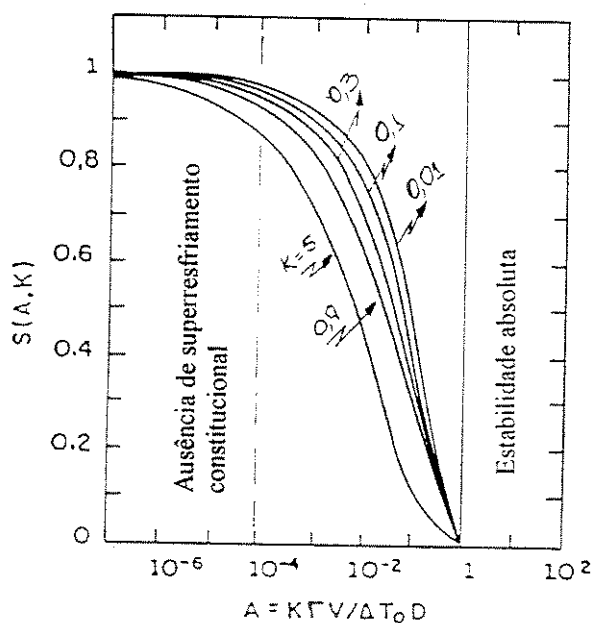


Figura 2.13 - Critério de estabilidade versus parâmetro adimensional A .

[Mullins/Sekerka, 1964;1965].

No limite inferior de estabilidade para baixas velocidades, muito semelhante às obtidas sob condições nulas de SRC, A será muito menor do que a unidade, indicando que $S \cong 1$.

A condição de baixa velocidade de solidificação permite simplificações na Equação 2.58 tais como:

$$(G_L / V_L) \gg [L / (2k_L)] \quad 2.60$$

que pode ser reescrita sob a forma:

$$\left(\frac{2k_L}{k_S + k_L}\right)\left(\frac{K_0}{1 - K_0}\right)\left(\frac{D_L G_L}{(-m_L)V_L C_0}\right) \gg 1 \quad 2.61$$

Esta equação pode ser comparada com as Equações 2.51a. e 2.53 relativas ao critério SRC, uma vez que para ($k_S = k_L$) os critérios de estabilidade da interface tornam-se os mesmos. Entretanto, a maioria dos metais apresenta condutividade térmica menor no estado líquido do que no estado sólido.

O limite superior de estabilidade, que é chamado de Estabilidade Absoluta, aumenta quando $A > 1$, e o parâmetro $S(A; K_0) = 0$. Neste caso, de acordo com a Equação 2,58, qualquer valor positivo do limite superior de estabilidade, levará à estabilidade da interface e, nestas circunstâncias tem-se:

$$V_{abs} \geq \frac{m_L C_0 D_L (K_0 - 1)}{\Gamma K_0^2} , \quad 2.62$$

sendo V_{abs} , a velocidade de estabilização absoluta que é responsável pelo retorno à interface plana.

O arranjo matemático da equação 2.58 e o uso da notação gradiente do SRC

$$[(dS / dx) = m_L G_C - G_L], \quad 2.63$$

possibilita prever, por meio da teoria de **Mullins/Sekerka**, a instabilidade da interface quando:

$$\frac{dS}{dx} > \frac{1}{\delta_s} \left\langle \frac{k_s}{k_s + k_L} (G_s - G_L) + G_L (1 - \delta_s) \right\rangle , \quad 2.64$$

que permite concluir que, para ocorrer a instabilidade da interface para pequenas perturbações, é necessário que exista além do SRC um gradiente de SRC.

2.3 - Formação da Microestrutura

A rejeição de soluto ($K_0 < 1$) ou rejeição de solvente ($K_0 > 1$) dá origem ao Superesfriamento Constitucional SRC. A interface tende a se instabilizar toda vez que o gradiente térmico na interface for menor que o gradiente da temperatura liquidus, conforme mostrado qualitativamente na Figura 2.14. Dependendo do valor de SRC, a instabilidade apresentar-se-á com diferentes morfologias e que, por ordem decrescente deste valor são denominadas, segundo **Viskanta e Kurz/Fisher [Viskanta,1988; Kurz/Fisher,1984]**, de:

- GLOBULAR,
- DENDRÍTICA, crescimento que obedece alguma textura cristalográfica;
- CELULAR, crescimento cooperativo com rejeição lateral de soluto podendo apresentar alguma orientação cristalográfica;
- PLANA.

conforme mostrado na Figura 2.15.

A morfologia da interface não é só função do Gradiente Térmico (G_L), depende também da Velocidade da interface (V), do Intervalo de Solidificação ($T_L - T_E$) e do tempo local de solidificação (t_{SL}). A transição PLANAR a DENDRÍTICA está associada à diminuição da razão (G_L/V). Esta transição pode ser melhor avaliada com o auxílio das Figuras(2.16 e 2.17). Na Figura 2.16 **Chalmers[Chalmers,1964]** mostra a modificação estrutural de ligas diluídas do sistema **Sn-Pb**, obtidas com a imposição da razão (G_L/V) que variou de **2000** até **350** ($^{\circ}\text{Cs}/\text{cm}^2$). Na Figura 2.17 **Kurz/Fisher[Kurz/Fisher,1992]** mostram a modificação estrutural de uma liga **Al-2%Cu**, com $G_L = 10 \text{ K/mm}$. Neste caso, pode ser visto o efeito da velocidade da interface S/L sobre a morfologia da microestrutura.

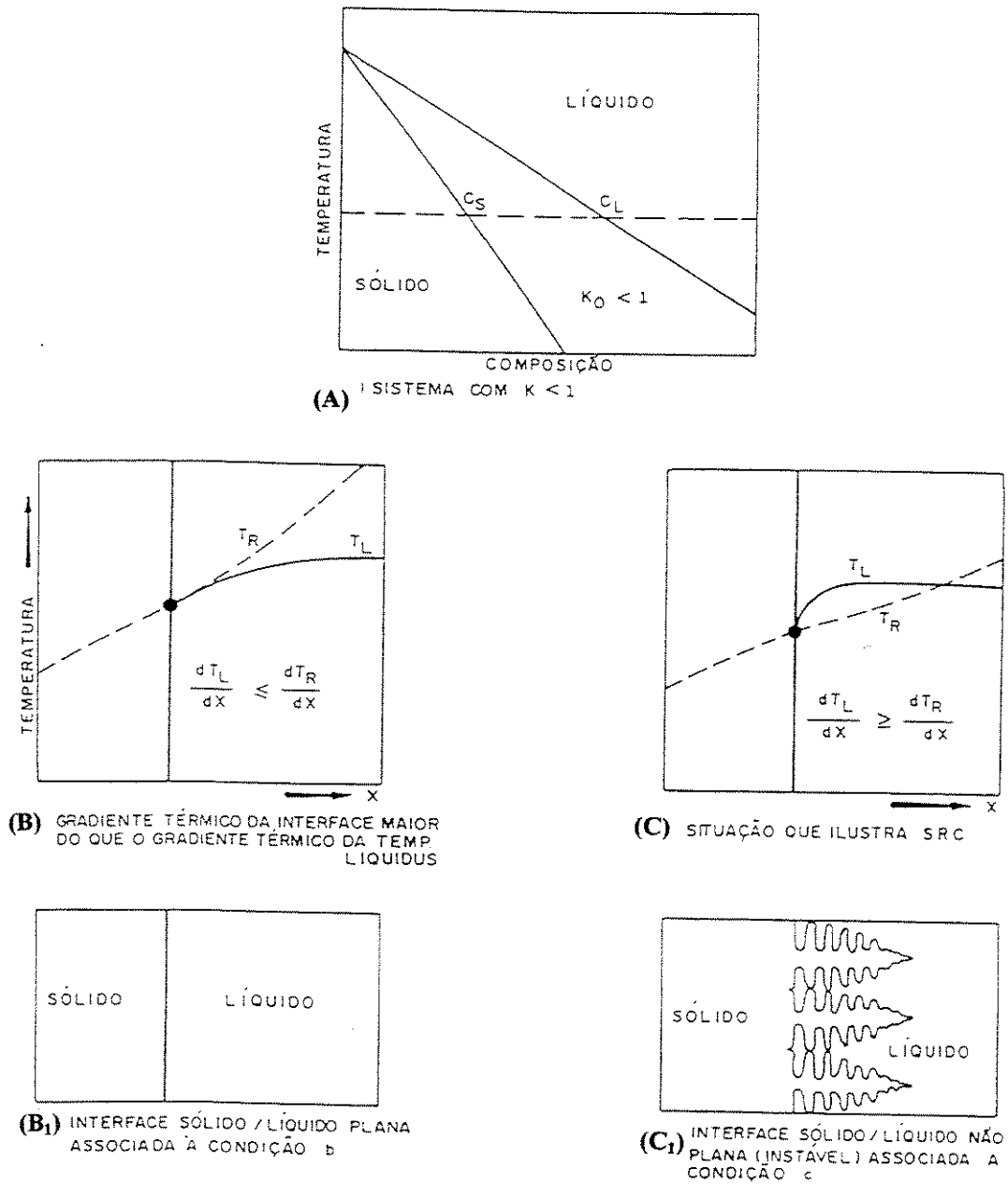


Figura 2.14 - Evolução esquemática da morfologia da interface sólido/líquido, (A) sistema com ($K < 1$), (B) gradiente térmico da interface maior do que gradiente térmico da temperatura liquidus, (B₁) interface sólido/líquido associada à condição (B), (C) gradiente térmico da interface menor do que gradiente térmico da temperatura liquidus (situação que ilustra SRC), (C₁) interface sólido/líquido associada à condição (C), segundo Viskanta e Kurz/Fisher [Viskanta,1988; Kurz/Fisher,1984].

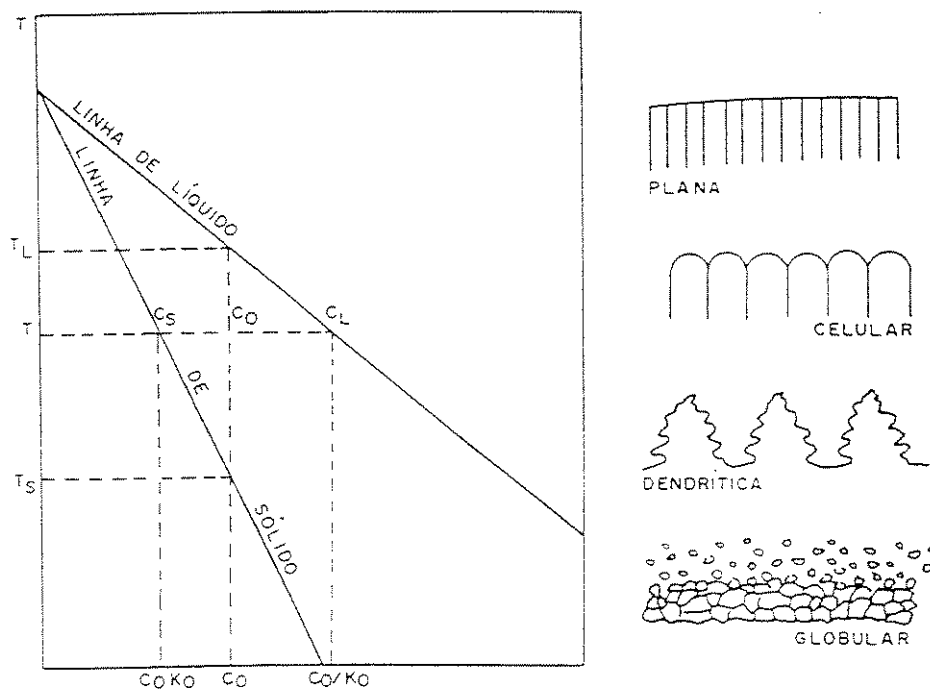


Figura 2.15 - Esquema ilustrativo dos tipos básicos das frentes de solidificação para sistemas metálicos com dois ou mais componentes Viskanta [Viskanta,1988].

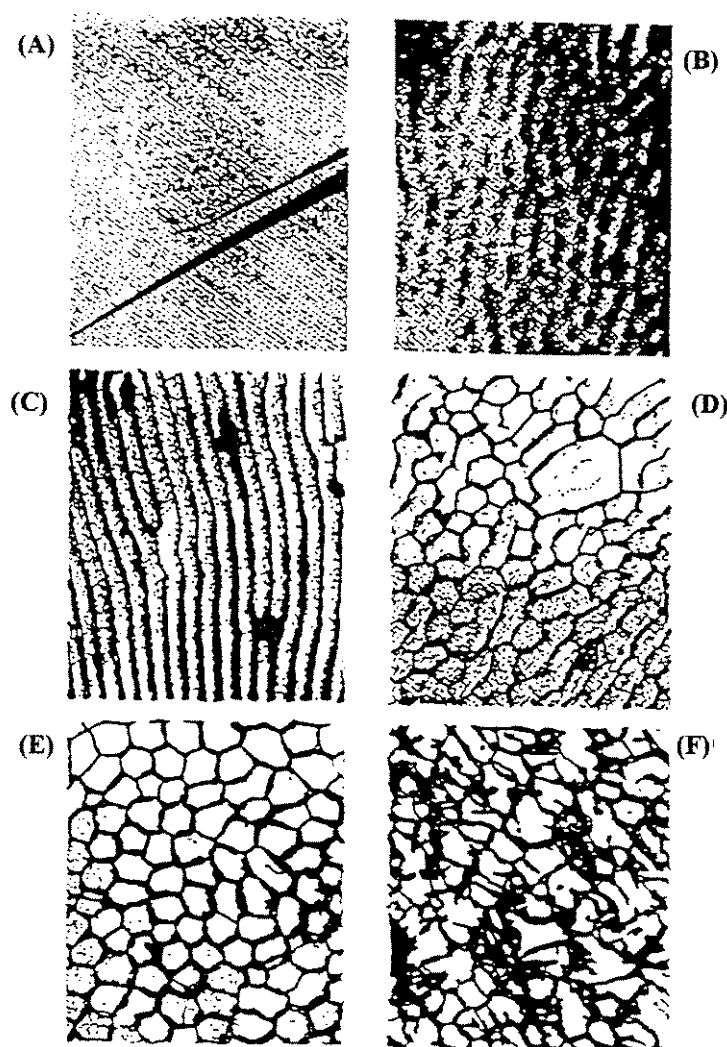


Figura 2.16 - Variação da microestrutura de ligas Sn-Pb diluídas. Sequência (A - E) liga Sn- 0,006%Pb (A) interface plana, (B) estrutura difusa, (C) células alongadas (D) células interrompidas (E) células hexagonais e (F) dendritas celulares para liga Sn- 0,2%Pb [Chalmers,1964].

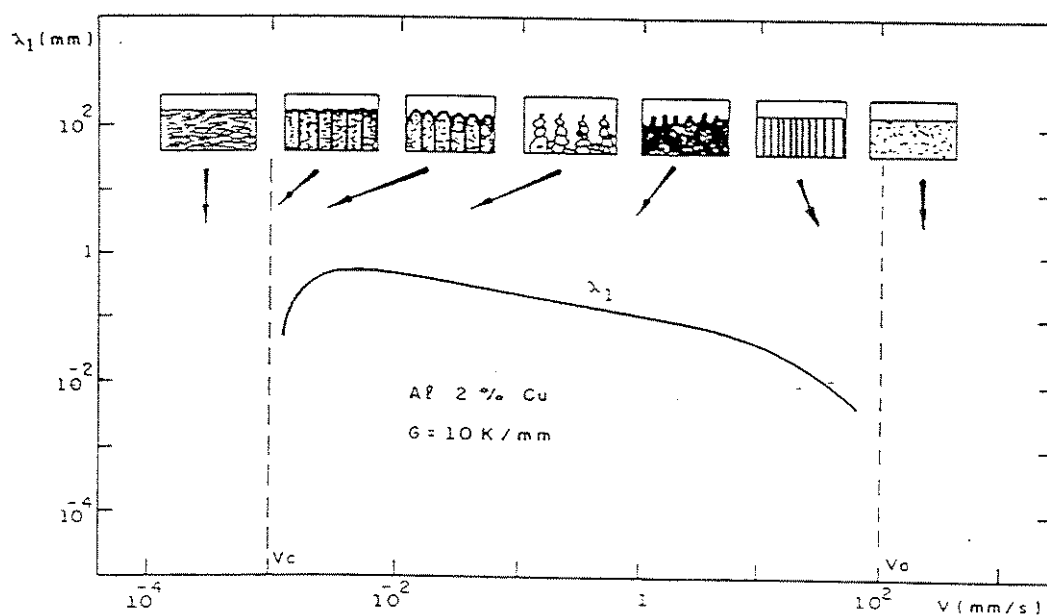


Figura 2.17 - Variação esquemática da morfologia microestrutural com a velocidade da interface sólido/líquido (V), V_c - velocidade crítica de mudança da interface plana para celular. V_a - velocidade absoluta, quando a morfologia passa de dendrítica para plana [Kurz/Fisher,1992].

A primeira característica morfológica de uma interface sólido/líquido não plana é o desenvolvimento de **Células**, vistas na Figura 2.18. São perturbações cujas amplitudes aumentam progressivamente à medida que as condições de crescimento afastam-se daquele valor crítico que determina a instabilidade da interface, seja através de alterações da velocidade da interface (V), do gradiente térmico no líquido (G_L), do tempo local de solidificação (t_{SL}), seja através da mudança do sistema metálico (m , C_0 , K_0). Além disto, há a ocorrência de acúmulo de soluto nas regiões adjacentes às perturbações, devido à rejeição lateral de soluto à medida que essas perturbações crescem, acentuando a diferença de velocidade de solidificação entre ambas.

O espaçamento entre as regiões ricas em soluto, denominado **Espaçamento Celular**, é um parâmetro tecnologicamente importante, uma vez que o seu comportamento tem sido alvo de estudos de vários pesquisadores nos quais foi observado a sua diminuição com o aumento da velocidade de solidificação até o momento em que ocorre a transição morfológica de celular para dendrítica, e quando é verificado um pequeno aumento do espaçamento[Eshelman et al, 1988].

Alguns autores propõem que [Flemings,1974; Kurz/Fisher,1984/1992]essa transição morfológica tende a ocorrer quando as condições de solidificação são tais que a anisotropia do crescimento dos cristais passa a exercer influência sobre as suas direções conforme pode ser visto na Figura 2.19, isto é, a direção de crescimento das dendritas é determinada pela direção de crescimento cristalograficamente mais favorável e não pela direção do fluxo de calor como é o caso do crescimento celular. Nessas circunstâncias, são identificadas por **dendritas primárias**, melhor caracterizadas pela Figura 2.20. A estrutura dendrítica pode caracterizar-se também pelo desenvolvimento de perturbações ao longo de seu eixo principal denominadas **braços** ou **ramos secundários** ou **dendritas secundárias**, provocadas desta vez pela instabilidade da interface entre o eixo principal da dendrita primária e o líquido adjacente conforme pode ser visto na Figura 2.21. Se a distância entre os eixos principais for significativa, a mesma instabilidade pode ocorrer com os braços

secundários ou dendritas secundárias e haver formação de **braços** ou **ramos terciários** ou dendritas terciárias.

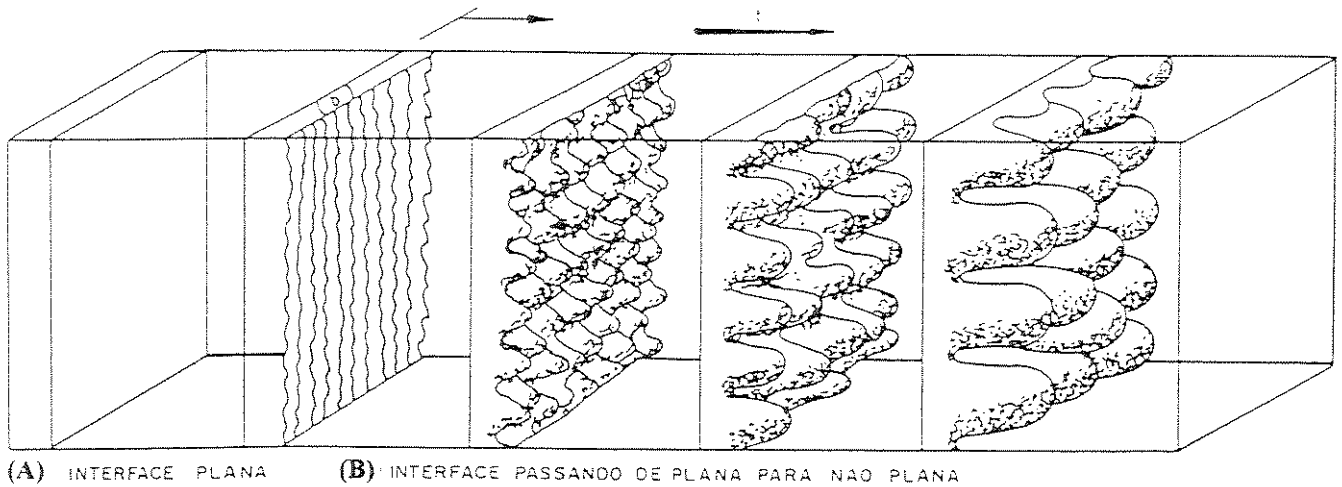


Figura 2.18 - Evolução esquemática da morfologia da interface sólido/líquido (A) interface plana, (B) interface passando de plana para não plana [Kurz / Fisher, 1992].

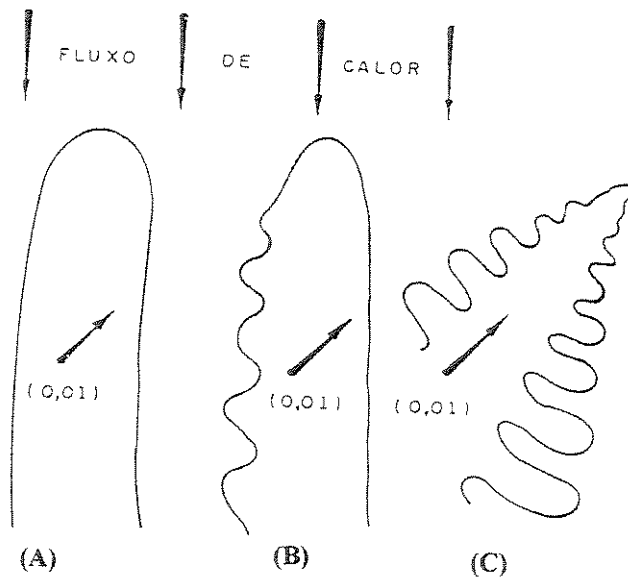
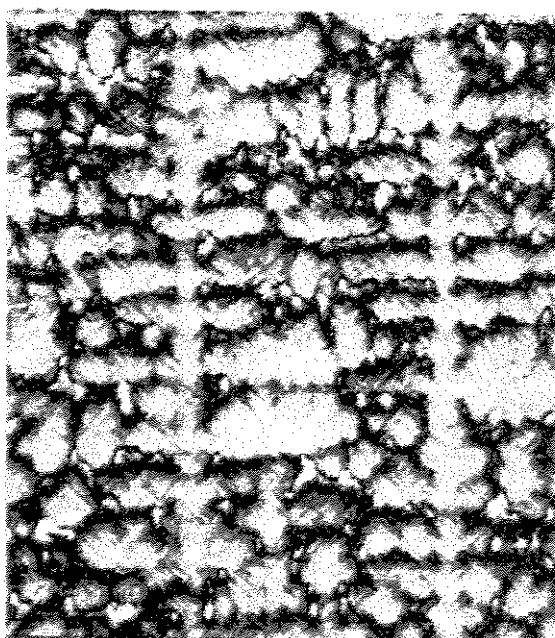


Figura 2.19 - Direções de crescimento esquemáticas (A) morfologia celular (B) morfologia de transição celular dendrita. Tanto o fluxo de calor como o crescimento possuem direções coincidentes e (C) morfologia dendrítica, onde a direção de crescimento é definida por fatores cristalográficos [Flemings, 1974; Kurz/Fisher, 1992].



500 μm

Figura 2.20 - Aspecto microestrutural obtido em seções transversais de lingotes de aço maraging grau 1900 MPa ilustrando presença de dendritas primárias [Rocha,1995].



500 μm

Figura 2.21 - Aspecto microestrutural obtido em seções longitudinais de lingotes de aço maraging grau 1900 MPa ilustrando presença de dendritas secundárias [Rocha,1995].

Sob o ponto de vista tecnológico, as medidas dos espaçamentos interdendríticos primários (**EDP** ou λ_1) e secundários (**EDS** ou λ_2) têm apresentado grande significado, pois tem sido constatado que elas exercem influência sobre as propriedades mecânicas de componentes fundidos e trabalhados mecanicamente[Flemings,1974; Kurz/Fisher,1984; Caldwell et al,1977]. A Figura 2.22 ilustra condições que permitem definir tanto (λ_1) como (λ_2).

2.4 Modelos de Crescimento Dendrítico

O entendimento de que a microestrutura de solidificação viesse a ter influência direta nas propriedades futuras de produtos fundidos tem levado pesquisadores envolvidos com a elaboração de Modelos Matemáticos que permitam prever a microestrutura de produtos fundidos, de tal sorte que a literatura apresenta muitos trabalhos nesta direção mas basicamente agrupados em dois tipos de modelo:

- Os de natureza teórica, baseados nos parâmetros térmicos e em relações geométricas;
- Os baseados exclusivamente em resultados experimentais.

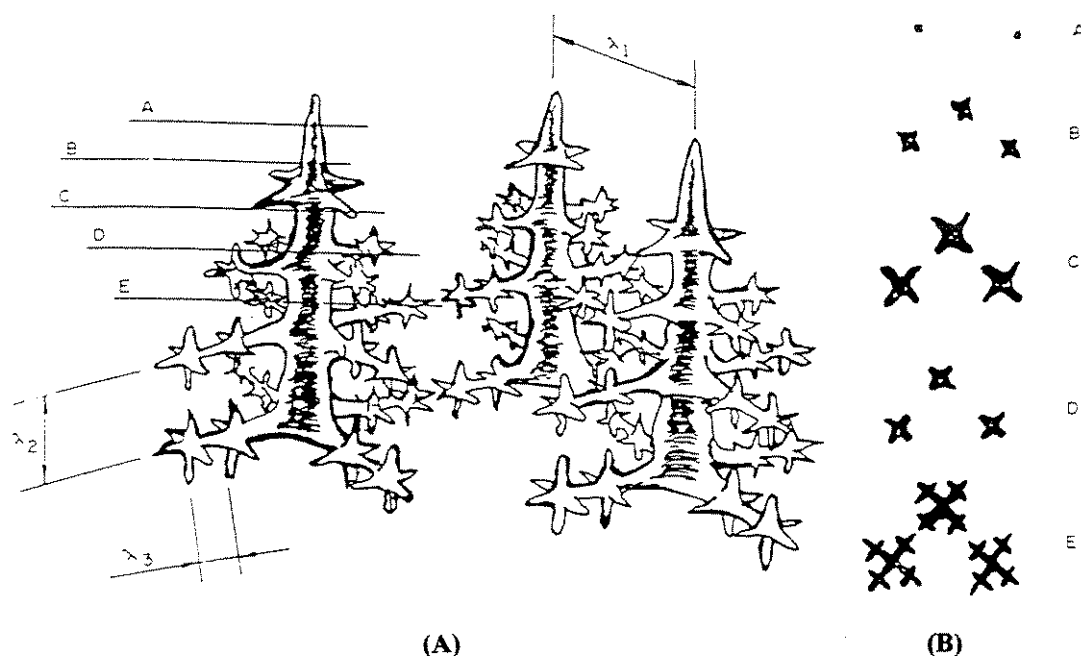


Figura 2.22 - Esquema ilustrativo do aspecto morfológico de crescimento dendrítico unidirecional em (A) indicação dos espaçamentos dendríticos primários (λ_1), secundários (λ_2) e terciários (λ_3) e em (B) indicação do aspecto das seções transversais dos planos indicados pelas letras maiúsculas [Rocha,1995].

2.4.1 - Espaçamento Dendrítico Primário (EDP)

Na avaliação do Espaçamento Interdendrítico Primário, normalmente são estudados os efeitos das condições térmicas impostas, representadas pelos valores do gradiente de temperatura na fase líquida (G_L) e velocidade da interface sólido / líquido (V), além das condições constitucionais, representadas pela composição da liga. No que diz respeito às condições térmicas, a literatura é unânime em afirmar que o espaçamento interdendrítico primário diminui com o aumento de G_L e V fornecendo correlações do tipo [Hunt,1979; Trivedi,1984; Kurz/Fisher,1981]:

$$\lambda_1 = Q (G)^{-a} (V)^{-b} .$$

2.65

As grandezas Q , a , b encontram valores no trabalho de **Hans/Trivedi**[Hans/Trivedi,1994], determinados por diferentes autores para várias ligas.

Quanto ao efeito do teor de soluto sobre λ_1 , existe controvérsia que não vem acompanhada de proposta do mecanismo que explique o comportamento, por exemplo, existem autores que afirmam que λ_1 diminui com o aumento do teor de soluto da liga. É o caso de [Edvardsson,1976; Spittle/Lloyd,1979]. Outros afirmam justamente o contrário. É o caso de [Flemings,1974;Young/Kirkwood,1975; Okamoto et al,1978].

A) Modelos teóricos para espaçamento dendrítico primário (EDP)

- **Modelo de Hunt**

Os primeiros trabalhos teóricos para medição dos EDP (λ_1) surgiram na década de 60, com destaque para a proposta de **Jackson/Hunt**[Jackson/Hunt,1966]. Posteriormente, **Hunt**[Hunt, 1979; 1984] e **McCartney/Hunt**[McCartney /Hunt, 1984], propuseram um modelo de crescimento dendrítico que relaciona os espaçamentos celulares ou dendríticos primários (λ_1) com velocidade de deslocamento da ponta da dendrita (V_L) e o gradiente de temperatura (G_L) nessa posição. Para tanto, assumiram que as dendritas crescem com formato regular, podendo aplicar a análise tanto para células como para dendritas, chegando à seguinte equação, com as unidades termofísicas pertencentes ao sistema SI:

$$\lambda_1 = 2,83 (\Gamma D_L \Delta T_{SL} K_0)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{1}{G_L}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{V_L}\right)^{\frac{1}{4}} . \quad 2.66$$

A Equação 2.66 foi comprovada experimentalmente por **Hunt**, para $V_L \gg V_{Trans}$ [V_{Trans} é a velocidade de transição de interface celular a dendrita] tirada da Equação 2.51a, e permite que se conclua que o espaçamento é mais sensível a variações do gradiente de temperatura (G_L) do que a variações na velocidade de deslocamento da ponta da dendrita (V_L) ou a variações na composição química nominal da liga (C_0). ΔT_{SL} representa o intervalo de solidificação de não equilíbrio.

- **Modelo de Kurz**

Os estudos de **Kurz**, a partir de 1979 [**Wolf/Kurz,1979; Clyne et al,1980; Kurz/Fisher,1981/1992**], à semelhança dos outros estudos teóricos, buscam relacionar a composição química com (G_L), (V), os tempos locais de solidificação (t_{SL}) e a morfologia da ponta da dendrita (R) para definir os valores dos espaçamentos dendríticos primários (λ_1), fazendo consideração semelhante àquela feita por **Hunt**, para $V_L \gg V_{Trans}$ tirada da Equação 2.51a, e apresenta como proposta as seguintes relações, com as unidades termofísicas no sistema SI.

$$\lambda_1 = \left(\frac{3 R \Delta T_{SL}}{G_L} \right)^{\frac{1}{2}} , \quad 2.67$$

$$R = 2 \pi \left(\frac{\Gamma D_L}{V K_0 \Delta T_{SL}} \right)^{\frac{1}{2}} , \quad e \quad 2.67a$$

$$\lambda_1 = 4,3 \left(\frac{D_L \Gamma \Delta T_{SL}}{K_0} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{1}{G_L} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{V} \right)^{\frac{1}{4}} . \quad 2.67b$$

• Modelo de Trivedi

Trivedi[Trivedi,1984-1994], assumindo várias considerações teóricas, tais como valores baixos para a relação G_L/V_L , interferência dos ramos dendríticos no crescimento um dos outros tendendo a minimizar ΔT_{SL} , além de considerar que o perfil da interface aproxima-se ao de uma calota esférica, apresenta como solução a Equação 2.68 sob a condição de que, se $(V_L < V_{Trans})$, o crescimento é predominantemente celular e que os espaçamentos entre as lamelas tendem a crescer com V_L .

$$\lambda_1 = 6 \left(\frac{\Delta T_{SL} D_L \Gamma}{K_0 V_L G_L^2} \right)^{0,25} , \lambda_1 [\mu m] ; V_L [\mu m/s] \text{ e } G_L [K/cm] . \quad 2.68$$

• Modelo de Bouchard/Kirkaldy

Os estudos de **Bouchard/Kirkaldy**[Bouchard/Kirkaldy,1997] tiveram como apoio vários sistemas metálicos binários para condições de solidificação estacionária e transitória e obtiveram para o regime transitório formulações do tipo apresentado na Equação 2.69, com as unidades termofísicas no sistema CGS.

$$\lambda_1 = g_1 \left[\frac{16 C_0^{0,5} G_0 (\epsilon \sigma_{SL}) T_F D_L}{m_L (1 - K_0) L G_L V_L} \right]^{0,5} , \quad 2.69$$

com ε = fator de escala para tensão superficial, e na qual a constante g_1 , identificada como fator de calibração, assume o valor 250 para o sistema alumínio/cobre. Os fatores de calibração (g) sugeridos possibilitam que as equações que descrevem tanto EDP como EDS possam ser usadas com alguma confiança, em função da indisponibilidade na literatura de propriedades físicas de todas as ligas de interesse.

B) Modelos experimentais para espaçamento dendrítico primário

• Modelo de Young/Kirkwood

Young/Kirkwood[Young/Kirkwood,1975] propuseram, a partir de experimentos com a liga Al-4,4%Cu, a seguinte relação para λ_1 :

$$\lambda_1 = 3,05 \times 10^3 (G_L)^{-0,5} (V_L)^{-0,36}, \quad 2.70$$

com $\lambda_1[\mu\text{m}]$; $V_L[\mu\text{m/s}]$; $G_L[^\circ\text{C/mm}]$.

• Modelo de McCartney/Hunt

McCartney/Hunt[McCartney/Hunt, 1981], utilizaram os sistemas metálicos Al-Cu e Al-Mg-Si em seus estudos e, com a liga Al-6%Cu obtiveram valores experimentais para λ_1 por meio da Equação 2.71:

$$\lambda_1 = 359 (G_L)^{-0,474} (V_L)^{-0,31}, \quad \lambda_1[\mu\text{m}]; V_L[\text{mm/s}]; G_L[\text{K/mm}]. \quad 2.71$$

•Modelo de Bouchard/Kirkaldy

Bouchard/Kirkaldy[Bouchard/Kirkaldy,1997], investigando um elenco de sistemas, dentre os quais o sistema alumínio/cobre, com as ligas Al-(4,0; 4,5; 5,0; 5,5; 10,0; 10,3)%Cu, chegaram a uma relação do tipo:

$$\lambda_1 = 250 \left[\frac{16C_0^{0,5} G_0 (\varepsilon \sigma_{SL}) T_F D_L}{m_L (1 - K_0) L G_L V_L} \right]^{0,5} \quad 2.72$$

2.4.2 Espaçamento Dendrítico Secundário (EDS)

O estudo do espaçamento dendrítico secundário sofre a influência das condições térmicas e constitucionais, sob as quais se processa a solidificação, e todos são concordantes no sentido da diminuição destes espaçamentos com o aumento da velocidade da interface e do teor de soluto [Flemings et al,1970; Young/Kirkood,1975; Okamoto et al,1978]. No geral, os resultados têm a forma da equação:

$$\lambda_2 = Cte (G_L V_L)^{-n} , \quad \lambda_2[\mu m]; V_L[mm/s]; G_L[K/mm]. \quad 2.73$$

Outro parâmetro comumente empregado na apresentação dos valores de EDS em função das condições térmicas na solidificação é o tempo local de solidificação

(t_{SL}), que é inversamente proporcional à velocidade de deslocamento da interface sólido/líquido e, no geral a correlação assume a forma:

$$\lambda_2 = Cte (t_{SL})^m , \quad \lambda_2[\mu m]; t_{SL}[s] . \quad 2.74$$

O tempo local de solidificação (t_{SL}) pode ser definido por uma expressão aproximada que é dada por,

$$t_{SL} = \frac{\Delta T_{LE}}{\dot{T}} = \frac{T_L - T_{Eut}}{G_L V_L} , \quad em (s) , \quad 2.74a$$

na qual $\dot{T}$ = taxa de resfriamento [K/s],

$\Delta T_{LE} = T_L - T_{Eut}$, intervalo de transformação líquido/sólido [K], e

T_{Eut} = temperatura eutética do sistema [K].

Nas transformações pró-eutéticas, esse tempo é definido como o tempo de passagem das isothermas líquidas e sólidas em uma determinada posição, ou mais precisamente, a passagem da ponta e da raiz da dendrita por esta posição.

Essa correlação entre o EDS e o t_{SL} deve-se à instabilidade dos EDS ao longo do intervalo de solidificação. Tal instabilidade tem por base a diminuição da energia de superfície do sistema [Flemings,1970;Kurz/Fisher,1984], que é responsável pelo aumento do EDS pela dissolução dos ramos secundários menores e conseqüente

engrossamento dos ramos secundários maiores, fenômeno denominado engrossamento. Este comportamento encontra-se ilustrado na Figura 2.23. Outra forma da energia de superfície do sistema ser manifestada é por meio do fenômeno do coalescimento, que se caracteriza pelo engrossamento das pontas dos ramos dendríticos e seu posterior coalescimento, deixando uma pequena região líquida confinada entre suas raízes [Chien/Kattamis,1970;Flemings,1974], como está mostrado na Figura 2.24.

A) Modelos teóricos para espaçamento dendrítico secundário (EDS)

- Modelo de Kurz/Fisher

$$\lambda_2 = 5,5 (M t_{SL})^{\frac{1}{3}} \quad 2.75$$

com

$$M = \frac{\Gamma D_L}{(1 - K_0) m_L (C_E - C_0)} \text{Ln} \left(\frac{C_E}{C_0} \right), \text{ em } (m^3/s), \quad 2.75a$$

e conhecido como parâmetro de engrossamento, sendo

C_E = concentração eutética do sistema.

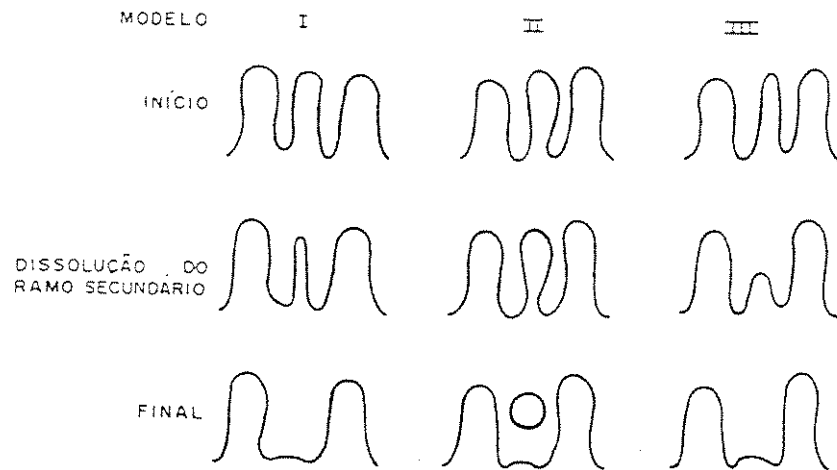


Figura 2.23 - Ilustração esquemática da etapa de dissolução do fenômeno de engrossamento dos ramos secundários[Flemings,1970;Kurz/Fisher,1984].

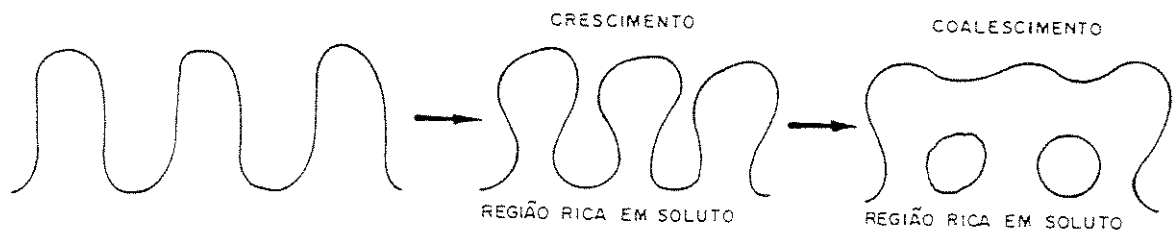


Figura 2.24 - Esquema ilustrativo da formação das regiões ricas em soluto no fenômeno do coalescimento dos ramos dendríticos secundários
[Chien/Kattamis,1970;Flemings,1974].

•Modelo de Feurer

Assumindo várias considerações teóricas, entre as quais a de que as ramificações dendríticas apresentam formato cilíndrico, **Feurer**[Feurer,1977] propôs um modelo de crescimento dendrítico que relaciona o espaçamento dendrítico secundário (λ_2) com o tempo local de solidificação (t_{SL}), pela seguinte expressão :

$$\lambda_2 = 4,36 (M t_{SL})^{1/3}, \quad 2.76$$

com

$$M = \frac{\sigma_{SL} D_L T_L}{L(1 - K_0) m_L (C_E - C_0)} 2 \ln\left(\frac{C_E}{C_0}\right), \quad \text{em } (m^3/s), \quad 2.76a$$

Estas relações foram comprovadas experimentalmente para vários sistemas por diferentes pesquisadores e tendo apresentado resultados bastante concordantes em todos os casos. A Figura 2.25 apresenta valores do parâmetro (M), para vários sistemas binários com o alumínio como elemento base. Os valores foram calculados com base nos dados da Tabela 2.1.

Adotando-se por exemplo,

$$\text{Al -4,5\%Cu chega-se a } \lambda_2 = 12,1 (t_{SL})^{0,33} \quad (a)$$

2.77

$$\text{Al -15\%Cu chega-se a } \lambda_2 = 9,9 (t_{SL})^{0,33} \quad (b)$$

com λ_2 [μm]; t_{SL} [s].

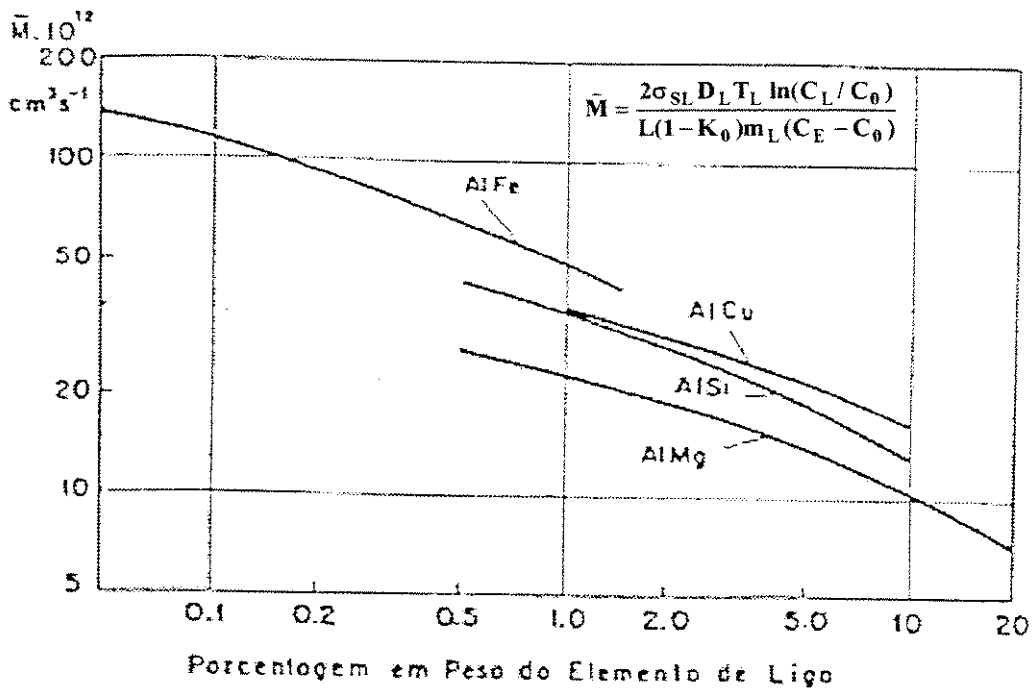


Figura 2.25 - Variação da constante $\bar{M}$ com o percentual em peso de elemento de liga para algumas ligas de alumínio [Feurer,1977].

Tabela 2.01 - Valores de características físicas de ligas de alumínio utilizadas na determinação do parâmetro M [Feurer,1977].

Constantes	AlCu	AlFe	AlMg	AlSi	Unidades
C_E	33,0	1,70	35,0	12,5	%
T_E	548	655	450	577	° C
K_c	0,172	0,029	0,439	0,132	-
m_L	-3,39	-2,94	-6,00	-6,64	° C/%
D_L	5,0	1,0	4,0	5,0	10^{-5} cm²/s
σ_{SL}	100	100	100	100	erg/cm²
L	$-1,0 \cdot 10^{10}$	$-1,0 \cdot 10^{10}$	$-1,0 \cdot 10^{10}$	$-1,0 \cdot 10^{10}$	erg/cm²

- **Modelo de Kirkwood**

O modelo de **Kirkwood**[Kirkwood,1985], a exemplo dos outros que buscam definir EDS, também aborda o fenômeno do engrossamento dos ramos secundários maiores pela dissolução dos ramos menores e, propõe como solução a seguinte equação:

$$\lambda_2 = \left(\frac{128\Gamma D_L t_{SL}}{(1-K_0)m_L(C_0 - C_E)} \ln\left(\frac{C_E}{C_0}\right) \right)^{\frac{1}{3}}, \quad \lambda_2 [\mu\text{m}]; t_{SL} [\text{s}] . \quad 2.78$$

- **Modelo de Bouchard/Kirkaldy**

O modelo de **Bouchard/Kirkaldy**[Bouchard/Kirkaldy,1997] faz uma abordagem teórica envolvendo condições estacionárias e transitórias para a solidificação, e propõe para o regime transitório a seguinte expressão:

$$\lambda_2 = 2\pi g_2 \left[\frac{4\sigma_{SL}}{C_0(1-K_0)^2 L} \left(\frac{D_L}{V_L}\right)^2 \right]^{\frac{1}{3}} . \quad 2.79$$

Esta expressão foi testada pelos autores com valores experimentais, encontrados na literatura, apresentando excelentes resultados para um elenco apreciável de sistemas

metálicos binários, dentre os quais o sistema alumínio/cobre e, dando como solução a expressão:

$$\lambda_2 = 10\pi \left[\frac{4\sigma_{SL}}{C_0(1-K_0)^2 L} \left(\frac{D_L}{V_L} \right)^2 \right]^{\frac{1}{3}}, \quad 2.79a$$

o valor para o fator de calibração g_2 para o elenco de ligas do sistema Al-Cu é sugerido como sendo igual a 5. As ligas testadas variaram desde ligas muito diluídas, como a Al-3,9%Cu, até ligas muito concentradas como a Al-26,7%Cu.

• Modelo de Trivedi

Trivedi[Trivedi et al,1984], com o auxílio de um modelo experimental de compostos orgânicos em regime de resfriamento unidirecional, discute os estudos experimentais de Huang/Glicksman[Huang/Glicksman,1981] e propõe uma relação entre o EDS e o raio da ponta da dendrita principal, chegando à seguinte relação para o EDS:

$$\lambda_2 = C_1 (\dot{T})^{-n} \quad \text{com} \quad \lambda_2 [\mu\text{m}]; \dot{T} [\text{K/s}] \text{ e } n = 0,5, \quad 2.80$$

e

$$C_1 = 17,8 \left(\frac{\Gamma D_L}{V_L} \right)^{0,5}. \quad 2.80a$$

- **Modelo de Mortensen**

Tendo por base que a taxa de engrossamento dos ramos dendríticos secundários é limitada pela taxa de calor por condução em materiais puros e pelas taxa de calor e taxa de difusão nas ligas e, como consequência, os valores dos **EDS** podem ser expressos pela relação:

$$\lambda_2 = C_2 (t_{SL})^n \quad \text{com } \lambda_2 [\mu\text{m}]; t_{SL} [\text{s}]; n = 1/3 \quad 2.81$$

Mortensen[Mortensen,1990] define uma expressão para C_2 , quando se tratar de solidificação de ligas binárias, na forma da Equação 2.81a:

$$C_2 = \left\{ \frac{27TD_L}{4C_L m_L (1 - K_0) F_s (1 - \sqrt{F_s})} \right\}^{\frac{1}{3}} \quad [(\text{m}^3/\text{s}) \times 10^{-16}] \quad , \quad 2.81a$$

Esse modelo, quando aplicado ao sistema Al-4,5%Cu, define o EDS por uma relação experimental do tipo:

$$\lambda_2 = 12 (t_{SL})^{1/3} \quad , \quad \text{com } \lambda_2 [\mu\text{m}] \text{ e } t_{SL} [\text{s}] \quad , \quad 2.81b$$

e para o sistema Fe-26%Ni define EDS, pela relação,

$$\lambda_2 = 27 (t_{SL})^{1/3} \quad , \quad 2.81c$$

- **Modelo de Voorhees**

Voorhees[Voorhees,1989] mostra que, quando o calor e a massa são transportados durante o engrossamento dos ramos dendríticos secundários, seus espaçamentos podem ser relatados por uma expressão do tipo:

$$\lambda_2 = C_3(t_{SL})^n \quad , \quad \quad \quad \mathbf{2.82}$$

com

$$\lambda_2 \text{ } [\mu\text{m}] \text{ ; } \quad t_{SL} \text{ } [\text{s}] \quad , \quad \quad \mathbf{n = 1/3} \quad , \text{ e } \quad .$$

$$C_3 = \left\{ \frac{8\sigma_{SL}\alpha_L T_m D_L}{9L \left[\frac{LD_L}{C_P} - (1 - K_0)C_L\alpha_L m_L \right]} \right\}^{\frac{1}{3}} \quad [(\text{m}^3/\text{s}) \times 10^{-15}] \quad , \quad \quad \mathbf{2.82a}$$

com

$$\alpha_L = k_L V_m / C_P \text{ , difusividade térmica do líquido,}$$

$$V_m = \text{volume molar,}$$

$$C_P = \text{calor específico,}$$

$$T_m = \text{temperatura de equilíbrio do elemento puro com a interface sólido/líquido.}$$

B) Modelos experimentais para espaçamento dendrítico secundário (EDS)

Além dos modelos já comentados de **Feurer e Bouchard/Kirkaldy**, existem ainda os modelos de:

- **Modelo de Suzuki**

Suzuki[Suzuki et al,1969] e seus colaboradores adotaram o sistema Fe-Fe₃C, como base de seus estudos, e solidificaram aços carbonos comum com teores de carbono na faixa de (0,14 a 0,88)% em peso, chegando a uma relação eminentemente experimental para a definição do valor do EDS, do tipo:

$$\lambda_2 = 146 (\dot{T})^{-0,39} , \quad \lambda_2[\mu\text{m}]; \dot{T} [\text{K/s}] . \quad 2.83$$

- **Modelo de Bower et al.**

A outra proposta experimental trata-se do trabalho de **Bower et al** [Bower et al,1966], que teve como base de investigação o sistema alumínio/cobre com a liga Al-4,5%Cu, e representa um consenso entre os vários trabalhos dessa natureza:

$$\lambda_2 = 7,5 (t_{SL})^{0,39} , \quad \lambda_2[\mu\text{m}]; t_{SL}[\text{s}] . \quad 2.84$$

- **Modelo de Jacobi**

Merecem destaque aqui os trabalhos na área do lingotamento contínuo de aços feitos por **Jacobi et al**[Jacobi/Pitsch,1975;Jacobi/Schwerdtfeger,1976], que realizaram medidas de espaçamentos dendríticos primários e secundários na casca sólida de um lingote de aço com teor de carbono variando entre (0,6 a 0,7)%C e que definiram equações como as seguintes,

$$\lambda_1 = 35,6 (t_{SL})^{0,49} \quad e \quad (a)$$

2.85

$$\lambda_2 = 15,8 (t_{SL})^{0,44} , \quad (b)$$

com $\lambda_2[\mu m]$; $t_{SL}[s]$.

Capítulo 3

3 MODELAGEM MATEMÁTICA DA SOLIDIFICAÇÃO

A solidificação pode ser definida como sendo a mudança do estado líquido para o estado sólido de uma substância, por resfriamento. Deste fato entende-se que certa quantidade de calor é retirada (transferida) da substância no estado líquido para que possa ocorrer a Nucleação e o Crescimento de seus núcleos sólidos e que, no caso particular de metais, do controle desta retirada de calor dependerá sua estrutura final e, conseqüentemente, suas propriedades. Facilmente compreende-se que o fenômeno da transferência de calor envolvido ocorre em regime transiente e que sua abordagem matemática resulta bastante complexa, uma vez que tantos outros aspectos e fenômenos da ciência encontram-se envolvidos, dentre os quais: a Termodinâmica, Fenômenos de Transporte, Transferência de Calor, e que acabam exigindo o estabelecimento de hipóteses simplificadoras das condições reais, de caráter físico ou matemático para que suas soluções possam ser viabilizadas [Carslaw,1959;Ruddle,1957].

A solidificação pode ser estudada sob os seguintes aspectos [Garcia, 1981; Viskanta, 1988; Patankar,1988]:

- Crescimento cristalino microscópico: simulação a nível microscópico,
- Morfologia da interface: estabilidade da frente de solidificação - critérios e mecanismos,
- Abordagem macroscópica: geometria e processo de fundição - modelagem.

Por outro lado, muita atenção tem sido dada ultimamente ao fenômeno da convecção [Dupouy,1989] em seus múltiplos aspectos, como principal causadora dos defeitos e heterogeneidades estruturais encontradas nos produtos fundidos, particularmente nos metais, uma vez que pode interferir na nucleação, no crescimento e no coalescimento das estruturas aí formadas e, por isso, afetar diretamente a segregação do soluto das ligas tanto a nível macro como a nível microscópico. A convecção pode ser abordada como sendo provocada por:

- Gradientes Térmicos,
- Gradientes de Concentração,
- Gradientes de Nucleação e Crescimento de fases mais leves ou mais pesadas que o metal fundido,
- Gradientes de Campo Magnéticos e/ou Rotacionais,
- Indução da Contração da Solidificação.

Um outro aspecto importante e que sempre merece atenção é o da análise da transferência de calor na solidificação. Neste caso, a abordagem pode buscar dois objetivos:

1. A determinação da distribuição térmica no sistema metal/molde, onde a abordagem pode ser feita por meio das variáveis,
 - Temperatura, tendo como variáveis dependentes a posição e o tempo. As equações da conservação da energia para o sólido e para o líquido são escritas separadamente [Viskanta,1988;Pham,1985;Samarkii et al,1993];
 - Entalpia, tendo como variável dependente a temperatura. O balanço energético é descrito através das interfaces [Ozisik,1980; Salcudean/Abdulah,1988; Voller/Swaminathan,1992].

2. A determinação da cinética da solidificação, onde a abordagem pode ser feita por meio das variáveis:

- Velocidade de Avanço da Interface Sólido/Líquido,
- Tempo Local de Solidificação, e
- Taxa de Resfriamento.

Para que essa análise seja possível é conveniente extrair-se um elemento de referência do sistema de forma a representar o comportamento do sistema como um todo. A Figura 3.1 apresenta um exemplo desta situação. A Figura 3.1C apresenta o elemento isolado evidenciando todos os modos de transferência de calor que podem ocorrer na solidificação em sistema metal/molde[**Sciama,1968;Pereira,1976**], que são: condução térmica no metal e no molde, transferência newtoniana na interface metal/molde, convecção térmica no metal líquido e no meio ambiente e radiação térmica do molde para o meio ambiente. Entretanto, alguns destes modos de transferência de calor são transitórios, enquanto outros permanecem durante a solidificação.

Na prática, a operação de vazamento do metal líquido em molde apropriado é sempre realizada a uma temperatura pouco acima da temperatura de fusão do metal para que este possa acomodar-se nas cavidades do molde antes do início da solidificação propriamente dita. Essa diferença de temperatura é conhecida como superaquecimento, e é rapidamente dissipado no início da solidificação pela ação das correntes de convecção natural ou forçada[**Kohn/Morillon,1965**]. Um esquema da ação das correntes de convecção pode ser vista na Figura 3.1A. Com a dissipação do superaquecimento desaparece também a força motriz que faz atuar a convecção e a condução térmica no metal líquido.

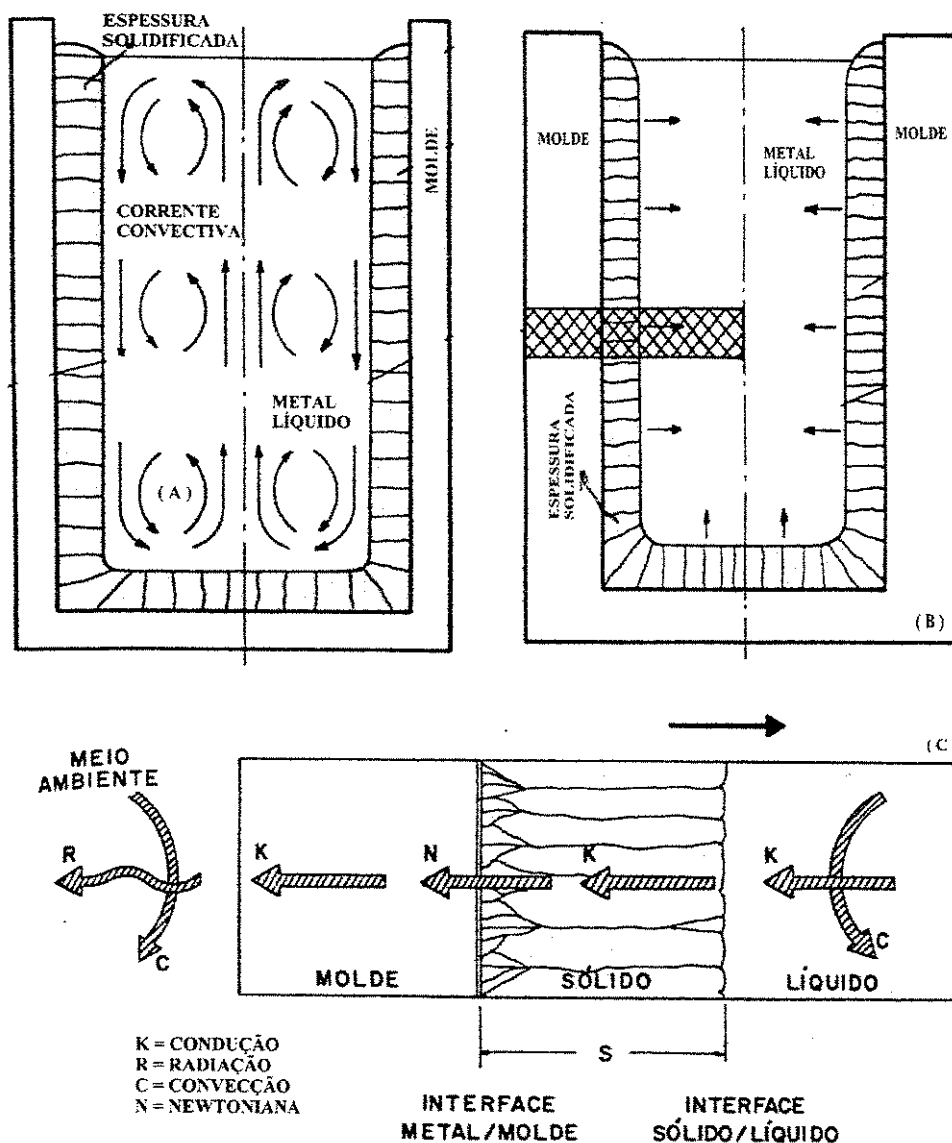


Figura 3.1 - Esquema ilustrando detalhes de um sistema metal/molde (A) ação das correntes convectivas no metal líquido, (B) localização de um elemento de referência para a análise da transferência de calor, (C) elemento de referência associado aos modos de transferência de calor durante a solidificação [Prates/Davies,1978].

A convecção e a radiação térmica do molde para o meio ambiente só se verifica quando o molde não tiver volume suficiente para absorver todo o calor transferido pelo metal durante a solidificação. Em condições práticas pode-se dimensionar o molde de

tal forma que possa absorver todo o calor transferido ou apenas eleve sua temperatura externa nos instantes finais do processo, tornando o transporte de calor ao meio ambiente inexpressivo no cômputo geral. Esses modos de transferência de calor não ocorrem quando trata-se de solidificação em moldes refrigerados.

A transferência newtoniana na interface metal/molde só não existe no caso de contato metal/molde perfeito, podendo ser desprezada em moldes de areia, sendo entretanto fundamental em todos os outros casos[Prates,1971].

Como conclusão, pode ser apresentado que fundamentalmente existem dois modos essenciais de transferir calor na solidificação que são: a condução térmica no metal que solidifica e no material do molde utilizado e a transferência newtoniana agindo na interface metal/molde.

Os processos de fabricação utilizam-se de conhecimentos técnicos científicos aliados a técnicas matemáticas que empregam a técnica computacional, na busca de minimizar os custos com aumento da qualidade de seus produtos. Olhando-se o passado do Setor Metalúrgico, onde sempre imperou o empirismo, o uso dessas técnicas está permitindo um verdadeiro salto de qualidade pela possibilidade da otimização do processo por meio da sua análise e do seu controle.

Os métodos de análise de transferência de calor no processo de solidificação podem ser classificados segundo as hipóteses simplificadoras empregadas e pelo tipo de abordagem ou ferramenta utilizada na tentativa de solucionar o problema, em modelos[Piwonka,1989; Samarkii et al,1993; Voller/Swaminathan,1992]:

- Análogos,
- Experimentais,
- Analíticos,
- Computacionais.

3.1. Modelos Análogos.

Estes modelos utilizam-se de compostos orgânicos que solidificam com variação de volume mínima, como um metal puro ou uma liga metálica. O manuseio de pequenas temperaturas envolvidas minimiza o risco e facilita a análise tanto da evolução do processo de solidificação como da estrutura final, do acabamento superficial e do produto assim solidificado, além de possibilitar uma projeção para situações reais. Por estas razões muitos trabalhos têm sido feitos com a utilização da técnica de modelos físicos análogos [Piwonka,1989; Trivedi,1984/94; Ding,1996; Laxmanan,1997/98].

Os métodos análogos podem ser também baseados na similaridade de forma existente entre as equações que regem a transferência de calor e as equações de circuitos elétricos tipo resistor/capacitor em regime transitório[Sciama,1964; Ruddle,1957]. A Tabela 3.1 apresenta as equivalências elétricas de algumas propriedades térmicas.

Tabela 3.1- Equivalência Elétrica de Propriedades Térmicas.

Propriedades Térmicas	Equivalência Elétrica
Capacidade térmica [J / kg. K]	Capacidade elétrica [F]
Resistência térmica [K / W]	Resistência elétrica [V / A]
Temperatura [K]	Tensão [V]
Fluxo térmico [W / m ²]	Corrente elétrica [A]

Os primeiros trabalhos com essa analogia datam da década de 40 com os trabalhos de Paschkis[Paschkis et al,1945/47/53/56] nos quais podem ser analisados a temperatura de vazamento, a espessura do molde de areia, a formação de camada de ar entre o metal e o molde e o efeito de resfriadores. Recentemente, tem-se no trabalho de Spim[Spim,1995] oportunidade de análise, dentre outros fatores, do coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde.

3.2 Modelos Experimentais

Além dos modelos cuja análise conduz a um desenvolvimento matemático rigoroso ou parcialmente rigoroso, ou ainda aqueles que se utilizam de facilidades computacionais, existem os modelos de análise de caráter essencialmente experimental. Nesses métodos, os autores propõem uma ferramenta de análise do problema de solidificação baseada na observação e comprovações experimentais, em alguns casos aplicáveis somente a problemas particulares, porém de grande incidência em unidades industriais. Como resultados desse tipo de análise resultaram algumas equações experimentais para determinação dos EDP e EDS, já amplamente discutidos no Capítulo 2, e do tempo de solidificação das quais a equação clássica é a que expressa o tempo de solidificação em função da espessura solidificada, na seguinte forma:

$$S = \eta\sqrt{t} - v, \quad 3.1$$

onde η e v são constantes, sendo que η depende fundamentalmente da capacidade de extração de calor do sistema metal/molde e v depende do grau de superaquecimento utilizado, sendo ambas dependentes também do formato e dimensões da peça a ser solidificada. Devido a estas dependências, fica evidente o caráter específico da Equação 3.1, na qual η e v devem ser determinadas cada vez que um parâmetro ou variável do processo de solidificação for mudado. Esta equação tem sido amplamente investigada nas últimas décadas com o objetivo de se determinar o maior número possível destas constantes, aplicáveis a diferentes casos de grande incidência na tecnologia de fundição e do lingotamento [Ruddle,1957; Weiberg/Buhr,1968; Prates,1972]. Dentre as Equações Experimentais que resultaram destas investigações podem-se mencionar as seguintes:

3.2.1 Modelo de Pires, Prates e Biloni.

A Equação desenvolvida por **Pires, Prates e Biloni**[Pires,1972/74] baseia-se nas seguintes hipóteses simplificadoras:

1. Metal e molde são considerados semi-infinitos;
2. Fluxo de calor unidimensional;
3. A resistência térmica da interface metal/molde é constante durante a solidificação;
4. A interface sólido/líquido é macroscopicamente plana;
5. A solidificação realiza-se sem superaquecimento no metal líquido; e
6. As propriedades físicas do sistema metal/molde não variam durante o processo.

Durante o processo de solidificação deve-se considerar a existência de três resistências térmicas essenciais:

- a resistência térmica do metal;
- a resistência térmica do molde; e
- a resistência térmica da interface metal/molde.

Propõe-se que estas três resistências térmicas tenham um efeito cumulativo sobre o tempo de solidificação, o que faz chegar a :

$$t = \alpha S^2 + \beta S \quad ,$$

onde α e β são constantes que dependem respectivamente do molde e do tipo de contato térmico da interface metal/molde e, podem ser calculadas pelas seguintes expressões:

$$\alpha = \frac{1}{4\phi^2 a_s} \quad , \quad 3.3$$

$$\beta = \frac{Hd_s}{h_i(T_F - T_0)} \quad 3.4$$

A grande limitação desse modelo reside no fato de não permitir a determinação da distribuição de temperatura do sistema metal/molde.

3.2.2 Modelo de Santos e Prates.

Considerando que o tempo de solidificação pode ser decomposto em duas parcelas, sendo uma relativa às influências da radiação e da convecção e outra relativa às influências de condução e de transferência newtoniana, **Santos [Santos,1977]** desenvolveu uma equação que permite a determinação do tempo de solidificação levando em conta a influência da espessura da parede do molde com geometria plana e cilíndrica, dada por:

$$t_s = t_\infty \operatorname{erf}\left(y_1 \frac{V_m}{V_p}\right) + t_0 \operatorname{erf}\left(y_2 \frac{V_m}{V_p}\right) \quad , \quad 3.5$$

onde (V_m / V_p) representa a relação entre o volume do molde e o volume da peça e t_∞ e t_0 são valores ideais de tempo de solidificação, correspondentes, respectivamente, aos casos extremos e opostos de solidificação em molde semi-infinito e solidificação em

Tabela 3.3- Valores experimentais do parâmetro **P** para o sistema metal/mole [Garcia, 1978].

METAL/LIGA	MOLDE	P
Aço carbono	Areia	0,60
	Ferro fundido	0,15
Alumínio	Areia	0,40
	Ferro fundido	0,10
Ferro fundido cinzento	Areia	2,04
	Ferro fundido	0,21
Ferro fundido maleável	Areia	0,82
	Ferro fundido	0,25
Latão	Areia	0,31
	Ferro fundido	0,17

3.3 Modelos Analíticos

Estes modelos podem ser divididos em **Aproximados e Exatos**

3.3.1 Modelos Analíticos Exatos

Os modelos analíticos exatos não admitem simplificações de caráter matemático, introduzindo hipóteses simplificadoras de caráter físico para tornar viável a solução do problema, afastando-se demasiado na maioria dos casos das condições físicas reais, o que inevitavelmente restringe bastante a utilização prática de tais métodos. As hipóteses simplificadoras adotadas na maioria das soluções do problema por meio desse método podem ser agrupadas como segue:

- a) O fluxo de calor é unidirecional;
- b) Não existe resistência térmica ao fluxo de calor na interface metal/molde.
Admite a existência de contato térmico perfeito metal/molde ou coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde tendendo a infinito;
- c) O metal e o molde comportam-se como elementos semi-infinitos, não havendo perdas de calor do molde para o meio ambiente. A temperatura externa do molde deve permanecer constante durante a solidificação. Todo calor do metal é transferido por condução e absorvido totalmente pelo molde;
- d) A temperatura da interface metal/molde permanece constante durante a solidificação;
- e) A interface sólido/líquido é macroscopicamente plana;
- f) Não existe fluxo de massa; e
- g) As propriedades físicas do metal e do molde permanecem constantes durante a solidificação.

Estas hipóteses consideradas em conjunto tornam a solução muito afastada dos casos práticos corriqueiros. Fluxo unidirecional ou utilização de moldes do tipo semi-infinito restringem-se a operações bastante particulares em metalurgia. O fato de assumir-se o contato térmico metal/molde perfeito implica em desprezar-se as diferentes naturezas físico-químicas do metal e do molde, as imperfeições da superfície interna do molde, bem como a camada de ar que se forma, entre o metal e o molde, pela contração do metal e do molde durante a solidificação. Por outro lado, a inexistência de fluxo de massa implica na inexistência de convecção térmica no metal líquido, ou seja, despreza-se o efeito do vazamento admitindo também que no caso da existência de superaquecimento no metal líquido, este seja extraído por condução térmica. Esta hipótese leva ainda à admissão da inexistência de segregação de soluto, o que torna os modelos analíticos exatos aplicáveis somente a metais puros, ligas eutéticas ou ligas bastante diluídas onde possa ser desprezada a pequena segregação existente. Finalmente, ao considerar-se que as propriedades físicas do metal e do molde

não variam na solidificação, isto é, não variam com a temperatura, e em alguns casos conduziram a erros apreciáveis[Sciama,1964].

Além de todas estas limitações esses modelos só são aplicáveis a moldes de paredes planas, assim mesmo com todas as restrições mencionadas e sem levar em conta os efeitos de canto, não sendo aplicáveis a nenhum outro tipo de geometria de molde. A maior vantagem dos modelos analíticos exatos reside no seu elevado grau de generalização, o que permite uma visão qualitativa abrangente dos modos de transferência de calor durante a solidificação.

Pode ser dito que o objetivo da análise da solidificação sob o ponto de vista da transferência de calor resume-se na determinação da lei de avanço da interface sólido/líquido com o tempo, bem como na determinação do perfil de temperaturas do sistema metal/molde durante o processo. As hipóteses simplificadoras consideradas reduzem a análise do fenômeno a um problema de condução não-estacionária e unidirecional de calor, aplicando-se portanto as equações matemáticas de fluxo de calor não-estacionário [Carslaw,1959;Ruddle,1957;Geiger,1973]. Desta forma, considerando o elemento infinitesimal do sistema metal/molde dado na Figura 3.1, a equação da condução de calor no sólido pode ser dada:

$$\nabla k \nabla T = d \left[\frac{\partial (c_p T)}{\partial t} \right] \quad . \quad 3.7$$

Com as hipóteses simplificadoras consideradas na análise por meio dos modelos analíticos exatos, a Equação 3.7 fica reduzida a:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} . \quad 3.8$$

O fluxo de calor por unidade de área é dado pela Equação de Fourier:

$$q = -k \frac{\partial T}{\partial x} . \quad 3.9$$

O sistema metal/molde é associado um sistema de coordenadas lineares de tal modo que:

$x < 0$	molde,
$x = 0$	interface meta/molde,
$x > 0$	metal,
$x = S$	interface sólido/líquido,
$0 < x < S$	metal sólido, e
$x > S$	metal líquido.

A solução deve satisfazer à Equação 3.8, desde que satisfeitas as seguintes condições:

para $t = 0$;

$$x \leq 0 \quad T_m = T_0 ; \quad e \quad 3.10$$

$$x > 0 \quad T_L = T_V ; \quad 3.11$$

para $t > 0$

$$x \rightarrow -\infty \quad T_m = T_0 ; \quad 3.12$$

$$x \rightarrow +\infty \quad T_L = T_V ; \quad 3.13$$

$$x = 0 \quad T_m = T_S = T_i ; \text{ e } \quad 3.14$$

$$x = S \quad T_S = T_L = T_F . \quad 3.15$$

A Figura 3.2 apresenta um esquema que reflete a distribuição de temperaturas em função das condições de contorno estabelecidas. Baseadas nas Equações 3.8 e 3.9 e nas condições de contorno consideradas, foram desenvolvidos vários modelos analíticos exatos cujas soluções estão apresentadas a seguir:

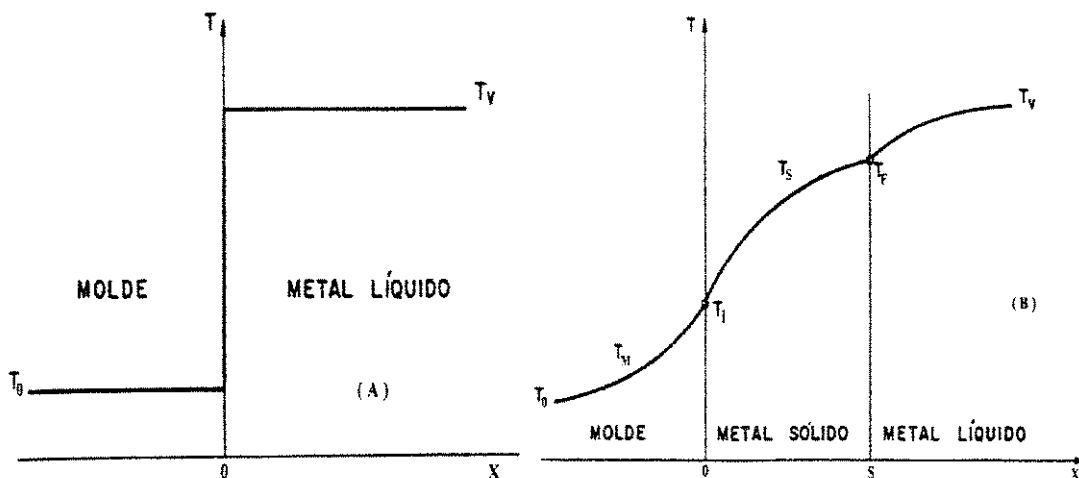


Figura 3.2 - Perfis térmicos esquemáticos para sistema metal/molde
(A) $t = 0$ e (B) $t > 0$ [Carslaw,1959;Ruddle,1957;Geiger,1973].

A) **Modelo de Schwarz**

Solução de caráter mais geral para o problema, na forma em que foi estabelecido no item anterior, foi obtida por **Schwarz** [Carslaw,1959; Ruddle,1957; Prates,1971; Adams,1958]. A Figura 3.3A apresenta um esquema da distribuição de temperaturas no sistema metal/molde obtidas por meio desse modelo.

B) **Modelo de Neumann**

A solução encontrada por **Neumann** apresenta um caráter menos geral do que a solução de **Schwarz**, e admite difusividade de calor infinita para o molde, isto é, considera o molde um perfeito absorvedor de calor, o que torna essa solução aplicável somente a moldes refrigerados [Carslaw,1959; Ruddle,1957; Prates,1971; Adams,1958]. A Figura 3.3B mostra um esquema da distribuição da temperatura no sistema metal/molde, segundo a solução de **Neumann**.

C) **Modelo de Lightfoot**

A solução de **Lightfoot** baseia-se na hipótese de que o molde seja um perfeito absorvedor de calor a exemplo da proposta de **Neumann**; porém, adicionalmente admite que as propriedades físicas do metal solidificado sejam iguais às do metal líquido [Carslaw,1959; Ruddle,1957; Prates,1971; Adams,1958]. A Figura 3.3B mostra o esquema do perfil de temperaturas utilizado na análise tornando evidente que as equações que permitem determiná-lo são as mesmas definidas por **Neumann**.

D) Modelo de Lyubov

A solução de **Lyubov** baseia-se em uma única hipótese adicional. Considera que não existe superaquecimento no metal líquido e que o metal é vazado à temperatura de fusão [Ruddle,1957;Prates,1971]. A Figura 3.3C mostra um esquema do perfil de temperaturas do sistema metal/molde, durante a solidificação, segundo a proposta de **Lyubov**.

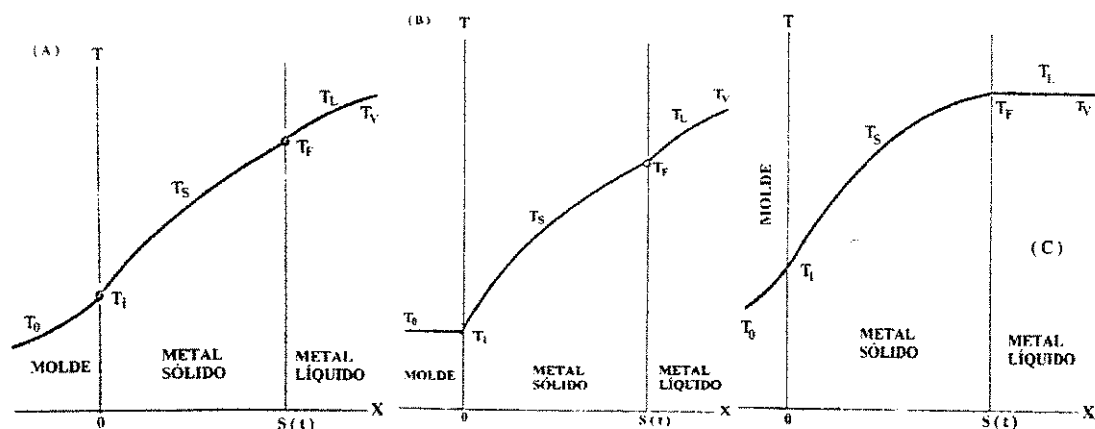


Figura 3.3 - Perfis térmicos para sistemas metal/molde conforme solução obtida por (A) Schwarz, (B) Neumann e Lightfoot e (C) Lyubov.

E) Modelo de Stefan

Esta proposta é na realidade uma particularização da proposta de **Lyubov** para o caso de moldes refrigerados, uma vez que apresenta como hipótese simplificadora o molde como perfeito absorvedor de calor e ausência de superaquecimento no metal líquido [Prates,1971]. O esquema de distribuição de temperaturas, durante a solidificação, para a proposta de **Stefan**, pode ser visto na Figura 3.4A.

F) Modelo de Chvorinov

A proposta de **Chvorinov** considera o molde como um péssimo absorvedor de calor e o metal líquido sendo vazado na temperatura de fusão[**Prates,1971**]. Essa proposta pode ser também considerada como um caso particular da proposta de **Lyubov** na qual se tem um molde de areia, situação em que a difusividade térmica do metal é muito maior do a do molde. O perfil de distribuição de temperaturas do sistema metal/molde, obtido através por essa proposta, encontra-se esquematizado na Figura 3.4B.

No final da década de 70, foi desenvolvido um método analítico para solidificação com interface sólido/líquido macroscopicamente plana, que incorporou a existência de uma resistência térmica metal/molde finita constante, inicialmente desenvolvida para moldes refrigerados[**Garcia,1978**] e, posteriormente, para moldes maciços[**Garcia,1979**]. Mais tarde, adotou-se um artifício de cálculo que permitiu assumir-se resistência variável na interface metal/molde[**Clyne,1982**]. As hipóteses básicas desse modelo foram ampliadas para permitir a análise da solidificação de ligas binárias em moldes refrigerados[**Garcia,1984**] e em moldes maciços[**Ynoue,1993**].

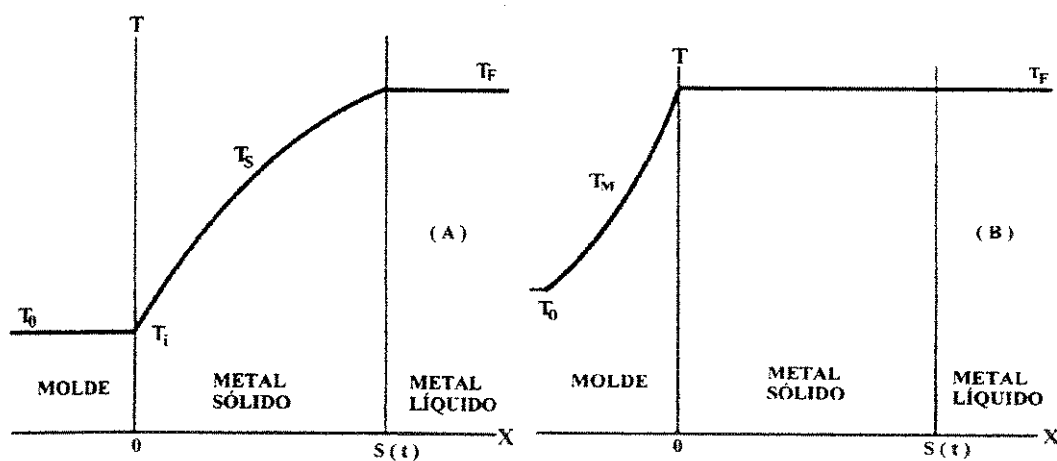


Figura 3.4 Distribuição esquemática de temperaturas em sistema metal/molde segundo a solução (A) Stefan e (B) Chvorinov.

3.3.2 Modelo Analíticos Aproximados

Os modelos analíticos aproximados caracterizam-se por admitir em simplificações de caráter matemático e assumir em determinadas condições de contorno que restringem o problema real, com a finalidade de tornar sua solução viável analiticamente. Os diferentes métodos admitem funções auxiliares polinomiais para descrever o perfil térmico no metal, a partir das quais se determina a cinética do processo de solidificação. A principal diferença entre os métodos analíticos exatos e os aproximados está no fato de que estes últimos consideram que o contato térmico metal/molde é imperfeito, isto é, admite a existência de uma resistência térmica na interface metal/molde. As hipóteses simplificadoras adotadas na solução do problema pelos métodos analíticos aproximados geralmente podem ser agrupados como segue:

- a) O fluxo de calor é unidimensional;
- b) O metal e o molde comportam-se como elementos semi-infinitos, não havendo perdas de calor do molde para o meio ambiente;
- c) O contato térmico metal/molde não é perfeito, apresentando um coeficiente de transferência de calor finito;
- d) A interface sólido/líquido é macroscopicamente plana;
- e) O material do molde apresenta uma difusividade de calor muito maior do que a do metal, isto é, o molde é considerado como um absorvedor perfeito de calor;
- f) Não existe fluxo de massa;
- g) As propriedades físicas do metal e do molde são constantes durante o processo de solidificação.

As hipóteses que caracterizam os métodos analíticos aproximados podem aproximar-se bastante das condições verificadas em determinados casos particulares de lingotamento contínuo, o que lhes confere um aspecto de aplicação tecnológica bastante importante[Hills,1965/67/69].

O desenvolvimento das soluções analíticas aproximadas é baseado em balanços de fluxo de calor na espessura solidificada em um instante qualquer do processo de solidificação, associando-se ao sistema metal/molde um sistema de coordenadas conforme mostra o esquema da Figura 3.5. As condições de contorno no início do processo são iguais às consideradas no desenvolvimento dos métodos analíticos exatos.

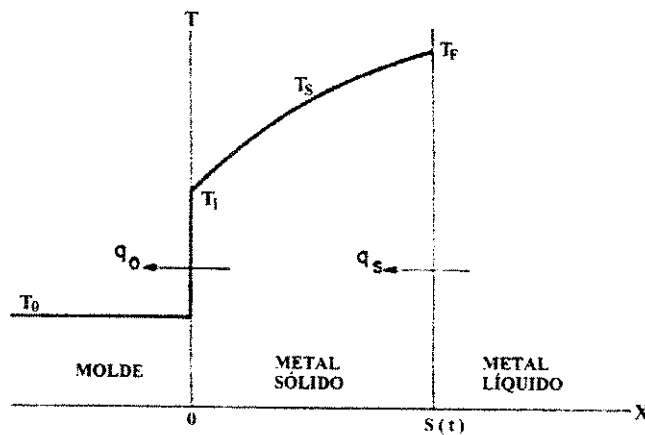


Figura 3.5 - Perfil de temperaturas do sistema metal/molde evidenciando o fluxo de calor nas interfaces metal/molde e sólido/líquido.

Os balanços térmicos na espessura solidificada para $t > 0$ leva à seguinte formulação:

na interface metal/molde $x = 0$

$$q_0 = -k_S \left(\frac{\partial T_S}{\partial x} \right)_{x=0} ; \quad 3.16$$

na interface sólido/líquido $x = S$

$$q_S = -k_S \left(\frac{\partial T_S}{\partial x} \right)_{x=S} + L d_S \left(\frac{dS}{dt} \right) \quad . \quad 3.17$$

Na espessura solidificada pode-se aplicar a Equação de Fourier para fluxo de calor não-estacionário:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_S \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) \quad , \quad 3.18$$

e que pode ser integrada em relação à variável x :

$$\int_0^S \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right) dx = \frac{k_S}{c_S d_S} \int_0^S \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) dx \quad . \quad 3.19$$

Considerando os resultados dos balanços térmicos expressos pelas Equações 3.16 e 3.17, que utilizados na Equação 3.19, resulta:

$$\int_0^S \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right) dx = \frac{1}{c_S d_S} [q_0 - q_S + L d_S \left(\frac{dS}{dt} \right)] \quad , \quad 3.20$$

ou

$$\int_0^S \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) dx = \left(\frac{L}{c_S} \right) \frac{dS}{dt} + \left(\frac{q_0 - q_S}{c_S d_S} \right) \quad . \quad 3.21$$

Segundo Leibnitz[Asparci,1966], pode ser reescrita na forma:

$$\frac{d}{dt} \left(\int_0^S T_S dx \right) - T_F S = \left(\frac{L}{c_S} \right) \frac{dS}{dt} + \frac{q_0 - q_S}{c_S d_S}, \quad 3.22$$

ou ainda,

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\frac{d}{dt} \left(\int_0^S T_S dx \right) - \left(\frac{q_0 - q_S}{c_S d_S} \right)}{T_F + \frac{L}{c_S}} \quad 3.23$$

Esta última Equação é a base do desenvolvimento das soluções analíticas aproximadas, que irão depender das hipóteses consideradas em relação ao perfil de temperaturas do metal sólido (T_S) e das soluções para determinação dos fluxos de calor (q_0) e (q_S). A partir do perfil de temperaturas considerado no sólido, e por meio de técnicas de integração, quase sempre numéricas, chega-se à uma solução do tipo $S = f(t)$, que podem servir como exemplos às propostas de:

G) Modelo de London/Seban

Nessa solução, os autores adotaram uma função linear para descrever o perfil térmico do metal durante o processo de solidificação[London/Seban,1943], isto é, a resistência térmica da interface metal/molde é muito maior que a do metal e o efeito do calor específico é desprezível comparado ao calor latente. A este fato foi associado a hipótese do vazamento do metal líquido sem superaquecimento. O perfil de temperaturas no sistema metal/molde, segundo essa proposta, pode ser visto esquematicamente na Figura 3.6A.

H) Modelos de Adams, Mergelin e Hills

Adams, Mergelin e Hills[Adams,1958;Mergelin,1966;Hills,1969] obtiveram suas soluções adotando uma função quadrática para descrever o perfil térmico do metal sólido durante a solidificação e associaram a esta condição que o metal solidifica sem superaquecimento conforme pode ser visto esquematicamente na Figura 3.6B.

I) Modelo de Hrycak

Hrycak[Hrycak,1963] admitiu duas funções auxiliares, uma que descreve o perfil térmico no metal solidificado e outra que descreve o perfil térmico no metal líquido, como mostrado no esquema da Figura 3.6C.

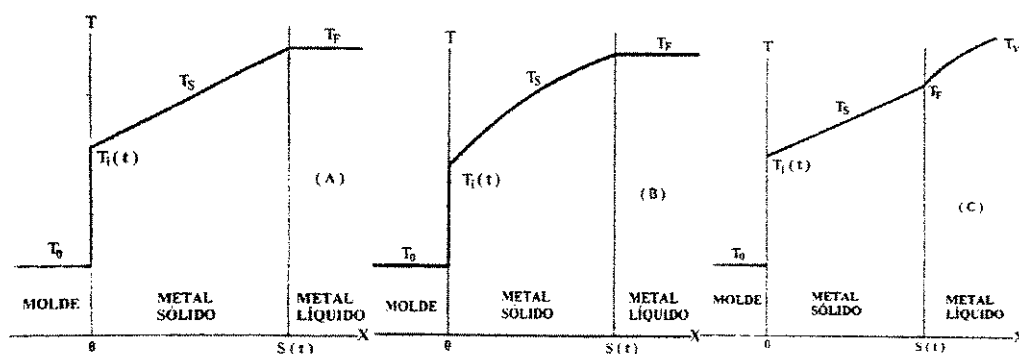


Figura 3.6 - Distribuição de temperaturas esquemático em sistema metal/molde segundo as hipóteses assumidas nas soluções de (A) London e Seban, (B) Adams, Mergelin e Hills, e (C) Hrycak.

3.4 Modelos Numéricos

A necessidade de utilizar-se métodos não-analíticos no cálculo da distribuição interna de temperaturas do sistema metal/molde e da posição da interface sólido/líquido durante a solidificação surge devido ao fato dos modelos analíticos exatos e aproximados fornecerem soluções que têm aplicação limitada devido às restrições impostas para sua solução. Esses métodos conduzem à utilização de hipóteses mais próximas das condições reais de solidificação podendo ser considerados: a resistência térmica na interface metal/molde, a geometria e as dimensões do sistema metal/molde, a geometria e cinética da interface sólido/líquido, a variação das propriedades termofísicas, a existência de fluxos de massa durante o processo, etc.

O tratamento do calor latente associado à mudança de fase constitui-se num dos principais problemas na modelagem de solidificação de metais puros e de ligas binárias eutéticas e não-eutéticas. Neste particular, **Dusinberre**[**Dusinberre,1949**] propôs um método versátil que serviu de base para o desenvolvimento de outros métodos numéricos. Esse problema foi abordado por diferentes pesquisadores pelo balanço de energia na interface sólido/líquido [**Viskanta,1988**; **Ozizik,1968**; **Voller/Cross,1981**; **Poirier/Salcedean,1988**; **Rabin/Korin,1993**].

Os vários métodos numéricos que foram propostos para resolver o problema da transferência de calor com mudança de fase foram agrupados de um modo geral por **Viskanta**[**Viskanta,1988**] em: **Método de malha fixa**; **métodos de malha móvel** e **métodos analíticos**. Estes últimos já foram apresentados e discutidos anteriormente.

As técnicas de **malha móvel**[**Ruan/Richmond,1993**] envolvem malhas deformáveis ou móveis de elementos finitos ou de diferenças finitas. A malha é continuamente móvel para se adaptar ao movimento da frente de solidificação, de modo que a localização de interface sólido/líquido é avaliada para todo o intervalo de

tempo da discretização[Samarskii et al,1993]. Os algoritmos utilizados são bastante complexos com maior custo operacional.

As técnicas de **malha móvel** nos grupos: **mudança de coordenadas; malhas deformáveis e malhas adaptativas**[Samarskii et al,1993;Silva/Galcão,1993].

No caso de **mudança de coordenadas**, a interface sólido/líquido é fixada com um sistema de transformação de coordenadas apropriado. Tais métodos de transformação introduzem complicações desde que a posição da frente não é especificada em princípio, mas, ao contrário, faz parte da solução do problema. Entretanto, para aqueles problemas onde a posição da frente de solidificação em princípio é conhecida, a técnica de transformação de coordenadas apresenta vantagens significativas.

No caso de discretização por **malhas deformáveis**, após a resolução das equações diferenciais para um dado passo no tempo, a localização da interface sólido/líquido é computada e uma nova malha é gerada. Realizam-se então os cálculos no próximo passo de tempo já com nova distribuição de nós.

Na discretização por **malhas adaptativas**, segundo Jucá[Jucá,1993], ocorre uma modificação dinâmica da malha com a evolução da solução das equações diferenciais, sendo que a redistribuição dos nós da malha sobre o domínio físico é direcionada pela física do problema, resultante da evolução de sua solução. O princípio fundamental desse método físico evolui, concentrando-o em regiões de maiores gradientes da solução, à medida que essas regiões são identificadas.

Nos métodos de **malhas fixas** não existe necessidade de localização da interface durante os cálculos. Como principais exemplos desse grupo temos os conhecidos [Kumar/Namburu,1990;Voller/Swaminathan,1990/91;Samarskii et al,1993] **métodos da temperatura**, onde a temperatura é tomada como a variável

dependente[Viskanta,1988], e o **método da entalpia**, sendo a entalpia e a temperatura as variáveis em questão.

No **método da temperatura** (= método do calor específico equivalente ou capacidade térmica equivalente), as equações de conservação da energia são escritas separadamente para as fases líquidas e sólidas[Viskanta,1988] acopladas na interface sólido/líquido[Viskanta,1988; Samarskii et al,1993]. O calor latente é considerado pela sua substituição por um calor específico equivalente[Santos,1995; Pham,1985] para todo o intervalo de solidificação [Eckert/Drake,1972].

O **método da entalpia**, conhecido ainda como formulação fraca, tem como principal vantagem o fato de não ser necessário um tratamento explícito da condição da interface sólido/líquido [Voller,1990; Voller/Prakash,1987; Fortin et al,1992; Griffith/Nassersharif,1990]. Isto é conseguido por meio da reformulação das equações da conservação da energia pela introdução de um termo apropriado de fonte de calor, de modo que uma equação diferencial simples é resolvida, mediante a consideração de uma malha fixa, para todo o domínio discretizado do metal (sólido e/ou líquido).

Um dos maiores problemas na utilização desse método é a determinação da entalpia total em cada célula da malha discretizada. A entalpia de uma célula sob mudança de fase depende da evolução da fração de sólido nesta célula. Quando a malha discretizada é suficientemente refinada de modo que dois ou mais nós façam parte da região em mudança de fase no intervalo de tempo considerado, resulta em bons resultados[Griffith/Nassersharif,1990]. Por outro lado, no caso de uma discretização grosseira, ou quando o intervalo de solidificação é estrito, a solução pelo **método da entalpia** pode produzir um certo número de falsos patamares de solidificação.

Como pode ser percebido, a seleção de um determinado método depende das suas características e das particularidades do problema a ser resolvido. Assim, as principais características que podem ser avaliadas em um modelo numérico são:

Análise de Erro

Na fase de modelagem é necessário o equacionamento físico do problema, definindo-se quais as variáveis relevantes e como elas se relacionam[Cunha,1993]. Normalmente, são necessárias várias simplificações do mundo físico para se ter um modelo matemático com o qual se possa trabalhar, pois nem tudo que influencia no fenômeno pode ser levado em consideração, introduzindo-se incertezas, que juntamente com as incertezas inerentes à etapa de medição dos parâmetros de processos, as incertezas relativas às condições iniciais,pode ser chamado de **erro inicial**. A influência dessas perturbações no resultado final vai depender da estabilidade do problema. Nas situações malpostas ou malcondicionadas, a influência desse erro pode ser desastrosa e inviabilizar a completamente a solução numérica aplicada. Neste caso são necessárias soluções numéricas especializadas conhecidas como problema inverso.

Na etapa de implementação computacional do modelo podem surgir os **erros numéricos**[Minkonycz,1988;Chapra/Canale,1990;Cunha,1993] divididos em **erros de arredondamento**, relativos à limitação física da máquina que se está usando e os **erros de truncamento**, relativos à utilização de processos que deveriam ser infinitos ou muito grandes para a determinação de um valor e que, por razões práticas, são truncados.

Os métodos numéricos podem ainda ser avaliados com base em propriedades inerentes à própria metodologia, tais como:

Consistência Numérica

A primeira exigência para qualquer esquema de discretização de equações diferenciais parciais pelo método de diferenças finitas é a **Consistência Numérica**[Minkowycz,1988]. Considera-se consistente com a equação diferencial original uma equação discretizada, se o erro de truncamento aproxima-se de zero quando o tamanho da malha e o intervalo de tempo tendem a zero[Shih,1984]. Está diretamente associado ao método de diferenças finitas.

Estabilidade Numérica

Um método é estável quando os **erros de arredondamento** não crescem durante a etapa de solução do problema[Cunha,1993; Shih,1984]. Na determinação da estabilidade da discretização de um sistema transiente, podem-se utilizar dois critérios. O critério conhecido como **método da matriz** e o conhecido como **método de Von Neumann**[Shih,1984;Jaluria/Torrance,1986;Smith,1985]. Está diretamente associado ao método de diferenças finitas

Convergência

É provavelmente a mais importante propriedade numérica dos esquemas de discretização, por estar associada à maioria dos métodos numéricos[Shih,1984]. O termo **convergência** significa que a solução por diferenças finitas aproxima-se da solução verdadeira da equação diferencial parcial, tendo as mesmas condições de contorno e iniciais, quando a malha é refinada.

Precisão

A **precisão** pode ser avaliada pela aproximação que possa existir entre a solução obtida utilizando-se a equação discretizada e a solução exata. Entretanto, na maioria dos casos de solidificação isto não ocorre, devendo-se adotar critérios para assegurar a **precisão**, como por exemplo, aumentando-se o refinamento da malha quando se utilizar o método de diferenças finitas ou, ainda aumentando a taxa de convergência de um dada função de interpolação, quando se aplica o método dos elementos finitos [Shih,1984].

Eficiência

Um algoritmo computacional pode ser considerado **eficiente** se necessitar de uma pequena quantidade de reserva de memória, assim como utilizar pouco tempo de processamento[Shih,1984]. A necessidade de memória está diretamente relacionada com a quantidade e tipos de dados e com a codificação das instruções.

3.5 Modelo Analítico para Análise da Solidificação Unidirecional de Ligas Binárias em Moldes Maciços

Na sua proposta inicial **Garcia**[Garcia,1978] tratou da solidificação de metais puros em moldes refrigerados sem superaquecimento. Em seguida, a mesma foi usada para tratar da solidificação de metais puros em moldes maciços[Garcia,1979] e, em sequência, foi aplicada na solidificação de ligas em moldes refrigerados com superaquecimento[Garcia,1984]. Recentemente, foi aplicado no caso da solidificação unidirecional de ligas binárias (com zona pastosa) em moldes maciços[Ynoue,1993].

O modelo apresenta como hipótese fundamental a consideração da resistência térmica newtoniana na interface metal / molde equivalente a uma camada de material pré - existente e que se divide em duas parcelas : uma resultante de uma espessura virtual acrescida ao molde e a outra, resultante de uma camada virtual constituída de metal previamente solidificado e de uma parcela da zona pastosa, tal como apresentado na Figura3.7.

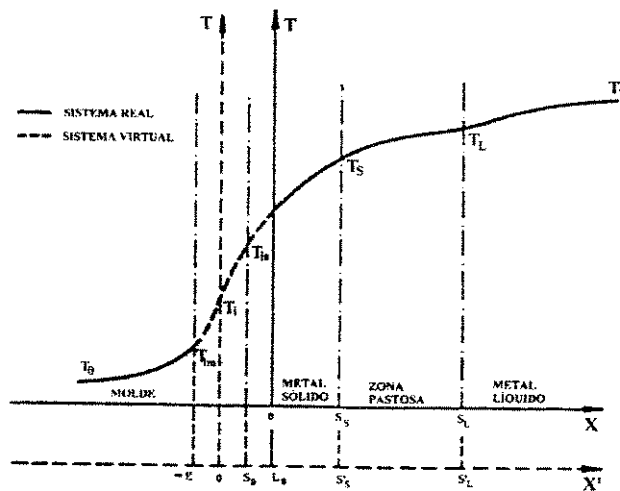


Figura 3.7 - Perfil térmico esquemático para sistema metal/molde segundo proposta de A. Garcia [Garcia,1978].

Desta forma é proposto um sistema virtual, no qual é considerado como perfeito o contato entre o metal e o molde, sendo todo o calor retirado por condução, o que permite analisar a solidificação pela Equação de Fourier para condução de calor em regime não-estacionário :

$$\frac{\partial T}{\partial t'} = a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x'^2} \right) ,$$

3.24

cuja solução geral é da seguinte forma,

$$T(x, t) = A + B \operatorname{erf}\left(\frac{x'}{2\sqrt{at'}}\right), \quad 3.25$$

que pode ser aplicada no molde, no sólido, na região pastosa e no líquido, evidentemente, com valores de **A** e de **B** referentes a cada caso.

3.5.1 Hipóteses Básicas de Caráter Físico Assumidas

São consideradas as seguintes hipóteses básicas de caráter físico:

- O fluxo de calor por condução é unidirecional;
- A resistência térmica newtoniana junto à interface metal / molde é representada por um coeficiente de transmissão de calor (**h**) constante ;
- As propriedades físicas dos materiais são invariantes dentro de uma mesma fase;
- No metal líquido, considera-se fluxo de calor somente por condução;
- O calor latente de solidificação liberado durante a solidificação é levado em consideração por um ajuste no valor do calor específico dentro de faixa de solidificação, isto é :

$$C_P = C_L + \left(\frac{L}{T_L - T_S}\right), \quad 3.26$$

3.5.2 Correlação entre o Sistema Virtual e o Sistema Real

A transposição entre os parâmetros do sistema virtual para o sistema real é feita por meio das seguintes relações :

$$x' = x + L_0 \quad \Rightarrow \quad x > 0 \quad 3.27$$

$$x' = x - E_0 \quad \Rightarrow \quad x < 0 \quad 3.28$$

$$S'_S = S_S + L_0 \quad 3.29$$

$$S'_L = S_L + L_0 \quad 3.30$$

$$t' = t + t_0 \quad 3.31$$

onde t_0 é o tempo em que ocorre a solidificação da espessura virtual S_0 .

3.5.3 Condições de Contorno aplicadas ao Sistema

As condições de contorno aplicadas ao sistema são as seguintes :

$$x' = -\infty \quad \Rightarrow \quad T_M = T_0 = \text{constante} \quad 3.32$$

$$x' = 0 \quad \Rightarrow \quad T_M = T_1 = T_i = \text{constante} \quad 3.33$$

$$x' = S'_S \quad \Rightarrow \quad T_1 = T_S = \text{constante} \quad 3.34$$

$$x' = S'_S \quad \Rightarrow \quad T_2 = T_S = \text{constante} \quad 3.35$$

$$x' = S'_L \quad \Rightarrow \quad T_2 = T_L = \text{constante} \quad 3.36$$

$$x' = S'_L \quad \Rightarrow \quad T_3 = T_L = \text{constante} \quad 3.37$$

$$x' = +\infty \quad \Rightarrow \quad T_3 = T_V = \text{constante} \quad 3.38$$

A preocupação do modelo é encontrar soluções que satisfaçam à Equação 3.24, uma vez que se aplicam nas diferentes posições de interesse do processo de solidificação. Desta forma, a análise atenta da bibliografia disponível sobre o assunto sugere que a manipulação matemática das correlações entre os parâmetros dos sistemas virtual e real, assim como das condições de contorno, são condições necessárias e suficientes para que o conjunto de equações que descrevem o processo de solidificação possa ser escrito.

3.5.4 Cinética de Solidificação

3.5.4.1 Evolução da isoterma solidus

A aplicação da C.C dada pela Equação 3.34 na Equação 3.25 e se o argumento da função erro desta equação for igualado à constante ϕ_1 , pode ser obtido o que se segue:

$$t'_s = \frac{(S'_s)^2}{4a_1(\phi_1)^2} \quad . \quad 3.39$$

Se forem assumidos considerações tais como :

$$x' = S_0 \quad \text{e} \quad t'_s = t_0, \quad \text{chega-se a}$$

$$t_0 = \frac{S_0^2}{4a_1(\phi_1)^2} \quad . \quad 3.40$$

Se em seguida for feita a combinação entre as Equações 3.29, 3.31, 3.39, e 3.40, pode-se escrever sem muito esforço :

$$t_s = \frac{S_s^2}{4a_1(\phi_1)^2} + \frac{L_0 S_s}{2a_1(\phi_1)^2} + \frac{L_0^2 - S_0^2}{4a_1(\phi_1)^2} \quad , \quad 3.41$$

ou de forma simplificada :

$$t_s = \alpha_s (S_s)^2 + \beta_s S_s + \delta \quad , \quad 3.42$$

onde :

$$\alpha_S = \frac{1}{4a_1(\phi_1)^2} \quad , \quad 3.42a$$

$$\beta_S = \frac{L_0}{2a_1(\phi_1)^2} \quad , \quad e \quad 3.42b$$

$$\delta = \frac{L_0^2 - S_0^2}{4a_1(\phi_1)^2} \quad . \quad 3.42c$$

A Equação 3.42 descreve o deslocamento da Isoterma Solidus em função do tempo, durante o processo de solidificação.

3.5.4.2 Evolução da Isoterma Liquidus

Por outro lado, se for aplicada a C.C dada pela Equação 3.36 na Equação 3.25 e o argumento da função erro desta equação for igualado à constante ϕ_2 , de forma semelhante poderá ser obtido:

$$t'_L = \frac{(S'_L)^2}{4a_2(\phi_2)^2} \quad . \quad 3.43$$

Com a relação entre as Equações 3.30, 3.31 e 3.43, obtém-se:

$$t_L = \frac{S_L^2}{4 a_2 (\phi_2)^2} + \frac{L_0 S_L}{2 a_2 (\phi_2)^2} , \quad 3.44$$

ou de forma simplificada:

$$t_L = \alpha_L (S_L)^2 + \beta_L S_L , \quad 3.45$$

onde:

$$\alpha_L = \frac{1}{4 a_2 (\phi_2)^2} , \text{ e} \quad 3.45a$$

$$\beta_L = \frac{L_0}{2 a_2 (\phi_2)^2} . \quad 3.45b$$

A Equação 3.45 descreve o deslocamento da Isoterma Liquidus em função do tempo, durante o processo de solidificação. Na Figura 3.8 encontra-se esquematizado o posicionamento das duas Isotermas (Liquidus e Solidus) nos sistemas real e virtual.

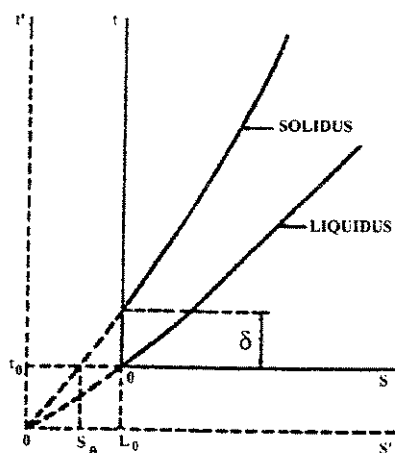


Figura 3.8 - Evolução esquemática das isothermas solidus e liquidus segundo proposta de A. Garcia[Garcia,1978].

3.5.5 Determinação dos Perfis Térmicos durante a Solidificação

3.5.5.1- Perfil Térmico no Molde

O perfil térmico no molde pode ser expresso com o auxílio da Equação 3.25, utilizando-se a Equação 3.46:

$$T_M = A_M + B_M \operatorname{erf}\left(\frac{x'}{2\sqrt{a_M t'}}\right) \quad 3.46$$

A determinação das constantes A_M e B_M depende da relação entre as C.C. dadas pelas Equações 3.32 e 3.33 com a Equação 3.46:

$$A_M = T_i, e \quad 3.47$$

$$B_M = T_i + T_0. \quad 3.48$$

A modificação do argumento da função erro da Equação 3.46 pode ser feito com a utilização das Equações 3.28, 3.29 e 3.39 da seguinte forma :

$$\frac{x'}{2\sqrt{a_M t'}} = \phi_1 \frac{x'}{S'_S} \frac{\sqrt{a_1}}{\sqrt{a_M}} = N\phi_1 \frac{x'}{S'_S} = N\phi_1 \left(\frac{x - E_0}{S_S + L_0} \right), e \quad 3.49$$

$$N = \frac{\sqrt{a_1}}{\sqrt{a_M}} = \sqrt{\frac{k_1 \cdot c_M \cdot d_M}{k_M \cdot c_1 \cdot d_1}}. \quad 3.50$$

A manipulação matemática das Equações 3.46, 3.47, 3.48 e 3.49 possibilita escrever

$$T_M = T_i + (T_i - T_0) \operatorname{erf} \left[N\phi_1 \left(\frac{x - E_0}{S_S + L_0} \right) \right]. \quad 3.51$$

Nesta equação faz-se necessária a determinação de T_i , que será feito com a Equação 3.85 a ser determinada mais tarde. Em consequência, pode-se reescrever a Equação 3.51 na forma :

$$T_M = T_0 + \frac{M(T_S - T_0)}{M + \operatorname{erf}(\phi_1)} \left\{ 1 + \operatorname{erf} \left[N\phi_1 \left(\frac{x - E_0}{S_S + L_0} \right) \right] \right\}, \quad 3.52$$

onde:

$$M = \frac{b_1}{b_M} = \frac{\sqrt{k_1 c_1 d_1}}{\sqrt{k_M c_M d_M}}. \quad 3.53$$

3.5.5.2 Perfil Térmico no Metal Sólido

A Equação 3.25 possibilita que se escreva o perfil térmico no metal sólido por meio de:

$$T_1 = A_1 + B_1 \operatorname{erf}\left(\frac{x'}{2\sqrt{a_1 t'}}\right) \quad . \quad 3.54$$

A determinação das constantes A_1 e B_1 depende da utilização das C.C. dadas pela introdução das equações 3.33, 3.34 na Equação 3.54:

$$A_1 = T_i \text{ , e} \quad 3.55$$

$$B_1 = \frac{T_s - T_i}{\operatorname{erf}(\phi_1)} \quad 3.56$$

A modificação do argumento da função erro da Equação 3.54 com a utilização das Equações 3.27 e 3.29 pode ser feito da seguinte forma :

$$\frac{x'}{2\sqrt{a_1 t'}} = \phi_1 \frac{x'}{S'_s} = \phi_1 \left(\frac{x + L_0}{S_s + L_0} \right) \quad . \quad 3.57$$

Combinando-se as Equações 3.54, 3.55, 3.56 e 3.57 chega-se a:

$$T_1 = T_i + \frac{(T_s - T_i)}{\operatorname{erf}(\phi_1)} \operatorname{erf}\left[\phi_1 \left(\frac{x + L_0}{S_s + L_0} \right)\right] \quad . \quad 3.58$$

Nesta equação faz-se necessária a eliminação de T_i , o que será feito com a Equação 3.85, a ser determinada mais tarde. Em consequência, pode-se rescrever a Equação 3.58 na forma

$$T_1 = T_0 + \frac{(T_s - T_0)}{M + \operatorname{erf}(\phi_1)} [M + \operatorname{erf}(\phi_1 \frac{x + L_0}{S_s + L_0})] \quad 3.59$$

3.5.5.3 Perfil Térmico da Região Pastosa ou “ Mushy Zone ”

A Equação 3.25 possibilita que o perfil térmico na região pastosa seja expresso por:

$$T_2 = A_2 + B_2 \operatorname{erf}(\frac{x'}{2\sqrt{a_2 t'}}) \quad 3.60$$

Com as C.C. dadas pelas Equações 3.35 e 3.37 pode-se reescrever a Equação 3.60 na forma:

$$T_s = A_2 + B_2 \operatorname{erf}(\frac{S'_s}{2\sqrt{a_2 t'}}) \quad , e \quad 3.61$$

$$T_L = A_2 + B_2 \operatorname{erf}(\frac{S'_L}{2\sqrt{a_2 t'}}) \quad 3.62$$

O ajuste entre os argumentos das funções erros das Equações 3.61 e 3.62 pode ser feito da seguinte forma:

$$\phi_2 = \frac{S'_L}{2\sqrt{a_2 t'}} = \frac{S'_L}{2\sqrt{a_2 t'}} \frac{\sqrt{a_1}}{\sqrt{a_1}} \frac{S'_S}{S'_S} = n\phi_1 \frac{S'_L}{S'_S}, \text{ e} \quad 3.63$$

$$n = \frac{\sqrt{a_1}}{\sqrt{a_2}} = \sqrt{\frac{k_1 \cdot c_2 \cdot d_2}{k_2 \cdot c_1 \cdot d_1}} \quad 3.64$$

Com arranjos entre as Equações 3.61, 3.62 e 3.63 pode-se escrever os valores de A_2 e B_2 como segue :

$$A_2 = T_L - \frac{T_L - T_S}{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)} \text{erf}(\phi_2), \text{ e} \quad 3.65$$

$$B_2 = \frac{T_L - T_S}{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)} \quad 3.66$$

Entretanto, da Equação 3.60 e com as Equações 3.63, 3.27 e 3.29 obtêm-se:

$$\frac{x'}{2\sqrt{a_2 t'}} = \phi_1 \frac{x'}{S'_S} \frac{\sqrt{a_1}}{\sqrt{a_2}} = n\phi_1 \frac{x'}{S'_S} = \phi_2 \frac{x'}{S'_L} = \phi_2 \left(\frac{x + L_0}{S_L + L_0} \right) \quad 3.67$$

Da relação entre as Equações 3.60, 3.65, 3.66 e 3.67 pode-se escrever a equação que descreve a distribuição de temperatura na zona pastosa na seguinte forma:

$$T_2 = T_L - \frac{(T_L - T_S)}{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)} \{ \text{erf}(\phi_2) - \text{erf}[\phi_2 \left(\frac{x + L_0}{S_L + L_0} \right)] \} \quad 3.68$$

3.5.5.4 Perfil Térmico no Metal Líquido

A Equação 3.25 possibilita escrever o perfil térmico no metal líquido pela Equação 3.69:

$$T_3 = A_3 + B_3 \operatorname{erf}\left(\frac{x'}{2\sqrt{a_3 t'}}\right) . \quad 3.69$$

Com as C.C. dadas pelas Equações 3.37 e 3.38 pode-se rescrever a Equação 3.69 na forma das Equações 3.70 e 3.71:

$$T_L = A_3 + B_3 \operatorname{erf}\left(\frac{S'_L}{2\sqrt{a_3 t'}}\right) , e \quad 3.70$$

$$T_V = A_3 + B_3 . \quad 3.71$$

O ajuste entre os argumentos das funções erro das Equações 3.69 e 3.70 pode ser feito com o auxílio da equação 2.43 da seguinte forma:

$$\frac{x'}{2\sqrt{a_3 t'}} = \phi_2 \frac{x'}{S'_L} \frac{\sqrt{a_2}}{\sqrt{a_3}} = m \phi_2 \frac{x'}{S'_L} = m \phi_2 \left(\frac{x + L_0}{S_L + L_0}\right) , \quad 3.72$$

sendo

$$m = \frac{\sqrt{a_2}}{\sqrt{a_3}} = \sqrt{\frac{k_2 \cdot c_3 \cdot d_3}{k_3 \cdot c_2 \cdot d_2}} . \quad 3.73$$

Com arranjos entre as Equações 3.70, 3.71 e 3.72 pode-se escrever os valores de A_3 e B_3 , como segue:

$$A_3 = T_V - \frac{T_V - T_L}{1 - \text{erf}(m\phi_2)}, e \quad 3.74$$

$$B_3 = \frac{T_V - T_L}{1 - \text{erf}(m\phi_2)} \quad 3.75$$

A distribuição da temperatura no líquido será descrita por:

$$T_3 = T_V - \frac{(T_V - T_L)}{1 - \text{erf}(m\phi_2)} \{1 - \text{erf}[m\phi_2(\frac{x + L_0}{S_L + L_0})]\} \quad 3.76$$

Pelas Equações 3.42, 3.44, 3.52, 3.59, 3.68 e 3.76 pode-se determinar a distribuição da temperatura em qualquer ponto do molde, do sólido, da zona pastosa e do líquido e em qualquer instante do processo, desde que também se defina a equação que descreva a distribuição da temperatura na interface metal / molde (T_i).

3.5.6 Determinação da Temperatura de Equilíbrio na Interface Metal / Molde (T_i)

O balanço térmico em $x' = 0$ permite escrever :

$$k_M \left[\frac{\partial T_M}{\partial x'} \right]_{x'=0} = k_1 \left[\frac{\partial T_1}{\partial x'} \right]_{x'=0} \quad 3.77$$

que é a equação que exprime a relação existente entre o perfil térmico no molde [Equação 3.51] com o perfil térmico existente no metal sólido [Equação 3.58], de tal sorte que com as Equações 3.28 e 3.29 associadas a elas pode-se escrever:

$$T_M = T_i + (T_i - T_0) \operatorname{erf}[N \phi_1 (\frac{x'}{S_s})] , \quad 3.78$$

que permite a obtenção de:

$$\frac{\partial T_M}{\partial x'} = \frac{2 N \phi_1 (T_i - T_0)}{\sqrt{\pi} S'_s \exp(\frac{N \phi_1 x'}{S'_s})^2} . \quad 3.79$$

Em $x' = 0$ tem-se:

$$[\frac{\partial T_M}{\partial x'}]_{x'=0} = \frac{2 N \phi_1 (T_i - T_0)}{S'_s \sqrt{\pi}} . \quad 3.80$$

Pela Equação 3.81,

$$T_1 = T_i + \frac{(T_s - T_i)}{\operatorname{erf}(\phi_1)} \operatorname{erf}[\phi_1 (\frac{x'}{S_s})] , \quad 3.81$$

chega-se a:

$$\frac{\partial T_1}{\partial x'} = \frac{2 \phi_1 (T_s - T_i)}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\phi_1) S'_s \exp(\phi_1 \frac{x'}{S'_s})^2} . \quad 3.82$$

Em $x' = 0$ tem-se:

$$[\frac{\partial T_1}{\partial x'}]_{x'=0} = \frac{2 \phi_1 (T_s - T_i)}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\phi_1) S'_s} . \quad 3.83$$

A substituição das Equações 3.80 e 3.83 na Equação 3.77 permite obter:

$$k_M N(T_i - T_0) = \frac{k_1(T_s - T_i)}{\text{erf}(\phi_1)} \quad , \quad 3.84$$

que depois de rearranjada fica:

$$T_i = T_0 + \frac{M(T_s - T_0)}{M + \text{erf}(\phi_1)} \quad , \quad 3.85$$

na qual M é expresso pela Equação 3.53.

3.5.7 Determinação de S_0 , L_0 e E_0

A transferência de calor através da interface metal / molde pode ser abordada com o auxílio da Figura 3.9, com base em três coeficientes de transmissão de calor parciais e relativos ao sistema virtual no molde (h_M), no metal sólido (h_1) e na região pastosa (h_2). O balanço térmico, no instante inicial do processo de solidificação ($t \Rightarrow 0$), na interface metal / molde do sistema real, deve ser feito assumindo-se que :

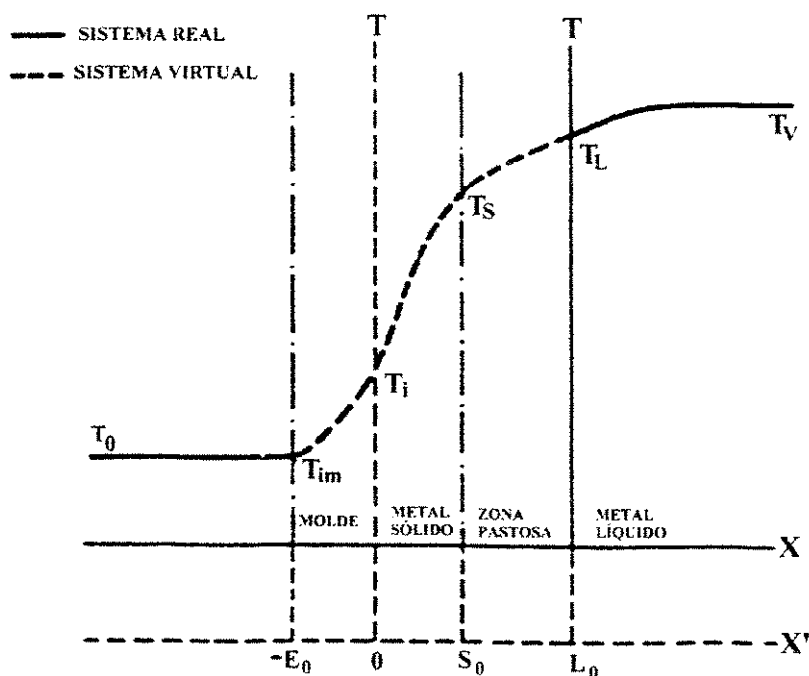


Figura 3.9 - Perfil térmico esquemático da interface metal/molde para ligas binárias utilizado na determinação de E_0 , S_0 e L_0 , segundo a proposta de A. Garcia[Garcia,1978].

1. em $(t \Rightarrow 0)$ o metal líquido que está em contato com a parede fria do molde atinge a temperatura solidus, e
2. o fluxo de calor do sistema real é equivalente ao fluxo de calor no sistema virtual em $t' = 0$ e $x' = S_0$.

Nestas circunstâncias, pode-se escrever que :

$$h_1(T_S - T_i) = k_1 \left[\frac{\partial T_1}{\partial x'} \right]_{x'=S_0}$$

Se a Equação 3.82 for avaliada em $x' = S_0$ ($S'_S = S_0$) chega-se a:

$$\frac{\partial T_1}{\partial x'} = \frac{2\phi_1(T_s - T_i)}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\phi_1) S_0 \exp(\phi_1)^2} \quad 3.87$$

Se nesta nova forma for substituída na Equação 3.86 obtém-se :

$$S_0 = \frac{2\phi_1 k_1}{h_1 \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\phi_1) \exp(\phi_1)^2} \quad 3.88$$

Pode-se definir (h_1) pela igualdade de fluxo de calor, admitindo-se, no sistema real, no instante ($t \Rightarrow 0$), a existência de um plano virtual de referência para a temperatura solidus (T_s), entre o molde e a superfície do metal líquido à temperatura liquidus, isto é :

$$h_g(T_L - T_0) = h_M(T_i - T_0) = h_1(T_s - T_i) = h_2(T_L - T_s), \text{ e} \quad 3.89$$

$$h_1 = h_g \left(\frac{T_L - T_0}{T_s - T_i} \right) \quad 3.90$$

Assim, S_0 poderá ser escrito na forma:

$$S_0 = \frac{2\phi_1 k_1 (T_S - T_0)}{h_g (T_L - T_0) \sqrt{\pi} [M + \operatorname{erf}(\phi_1)] \exp(\phi_1)^2} \quad 3.91$$

L_0 tem relação com S_0 por outra relação entre S'_S e S'_L , tirada da cinética de solidificação e do uso das C.C dadas pelas Equações 3.34 e 3.36 tal como:

$$t' = \frac{(S'_S)^2}{4a_1(\phi_1)^2}, \quad 3.91a$$

ou

$$t' = \frac{(S'_L)^2}{4a_2(\phi_2)^2}, \quad 3.91b$$

que permite escrever:

$$S'_S = n S'_L \left(\frac{\phi_1}{\phi_2} \right), \quad 3.92$$

sendo n dado pela Equação 3.64.

Para $t' = t_0$, $S'_S = S_0$ e $S'_L = L_0$ chega-se a

$$L_0 = S_0 \frac{\phi_2}{n \phi_1}. \quad 3.93$$

O balanço térmico, no instante inicial do processo de solidificação ($t \Rightarrow 0$), na interface metal / molde do sistema real, deve ser feito considerando-se que :

1. em ($t \Rightarrow 0$) o metal sólido que está em contato com a parede fria do molde atinge a temperatura T_S ; e
2. o fluxo de calor do sistema real é equivalente ao fluxo de calor no sistema virtual em $t' = t_0$ e $x' = -E_0$.

Nestas circunstâncias, pode ser escrito que :

$$h_M (T_i - T_0) = k_M \left[\frac{\partial T_M}{\partial x'} \right]_{x' = -E_0} \quad 3.94$$

Da a avaliação da Equação 3.80 em $x' = -E_0$ ($S'_S = L_0$) chega-se a :

$$\left[\frac{\partial T_M}{\partial x'} \right]_{x' = -E_0} = \frac{2 N \phi_1 (T_i - T_0)}{L_0 \sqrt{\pi} \exp\left(\frac{N \phi_1 E_0}{L_0}\right)^2} \quad 3.95$$

Se, nesta nova forma, for levada à Equação 3.94 obtém-se:

$$E_0 = \frac{L_0}{n \phi_1} \sqrt{\ln\left(\frac{2 N \phi_1 k_M}{h_M L_0 \sqrt{\pi}}\right)} \quad 3.96$$

A relação entre h_M e h_g pode ser obtida das igualdades da Equação 3.89

$$h_M = h_g \left(\frac{T_L - T_0}{T_i - T_0} \right) \quad 3.97$$

Se a Equação 3.85 for levada à Equação 3.97 chega-se a:

$$h_M = h_g \left(\frac{T_L - T_0}{T_S - T_0} \right) \left[1 + \frac{\text{erf}(\phi_1)}{M} \right] \quad 3.98$$

As Equações 3.93 e 3.98, quando levadas à Equação 3.96, e feitas as simplificações possíveis, permitem escrever:

$$E_0 = S_0 / N \quad 3.99$$

3.5.8 Determinação das Constantes ϕ_1 e ϕ_2

O balanço térmico na interface sólido / pastoso ($x' = x + L_0$), ($S'_s = S_s + L_0$) e ($x' = S'_s$) possibilita escrever que:

$$k_1 \left[\frac{\partial T_1}{\partial x'} \right]_{x'=S'_s} = k_2 \left[\frac{\partial T_2}{\partial x'} \right]_{x'=S'_s} \quad 3.100$$

igualdade que exprime a relação existente entre o perfil térmico no metal sólido, [Equação 3.58] e o perfil térmico existente na região pastosa [Equação 3.68]. Por outro lado, das Equações 3.67 e 3.68 chega-se a:

$$T_2 = T_L - \frac{(T_L - T_S)}{\operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf}(n\phi_1)} \{ \operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf}[n\phi_1(\frac{x'}{S'_S})] \} , \quad 3.101$$

cuja derivação, em relação a x' , fornece:

$$\frac{\partial T_2}{\partial x'} = \frac{2(T_L - T_S)n\phi_1}{\sqrt{\pi} [\operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf}(n\phi_1)] S'_S \exp(\frac{n\phi_1 x'}{S'_S})^2} . \quad 3.101a$$

Com a substituição das Equação 3.82, 3.85 e 3.101a. na Equação 3.100 chegar-se a:

$$\frac{(T_L - T_S)}{[\operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf}(n\phi_1)]} = (T_S - T_0) \frac{k_1 \exp[(n^2 - 1)(\phi_1)^2]}{nk_2 [M - \operatorname{erf}(\phi_1)]} , \quad 3.102$$

ou

$$[\operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf}(n\phi_1)] = \frac{(T_L - T_S)nk_2 [M - \operatorname{erf}(\phi_1)]}{k_1 (T_S - T_0) \exp[(n^2 - 1)(\phi_1)^2]} . \quad 3.102a$$

Analogamente, o balanço térmico na interface pastoso / líquido :

$$(x' = S'_L), \quad (x' = x + L_0) \quad \text{e} \quad (S'_L = S_L + L_0) ,$$

possibilita escrever:

$$k_2 \left[\frac{\partial T_2}{\partial x'} \right]_{x'=S'_L} = k_3 \left[\frac{\partial T_3}{\partial x'} \right]_{x'=S'_L} , \quad 3.103$$

igualdade que exprime a relação existente entre o perfil térmico na região pastosa [Equação 3.68] e o perfil térmico no metal líquido [Equação 3.76].

Entretanto, das Equações 3.72 e 3.76 obtém-se:

$$T_3 = T_V - \frac{(T_V - T_L)}{1 - \operatorname{erf}(m\phi_2)} \left\{ 1 - \operatorname{erf}\left[m\phi_2 \left(\frac{x'}{S'_L}\right)\right] \right\} , \quad 3.104$$

cuja derivação, em relação a x' fornece:

$$\frac{\partial T_3}{\partial x'} = \frac{2m\phi_2(T_V - T_L)}{\sqrt{\pi}[1 - \operatorname{erf}(m\phi_2)]S'_L \exp\left(\frac{m\phi_2 x'}{S'_L}\right)^2} . \quad 3.104a$$

Inicialmente, a Equação 3.101a deve ser modificada com as Equações 3.92, para em seguida substituí-la na Equação 3.103, juntamente com a Equação 3.104a, possibilitando obter-se:

$$\frac{(T_L - T_S)}{[\operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf}(n\phi_1)]} = \frac{k_3 m (T_V - T_L) \exp[(1 - m^2)\phi_2^2]}{k_2 [1 - \operatorname{erf}(m\phi_2)]} , \quad 3.105$$

ou

$$[\operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf}(n\phi_1)] = \frac{(T_L - T_S)k_2 [1 - \operatorname{erf}(m\phi_2)]}{k_3 \cdot m (T_V - T_L) \exp[(1 - m^2)\phi_2^2]} . \quad 3.105a$$

Neste ponto, cabem as seguintes observações:

1. As constantes (ϕ_1) e (ϕ_2) são definidas pela resolução simultânea das Equações 3.102a e 3.105a por interação. A Figura 3.10 corresponde às Equações 3.102 e 3.105, na qual (ϕ_1) e (ϕ_2) estão colocadas uma em função da outra, isto é, pode ser construída a partir de valores atribuídos a (ϕ_1) na Equação 3.102 para obter-se valores para (ϕ_2) . Em seguida, são atribuídos valores a (ϕ_2) na Equação 3.105 para obter-se valores para (ϕ_1) . O cruzamento das curvas define a solução destas equações.

2. O modelo de solidificação em moldes refrigerados ($M = 0$) é um caso particular do modelo de solidificação unidirecional de ligas binárias em moldes maciços. Atribuindo-se $M = 0$.

- nas Equações 3.52 e 3.59 para cálculo dos perfis térmicos no molde e no metal sólido,
- na Equação 3.91 para a determinação de S_0 , e
- na Equação 3.102 para a determinação de ϕ_1 e ϕ_2 .

Estas se igualar-se-ão àquelas da solidificação em moldes refrigerados.

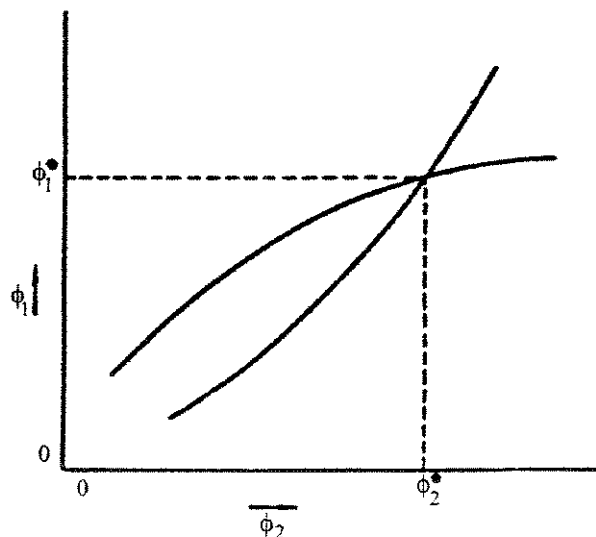


Figura 3.10 - Ábaco esquemático para determinação das constantes ϕ_1 e ϕ_2 , segundo proposta de A. Garcia[Garcia,1978].

3.5.9 Taxa de Resfriamento ($\dot{T}$)

Breves comentários foram tecidos nos itens anteriores sobre como formular um problema de solidificação, e sobre os vários métodos matemáticos de solucioná-los, com ênfase para o **modelo de analítico** aplicado na solidificação unidirecional de ligas binárias em moldes maciços.

A obtenção de equações que expressem a Taxa de Resfriamento ($\dot{T}$), no metal sólido, na zona pastosa e no metal líquido, será a preocupação nesta etapa de desenvolvimento, uma vez que a rapidez com que ocorre a transferência de calor nesses locais pode contribuir para a definição dos espaçamentos dendríticos (λ) que, por sua vez, podem contribuir no desempenho mecânico futuro material.

Como definição para a Taxa de Resfriamento ($\dot{T}$) pode ser adotada a seguinte expressão:

$$\dot{T} = \frac{dT}{dt} = \frac{dT}{dx} \frac{dx}{dt} \quad 3.106$$

Esta equação, particularmente em uma situação de interface, como por exemplo na interface sólido/líquido ($x = S$), toma a forma

$$\dot{T} = G.V \quad 3.106a$$

onde

G = gradiente térmico [K/m]; e

V = velocidade de deslocamento da interface sólido/líquido[m/s].

3.5.9.1 Cinética de Deslocamento das Isotermas Solidus e Liquidus

A manipulação matemática da Equação 3.42 leva à Equação 3.107:

$$\frac{dS_S}{dt_S} = V_S = \left(\frac{1}{2\alpha_S S_S + \beta_S} \right) \quad , \quad 3.107$$

e a combinação das Equações 3.42 a. e 3.42b leva à Equação 3.108:

$$L_0 = \frac{\beta_S}{2\alpha_S} \quad . \quad 3.108$$

A combinação das Equações 3.31, 3.40, 3.42 e 3.42c possibilita a obtenção de:

$$t'_S = \frac{1}{4\alpha_S V_S^2} \quad . \quad 3.109$$

Por outro lado, a manipulação matemática da Equação 3.45 permite obter-se:

$$\frac{dS_L}{dt_L} = V_L = \left(\frac{1}{2\alpha_L S_L + \beta_L} \right) \quad , \quad 3.110$$

A combinação das Equações 3.45 a. e 3.45b leva a:

$$L_0 = \frac{\beta_L}{2 \alpha_L} \quad . \quad 3.111$$

Entretanto, a combinação Equações 3.31, 3.40 e 3.45 permite obter-se a Equação 3.112:

$$t'_L = \frac{1}{4 \alpha_L V_L^2} \quad . \quad 3.112$$

3.5.9.2 Gradientes Térmicos (G)

A Taxa de Resfriamento($\dot{T}$) pode ser expressa na forma genérica da Equação 3.106, quando condições particulares podem ser consideradas:

$$\dot{T} = \frac{dT}{dt} = \frac{dT}{dx} * \frac{dx}{dt} = G V \quad .$$

Em se tratando de temperatura, duas circunstâncias operacionais podem ser impostas ao sistema metal/molde:

I- Metal Líquido Vazado com Superaquecimento ($\Delta T > 0$)

Nos casos em que o metal líquido é vazado com superaquecimento o gradiente térmico ($G = G_L$) pode ser expresso na forma da Equação 3.113:

$$G_L = \left[\frac{dT_3}{dx'} \right]_{X=S_L} , \quad \Delta T = T_V - T_L \Leftrightarrow \Delta T > 0 . \quad 3.113$$

A partir das Equações 3.72 e 3.76 pode-se escrever a Equação 3.114:

$$T_3 = T_V - \frac{T_V - T_L}{1 - \text{erf}(m\phi_2)} + \frac{T_V - T_L}{1 - \text{erf}(m\phi_2)} \{ \text{erf}[m\phi_2(\frac{x'}{S'_L})] \} . \quad 3.114$$

Entretanto, fazendo uso de uma variável auxiliar (U):

$$U = m\phi_2(\frac{x'}{S'_L}) \Rightarrow f(U) = \text{erf}(U) , \quad 3.114a$$

e

$$\frac{df(U)}{dx'} = \frac{d[\text{erf}(U)]}{dU} * \frac{dU}{dx'} , \quad 3.114b$$

com

$$\frac{d[\text{erf}(U)]}{dU} = \frac{2}{\sqrt{\pi} \exp(U)^2} = \frac{2}{\sqrt{\pi} \exp[m\phi_2(\frac{x'}{S'_L})]^2} , \quad 3.114c$$

e

$$\frac{dU}{dx'} = \frac{m\phi_2}{S'_L} \quad 3.114d$$

Portanto:

$$\frac{df(U)}{dx'} = \frac{2m\phi_2}{\sqrt{\pi} \exp[m\phi_2(\frac{x'}{S'_L})]^2} * \frac{1}{S'_L}, \quad 3.114e$$

e a Equação 3.113 pode ser rescrita na forma da Equação 3.115:

$$G_L = \frac{dT_3}{dx'} = \frac{2m\phi_2(T_V - T_L)}{[1 - \operatorname{erf}(m\phi_2)]\sqrt{\pi} \exp[m\phi_2(\frac{x'}{S'_L})]^2} * \frac{1}{S'_L} \quad 3.115$$

com o auxílio das relações de conversão [Equações 3.27, 3.30 e da Equação 3.111], pode ser obtida:

$$G_L = \frac{2m\phi_2(T_V - T_L)}{[1 - \operatorname{erf}(m\phi_2)]\sqrt{\pi} \exp[m\phi_2(\frac{2\alpha_L x + \beta_L}{2\alpha_L S_L + \beta_L})]^2} (\frac{2\alpha_L}{2\alpha_L S_L + \beta_L}) \quad 3.115a$$

Com a Equação 3.110 e $[x = S_L]$, que levadas à Equação 3.115a, obtém-se a Equação 3.115b que explicita o gradiente de temperatura no metal líquido, em função de V_L :

$$G_L = \frac{m\phi_2(T_V - T_L)}{\sqrt{\pi} [1 - \operatorname{erf}(m\phi_2)] \exp(m\phi_2)^2} 4\alpha_L V_L \quad 3.115b$$

II- Metal Líquido Vazado sem Superaquecimento ($\Delta T = 0$)

No caso do metal líquido ser vazado sem superaquecimento, o gradiente controlador do crescimento dendrítico é G_{SL} , e pode-se escrever ($G = G_{SL}$), expressando-o na forma da Equação 3.116:

$$G_{SL} = \left[\frac{dT_2}{dx'} \right]_{x=s_L} \quad \Delta T = T_V - T_L \quad \Leftrightarrow \quad \Delta T = 0 \quad . \quad 3.116$$

Neste caso, com o auxílio da Equação 3.67 associada às C.C. dadas pelas equações 3.35 e 3.36, a equação 3.68 pode ser expressa na forma da Equação 3.117:

$$T_2 = T_L - \frac{T_L - T_S}{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)} \text{erf}(\phi_2) + \frac{T_L - T_S}{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)} \text{erf}\left(\phi_2 \frac{x'}{S'_L}\right) \quad . \quad 3.117$$

O tratamento matemático aplicado na Equação 3.114 para a obtenção da Equação 3.114b, pode ser feito na Equação 3.117, o que possibilitará escrever a Equação 3.116 sob nova forma:

$$G_{SL} = \frac{dT_2}{dx'} = \frac{2\phi_2(T_L - T_S)}{\sqrt{\pi} [\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)] \exp\left(\phi_2 \frac{x'}{S'_L}\right)^2} \left(\frac{1}{S'_L}\right) \quad . \quad 3.118$$

Com o auxílio das relações de conversão [Equações 3.27, 3.30 e da Equação 3.45b], a Equação 3.118a, pode ser obtida na forma:

$$G_{SL} = \frac{2\phi_2(T_L - T_S)}{\sqrt{\pi}[\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)]\exp(\phi_2 \frac{2\alpha_L x + \beta_L}{2\alpha_L S_L + \beta_L})^2} (\frac{2\alpha_L}{2\alpha_L S_L + \beta_L}) \quad 3.118a$$

A Equação 3.118a pode assumir a forma da Equação 3.118b com o auxílio da Equação 3.110, bem como de $x = S_L$:

$$G_{SL} = \frac{\phi_2(T_L - T_S)}{\sqrt{\pi}[\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)]\exp(\phi_2)^2} (4\alpha_L V_L) \quad 3.118b$$

Com as equações que expressam o gradiente térmico no líquido (G_L) e na zona pastosa, na interface sólido / líquido ($x = S_L$) [Equações 3.115b e 3.118b, respectivamente], as propostas que definem os **espaçamentos dendríticos primários** (λ_1), citadas anteriormente, como por exemplo(**modelo de Hunt** e **modelo de Kurz/Fisher**), podem ser modificadas.

3.5.9.3 Taxa de Resfriamento no Metal Sólido ($\dot{T}_1$)

A Equação 3.59 mostra que:

$$T_1 = T_0 + \frac{(T_S - T_0)}{M + \operatorname{erf}(\phi_1)} [M + \operatorname{erf}(\frac{x'}{2\sqrt{a_1 t'}})] \quad 3.119$$

Entretanto, se for feito o uso de uma variável auxiliar (U) pode se escrever o que se segue:

$$U = \frac{x'}{2\sqrt{a_1 t'}} \Rightarrow f(U) = \operatorname{erf}(U) \quad 3.120$$

logo :

$$\frac{df(U)}{dt'} = \frac{d[\operatorname{erf}(U)]}{dU} * \frac{dU}{dt'} \quad 3.121$$

com:

$$\frac{d[\operatorname{erf}(U)]}{dU} = \frac{2}{\sqrt{\pi} \exp(U)^2} = \frac{2}{\sqrt{\pi} \exp(\frac{x'}{2\sqrt{a_1 t'}})^2} \quad 3.122$$

e

$$\frac{dU}{dt'} = \frac{x'}{4t' \sqrt{a_1 t'}} \quad 3.123$$

Assim, a equação da Taxa de Resfriamento no metal sólido ($\dot{T}_1$) pode ser escrita na forma da Equação 3.124, como uma função de (x' ; t'):

$$\dot{T}_1 = \frac{dT_1}{dt'} = \left[\frac{T_S - T_0}{M + \text{erf}(\phi_1)} \right] \left[\frac{1}{\sqrt{\pi} \exp\left(\frac{x'}{2\sqrt{a_1 t'}}\right)^2} \left(\frac{x'}{2\sqrt{a_1 t'}} \right) \left(\frac{1}{t'} \right) \right] \quad , \quad 3.124$$

ou escrita na forma da Equação 3.124a. como uma função só de (t'):

$$\dot{T}_1 = \left[\frac{T_S - T_0}{M + \text{erf}(\phi_1)} \right] \left[\left(\frac{1}{\sqrt{\pi} \exp\left(\phi_1 \frac{x + L_0}{S_S + L_0}\right)^2} \right) \left(\phi_1 \frac{x + L_0}{S_S + L_0} \right) \left(\frac{1}{t'} \right) \right] \quad . \quad 3.124a$$

A utilização da Equação 3.108 possibilita escrever a equação que retrata

$\dot{T}_1(x, t)$:

$$\dot{T}_1 = \left[\frac{T_S - T_0}{M + \text{erf}(\phi_1)} \right] \left[\left(\frac{1}{\sqrt{\pi} \exp\left(\phi_1 \frac{2\alpha_S x + \beta_S}{2\alpha_S S_S + \beta_S}\right)^2} \right) \left(\phi_1 \frac{2\alpha_S x + \beta_S}{2\alpha_S S_S + \beta_S} \right) \left(\frac{1}{t'} \right) \right] \quad . \quad 3.124b$$

Entretanto, a utilização das Equações 3.107 e 3.109 permite escrever a equação que retrata $\dot{T}_1(x, V)$:

$$\dot{T}_1 = \left[\frac{T_S - T_0}{M + \text{erf}(\phi_1)} \right] \left[\frac{V_S \phi_1 (2\alpha_S x + \beta_S)}{\sqrt{\pi} \exp[\phi_1 V_S (2\alpha_S x + \beta_S)]^2} \right] (4\alpha_S V_S^2) \quad . \quad 3.124c$$

Entretanto, a Taxa de Resfriamento no metal sólido ($\dot{T}_1$) pode ser relacionada com o produto do Gradiente de Temperatura no metal sólido (G_S) e da Velocidade de Deslocamento da Isoterma Solidus (V_S), se for considerado o caso particular em que:

$$x = S_S.$$

Logo:

$$\dot{T}_1 = \frac{dT_1}{dt'} = \left[\frac{dT_1}{dx} \right]_{x=S_S} \left[\frac{dx}{dt'} \right]_{x=S_S} = G_S V_S. \quad 3.124d$$

Neste caso, da Equação 3.124c e com $x = S_S$ chega-se a à Equação 3.124e, responsável pela descrição da Taxa de Resfriamento no metal sólido como uma função de $(V_S)^2$:

$$G_S V_S = \left[\frac{T_S - T_0}{M + \text{erf}(\phi_1)} \right] \left[\frac{\phi_1}{\sqrt{\pi} \exp(\phi_1)^2} \right] (4\alpha_S V_S^2). \quad 3.124e$$

3.5.9.4 Taxa de Resfriamento na Região Pastosa ($\dot{T}_2$)

Da Equação 3.68 tem-se que,

$$T_2 = T_L - \frac{(T_L - T_S)}{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)} \text{erf}(\phi_2) + \frac{(T_L - T_S)}{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)} \text{erf}\left[\phi_2 \left(\frac{x'}{2\sqrt{a_2 t'}} \right)\right]. \quad 3.125$$

A submissão do argumento da função erro da Equação 3.125, a tratamento semelhante ao que foi adotado no caso do Perfil Térmico no metal sólido permite obter a Equação para a Taxa de Resfriamento na região pastosa como uma função (x' ; t'):

$$\dot{T}_2 = \frac{dT_2}{dt'} = \frac{(T_L - T_S)}{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi} \exp\left(\frac{x'}{2\sqrt{a_2 t'}}\right)^2} \right] \left(-\frac{x'}{2\sqrt{a_2 t'}} \right) \left(\frac{1}{t'} \right), \quad 3.126$$

ou na forma da Equação 3.126 a. como uma função de (t'):

$$\dot{T}_2 = \frac{(T_L - T_S)}{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi} \exp\left(\phi_2 \frac{x + L_0}{S_L + L_0}\right)^2} \right] \left(\phi_2 \frac{x + L_0}{S_L + L_0} \right) \left(\frac{1}{t'} \right). \quad 3.126a$$

A utilização da Equação 3.111 possibilita escrever a Equação 3.126b que retrata $\dot{T}_2(x, t)$:

$$\dot{T}_2 = \frac{(T_L - T_S)}{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi} \exp\left[\phi_2 \left(\frac{2x\alpha_L + \beta_L}{2S_L\alpha_L + \beta_L} \right)\right]^2} \right] \left[\phi_2 \left(\frac{2x\alpha_L + \beta_L}{2S_L\alpha_L + \beta_L} \right) \right] \left(\frac{1}{t'} \right). \quad 3.126b$$

Com a utilização das Equações 3.110 e 3.112 escreve-se a equação 3.126c, que retrata $\dot{T}_2(x, V)$:

$$\dot{T}_2 = \frac{(T_L - T_S)}{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)} \left[\frac{\phi_2 V_L (2x\alpha_L + \beta_L)}{\sqrt{\pi} \exp[\phi_2 V_L (2x\alpha_L + \beta_L)]^2} \right] (4\alpha_L V_L^2) . \quad 3.126c$$

3.5.9.5- Taxa de Resfriamento no Metal Líquido ($\dot{T}_3$)

A partir da Equação 3.76 pode-se escrever a Equação 3.127, que retrata a distribuição de temperaturas no metal líquido como uma função de (x' ; t'):

$$T_3 = T_V - \frac{(T_V - T_L)}{1 - \text{erf}(m\phi_2)} + \frac{(T_V - T_L)}{1 - \text{erf}(m\phi_2)} \text{erf}\left(\frac{x'}{2\sqrt{a_3 t'}}\right) \quad 3.127$$

A submissão do argumento da função erro da Equação 3.127, a tratamento semelhante ao que foi adotado no caso do Perfil Térmico no metal sólido, permite obter a Equação 3.128, que descreve a Taxa de Resfriamento no Metal Líquido como uma função (x' ; t'):

$$\dot{T}_3 = \frac{dT_3}{dt'} = \frac{(T_V - T_L)}{1 - \text{erf}(m\phi_2)} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi} \exp\left(\frac{x'}{2\sqrt{a_3 t'}}\right)^2} \right] \left(\frac{x'}{2\sqrt{a_3 t'}}\right) \left(\frac{1}{t'}\right) , \quad 3.128$$

ou na forma da Equação 3.128 a:

$$\dot{T}_3 = \frac{(T_V - T_L)}{1 - \text{erf}(m\phi_2)} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi} \exp[m\phi_2 (\frac{x + L_0}{S_L + L_0})]^2} \right] (m\phi_2 \frac{x + L_0}{S_L + L_0}) (\frac{1}{t'}) . \quad 3.128a$$

Com a utilização da Equação 3.111, na forma da Equação 3.128b, pode-se obter:

$$\dot{T}_3 = \frac{(T_V - T_L)}{1 - \text{erf}(m\phi_2)} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi} \exp[m\phi_2 (\frac{2x\alpha_L + \beta_L}{2S_L\alpha_L + \beta_L})]^2} \right] (m\phi_2 \frac{2x\alpha_L + \beta_L}{2S_L\alpha_L + \beta_L}) (\frac{1}{t'}) . \quad 3.128b$$

Entretanto, o emprego das Equações 3.110 e 3.112 possibilita escrever a Equação 3.128c, que explicita $\dot{T}_3(x, V)$:

$$\dot{T}_3 = \frac{(T_V - T_L)}{1 - \text{erf}(m\phi_2)} \left[\frac{m V_L \phi_2 (2x\alpha_L + \beta_L)}{\sqrt{\pi} \exp[m V_L \phi_2 (2x\alpha_L + \beta_L)]^2} \right] (4\alpha_L V_L^2) . \quad 3.128c$$

Por outro lado, a Taxa de Resfriamento no Metal Líquido ($\dot{T}_3$) pode ser relacionada com o produto do Gradiente de Temperatura no Metal Líquido (G_L) e da Velocidade de Deslocamento da Isoterma Liquidus (V_L), se for considerado o caso particular em que:

$X = S_L$, ou seja:

$$\dot{T}_3 = \frac{dT_3}{dt'} = \left[\frac{dT_3}{dx} \right]_{X=S_L} \left[\frac{dx}{dt'} \right]_{X=S_L} = G_L V_L . \quad 3.128d$$

Neste caso, da Equação 3.128c e com $x = S_L$ pode ser obtida a Equação 3.128e, responsável pela descrição da Taxa de Resfriamento no Metal Líquido como uma função de $(V_L)^2$:

$$\dot{T}_3 = G_L V_L = \left[\frac{T_V - T_L}{1 - \text{erf}(m\phi_2)} \right] \left[\frac{m\phi_2}{\sqrt{\pi} \exp(m\phi_2)^2} \right] (4\alpha_L V_L^2). \quad 3.128e$$

3.6. Inserção de Parâmetros Térmicos em alguns Modelos de Crescimento Dendrítico.

3.6.1. Modelo de Hunt

No caso do **modelo de Hunt**, se as Equações 3.115b e 3.118b forem levadas à Equação 2.66, o EDP poderá ser expresso como segue:

i) **para vazamentos com superaquecimento ($\Delta T > 0$)**

Aplicando-se a Equação 3.115b na Equação 2.66 obtém-se o EDP na seguinte forma:

$$\lambda_1 = 2,83(\Gamma D_L \Delta T_{SL} K_0)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{1}{\frac{m\phi_2(T_V - T_L)4\alpha_L V_L}{\sqrt{\pi}[1 - \text{erf}(m\phi_2)] \exp(m\phi_2)^2}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{V_L} \right)^{\frac{1}{4}}, \quad 3.129$$

que, após arranjos e substituições, fica:

$$\lambda_1 = 1,884 [\Gamma D_L K_0 \Delta T_{SL}]^{\frac{1}{4}} \left[\frac{1 - \operatorname{erf}(m\phi_2)}{m\phi_2 \alpha_L (T_V - T_L)} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{V_L} \right)^{\frac{3}{4}} \exp(m\phi_2). \quad 3.129a$$

ii) para vazamentos sem superaquecimento ($\Delta T = 0$)

Aplicando-se a Equação 3.118b na Equação 2.66 pode-se obter exprimir o EDP na forma da Equação 3.130:

$$\lambda_1 = 2,83 (\Gamma D_L \Delta T_{SL} K_0)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{1}{\phi_2 (T_L - T_S) 4 \alpha_L V_L} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{V_L} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{\pi} [\operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf}(n\phi_1)] \exp(\phi_2)^2}, \quad 3.130$$

que, após arranjos e substituições, fica:

$$\lambda_1 = 1,884 [\Gamma D_L \Delta T_{SL} K_0]^{\frac{1}{4}} \left[\frac{\operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf}(n\phi_1)}{\phi_2 \alpha_L (T_L - T_S)} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{V_L} \right)^{\frac{3}{4}} \exp(\phi_2), \quad 3.130a$$

que, após utilização da Equação 3.105, toma a forma:

$$\lambda_1 = 1,884 [\Gamma D_L K_0 \Delta T_{SL}]^{\frac{1}{4}} \left\{ \left(\frac{k_2}{m \alpha_L \phi_2 k_3 (T_V - T_L)} \right) \frac{[1 - \operatorname{erf}(m\phi_2)]}{\exp[(1 - m^2)(\phi_2)^2]} \right\}^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{V_L} \right)^{\frac{3}{4}} \exp(\phi_2). \quad 3.130b$$

3.6.2. Modelo de Kurz/Fisher

iii) para vazamentos com superaquecimento ($\Delta T > 0$)

A partir da substituição da Equação 3.115b na Equação 2.67b os EDP podem ser expressos pela Equação 3.131:

$$\lambda_1 = 4,3 \left(\frac{D_L \Gamma \Delta T_{SL}}{K_0} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{1}{\frac{m \phi_2 (T_V - T_L) 4 \alpha_L V_L}{\sqrt{\pi} [1 - \operatorname{erf}(m \phi_2)] \exp(m \phi_2)^2}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{V_L} \right)^{\frac{1}{4}}, \quad 3.131$$

que, após arranjos e substituições, fica:

$$\lambda_1 = 2,86 \left[\frac{D_L \Gamma \Delta T_{SL}}{K_0} \right]^{\frac{1}{4}} \left[\frac{1 - \operatorname{erf}(m \phi_2)}{m \phi_2 \alpha_L (T_V - T_L)} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{V_L} \right)^{\frac{3}{4}} \exp(m \phi_2). \quad 3.131a$$

iv) para vazamentos sem superaquecimento ($\Delta T = 0$)

A partir da substituição da Equação 3.118b na Equação 2.67b, os EDP segundo a proposta de **Kurz/Fisher** podem ser obtidos pela Equação 3.132:

$$\lambda_1 = 4,3 \left(\frac{D_L \Gamma \Delta T_{SL}}{K_0} \right)^{\frac{1}{4}} \left[\frac{1}{\frac{\phi_2 (T_L - T_S) 4 \alpha_L V_L}{\sqrt{\pi} [\operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf}(n \phi_1)] \exp(\phi_2)^2}} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{V_L} \right)^{\frac{1}{4}}, \quad 3.132$$

que, após arranjos e substituições, toma a forma:

$$\lambda_1 = 2,86 \left(\frac{D_L \Gamma \Delta T_{SL}}{K_0} \right)^{\frac{1}{4}} \left[\frac{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)}{\phi_2 \alpha_L (T_L - T_S)} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{V_L} \right)^{\frac{3}{4}} \exp(\phi_2), \quad 3.132a$$

e que, após a utilização da Equação 3.102, toma a forma:

$$\lambda_1 = 2,86 \left(\frac{D_L \Gamma \Delta T_{SL}}{K_0} \right)^{\frac{1}{4}} \left[\frac{nk_2(M - \text{erf}(\phi_1))}{k_1 \phi_2 \alpha_L (T_S - T_0) \exp[(n^2 - 1)(\phi_1^2)]} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{V_L} \right)^{\frac{3}{4}} \exp(\phi_2). \quad 3.132b$$

3.6.3. Modelo de Bouchard / Kirkaldy

A partir da Equação 2.79, proposta por Bouchard e Kirkaldy[Bouchard / Kirkaldy,1996;1997] para a determinação de λ_2 , e com a substituição da Equação 3.110, que determina V_L pelo modelo analítico, pode-se chegar facilmente à Equação 3.133:

$$\lambda_2 = 2\pi g_2 \left\{ \frac{4\sigma_{SL} \cdot D_L^2}{C_0(1 - K_0)^2 L} \left[\frac{1}{2\alpha_L S_L + \beta_L} \right]^{-2} \right\}^{\frac{1}{3}}. \quad 3.133$$

3.6.4. Modelos baseados no Tempo Local de Solidificação (t_{SL}).

A exemplo das modificações feitas nos modelos que utilizam a Taxa de Resfriamento para expressarem os EDP, os modelos de crescimento dendrítico, que utilizam o tempo local de solidificação(t_{SL}) como o **modelo de Feurer** e o **modelo de Kurz/Fisher** , que explicitam os EDS (λ_2), podem ser modificados de duas maneiras.

A) Definindo-se (t_{SL}) primeiro para o caso das ligas metálicas binárias , onde a frente de solidificação é celular ou dendrítica, a análise da transferência de calor durante a solidificação nesse tipo de liga, para uma posição qualquer no metal, a partir da interface metal/molde ($x = S$), pode ser feita com base nas Equações 3.134 e 3.134a, que explicitam os tempos que a isoterma solidus e a isoterma liquidus gastam para passar no ponto ($x = S$):

$$t_S = \alpha_S x^2 + \beta_S x + \delta , \quad 3.134$$

com α_S , β_S e δ explicitados pelas Equações 3.42a, 3.42b e 3.42c, respectivamente, e:

$$t_L = \alpha_L x^2 + \beta_L x , \quad 3.134a$$

com α_L e β_L explicitados pelas Equações 3.45a, 3.45b, respectivamente. A diferença entre as Equações 3.134 e 3.134a define t_{SL} na forma da Equação 3.135:

$$t_{SL} = (\alpha_S - \alpha_L) x^2 + (\beta_S - \beta_L) x + \delta . \quad 3.135$$

B) Se for considerado que os parâmetros térmicos do processo de solidificação podem ser obtidos pela condição de frente plana de solidificação, caso dos metais, ligas eutéticas e ligas binárias, cujo intervalo de solidificação não seja significativamente amplo(abordagem simplificadora), t_{SL} pode ser obtido por meio da seguinte aproximação:

$$t_{SL} = \left(\frac{T_L - T_E}{\dot{T}} \right) = \left(\frac{T_L - T_E}{GV} \right) . \quad 3.136$$

Admitindo-se $(\dot{T})$ expresso pela Equação 3.106, no caso particular de metais puros, assume a forma da Equação 3.137:

$$\dot{T} = \frac{dT_S}{dt} = \left[\frac{dT}{dx} \right]_{x=S} \left[\frac{dx}{dt} \right]_{x=S} = G_S V . \quad 3.137$$

Admitindo-se, além da frente plana de solidificação, a falta de superaquecimento no metal líquido ($\Delta T = T_V - T_L = 0$), e se for feito um balanço térmico junto a essa interface (**sólido/líquido**), chega-se à Equação 3.138a:

$$k_S \left(\frac{dT_S}{dx} \right)_{x=S} = Ld_S \left(\frac{dS}{dt} \right)_{x=S} , \quad 3.138$$

ou

$$G_S = \frac{Ld_S}{k_S} V . \quad 3.138a$$

A combinação da Equação 3.138a com a Equação 3.137 permite escrever a Equação da Taxa de Resfriamento na forma:

$$\dot{T} = \frac{Ld_S}{k_S} V^2 \quad , \quad 3.139$$

na qual L , calor latente de fusão ,
 d_S , massa específica do sólido formado, e
 k_S , condutividade do sólido formado.

A. Garcia[Garcia,1978] propõe como solução de seu modelo analítico para solidificação de metais puros sem superaquecimento ($\Delta T = 0$) a Equação 3.140:

$$t = \frac{S^2}{4a_S\phi_S^2} + \frac{Ld_S S}{h(T_F - T_0)} \quad , \quad 3.140$$

onde :

$$\alpha = \frac{1}{4a_S\phi_S^2} \quad , \quad 3.140a$$

e

$$\beta = \frac{S_0}{2a_S\phi_S^2} = \frac{Ld_S}{h(T_F - T_0)} \quad . \quad 3.140b$$

Desta última obtém-se a Equação 3.141:

$$V = \frac{dS}{dt} = \left[\frac{S}{2a_S \phi_S^2} + \frac{Ld_S}{h_i(T_F - T_0)} \right]^{-1} \quad 3.141$$

Com a Equação 3.141, levada à Equação 3.139, e se após esta modificação a mesma for levada à Equação 3.136, escreve-se, o tempo local de solidificação, sob nova forma:

$$t_{SL} = \frac{T_L - T_E}{\frac{Ld_S}{k_S} \left\{ \frac{1}{\left[\frac{S}{2a_S \phi_S^2} + \frac{Ld_S}{h_i(T_F - T_0)} \right]^2} \right\}} \quad 3.142$$

que pode ser reescrito como:

$$t_{SL} = \frac{k_S(T_L - T_E)}{Ld_S} \left[\frac{S}{2a_S \phi_S^2} + \frac{Ld_S}{h_i(T_F - T_0)} \right]^2 \quad 3.142a$$

O notável nesta equação é que, fixado o metal, o molde e a condição ($\Delta T = 0$), o agente que varia é a resistência térmica da interface metal / molde (h_i) o que, nas condições mencionadas, evidencia ser (h_i) o agente modificador dos espaçamentos dendríticos (λ) e que, conhecidas as condições da variação de (h_i), ficarão conhecidos (λ_1) e/ou (λ_2).

3.6.4.1. Modelo de Feurer

a) caso geral de ligas binárias com qualquer intervalo de solidificação.

Com a Equação 3.135 pode-se interferir na Equação 2.76 e obtê-la na forma da Equação 3.143:

$$\lambda_2 = C [(\alpha_S - \alpha_L) x^2 + (\beta_S - \beta_L) x + \delta]^{1/3} , \quad 3.143$$

$$\text{com } C = 4,36 M^{1/3} ,$$

e por meio da qual podem ser obtidos valores teóricos dos espaçamentos dendríticos para ligas binárias cujo intervalo de solidificação seja significativamente longo.

b) caso de ligas com intervalo de solidificação (ΔT_{SL}) curto

Com a Equação 3.142a, interfere-se na Equação 2.76 para obtê-la na forma da Equação 3.144:

$$\lambda_2 = C \left\{ \frac{k_S (T_L - T_E)}{Ld_S} \left[\frac{S}{2a_S \phi_S^2} + \frac{Ld_S}{h_i (T_F - T_0)} \right]^2 \right\}^{\frac{1}{3}} , \quad 3.144$$

$$\text{com } C = 4,36 M^{1/3} .$$

3.6.4.2. Modelo de Kurz/Fisher

c) caso geral de ligas binárias com qualquer intervalo de solidificação.

Com a Equação 3.135 interfere-se na Equação 2.75 para obtê-la na forma da Equação 3.145:

$$\lambda_2 = C [(\alpha_S - \alpha_L) x^2 + (\beta_S - \beta_L) x + \delta]^{1/3}, \quad 3.145$$

com $C = 5,5 M^{1/3}$.

d) caso de ligas com intervalo de solidificação (ΔT_{SL}) curto

Com a Equação 3.142a, interfere-se na Equação 2.75, para obtê-la na forma da Equação 3.146:

$$\lambda_2 = C \left\{ \frac{k_S (T_L - T_E)}{Ld_S} \left[\frac{S}{2a_S \phi_S^2} + \frac{Ld_S}{h_i (T_F - T_0)} \right]^2 \right\}^{1/3}, \quad 3.146$$

com $C = 5,5 M^{1/3}$.

Pode ser observado que, se for fixado o sistema metal / molde, podem ser definidos os parâmetros térmicos de interesse e correlacioná-los com os modelos de crescimento dendrítico. Desta forma, têm-se condições de construir uma equação que defina tanto os EDP (λ_1) como os EDS (λ_2) em função do tempo local de solidificação (t_{SL}) e da taxa de resfriamento ($\dot{T}$) semelhante à Equação 3.147, para ligas com pequeno intervalo de solidificação (ΔT_{SL}):

$$\lambda_{1,2} = C_{1,2} \left\{ \frac{k_S (T_L - T_E)}{Ld_S} \left[\frac{S}{2a_S \phi_S^2} + \frac{Ld_S}{h_i (T_F - T_0)} \right]^2 \right\}^{\eta_{1;2}}, \quad 3.147$$

ou semelhante a Equação 3.148, para ligas com qualquer intervalo de solidificação (ΔT_{SL}):

$$\lambda_{1,2} = C_{1,2} [(\alpha_S - \alpha_L) x^2 + (\beta_S - \beta_L) x + \delta]^{\eta_{1;2}} . \quad 3.148$$

Vê-se que a determinação dos espaçamentos dendríticos depende da correta inserção das propriedades físicas das ligas e dos parâmetros operacionais do sistema metal/molde, como por exemplo a(s) velocidade(s) da(s) isoterma(s) características, e dos parâmetros térmicos. Estes, por sua vez, dependem do superaquecimento do metal líquido que se impõe pela temperatura de vazamento e dos coeficientes de transferência de calor metal/molde e molde/ambiente. Sem a precisa caracterização destes últimos parâmetros, não se pode pensar em determinar numericamente os espaçamentos dendríticos. O próximo Capítulo discutirá a determinação experimental desses coeficientes.

3.7. Modelos Numéricos Aplicados à Solidificação Unidirecional de Ligas Binárias

3.7.1 Considerações Gerais

Atualmente, com o advento da globalização da economia, o mercado como um todo vem sofrendo modificações de exigência de qualidade e baixo custo, constantes e rápidas, e que tem como consequência a busca incessante do conhecimento novo e de torná-lo cada vez mais eficiente. Entretanto, tal necessidade depende de ferramentas tecnológicas novas e flexíveis, que venham em auxílio da sociedade, traduzindo em conforto e melhoria da qualidade de vida, sem contudo traduzir numa relação escrava entre a qualidade/custo baixo e as ferramentas. Neste contexto encontram-se todos os seguimento sociais. Tal é o caso da indústria metalúrgica, com suas dificuldades milenares e o progresso tecnológico que a indústria da computação conquista a passos largos e rápidos. Este é um exemplo do campo social em que conhecimentos antigos e novos precisam se relacionar com muito equilíbrio, para poderem refletir maximamente em benefício da sociedade.

Especificamente, nos processos industriais que envolvem o fenômeno da transferência de calor, como a solidificação, tem-se um exemplo de fenômeno físico de ampla complexidade que pode ser razoavelmente bem caracterizado por Equações Matemáticas ou Modelos Matemáticos que, por sua vez, podem ser resolvidas por Métodos Matemáticos, como por exemplo, o Método de Elementos Finitos (MEF), o Método de Diferenças Finitas (MDF), o Método de Monte Carlo (MMC), etc.

Dentre os modelos citados, o que utiliza a técnica de diferenças finitas tem se mostrado eficiente e flexível, principalmente aos fenômenos que envolvem a transferência de calor, caracterizando-se por :

- Aplicação em sistemas uni, bi e tridimensionais;
- Aplicação em sistemas com propriedades físicas variáveis no espaço e/ou no tempo;
- Facilidade de implementação em sistemas com variações das condições de contorno;
- Subdivisões do corpo físico em nós de tamanhos e formas distintas, permitindo mapeamento espacial total;
- Facilidade de implementação em programas numéricos que possam ser utilizados em computadores de pequeno porte.

Submeter o processo de fundição a um modelo numérico por meio de uma linguagem computacional, tem como objetivo promover a análise dos parâmetros que o caracterizam como um todo, tais como transientes térmicos; mudanças de fases; transferência de calor e massa; crescimento de grão; contração do metal e/ou do molde na interface metal/molde e, como consequência, sugerir possíveis mudanças no processo produtivo, evitando-se procedimentos de análise por meio de tentativa e erro. A Figura 3.11 mostra o fluxo de análise e seus benefícios, sugeridos por Overfelt [Overfelt,1992] para a modelagem da solidificação.

A escolha do Método de Diferenças Finitas está associado principalmente à simplicidade da geometria que pode ser obtida nos produtos fundidos, como seções quadradas, circulares ou retangulares. O método que será desenvolvido consiste, basicamente, numa técnica que discretiza o tempo e o espaço de um fenômeno físico contínuo, descrito por uma equação diferencial parcial. A resolução discreta é feita por

equações lineares de solução relativamente simples, aplicadas sucessivamente para cada ponto do espaço dentro de cada intervalo de tempo.

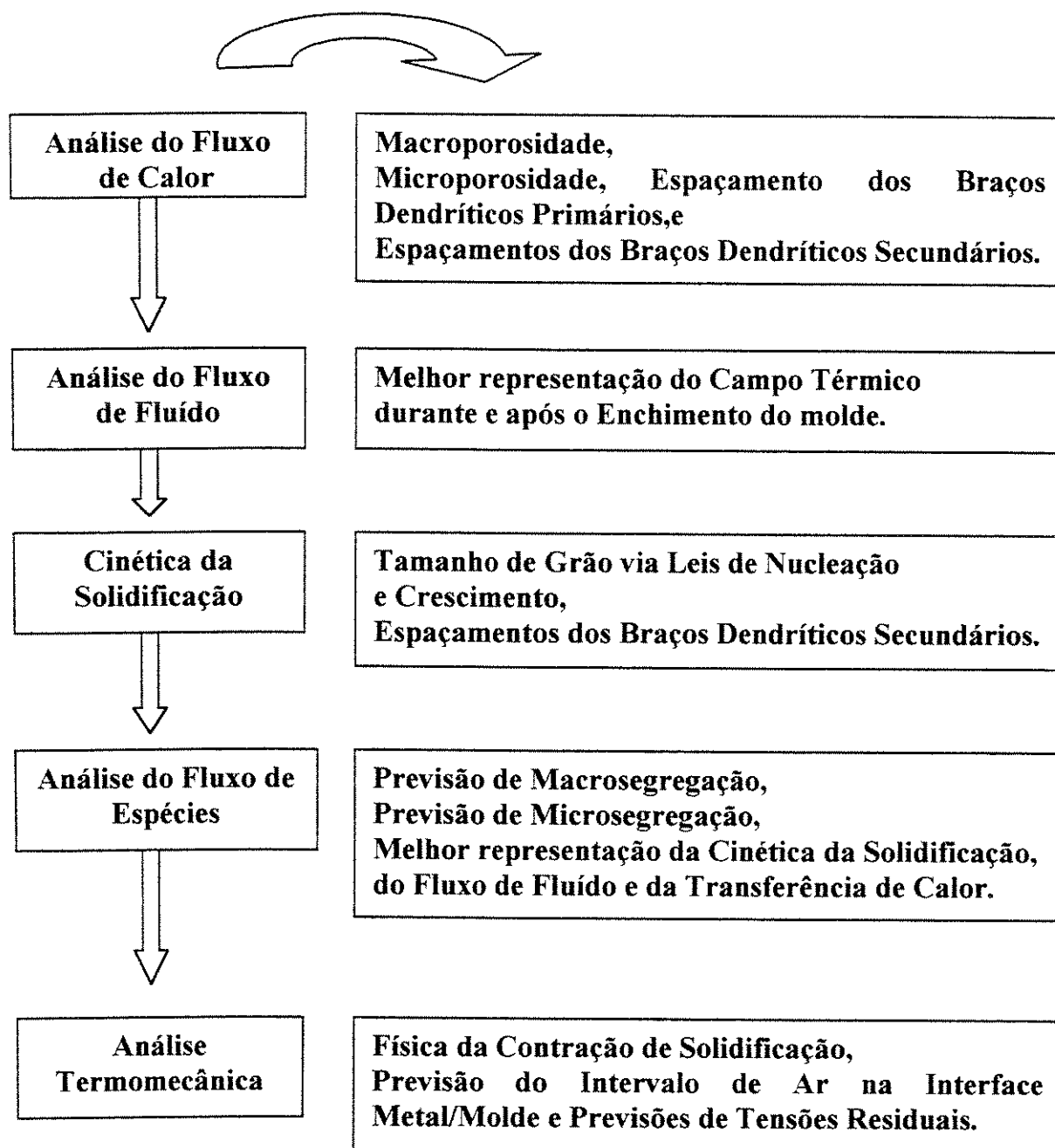


Figura 3.11 - Tipos de análise para modelagem do processo de solidificação e seus benefícios[Overfelt,1992].

3.7.2. Formulação do Modelo Numérico

Existem diversas formas de se analisar a transferência de calor em um sistema metal/molde envolvendo mudança de estado, como no caso da solidificação, com destaque para a modelagem matemática do processo que, dividida em dois grupos de maior importância - métodos analíticos e métodos numéricos - tem se mostrado uma poderosa ferramenta desta análise.

Em itens anteriores, as técnicas analíticas foram detalhadas cuidadosamente. Entretanto, cada vez mais intensamente, as técnicas numéricas, como o Método de Diferenças Finitas, têm sido utilizadas no acompanhamento da solidificação de peças fundidas. Diante da necessidade e da facilidade atualmente encontrada em se manipular modelos matemáticos em computadores, vários trabalhos foram desenvolvidos por diversos pesquisadores na tentativa de caracterizar precisamente todo o fenômeno em um sistema metal/molde [Brimacombe, 1986/1988/1993; Kumar, 1993; Samarasekera, 1994; Spim, 1997].

A formulação matemática de muitos problemas na ciência envolve mudanças ou variações com respeito a duas ou mais variáveis ou parâmetros, usualmente representadas pelo tempo e pela posição, conduzindo às chamadas Equações Diferenciais Parciais. A representação computacional de tais expressões envolve um grande tratamento matemático, sendo representadas por equações do tipo [Smith, 1985]:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \dot{q} \quad , \quad 3.149$$

a qual pode representar fenômenos como a condução de calor em um material, o movimento de uma corrente elétrica, ou o movimento de oscilação de um pêndulo, sendo k uma constante dependente da situação analisada, t o tempo e x a posição ou o espaço.

A equação de grande interesse nos fenômenos de transferência de calor em sistema de solidificação é conhecida como Equação Geral da Condução de Calor em Regime Não-Estacionário ou Transitório, dada para uma situação tridimensional por:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(k \nabla T) + \dot{q} \quad , \quad 3.150$$

onde:

$$\nabla T = \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\partial T}{\partial z} \quad ,$$

$\rho(T)$ = massa específica do material [kg/m³];

$c(T)$ = calor específico do material [J/kg.K];

$k(T)$ = condutibilidade térmica do material [W/m.K];

$\frac{\partial T}{\partial t}$ = taxa de resfriamento ou aquecimento [K/s];

$\dot{q}$ = geração interna de calor, associado à transformação de fase de um material.

A condutividade térmica do material, por ser uma grandeza direcional, varia com a direção considerada e ao longo desta, bem como com a temperatura. No entanto, a consideração de $k(x) = k(y) = k(z) = k_{cte}$, onde k_{cte} é a condutibilidade térmica do material ao longo da linha de condução, é válida para o tratamento matemático da solidificação, admitindo-se somente que $k = f(T)$.

O termo de geração interna de calor pode ser aproximado, no caso da solidificação de uma liga binária, por:

$$\dot{q} = \rho L \frac{\partial F_S}{\partial t} , \quad 3.150a.$$

na qual (L) eqüivale ao calor latente de fusão do material e ($\partial F_S / \partial t$) corresponde à variação da fração de sólido no tempo, e pode ser aproximada por[Evans,1991]:

$$\frac{\partial F_S}{\partial t} = \frac{\partial F_S}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} , \quad 3.150b$$

e a Equação 3.150a assume a forma da Equação 3.150c

$$\dot{q} = \rho L \frac{\partial F_S}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} . \quad 3.150c$$

Assim, a Equação 3.150 pode ser reescrita em sua forma unidirecional, admitindo-se somente fluxo de calor na direção X , como:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) + \rho L \frac{\partial F_S}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} . \quad 3.151$$

Nesta Equação, o termo $L(\partial F_S / \partial T)$ é entendido como associado à liberação de energia na forma de calor, devido à mudança de fase. Para o caso particular da solidificação de uma liga binária, onde o fenômeno da solidificação é fortemente desacelerado pela liberação de calor devido a esta mudança de fase do material [Poireir,1988; Salcudeann1988; Spim,1992/1995; Santos,1996 A/B, 1997], e chamando de pseudo calor específico para a relação abaixo:

$$c' = [c - L(\partial F_S / \partial T)] \quad 3.151a$$

3.7.2.2. Substituição das Derivadas Parciais por Diferenças Finitas

Uma função dependente e contínua (f), que possui derivadas de ordem ($n \geq 1$) num intervalo aberto (I) em relação a um ponto fixo (i) em (I), pode ser expandida pela série de Taylor de tal sorte que $P_n(x) \equiv f(x)$, para (x) muito próximo de (i) e (n) muito grande.

$$P_n(x) = f(i) + \frac{f'(i)}{1!}(x-i) + \frac{f''(i)}{2!}(x-i)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(i)}{n!}(x-i)^n \quad 3.152$$

A Equação 3.152 é um exemplo da expansão de uma função (f) em (i) pela regra de Taylor.

Se uma função $T(x)$ permite determinar $T(i+\Delta x)$ e $T(i-\Delta x)$, onde (i) é um ponto qualquer no eixo (x), então,

$$T(i+\Delta x) = T(i) + \Delta x \frac{\partial T(i)}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 T(i)}{\partial x^2} + \dots + \frac{\Delta x^n}{n!} \frac{\partial^n T(i)}{\partial x^n} \quad 3.153$$

$$T(i-\Delta x) = T(i) - \Delta x \frac{\partial T(i)}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 T(i)}{\partial x^2} + \dots + (-1)^n \frac{\Delta x^n}{n!} \frac{\partial^n T(i)}{\partial x^n} \quad 3.154$$

Entretanto, se for feita a seguinte consideração :

$$T(i+\Delta x) = T_{(i+1)} ; \quad T(i-\Delta x) = T_{(i-1)} ; \quad T(i) = T_{(i)}$$

reescreve-se a equação 3.151 na forma da Equação 3.151b:

$$\rho c' \frac{\partial T}{\partial t} = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) , \quad 3.151b$$

F_S será abordado com mais detalhes no item 3.7.2.4.

Para a resolução da Equação 3.151b , utilizar-se-á a técnica de diferenças finitas, que consiste de método numérico de aproximações onde o meio no qual ocorrerá a condução de calor é discretizado em uma sequência de pontos ou nós.

3.7.2.1. Formação da Malha do Modelo de Diferenças Finitas

O elemento em estudo deve ser dividido em regiões infinitesimais, ditas de diferenças finitas. Em cada uma delas localiza-se um ponto de referência ou ponto nodal no interior do elemento de malha, que devem estar identificados com suas posições segundo o eixo de referência, como pode ser visto na Figura 3.12. Para uma análise unidimensional é suficiente que se adote uma pequena região do meio físico, chamado volume de controle.

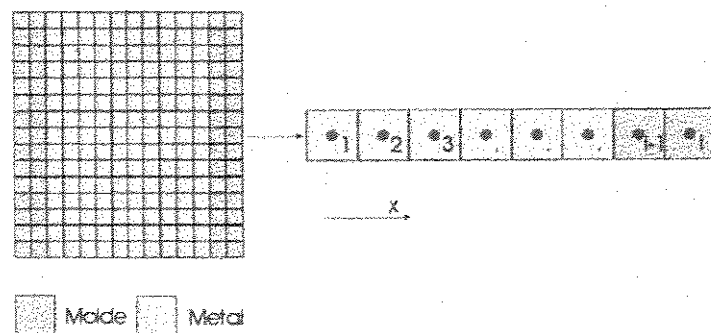


Figura 3.12 - Representação da malha de nós num sistema metal/molde unidimensional.

a Equação 3.155a poderá ser obtida, a partir da Equação 3.153, identificada por Diferença Finita de Avanço do ponto (i) (DFA); da Equação 3.154 obtém-se a equação 3.156a, identificada por Diferença Finita de Retorno do ponto (i) (DFR). Porém, da adição destas duas equações, truncadas no termo de segunda ordem, chega-se à Diferença Finita Central a três pontos do ponto (i) (DFC) [Equação 3.157a]. A figura 3.13 mostra a representação geométrica destas Equações.

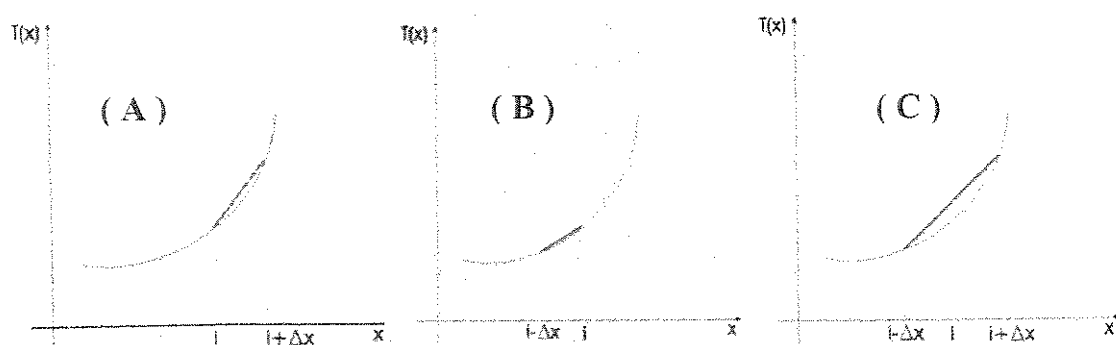


Figura 3.13 - Representação geométrica das diferenças finitas, (A) Diferença Finita de Avanço do ponto(i), (B) Diferença Finita de Retorno do ponto(i), (C) Diferença Finita centrada no ponto(i).

$$\frac{\partial T(i)}{\partial x} = \frac{T(i + \Delta x) - T(i)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) , \quad 3.155$$

$$\frac{\partial T(i)}{\partial x} = \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta x} , \quad (\text{DFA}) \quad 3.155a$$

$$\frac{\partial T(i)}{\partial x} = \frac{T(i) - T(i - \Delta x)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) , \quad 3.156$$

$$\frac{\partial T(i)}{\partial x} = \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta x} , \quad (\text{DFR}) \quad 3.156a$$

$$\frac{\partial T^2(i)}{\partial x^2} = \frac{T(i + \Delta x) - 2T(i) + T(i - \Delta x)}{\Delta x^2} + \Xi(\Delta x^3) , \quad 3.157$$

$$\frac{\partial T^2(i)}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} . \quad (\text{DFC}) \quad 3.157a$$

O erro de truncamento das Equações 3.155a; 3.156a e 3.157a, representados respectivamente por $[\Xi(\Delta x^2)]$ e $[\Xi(\Delta x^3)]$, pode ser minimizado com a utilização de intervalos menores se:

$$\Xi(\Delta x^n) \rightarrow 0 \quad \text{quando} \quad \Delta x \rightarrow 0.$$

A simulação de um fenômeno físico por um modelo numérico que o aproxime matematicamente da realidade física, exige a consideração de cuidados importantes no que diz respeito à solução, analisando fatores como: erro, estabilidade e convergência do modelo, cujos conceitos básicos já foram comentados neste trabalho.

Com as derivadas parciais de primeira ordem de avanço, obtém-se o Método de Diferenças Finitas Explícito, no qual as temperaturas nodais posteriores T_i^{n+1} são determinadas somente se os valores das temperaturas atuais (anteriores) T_i^n forem conhecidas, conforme pode ser visto na Figura 3.14A.

Com as derivadas parciais de primeira ordem de retorno obtém-se o Método de Diferenças Finitas Implícito no qual as temperaturas nodais são determinadas no tempo posterior ($n + 1$). A nova temperatura no nó (i) depende das novas temperaturas ($n + 1$) dos nós vizinhos, ($i - 1$) e ($i + 1$), que geralmente são desconhecidas, como pode ser visto na Figura 3.14B.

Como base de comparação entre esses dois modos de operação existe o fator estabilidade, que não preocupa no modo implícito de diferenças finitas por ser estável para qualquer intervalo de tempo e espaço. Isso já não ocorre com o modo explícito de diferenças finitas no qual este fator é fundamental, uma vez que espaço e tempo devem ser compatibilizados. Entretanto, as condições de modelagem e cálculo são mais favoráveis ao modo explícito, fator determinante na sua escolha. Para o caso do modo implícito devem ser aplicados métodos de resoluções matriciais, como por exemplo o método da inversão matricial, método iterativo de Gauss/Seidel[Incropera,1990] e o método de eliminação de Gauss[Ruggero,1988]. A Figura 3.14 mostra as posições conhecidas e desconhecidas em uma região de interesse.

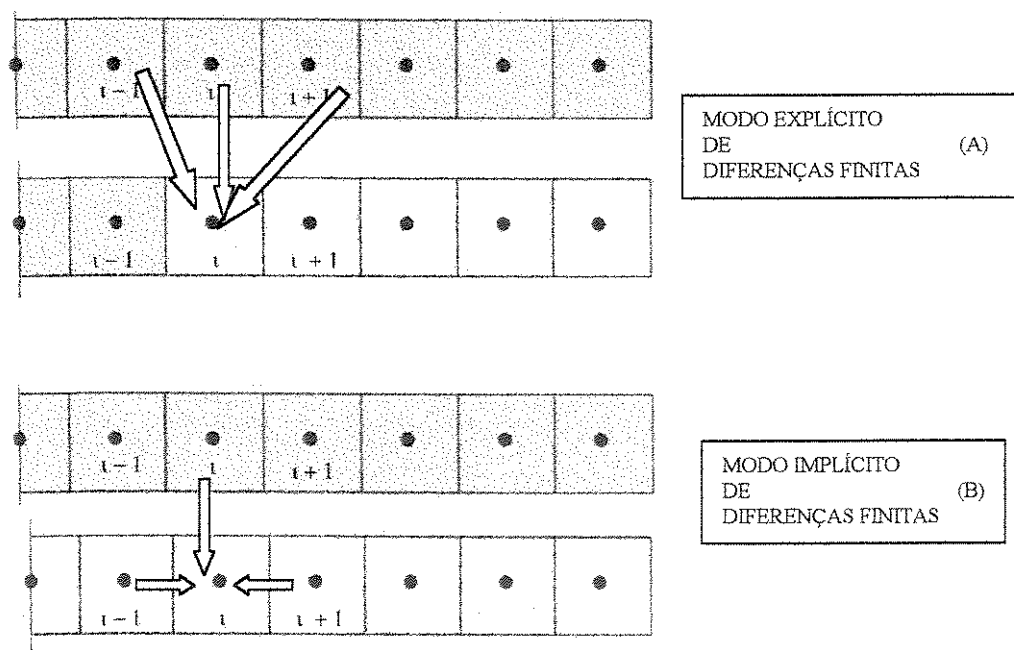


Figura 3.14 - Arranjo esquemático ilustrando posições conhecidas e desconhecidas em uma malha de Diferenças Finitas

As aproximações por diferenças finitas dos termos expressos por derivadas parciais de primeira e segunda ordem, na Equação 3.151b, para o ponto (i) permite escrever:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_i \equiv \left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_i \Rightarrow \frac{T_{i+1}^n - T_i^n}{\Delta x} \equiv \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} , \text{ e} \quad 3.158$$

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_i \equiv \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{\Delta x^2} . \quad 3.159$$

Os índices (n) e ($n + 1$) são usados para mostrar a dependência da temperatura com o tempo ($t = n\Delta t$). Nestas circunstâncias, a temperatura em cada nó deve ser conhecida em ($t = 0$) pelas condições iniciais. Os cálculos iniciam-se em ($t = \Delta t$) ou ($n = 1$) e continuam para os outros valores de (n). Os subíndices (i ; $i + 1$ e $i - 1$) indicam, respectivamente, o nó estudado, o nó posterior e o nó anterior no espaço considerado.

3.7.2.3. O Método de Diferenças Finitas no Modo Explícito

As Equações 3.158 e 3.159 levadas à Equação 3.151b possibilita que a mesma possa ser obtida na forma que é conhecida como o modo explícito do MDF:

$$\rho c' \left(\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} \right) = k \left(\frac{T_{i-1}^n - 2T_i^n + T_{i+1}^n}{\Delta x^2} \right) . \quad 3.160$$

Com a manipulação matemática da Equação 3.160 chega-se à Equação 3.161

$$T_i^{n+1} = \frac{1}{N} T_{i-1}^n + \left(\frac{N-2}{N}\right) T_i^n + \frac{1}{N} T_{i+1}^n, \quad 3.161$$

na qual:

$N = \Delta x^2 / \alpha' \Delta t \Rightarrow 1/N$, conhecido por fator de peso ou número de Fourier;

$\alpha' = k / \rho c'$, é a difusividade térmica do material[m^2 / s]; e

$N - 2 > 0 \Rightarrow \Delta t < \Delta x^2 / 2\alpha$, que é o critério de estabilidade do Modo Explícito.

3.7.2.4. Tratamento da Transformação de Fase

As propriedades termofísicas do metal como massa específica (ρ), condutividade térmica (k) e calor específico (c) são variáveis com o estado de agregação do material, ou seja, apresentam valores distintos para o estado sólido, líquido e pastoso para o caso de ligas. Assim, quando se tratar de ligas binárias, estas propriedades variam com a temperatura dentro da região do intervalo de transformação de fase sólido / líquido, segundo[Voller,1991/1992]:

$$\begin{aligned} k &= (k_S - k_L) \cdot F_S + k_L, \\ c' &= (c_S - c_L) \cdot F_S + c_L - L(\partial F_S / \partial T), \text{ e} \\ \rho &= (\rho_S - \rho_L) \cdot F_S + \rho_L. \end{aligned} \quad 3.162$$

A fração sólida F_S pode ser função de uma série de parâmetros envolvidos no sistema de fundição como constituintes internos da liga e da forma com que interagem durante a solidificação do sistema. No entanto, na modelagem matemática é importante assumir a variação como função apenas da temperatura, isto é:

$$F_S = F(T) \quad \text{para} \quad T_S < T < T_L. \quad 3.163$$

As formulações mais importantes foram apresentadas em itens anteriores neste trabalho. No entanto, têm-se para o caso de ligas não-ferrosas um tratamento adequado àquele dado por Scheil[Scheil,1942], para o caso de solidificação em condições de não-equilíbrio com mistura completa de soluto no líquido e movimento desprezível de soluto no sólido formado, circunstâncias que podem ocorrer quando o soluto e solvente têm raios atômicos de mesma ordem de grandeza, como no caso de ligas dos sistemas Alumínio/Cobre e Estanho/Chumbo. Caso das soluções sólidas substitucionais associadas ao critério do fator tamanho de Hume-Rothery. A Equação 2.19 é Equação de Scheil.

$$F_S = 1 - \left[\frac{T_F - T}{T_F - T_L} \right]^{\left(\frac{1}{K_0 - 1} \right)}.$$

a) Ligas Binárias com Transformação Eutética

No que diz respeito às transformações invariantes, iguais àquelas que ocorrem na solidificação de metais puros ou ligas com composições eutéticas, o tratamento da liberação de calor latente é feito utilizando-se do tratamento que correlaciona o parâmetro (λ) com variáveis dependentes do metal, como calor latente de fusão e calor específico, determinado pela Equação 3.164, proposta por Dussimberre para metais

3.7.2.5. Analogia entre Sistemas Térmicos e Circuitos Elétricos

Segundo Spim[Spim,1995], a analogia físico/numérica entre um sistema térmico e um sistema elétrico tem como consequência o ganho de tempo operacional, uma vez que cada ponto nodal pode ser visto como um circuito resistivo e capacitivo individual. Isto implica aumento do número de pontos ou redução da malha apenas na região do corpo físico em que se deseja maior precisão, como por exemplo nas proximidades das interfaces. Além disso, o modo convectivo de transferir calor pode também ser visto como uma resistência à passagem ao fluxo de calor, mantendo com a analogia a consistência das Equações aplicadas no modelo. Para um sistema unidimensional, conforme a Figura 3.15, resumidamente esta analogia pode ser feita quando se multiplica a Equação 3.160 por Δx e pela área de passagem do fluxo de calor (A_T), que é dada por $\Delta y \cdot \Delta z$ para esta situação, e chega-se a:

$$A_T \Delta x \rho c' \left(\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} \right) = A_T k \left(\frac{T_{i+1}^n + T_{i-1}^n - 2T_i^n}{\Delta x} \right) \quad 3.165$$

Fazendo a analogia com circuitos elétricos, o acúmulo de energia do elemento finito "i" é caracterizado pela sua capacidade térmica dada por [Welty, 1974; Spim,1995; Santos,1996]:

$$C_{Ti} = A_T \cdot \Delta x_i \cdot \rho_i \cdot c_i' = V \cdot \rho_i \cdot c_i' \quad , \quad 3.165a$$

onde: $V = A_T \cdot \Delta x_i$ corresponde ao volume do elemento finito "i"; e

C_{Ti} é a capacidade térmica do elemento "i".

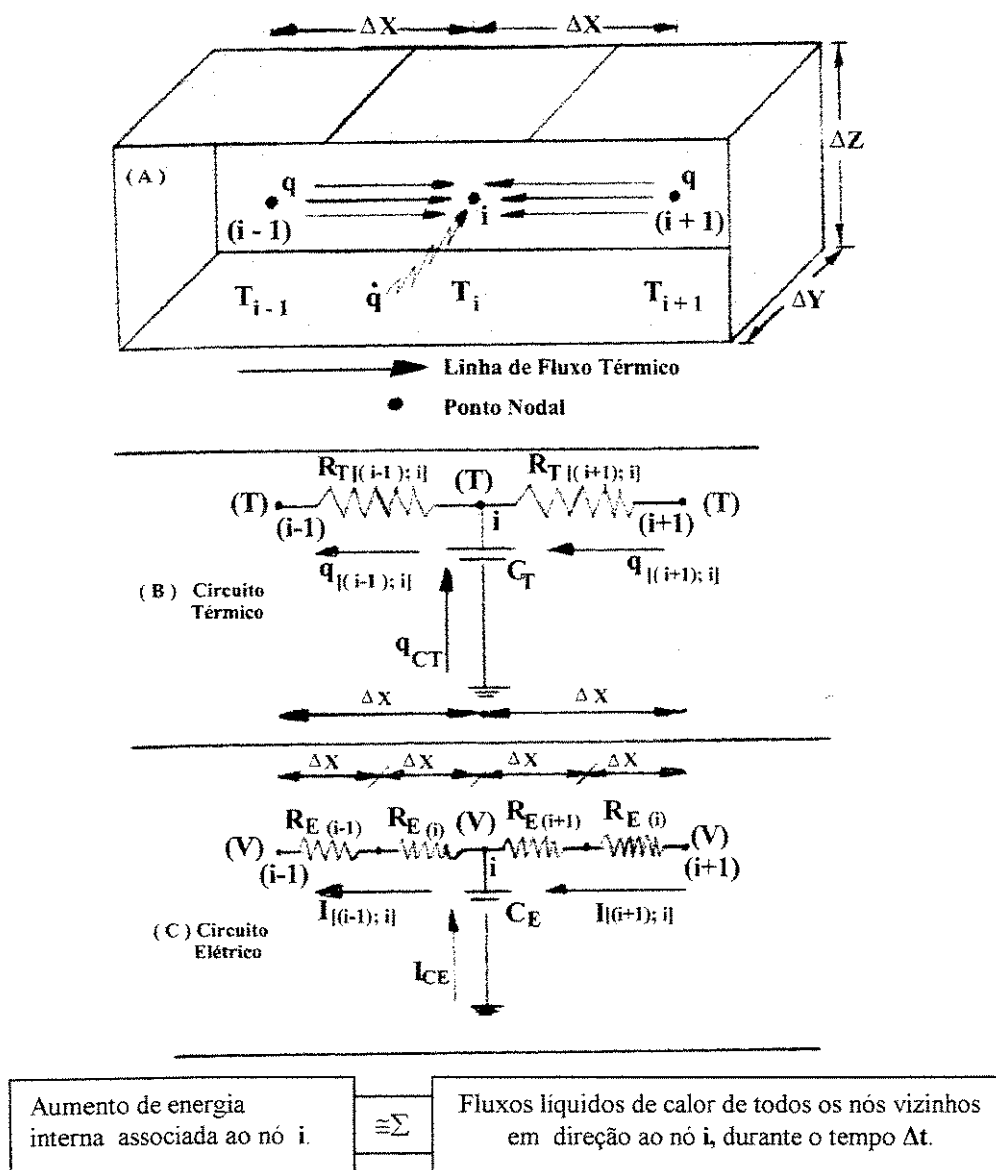


Figura 3.15 -Caracterização Esquemática da Similaridade entre Circuito Térmico (B) e um Circuito Elétrico (C). Em (A) é apresentado o esquema ilustrando um elemento de malha e um ponto nodal.

O fluxo térmico entre os pontos nodais (centrais) dos elementos finitos tem, como resistência térmica à passagem de calor, um valor representado pelo inverso da condutividade térmica, sendo:

$$R_T = \frac{\Delta x}{kA_T} , \quad 3.165b$$

na qual Δx é a distância percorrida pelo fluxo de calor entre os pontos centrais.

Com base na Figura 3.15, a resistência térmica no interior de cada elemento até a interface com o elemento vizinho é:

$$R_{i+1} = \frac{\Delta x_{i+1}}{2k_{i+1}A_T} , \quad 3.165c$$

$$R_{i-1} = \frac{\Delta x_{i-1}}{2k_{i-1}A_T} , \text{ e} \quad 3.165d$$

$$R_i = \frac{\Delta x_i}{2k_iA_T} . \quad 3.165e$$

Generalizando a Equação 3.165 com a substituição das Equações 3.165a;b;c;d e e obtém-se a Equação :

$$C_{Ti} \left(\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} \right) = \left(\frac{T_{i+1}^n - T_i^n}{R_{i+1,i}} \right) + \left(\frac{T_{i-1}^n - T_i^n}{R_{i-1,i}} \right) , \quad 3.166$$

sendo $R_{i+1,i} = R_{i+1} + R_i$ e $R_{i-1,i} = R_{i-1} + R_i$.

O arranjo matemático da Equação 3.166, com base nos conceitos térmicos/elétricos associados pela Figura 3.15, conduz naturalmente à forma da Equação 3.167:

$$T_i^{n+1} = \frac{\Delta t}{C_{Ti}} \left(\frac{T_{i+1}^n}{R_{i+1} + R_i} + \frac{T_{i-1}^n}{R_{i-1} + R_i} \right) + \left[1 - \frac{\Delta t}{C_{Ti}} \left(\frac{1}{R_{i+1} + R_i} + \frac{1}{R_{i-1} + R_i} \right) \right] T_i^n . \quad 3.167$$

Assim, a Equação 3.167 pode ser escrita de forma simplificada como:

$$T_i^{n+1} = \left(\frac{\Delta t}{\tau_{Qi}} \right) T_{i+1}^n + \left[1 - \frac{\Delta t}{\tau_{QDi}} \right] T_i^n + \left(\frac{\Delta t}{\tau_{Di}} \right) T_{i-1}^n . \quad 3.168$$

A Equação 3.168 corresponde à Equação de Solução do M.D.F. na **Forma Explícita** de trabalho, e é estável para valores de $\Delta t \leq \tau_{QDi}$, sendo este o critério de estabilidade do sistema.

Para a Equação 3.168 tem-se que:

$$\tau_{Qi} = C_{Ti}(R_{i+1} + R_i) \quad (\text{C arga}) \quad 3.168a$$

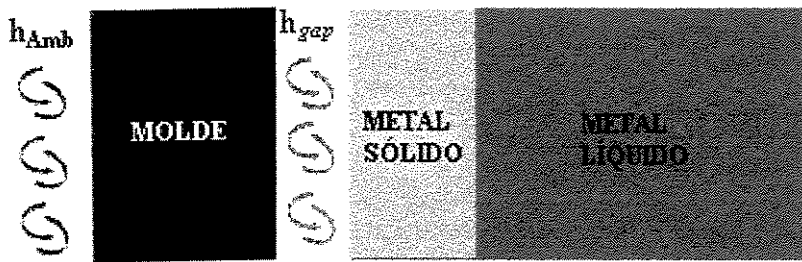
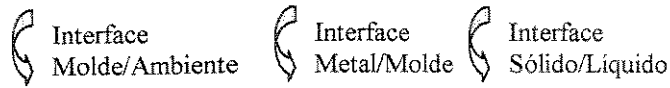
$$\tau_{Di} = C_{Ti}(R_{i-1} + R_i) \quad (\text{Descarga}) \quad 3.168b$$

$$\tau_{QDi} = \frac{\tau_{Qi} \cdot \tau_{Di}}{\tau_{Qi} + \tau_{Di}} \quad (\text{Carga e Descarga}) \quad 3.168c$$

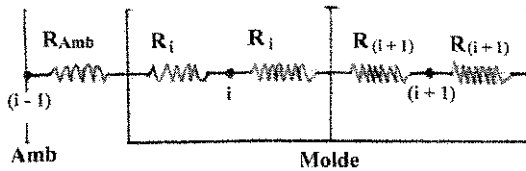
A análise térmica feita em circunstâncias como a ilustrada na Figura 3.15, via analogia térmica/elétrica, exige que as resistências representativas do fenômeno sejam distribuídas como no circuito elétrico, mas levando em conta a análise das condições de contorno do sistema.

3.7.2.6. Tratamento das Condições de Contornos

A Figura 3.16 mostra os elementos de malha e suas respectivas resistências térmicas de acordo com a posição considerada associadas ao conjunto de equações a serem satisfeitas em cada circunstância.

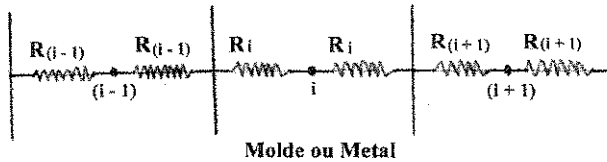


Tratamento para Interface Molde/Ambiente



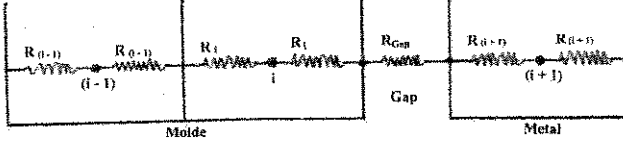
$$\begin{aligned}\tau_{Qi} &= C_{Ti} [R_{(i+1)} + R_i] \\ \tau_{Di} &= C_{Ti} [R_i + R_{(i-1)}] \\ R_{(i-1)} &= R_{Amb} = \frac{1}{(h_{Amb} \cdot A_T)} \\ \tau_{QDi} &= \left[\frac{\tau_{Di} \cdot \tau_{Qi}}{\tau_{Di} + \tau_{Qi}} \right] \# C_{Ti} = V_i \cdot \rho_i \cdot c_i\end{aligned}$$

Tratamento para Interior do Molde ou do Metal



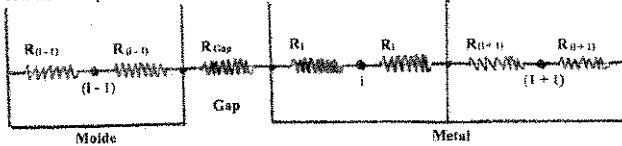
$$\begin{aligned}\tau_{Qi} &= C_{Ti} [R_{(i+1)} + R_i] \\ \tau_{Di} &= C_{Ti} [R_i + R_{(i-1)}] \\ \tau_{QDi} &= \left[\frac{\tau_{Di} \cdot \tau_{Qi}}{\tau_{Di} + \tau_{Qi}} \right] \# C_{Ti} = V_i \cdot \rho_i \cdot c_i\end{aligned}$$

Tratamento para Interface Metal/Molde (i no Molde)



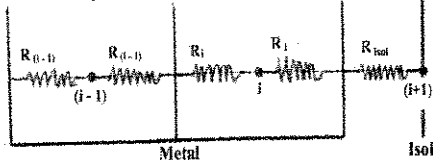
$$\begin{aligned}\tau_{Qi} &= C_{Ti} [R_{(i+1)} + R_{Gap} + R_i] \\ R_{Gap} &= \frac{1}{h_i \cdot A_T} \\ \tau_{Di} &= C_{Ti} [R_i + R_{(i-1)}] \\ \tau_{QDi} &= \left[\frac{\tau_{Qi} \cdot \tau_{Di}}{\tau_{Qi} + \tau_{Di}} \right] \# C_{Ti} = V_i \cdot \rho_i \cdot c_i\end{aligned}$$

Tratamento para Interface Metal/Molde (i no Metal)



$$\begin{aligned}\tau_{Qi} &= C_{Ti} [R_{(i+1)} + R_i] \\ R_{Gap} &= \frac{1}{h_i \cdot A_T} \\ \tau_{Di} &= C_{Ti} [R_i + R_{(i-1)}] \\ \tau_{QDi} &= \left[\frac{\tau_{Qi} \cdot \tau_{Di}}{\tau_{Qi} + \tau_{Di}} \right] \# C_{Ti} = V_i \cdot \rho_i \cdot c_i\end{aligned}$$

Tratamento para Interface Metal/Isolante



$$\begin{aligned}\tau_{Qi} &= C_{Ti} [R_{(i+1)} + R_i] \\ R_{isol} &= R_{(i-1)} = R_{(i+1)} \\ \tau_{Qi} &= C_{Ti} [R_{(i-1)} + R_i] \\ \tau_{Di} &= C_{Ti} [R_i + R_{(i-1)}] \\ \tau_{QDi} &= \left[\frac{\tau_{Qi} \cdot \tau_{Di}}{\tau_{Qi} + \tau_{Di}} \right] \# C_{Ti} = V_i \cdot \rho_i \cdot c_i \\ \tau_{QDi} &= \left[\frac{\tau_{Di}}{(\tau_{Di})^2} \right] = \frac{2C_{Ti}}{\tau_{Di}}\end{aligned}$$

Figura 3.16 - Distribuição esquemática dos elementos do sistema metal/molde, associando aos elementos de malha do MDF, às respectivas resistências térmicas bem como ao conjunto de equações.

Capítulo 4

4 COEFICIENTES DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR M/M E M/AMB

4.1 Definições das Resistências Térmicas na Solidificação

Como foi visto no capítulo 3, uma das principais dificuldades encontradas na aplicação de modelos matemáticos para a simulação da transferência de calor nos processos de fundição de metais é o tratamento das interfaces como as vistas na Figura 3.16. Entretanto, é conveniente que se caracterize a transferência de calor ao longo de um sistema de solidificação, como o visto na Figura 4.1, onde a transferência de calor pode ser caracterizada por resistências térmicas, tais como: resistência térmica da interface molde/ambiente ($R_{M/A} = R_C + R_R$), resistência térmica da parede do molde (R_M), resistência térmica da interface metal/molde (R_i), resistência térmica da camada solidificada (R_S) e resistência térmica da camada líquida (R_L) para melhor compreensão dos parâmetros termofísicos envolvidos, conforme a Equação 4.1 [Santos,1997; Spim,1996],

$$R_T = R_{M/A} + R_M + R_i + R_S + R_L \quad . \quad 4.1$$

O valor da resistência térmica na interface molde/ambiente é dada por:

$$R_{M/A} = \frac{1}{(h_R + h_C)A_T}$$

4.2

onde h_R = coeficiente radiativo [$W/m^2.K$];

h_C = coeficiente de convecção do gás [$W/m^2.K$]; e

A_T = área de troca de térmica [m^2].

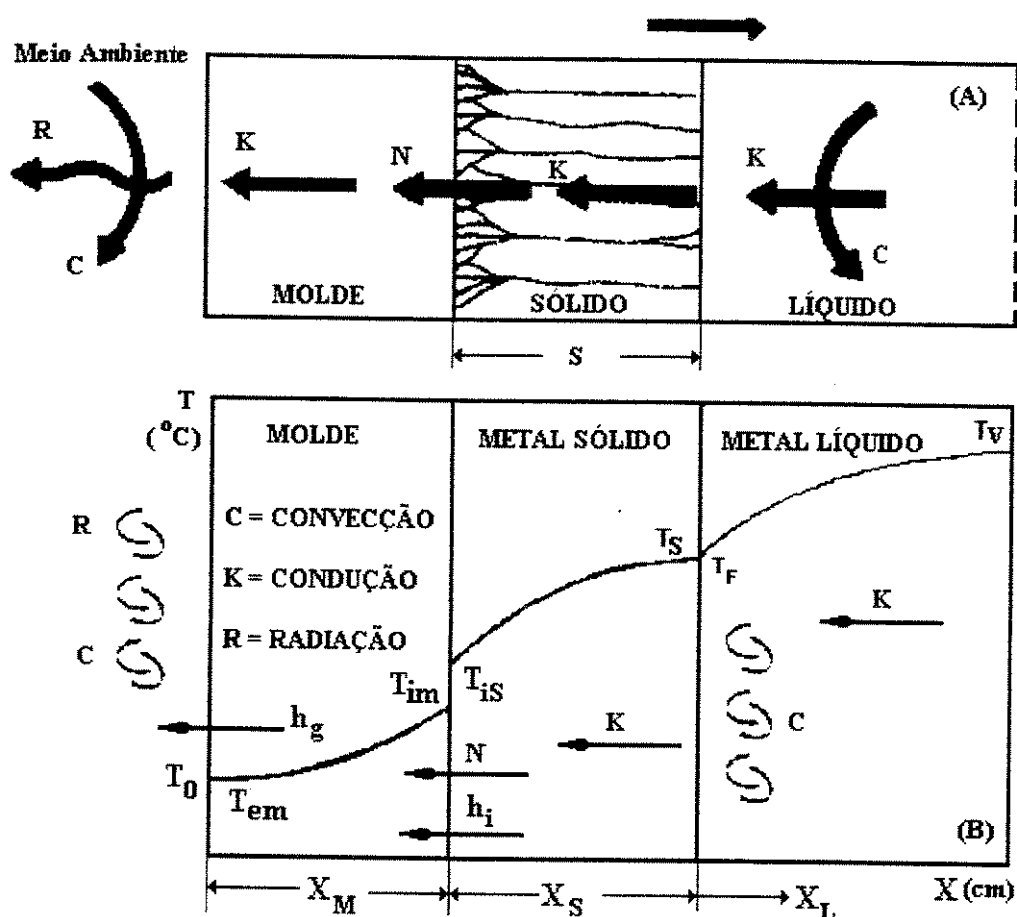


Figura 4.1- Esquema ilustrando (A) o sistema metal/molde e as formas de transferência de calor e (B) o perfil térmico ao longo do elemento de estudo associado às formas de transferência de calor em cada caso.

Para o cálculo do coeficiente radiativo tem-se que:

$$h_R = \sigma \cdot \varepsilon (T_{EM} + T_0)(T_{EM}^2 + T_0^2) \quad , \quad 4.3$$

onde: σ = constante de Stefan-Boltzman [=5,672 x 10⁻⁸ W/m².K⁴];

ε = emissividade do material do molde;

T_{EM} = temperatura da superfície externa do molde[K]; e

T_0 = temperatura ambiente[K].

Para o cálculo do coeficiente de convecção, sabe-se que:

$$h_C = \frac{k_{gás} N_u}{\chi} \quad , \quad 4.4$$

na qual:

$$N_u = C (G_R \cdot P_R)^n \quad , \quad \text{Número de Nusselt} \quad 4.4a$$

$$G_R = \frac{g \cdot \gamma \cdot \chi^3 (T_{EM} - T_0)}{\eta_{gás}^2} \rho_{gás}^2 \quad , \quad \text{Número de Grashof} \quad 4.4b$$

$$P_R = \left[\frac{\eta}{k} \cdot c \right]_{gás} \quad , \quad \text{Número de Prandtl} \quad 4.4c$$

onde η = viscosidade dinâmica do fluido de refrigeração[kg/m.s];
 c = calor específico do fluido de refrigeração[J/kg.K];
 $\rho_{\text{gás}}$ = massa específica do fluido de refrigeração [kg/m³];
 k = condutividade do fluido de refrigeração[W/m.K];
 χ = dimensão característica da superfície, referente ao percurso feito pelo fluido de refrigeração ao passar pela superfície do corpo[m];
 γ = coeficiente de expansão térmica volumétrica do fluido de refrigeração[para gases pode ser aproximado por $(\gamma = 1 / T_0)$ [K⁻¹]]; e
 g = aceleração da gravidade[= 9,81 m/s²].

Para um estudo onde o fluxo de fluido pode ser considerado laminar e a superfície do corpo na posição vertical, o valor do produto $[G_R * P_R]$ deverá variar no intervalo $[10^4 \text{ a } 10^9]$ e para cálculo do Número de Nusselt $[C = 0,59 ; n = 0,25]$. Por outro lado, as propriedades do fluido de refrigeração, como o ar, variam com a temperatura[Bejan,1993;Poirier,1994].

A resistência térmica da parede do molde pode ser tratada sob dois aspectos, ou seja, para moldes de paredes espessas pode ser tratada por condução. Neste caso só são avaliados $(h_C, h_R \text{ e } h_i)$; porém, tratando-se de molde de paredes delgadas, pode ser feita a seguinte aproximação para a obtenção de R_M :

$$R_M = \frac{1}{h_M A_T} = \frac{X_M}{k_M A_T} \quad , \quad 4.5$$

na qual h_M = coeficiente de transferência de calor do molde[W/m².K];
 X_M = espessura da parede do molde [m]; e
 k_M = condutividade térmica no material da parede do molde[W/m.K).

A resistência térmica da interface metal/molde é dada por:

$$R_i = \frac{1}{h_i A_T} = \frac{X_{gap}}{k_{gás} A_T} , \quad 4.6$$

na qual h_i = coeficiente de transferência de calor da interface metal/molde [$W/m^2.K$];

X_{gap} = espessura do *gap* de ar [m]; e

$k_{gás}$ = condutividade térmica do gás do *gap* [$W/m.K$].

A resistência térmica da camada solidificada é dada por:

$$R_S = \frac{1}{h_S A_T} = \frac{X_S}{k_S A_T} , \quad 4.7$$

na qual h_S = coeficiente da transferência de calor da camada solidificada [$W/m^2.K$];

X_S = espessura da camada solidificada [m]; e

k_S = condutividade térmica do metal sólido [$W/m.K$].

A resistência térmica da camada de líquido terá como componentes uma parcela devido à condução térmica associada e outra devido à convecção, como pode ser visto na Figura 4.1A:

$$R_L = \frac{1}{(h_L + h_C) A_T} . \quad 4.8$$

Desta forma, reescreve-se a Equação 4.1 utilizando-se dos elementos do sistema térmico na forma da Equação 4.9, que permite conceituar as Resistências Térmicas como o inverso dos Coeficientes de Transferência de Calor (h) em cada interface considerada:

$$R_T = \frac{1}{A_T} \left[\frac{1}{(h_R + h_C)} + \frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_M} + \frac{1}{h_S} + \frac{1}{(h_L + h_C)} \right] \quad 4.9$$

As Equações 4.5 e 4.7 permitem a análise de situações limites no circuito térmico completo do sistema de fundição.

No caso de moldes refratários, os baixos valores da condutividade térmica implicam $R_M \gg R_i$;

No caso de peças de grande porte, como por exemplo lingotes de aço de várias toneladas, o valor de X_S na Equação 4.7 é tão significativo que implica $R_S \gg R_i$. Nos dois casos, a resistência térmica metal/molde pode ser desprezada.

Por outro lado, à medida em que cresce a difusividade térmica do metal e diminui a espessura da peça, cresce também a importância da resistência térmica metal/molde até que sejam atingidas novas condições limites onde a solidificação é praticamente controlada por esta resistência térmica ($R_i \gg R_S ; R_M$). Nestas condições, na análise de peças de espessuras médias ou finas de ligas de Cobre ou ligas de Alumínio, é fundamental que se tenham condições de caracterizar o melhor possível essa resistência interfacial.

Embora h_C , h_R , h_M , h_S e h_L possam ser calculados a partir das temperaturas desenvolvidas durante a solidificação e das propriedades termofísicas do molde e do metal, h_i deve ser objeto de determinação experimental. Por este motivo, a determinação correta de h_i , tem sido objeto de estudo de diversos pesquisadores [Garcia/Clyne,1983; Nishida et alli,1986; Sharma/Krishnan,1991]. A confiabilidade, ou precisão dos resultados quando da utilização de qualquer método de solução do problema do fluxo de calor no sistema metal/molde, por mais elaborado que tenha sido o método adotado, depende fundamentalmente de como é considerada a resistência térmica nestas interfaces, visto que em determinadas situações, estas podem exercer um controle efetivo das condições de resfriamento. Consequentemente, podem definir a forma e o tamanho na estrutura do fundido, parâmetros que contribuem fortemente para as futuras propriedades desses materiais.

4.2 Formação do *gap* de Ar na Interface Metal / Molde

A transferência de calor na interface metal/molde, por causa de sua importante influência na velocidade de solidificação e nas taxas de resfriamento de fundidos, tem sido alvo de inúmeras pesquisas. Vários trabalhos foram desenvolvidos objetivando caracterizar o mecanismo físico da transferência de calor entre as superfícies de contato.

Em geral, no início do processo de solidificação, uma fina camada de metal solidifica-se junto à parede do molde. À medida que o processo avança, um espaço *gap* interfacial separando o metal e o molde, semelhante ao visto na Figura 4.2, pode desenvolver - se, apoiado em mecanismos que estão associados a [Prates/Biloni,1972; Ho/Pehlke,1984; Prabhu et alli,1992; Wu et alli,1992]:

- interação do metal com o molde em função das diferentes naturezas físico-químicas; e
- contração do metal e expansão do molde.

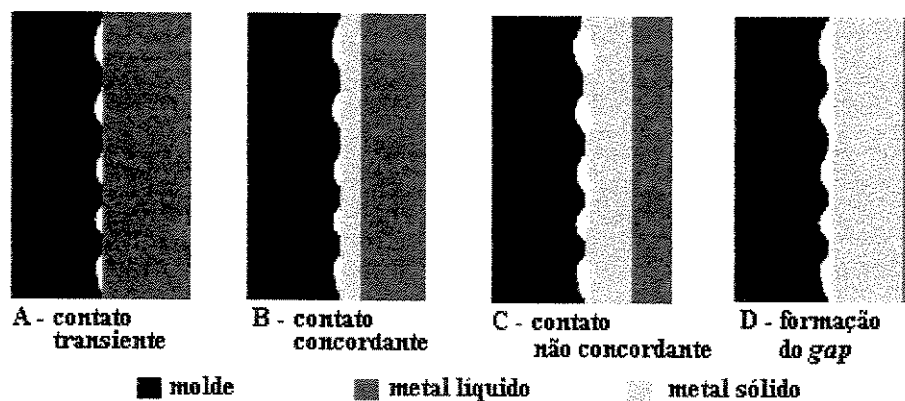


Figura 4.2 - Esquema ilustrativo da evolução da formação do *gap* de ar, durante o processo de solidificação, entre o metal e o molde.

Interação do metal com o molde - Com a formação do *gap* de ar nessa interface, o coeficiente de transferência de calor nessa região pode decrescer rapidamente, dificultando a retirada de calor na mesma e desacelerando o processo de solidificação do metal líquido. Baseados em trabalhos com ligas de alumínio e moldes permanentes, Prates e Biloni[Prates/Biloni,1972] propuseram um mecanismo para explicar a formação do *gap*, segundo o qual a parede do molde, por mais lisa que seja, apresenta pequenas saliências, mesmo que a nível microscópico. Quando o metal líquido se aproxima da superfície interna do molde, o primeiro contato acontece nos picos dessas saliências, que estão a uma temperatura bem abaixo do metal líquido, causando a formação de pequenos núcleos de solidificação nesses locais. Ao mesmo tempo, a tensão superficial (fluidez) do metal líquido poderá impedir que o restante do metal que se solidifica, alcance os vales das asperezas superficiais, onde são armazenados os gases liberados inerentes ao processo de fundição.

Contração do metal / Expansão do molde- No início do processo, o contato entre o molde e o metal líquido pode ser considerado muito bom, por depender da pressão metalostática e da fluidez do metal líquido, o que acarreta um coeficiente de transferência de calor alto (h alto). À medida que o processo progride, uma fina camada de metal solidifica-se em contato com a parede do molde, e favorecido pela pressão metalostática exercida pelo metal líquido, causando uma redução no fluxo de calor. Com o avanço da solidificação, o contato entre molde e a camada de metal solidificada é gradativamente dificultado, pois de um lado o molde aquece e expande e do outro o metal solidificado contrai, provocando uma separação entre os mesmos. O *gap* (h decresce), dificultando a retirada de calor nesta região[Prates/Biloni,1972; Ho/Pehlke,1984].

Esse *gap* entre as superfícies internas do molde e da camada de metal solidificada, comporta-se como uma resistência térmica à retirada de calor e sua influência, como foi visto anteriormente, pode ser traduzida pelo inverso da condutância térmica metal/molde multiplicada pela área de passagem de fluxo.

A disponibilidade de valores de h_i na literatura é escassa, e as características de alta diversidade dos sistemas metal/molde implicam na necessidade do desenvolvimento de metodologias para sua determinação experimental. Decorre disto a disponibilidade de um banco de dados com valores h_i ser fundamental na modelagem matemática do processo de solidificação, seja para simular operações de fundição, seja para otimizar o processo através de modificações operacionais. No entanto, praticamente inexistente disponibilidade desses valores na literatura especializada. O confronto dos resultados teóricos / experimentais permitirá o levantamento de valores de h_i que poderão ser extremamente úteis em futuras análises de problemas de solidificação, tanto a nível acadêmico, quanto em aplicações na indústria de fundição.

Podem ser mencionadas quatro metodologias de determinação de h_i , que individualmente estão apoiadas em diferentes análises do processo básico da solidificação tanto de metais como de ligas metálicas binárias, a saber :

- Cinética de Solidificação Unidirecional Controlada;
- Medidas de Espaçamento Dendrítico Secundário;
- Medida de Temperatura e Vazão em Moldes Refrigerados e
- Confronto de Perfis Térmicos Teóricos / Experimentais via Computador.

4.3 Determinação de h_i por meio da Cinética de Solidificação Unidirecional.

Esta primeira abordagem esta apoiada em uma proposta de **Garcia[Garcia,1978]** para casos em que o processo de solidificação de metais com interface sólido/líquido plana ocorre sem superaquecimento considerando dois aspectos que levam em conta,

*** Moldes maciços, e**

**** Moldes Refrigerados .**

O balanço térmico obtido com o auxílio da Figura 4.3 permite escrever a equação da cinética de solidificação nos instantes iniciais. O metal em contato com o parede fria do molde forma quase instantaneamente um filme de sólido à temperatura de fusão T_F . Nessas circunstâncias , o fluxo de calor decorrente da liberação de calor latente devido à transformação sólido/líquido deve ser igualado ao fluxo que chega ao molde através da interface metal/molde, conforme quantificado pela Equação 4.10.

Vê-se pela Equação 4.10a que, se os valores experimentais da cinética de solidificação forem colocados graficamente na forma (t / S) contra (S) , a extrapolação para os instantes iniciais do processo permitirá a determinação de β . Como este parâmetro é dependente de h_i e de propriedades e temperaturas do sistema metal/molde que são conhecidas, a determinação de h_i é direta. Para condições de solidificação unidirecionais a variação de (t / S) contra (S) se dá por uma reta, o que torna a extrapolação mais precisa. A Figura 4.4 mostra um esquema ilustrativo do método.

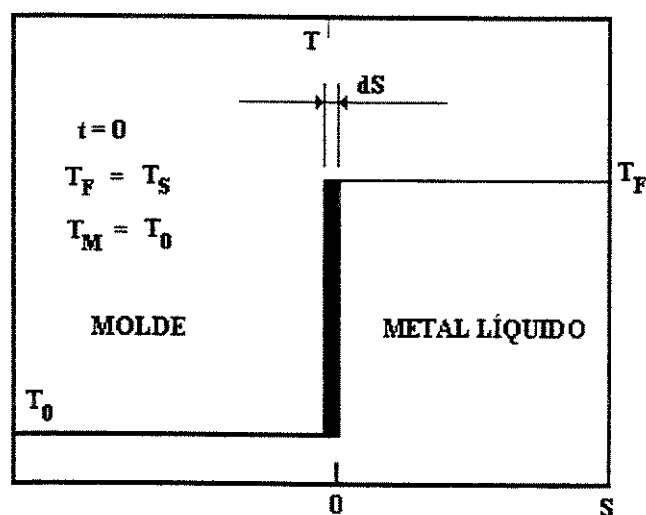


Figura 4.3 -Esquema ilustrativo dos instantes iniciais da solidificação. $\Delta T = 0$; $t = 0$.

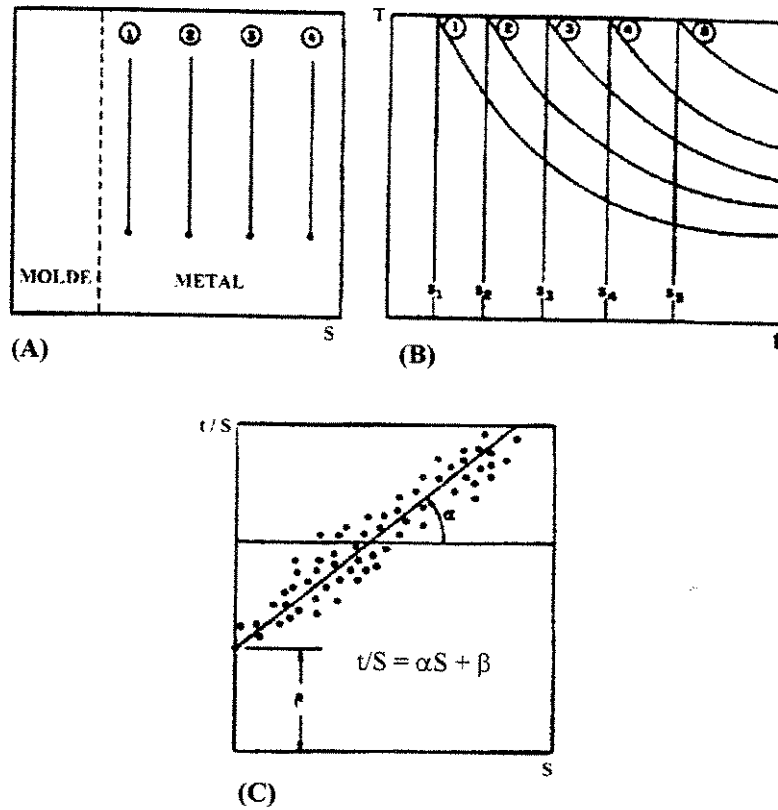


Figura 4.4 - Esquema ilustrativo para determinação experimental de h_i (A) posição dos termopares em relação ao molde. (B) perfis térmicos relativos às posições dos termopares, $\Delta T = 0$. (C) representação gráfica da média dos valores de t/S em função de S .

$$h_i(T_F - T_0) = L\rho_S \frac{dS}{dt} , \quad 4.10$$

ou na forma

$$\frac{t}{S} = \frac{L\rho_S}{h_i(T_F - T_0)} = \beta , \quad 4.10a$$

onde: T_F = temperatura de fusão do metal [K];

T_0 = temperatura ambiente ou inicial do molde [K];

L = calor latente de fusão [J/kg K];

ρ_s = massa específica do metal sólido [kg/m³]; e

dS = espessura infinitesimal de sólido formada [m];

t = tempo [s].

A condutância térmica da interface metal/molde (h_i) assim determinada, é aquela que ocorre fisicamente nos instantes iniciais do processo de solidificação.

Em seus trabalhos **Garcia, Prates e Clyne** [**Garcia/Prates, 1978; Garcia/Clyne/Prates, 1979**] obtiveram $h_i = 4.200 \text{ W/m}^2.\text{K}$ para o par metal/molde (Pb / molde de aço polido) e $h_i = 750 \text{ W/m}^2.\text{K}$ para (Pb / molde de aço pintado); para o par metal/molde (Sn / molde refrigerado polido) obtiveram $h_i = 3.600 \text{ W/m}^2.\text{K}$ e $h_i = 1.200 \text{ W/m}^2.\text{K}$ para (Sn / molde refrigerado pintado). Todos os trabalhos referem-se a sistemas de solidificação unidirecional vertical ascendente., onde o contato térmico metal/molde apresenta pouca variação durante o processo. Isto ocorre pois a contração volumétrica que acompanha a transformação líquido/sólido provoca um descolamento da peça das paredes laterais isoladas do molde, enquanto o peso próprio do fundido ajuda a manter o contato térmico com a parede do molde responsável pelo resfriamento. Situações que podem ser simuladas em laboratório com resultados semelhantes aos vistos na Figura 4.4c, cuja distribuição linear dos pontos é indicativa de que além de h_i permanecer constante é ele o controlador do processo de solidificação.

Esse método foi também utilizado de forma aproximada para a determinação de valores de h_i na solidificação unidirecional de ligas Al-4,5%Cu e Al-15%Cu [Garcia/Clyne, 1983].

4.4 Determinação de h_i por meio de Medidas dos Espaçamentos Dendríticos Secundários.

Uma maneira indireta de determinação do coeficiente de transferência de calor metal/molde consiste no levantamento metalográfico dos espaçamentos dendríticos secundários a partir da superfície da peça, e sua correlação com parâmetros térmicos da solidificação e leis de crescimento dendrítico. A literatura apresenta uma série de modelos de crescimento dendrítico, que pode ser expressa de forma generalizada com auxílio da equação 2.76:

$$\lambda_2 = C \cdot t_{SL}^n ,$$

onde C e n = são constantes que dependem da liga considerada;

t_{SL} = tempo local de solidificação [s]; e

λ_2 = espaçamento dendrítico secundário (EDS) [μm].

O tempo local de solidificação já definido no Capítulo 3 como a diferença entre o tempo de passagem da isoterma solidus e o tempo de passagem da isoterma liquidus por um determinada ponto da peça em solidificação, ou quando os parâmetros térmicos do processo de solidificação são obtidos através da consideração de frente sólido/líquido plana, pode-se definir t_{SL} a partir da Equação 3.136 abaixo:

$$t_{SL} = \frac{\Delta T_{SL}}{\dot{T}} ,$$

na qual $\Delta T_{SL} = T_L - T_S$ = intervalo de solidificação [K];

$\dot{T}$ = taxa de resfriamento do sólido junto à interface sólido/líquido [K/s].

Viu-se no Capítulo 3 que a taxa de resfriamento pode ser definida com o auxílio da Equação 3.106:

$$\dot{T} = \left. \frac{dT}{dt} \right|_{x=s} = \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=s} \left. \frac{dx}{dt} \right|_{x=s} = GV$$

Entretanto, na ausência de superaquecimento no metal líquido, tem-se o gradiente térmico expresso na forma mostrada a seguir a partir da Equação 3.138:

$$k_S G = L \rho_S V$$

que, combinada com a Equação 3.106, permite obter a equação para a taxa de resfriamento, dada pela Equação 3.139, em seguida:

$$\dot{T} = \frac{L \rho_S V^2}{k_S}$$

A partir de medidas experimentais de λ_2 , modelos de crescimento dendrítico do tipo da Equação 2.76 permitem a determinação de valores de t_{SL} , que por sua vez permitem que h_i seja determinado através da utilização de modelos analíticos ou numéricos de solidificação, de acordo com a seqüência esquemática mostrada na Figura 4.5.

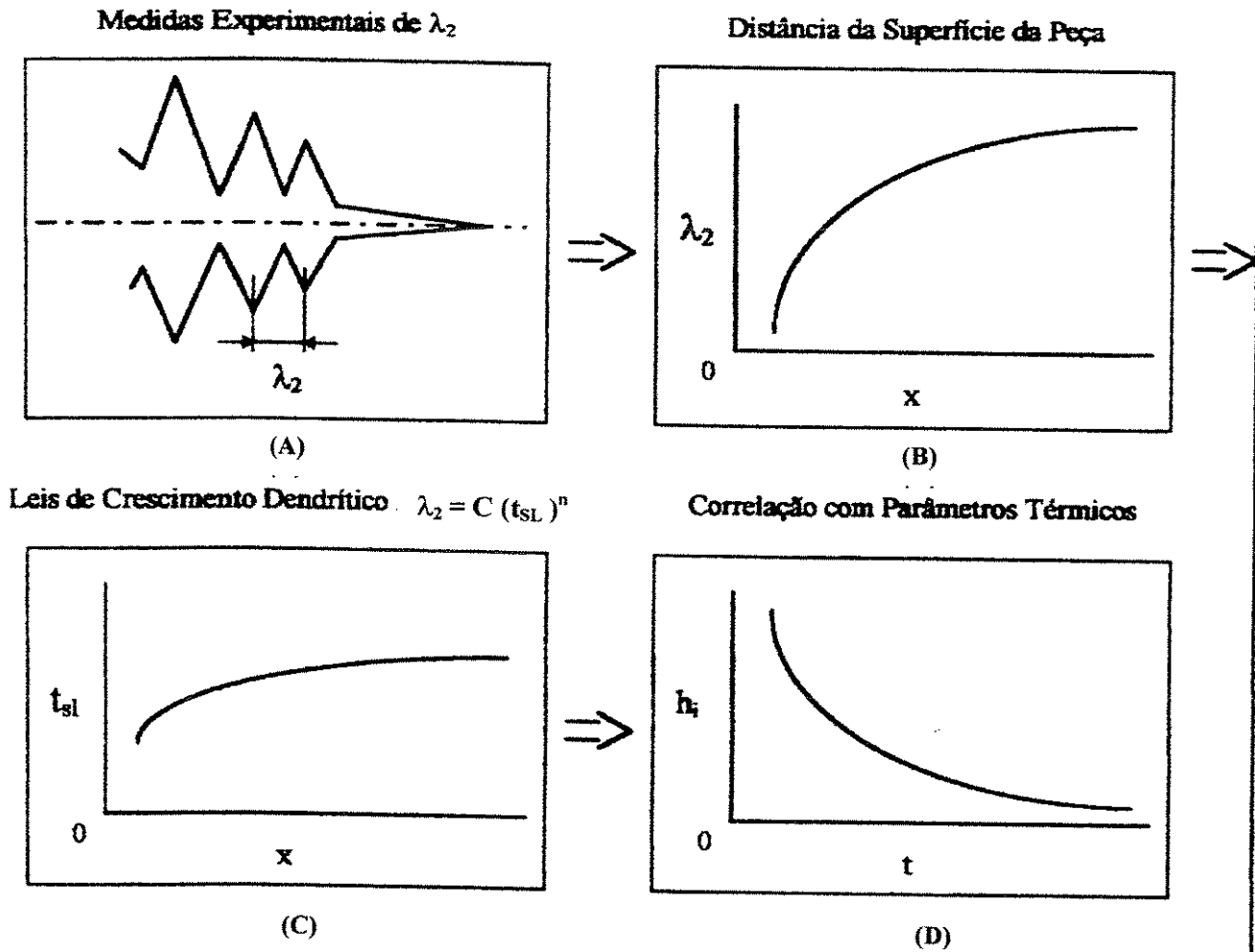


Figura 4.5 -Esquema da determinação experimental de h_i a partir de valores de λ_2 .

(A) Metalografia e medidas de λ_2 por microscopia óptica. (B) Variação de λ_2 da superfície ao centro da peça. (C) Variação de t_{SL} da superfície ao centro da peça e (D) Determinação de h_i a partir de valores de t_{SL} utilizando-se modelos matemáticos de solidificação.

A literatura mostra um exemplo de aplicação desse tipo de método na solidificação da liga Al-4,5%Cu em uma lingoteira de aço carbono. Os resultados indicaram um valor inicial de $h_i = 2500 \text{ W/m}^2\text{K}$ e que, após a completa formação do gap cai para cerca de $1000 \text{ W/m}^2\text{K}$ [Caram/Garcia,1995].

4.5 Determinação de h_i por meio de Medidas de Temperaturas e Vazão em Moldes Refrigerados

A aplicação tecnológica mais importante de moldes refrigerados consiste no resfriamento primário do processo de lingotamento contínuo de metais. A caracterização de um coeficiente global de transferência de calor entre a superfície do metal e o meio de refrigeração (h_g) é fundamental para que se possa analisar a evolução da solidificação nesses tipos de molde.

No caso específico dos moldes refrigerados dos equipamentos de lingotamento contínuo de aços, esse coeficiente deve ser tal que permita, na saída do molde, que o lingote apresente uma camada sólida suficientemente espessa, de tal forma a apresentar resistência mecânica suficiente para suportar as pressões do metal líquido e as tensões de extração do lingote. O coeficiente h_g é um importante parâmetro de projeto, uma vez que é um indicador da quantidade de calor extraída pelo molde. A Figura 4.6 mostra uma representação esquemática de um molde refrigerado, contendo todas as resistências térmicas à passagem de calor até o fluido de refrigeração.

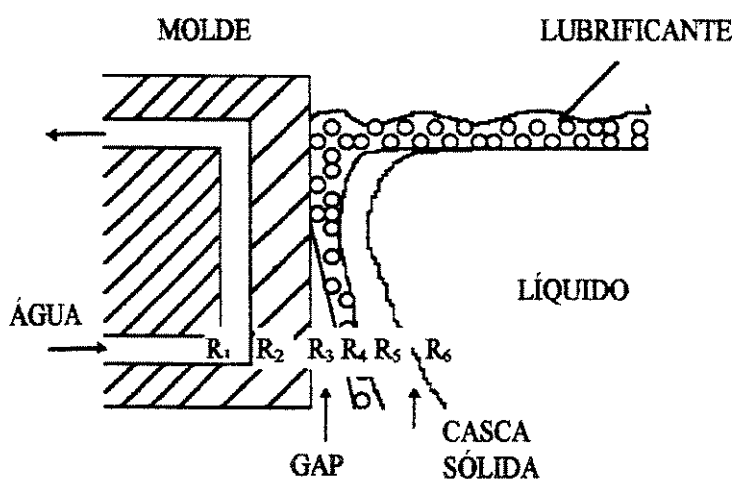


Figura 4.6 - Esquema ilustrando as resistências térmicas do sistema metal/molde com molde refrigerado.

A resistência térmica global R_g ($R_g = 1/h_g$), desde a superfície do lingote até o meio de refrigeração, pode ser expressa por:

$$R_g = \sum_{i=1}^4 R_i, \quad 4.11$$

onde R_1 ($R_1 = 1/h_1$) é a resistência térmica entre o fluido de refrigeração e a superfície do molde, e h_1 pode ser calculado por [Irving,1967],

$$\frac{h_1 \ell}{k_f} = 0,023(R_e)^{0,8} (Pr)^{0,4}, \quad 4.12$$

sendo:

$$h_1 = 0,023 \frac{k_f}{\ell} \left(\frac{\rho_f w_f \ell}{\eta_f} \right)^{0,8} \left(\frac{c_f \eta_f}{k_f} \right)^{0,4}, \quad 4.12a$$

onde: Re = número de Reynolds;

Pr = número de Prandtl;

k_f = condutividade térmica do fluido de refrigeração [W/m.K];

c_f = calor específico do fluido de refrigeração [J/kg.K];

ρ_f = massa específica do fluido de refrigeração [kg/m³];

η_f = viscosidade [kg/m.s];

w_f = velocidade do fluido de refrigeração [m/s]; e

ℓ = largura ou diâmetro do canal de refrigeração [m].

A resistência R_2 leva em consideração a espessura da parede do molde, e é dada pela mesma relação apresentada na Equação 4.5.

A resistência R_3 é decorrente da formação do *gap* de ar e, neste caso, pode ser expressa por:

$$R_3 = \frac{1}{A_T} \left(\frac{1}{h_{Gap} + h_R} \right) , \quad 4.13$$

com h_R e h_{Gap} , sendo obtidos pelas Equações 4.3 e 4.6, respectivamente, devendo-se, entretanto, tomar-se cuidado quanto às propriedades termofísicas envolvidas.

Existem duas grandes dificuldades que impedem uma avaliação precisa dessa resistência térmica. A primeira consiste no desconhecimento da evolução do *gap* ao longo do processo e, em segundo lugar, o desconhecimento das características físicas precisas dos gases que preenchem o *gap*.

A resistência térmica R_4 deve-se à camada de lubrificante ou de escória entre o lingote e o molde, e é dada por:

$$R_4 = \frac{X_{lb}}{k_{lb} A_T} , \quad 4.14$$

onde X_{lb} = espessura da camada de lubrificante [m]; e

k_{lb} = condutividade térmica do lubrificante [W/m.K].

As resistências R_3 e R_4 são as mais significativas, mas de qualquer forma a dificuldade de avaliá-las independentemente faz com que a determinação da resistência térmica global (ou de h_g) constitua o procedimento mais adequado.

Um balanço térmico apropriado permite que se estabeleça a seguinte relação:

$$h_g A_T (T_{is} - T_{mf}) = c_f (T_{fs} - T_{fe}) \dot{m} \quad , \quad 4.15$$

onde A_T = área de troca térmica [m^2];

T_{is} = temperatura da superfície do lingote [K];

T_{mf} = temperatura média do fluido de refrigeração [K];

T_{fs} = temperatura do fluido na entrada do circuito de refrigeração [K];

T_{fe} = temperatura do fluido na saída do circuito de refrigeração [K]; e

$\dot{m}$ - vazão do fluido de refrigeração [kg/s].

As medidas experimentais de T_{is} , T_{mf} , $\dot{m}$, T_{fs} e T_{fe} permitem a determinação de valores de $h_g = f(t)$ em qualquer sistema de fundição com molde refrigerado. No caso de lingotamento contínuo, a movimentação do lingote em relação ao molde impede a determinação experimental de T_{is} que deve, portanto, ser obtido indiretamente por modelos matemáticos de solidificação, para então permitir a avaliação de h_g .

Algumas medidas experimentais de h_g para a liga Al-4,5%Cu, em moldes estáticos de Cobre refrigerados a água, revelaram uma variação nos valores máximos de h_g entre $4500 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ e $3500 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ para a superfície interna do molde polida e *gap* preenchido, respectivamente, por hélio e ar [Quaresma,1986].

4.6 Determinação de h_i pelo Confronto Teórico/Experimental de Perfis Térmicos.

Outra forma indireta de determinação da condutância térmica metal/molde consiste em mapear experimentalmente as temperaturas em determinados pontos do molde e do metal ao longo da solidificação e, posteriormente, confrontar os perfis de temperatura ou curvas de resfriamento experimentais com as curvas teóricas simuladas por um modelo numérico de solidificação, que tenha sido prévia e devidamente aferido.

A Figura 4.7 ilustra uma seqüência deste procedimento, onde é mostrada a possibilidade da determinação tanto de valores médios quanto de valores variáveis com o tempo para a condutância térmica. Esse método de determinação de h_i em função da atual maior disponibilidade de ferramentas e de facilidades computacionais, é extremamente conveniente, principalmente quando se dispõe de um sistema de aquisição de dados para a monitorização experimental das temperaturas . Dentre os métodos citados neste trabalho, este é o único que permite também avaliar os coeficientes de transferência de calor nas zonas de resfriamento por " **sprays** " dos equipamentos de lingotamento contínuo[**Spim Jr.,1996**].

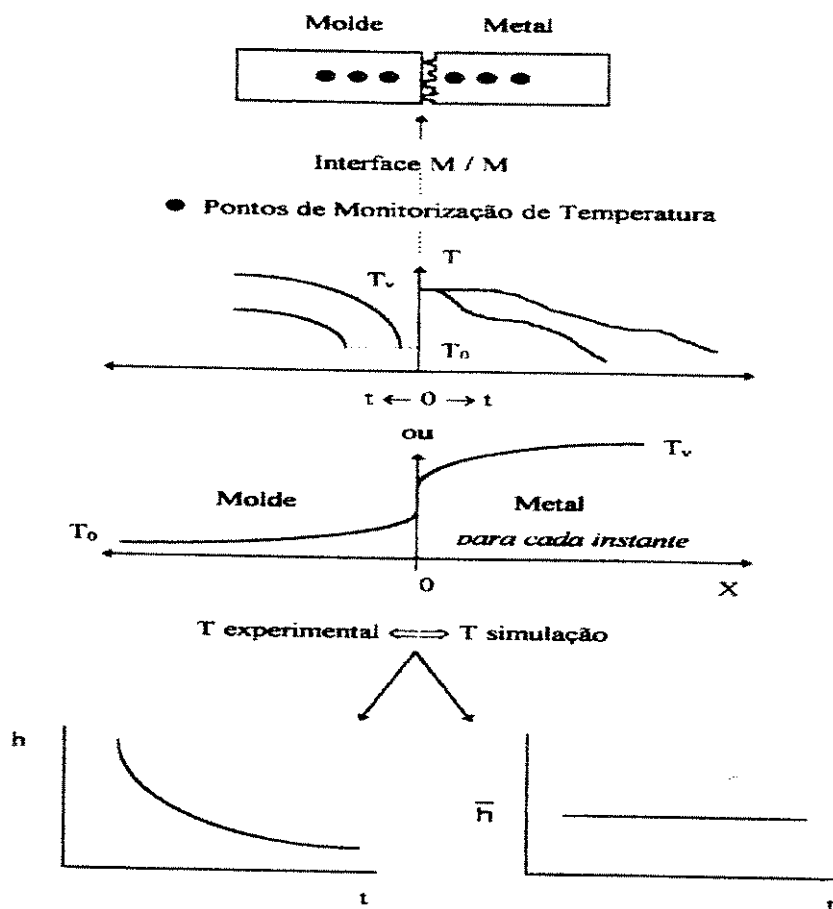


Figura 4.7 - Ilustração esquemática do procedimento para determinação de h_i através do confronto de Perfis Térmicos Experimentais e Simulados

Numa primeira avaliação, Spim Jr.[Spim Jr.,1996], empregando a história térmica de pares metal/molde utilizado nas empresas metalúrgicas LITEMA - Com. e Indústria de Ligas Téc. e Mat. Ltda. e FASA - ZINSEL INDUSTRIAL S.A., que produzem peças de aço inoxidável e ferro fundido cinzento, respectivamente, em moldes de areia, utilizou valores de $h_i = 800 \text{ W} / \text{m}^2 \text{ K}$, em um modelo de diferenças finitas obtendo boa concordância em seus resultados.

Como resultado de uma primeira avaliação Santos[Santos, 1997], empregando a técnica do confronto de perfis térmicos teóricos/experimentais, apresenta como resultados de seus trabalhos valores de h_i variáveis com o tempo, em condições tais

como: espessura de molde (50 e 06) mm e para a liga Sn- 10% Pb; a) molde de aço ($h_i = t^{-0,7623} \times 15.819$ e $h_i = t^{-0,1644} \times 10.663$); b) molde de cobre ($h_i = t^{-0,6716} \times 6.491$ e $h_i = t^{-0,2663} \times 14.034$) [W/m².K].

4.7 Interface Molde/Ambiente

Na maioria das abordagens analíticas da solidificação é comum tratar-se o molde como sendo semi-infinito, ou seja, a temperatura da superfície externa do mesmo não apresenta variação durante todo o processo de solidificação, mantendo-se em equilíbrio com a temperatura ambiente. Porém na prática, isto raramente acontece, já que temperatura externa da parede do molde aumenta consideravelmente durante o processo, principalmente em coquilhas. Isto deve-se ao fato de se utilizar moldes com paredes não muito espessas, objetivando reduzir custos do material para a sua confecção.

A Figura 4.8 mostra um esquema dos diferentes perfis de temperaturas para sistemas molde/ambiente em função da variação da espessura e do tipo de molde utilizado.

Como a temperatura da parede externa do molde não permanece igual à temperatura ambiente, é de se esperar uma variação nas taxas de transferência de calor por radiação e convecção para com o meio. Admitindo-se que a temperatura da superfície da parede externa do molde pode ser monitorada, pode-se calcular a taxa de transferência de calor desta superfície para o meio ambiente. Os mecanismos de transferência de calor que ocorrem na interface molde/ambiente podem ser vistos na Figura 4.9, onde se destaca a ação conjunta da radiação e da convecção atuando sobre a parede do molde. Porém, para determinar estas taxas, torna-se necessário conhecer-se os coeficientes de transferência de calor atuantes no processo, tanto para a radiação como para a convecção.

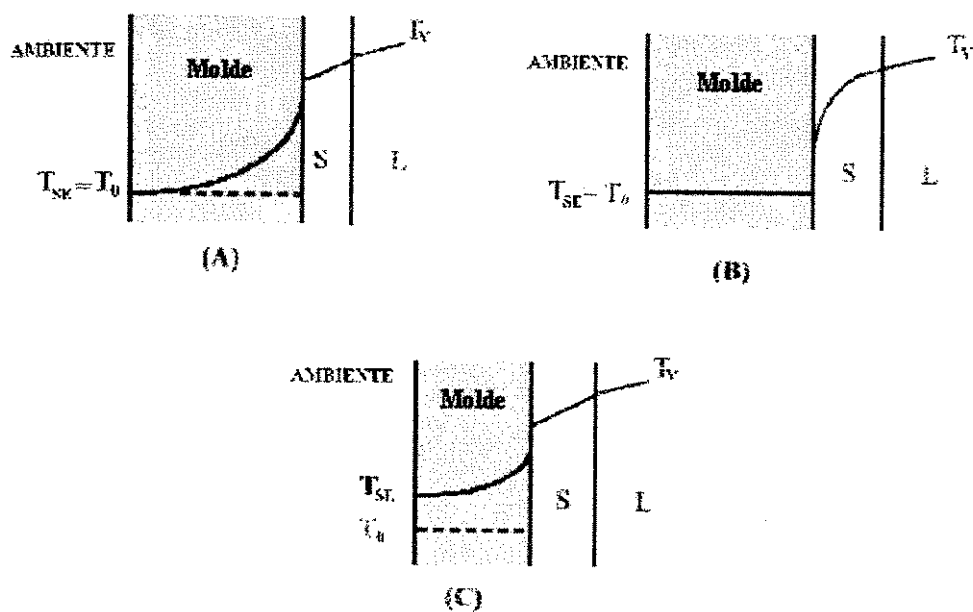


Figura 4.8 - Esquema de distribuição de temperatura através do molde (A) molde semi-infinito, (B) molde refrigerado e (C) molde com parede fina.

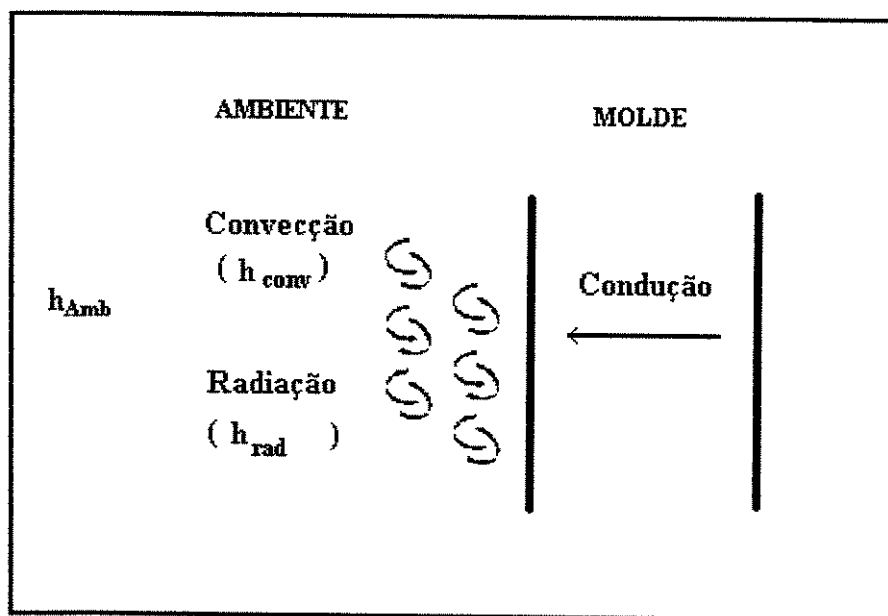


Figura 4.9 - Ilustração esquemática dos modos de transferência de calor na interface molde/ambiente

Para a interface molde/ambiente, pode-se estimar com cálculos analíticos o valor de h_{Amb} , dado por:

$$h_{\text{Amb}} = h_{\text{rad}} + h_{\text{conv}} , \quad 4.16$$

sendo h_{Amb} = coeficiente de transferência de calor no resfriamento da interface molde/ambiente [$\text{W}/\text{m}^2\cdot\text{K}$];

h_{rad} = coeficiente de transferência de calor por radiação [$\text{W}/\text{m}^2\cdot\text{K}$]; e

h_{conv} = coeficiente de transferência de calor por convecção [$\text{W}/\text{m}^2\cdot\text{K}$].

Para o cálculo do coeficiente radiativo e convectivo podem ser adotadas as Equações 4.3 a 4.4c, já vistas anteriormente.

Santos[Santos,1997], em trabalho no qual utilizou a liga Sn-10%Pb vazada em moldes de aço e de cobre com espessuras de 50mm e 06 mm, obteve as seguintes expressões para h_{Amb} em [$\text{W}/\text{m}^2\cdot\text{K}$]:

- Molde de aço com espessura de 6mm:

$$h_{\text{Amb}} = T_{\text{SE}}^{0,449} * 2,050 \quad 4.17$$

- Molde de cobre com espessura de 6 mm :

$$h_{\text{Amb}} = T_{\text{SE}}^{0,508} * 0,825 \quad 4.18$$

nas quais T_{SE} = temperatura da superfície externa do molde [K].

TABELA 4.1- Relação de equações e/ou valores do Coeficiente de Transfêrência de Calor na Interface Metal/Molde.

AUTORES	MÉTODO	MOLDE	MATERIAL metal / liga	EQUAÇÃO / VALOR DE h_i [W / m ² K]
SULLY (1976)	MDF Implícito, unidirecional	Aço, refrigerado	Alumínio $t = 15$ seg.	(1.130 a 1.200)
ROBERTSON / FASCETTA (1977)	Analítico Exato, unidirecional	Cobre	Estanho	15.500
		Aço	Estanho	5.250
GARCIA/PRATES (1978)	Cinética de Solidificação	Aço	Chumbo	4.900
				750
		Refrigerado	Alumínio	4.100
				610
GARCIA/CLYNE/ PRATES (1979)	Cinética de Solidificação	Aço	Chumbo	4.200
				750
GARCIA/CLYNE (1983)	Cinética de Solidificação	Aço	Chumbo	4.200
				750
		Aço	Estanho	7400
				1.200
			Al-4,5%Cu	4.400
				1700
	Medidas de EDS	Refrigerado	Al-15%Cu	1900
			Al-4,5%Cu	1.600
GARCIA/PRATES (1983)	Analítico Exato, unidirecional	Cobre refrigerado	Aço , 0,62% C	2.700
HO/PEHLKE (1983/1984/1985)	IHCP, unidirecional	Retangula, cobre, refrigerado	Alumínio	(2.250 a 1750)
			Cu-5%Al $t = 60$ seg.	≈ 1200
NISHIDA et alli (1986)	MDF Explícito	Cilíndrico	Alumínio	(2.800 a 1800)
			Al-13,2% Si $t = 30$ seg.	(2.500 a 800)
	MDF, bidimensional	Plano	Al-13,2% Si $t = 30$ seg.	(3.200 a 500) fechado (4.500 a 500) aberto
			Alumínio $t = 30$ seg.	(2.800 a 1.800) fechado (4.000 a 500) aberto
BAMBERGER et alli (1987)	MDF Explícito, unidirecional	Cilíndrico, aço, refrigerado.	Al-7,5%Si e Al-9,7%Si $\Delta T = 20^{\circ}\text{C};$ $\Delta T = 130^{\circ}\text{C};$ $\Delta T = 250^{\circ}\text{C}$ $t = 60$ seg.	(2.700 a 800) (3.000 a 1.200) (4.500 a 1280)
STEFANESCU et alli (1990)	MEF, unidirecional	Areia	Eutético Al-Si	$h = a \exp (bT)$ $a = 0,081002$ $b = 0,012156$
			Ferro Fundido	334,9
THEVOZ et alli (1989)	MDF Implícito		Al-7%Si	1.000
CHIESA (1990)	IHCP, unidirecional	Ferro Fundido	A 356	1.850
KRISHNAN/SHARMA (1991)	IHCP, unidirecional	Ferro Fundido, refrigerado	Al-11,49%Si $t = 60$ seg.	(1.800 a 1.200)
EL- MAHALLAWY/ASSAR (1991)	MDF Explícito, unidirecional	Cobre, refrigerado	Alumínio $\Delta T = 40^{\circ}\text{C};$ $\Delta T = 115^{\circ}\text{C};$ $t = 150$ seg.	(9.000 a 2.800) (12.000 a 6.000)
NIYAMA/ANZAY (1992)	Analítico Exato, unidirecional	Ferro	Ferro	(1.100 a 1.000)
REDDY / BECKERMANN (1993)	MVF, unidirecional	Cobre, refrigerado	Estanho	3.750
			Sn-10%Pb	4500
			Eutético	3000

TABELA 4.1- Relação de equações e/ou valores do Coeficiente de Transfêrência de Calor na Interface Metal/Molde.(continuação)

MOUJEKWU et alli (1995)	IHCP	Cobre, refrigerado		Al-7%Si ΔT = 30°C t = 50 seg.	(450 a 600) Mínimo (4.000 a 2.000) Máximo
CARAM/GARCIA (1995)	Medidas de EDS	Aço		Al-4,5%Cu	(2.500 a 1000)
LEE et alli (1995)	MVF, bidirecional	?		Alumínio	≥ 10.000
QUARESMA/SOEIRO (1986)	Medidas de Temperaturas e Vazão em Moldes refrigerados	Cobre refrigerado		Al-4,5% Cu	(4.500 a 3.500)
QUARESMA et alli (1996)	MDF Explícito, unidirecional Confronto de Perfis Térmicos	Aço	Lixado	Sn-10%Pb	780
			Pintado		550
SANTOS et alli (1996)	MDF Explícito, unidirecional Confronto de Perfis Térmicos		Pintado	Al-4,5%Cu	(4.500 a 500)
			Polida		(5.000 a 1.000)
			Pintado	Al-15%Cu	(6500 a 600)
			Polida		(13.000 a 1.000)
SPIM Jr. (1996)	MDF Explícito, unidirecional Confronto de Perfis Térmicos	Areia		Aço Inoxidável	800
				Ferro Fundido	
KRISHNAN/SHARMA 1996	IHCP, unidirecional	Ferro, refrigerado		Al-11,49% Si Al-Cu/ Si Al-2,7% Si	(3.000 a 1.000)
SANTOS (1997)	MDF Explícito unidirecional Confronto de Perfis Térmicos	Aço	50 mm	Sn-10% Pb	$t^{0,7623} \cdot 15.819$
			06 mm		$t^{0,1644} \cdot 10.663$
		Cobre	50 mm	Sn-10% Pb	$t^{0,6716} \cdot 6.419$
			06 mm		$t^{0,2663} \cdot 14.034$

IHCP - Inverse Heat Conduction Problem; MDF - Método de Diferenças Finitas; MEF - Método de Elementos finitos; MVF - Método de Volumes Finitos.

Capítulo 5

5 ANÁLISE EXPERIMENTAL

A análise experimental deste trabalho pode ser apresentada em duas grandes etapas: uma que trata da determinação dos coeficientes de transferência de calor molde/ambiente (h_{Amb}) e metal/molde (h_i) e outra, que trata da determinação da relação entre os parâmetros operacionais experimentais como: gradiente térmico, taxa de resfriamento e velocidade da interface sólido/líquido, e os respectivos parâmetros estruturais que, neste caso, estão representados pelos espaçamentos dendríticos secundários (EDS) e limites de resistência à tração (σ_u).

Estas etapas, entretanto, tiveram arranjo experimental comum que pode ser identificado como:

5.1 Aparato experimental de uso comum

a) acessórios e equipamento para obtenção das ligas

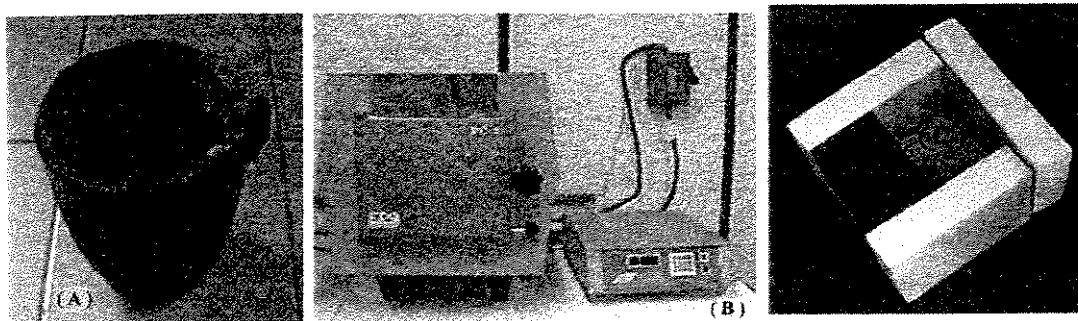


Figura 5.1 - Cadinho de grafita (A), Forno elétrico (B) utilizado na fusão das ligas e Cavidade de vazamento (C) destinada a receber o metal líquido.

Cadinho de grafita modelo AS 6 da Carbosil, revestido internamente com camada consistente de uma suspensão à base de alumina, para evitar contaminação do banho de metal líquido, além de preservá-lo por mais tempo.

Forno tipo mufla, marca EDG, temperatura máxima 1000 °C, com interior revestido de placas refratárias e controle processado de temperatura.

Cavidade de vazamento, constituída por uma parede metálica envolta por paredes refratárias, proporcionando extração de calor de forma unidirecional.

b) acessórios e equipamento para controle das temperaturas

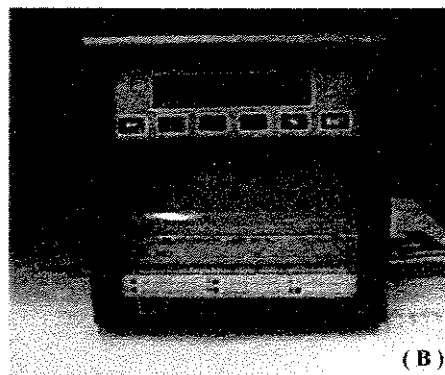
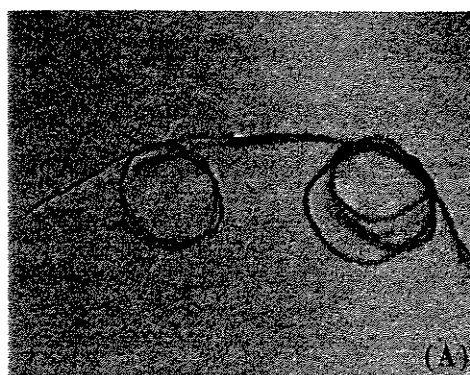


Figura 5.2 - Termopar (A) e Registrador gráfico de temperaturas (B) utilizados no registro das temperaturas envolvidas nos experimentos.

- **Termopares ou termoelementos:** os tipos de termopares comumente usados são identificados por letras segundo I.S.A (Instrument Society of America) e adotado como padrão americano na ANSI C96 - 1964. As temperaturas foram registradas com o auxílio de termopares de diâmetro(= 1,5mm) do **tipo J**, na interface molde/ambiente, e **tipo K**, nas outras posições monitoradas.

Tipo J : Ferro (+) - Constantan (-) ou Fe-CuNi

Faixa de utilização: (-190 a 870)°C $\equiv$ (-7,659 a 49,989) mV

Potência Termoelétrica: (5,74 mV / 100 °C)

Tipo K : Chromel (+) - Almel (-)

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

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

- **Registrador Gráfico de Temperaturas**, marca ALMEMO, modelo MT 566 com possibilidade de programação da leitura e plotagem térmica direta de seis (06) canais simultaneamente ao longo do tempo, todos com diferentes escalas de temperaturas e regulagem da velocidade de impressão gráfica. Fato de extrema relevância quando necessário monitorar diferentes posições do sistema em estudo.

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.

5.2 Aparato experimental para determinação de h_{Amb} e h_i

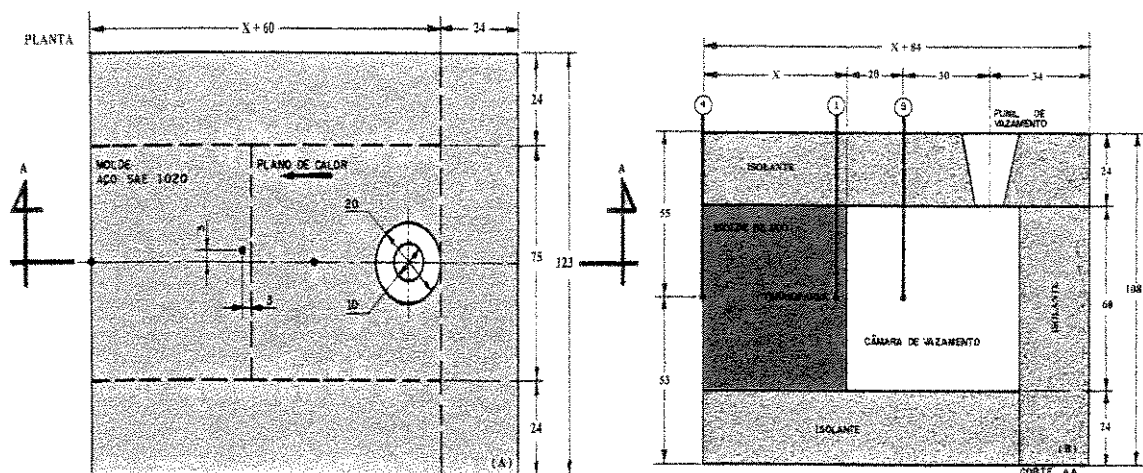


Figura 5.3 - Esquema ilustrativo da sistema metal/molde (A) vista superior evidenciando o plano de calor da leitura térmica e a posição dos termopares relativa ao molde e (B) vista lateral do sistema com ênfase para a espessura do molde; posição e profundidade dos termopares e funil e câmara de vazamento.

- **Molde de aço SAE 1030;** a escolha desse material, para construção da única parede do sistema que atuaria como absorvedor de calor, foi feita de forma comparativa após repetidos vazamentos com uma parede de cobre, com base na melhor e maior unidirecionalidade microestrutural proporcionada e a grande quantidade de trabalhos que utilizam coquilhas de aço. As outras paredes foram todas construídas com material isolante à base de sílica para garantir máxima a carga térmica retirada através da parede metálica ou molde e mínima através das paredes isolantes. A posição do orifício cônico na tampa superior próximo a parede oposta à parede metálica tem a finalidade de minimizar a turbulência causada devido ao vazamento de metal líquido, que seria maior se o fluxo de metal líquido ocorresse mais próximo à parede metálica. Foram utilizadas cinco espessuras para as paredes metálicas, a saber: $(X = 6; 17; 18; 39 \text{ e } 50) \text{ mm}$, cuja situação de acabamento das superfícies externas foi obtida por usinagem com fresa de topo e posterior acabamento por lixamento com lixa d'água n.º 120. O furo, para posicionamento dos termopares de diâmetro(= 1,5mm), feito nas paredes metálicas com broca de diâmetro(= 1,6mm), além de obedecer à posição relativa à interface metal/molde de 3mm, apresenta profundidade(=55mm) a

partir do topo da parede superior de refratário ou ($\approx 31\text{mm}$), tomada do topo da parede metálica, conforme ilustrado na Figura 5.3.

- **Materiais utilizados;** a escolha do sistema Sn-Pb na investigação da variação de h_i deve-se ao fato do mesmo ser um eutético simples, apresentar temperaturas líquidas relativamente baixas, fato que facilita as operações de fusão e posterior vazamento; apresenta intervalos de solidificação bastante variáveis, característica que permite investigar efeitos de superaquecimentos também variáveis, abrindo um pouco mais o espectro de resultados e, o mais importante, as propriedades termofísicas das ligas hipoeutéticas são conhecidas. Todas as ligas utilizadas nos experimentos foram analisadas termicamente, como pode ser visto na Figura 5.4.

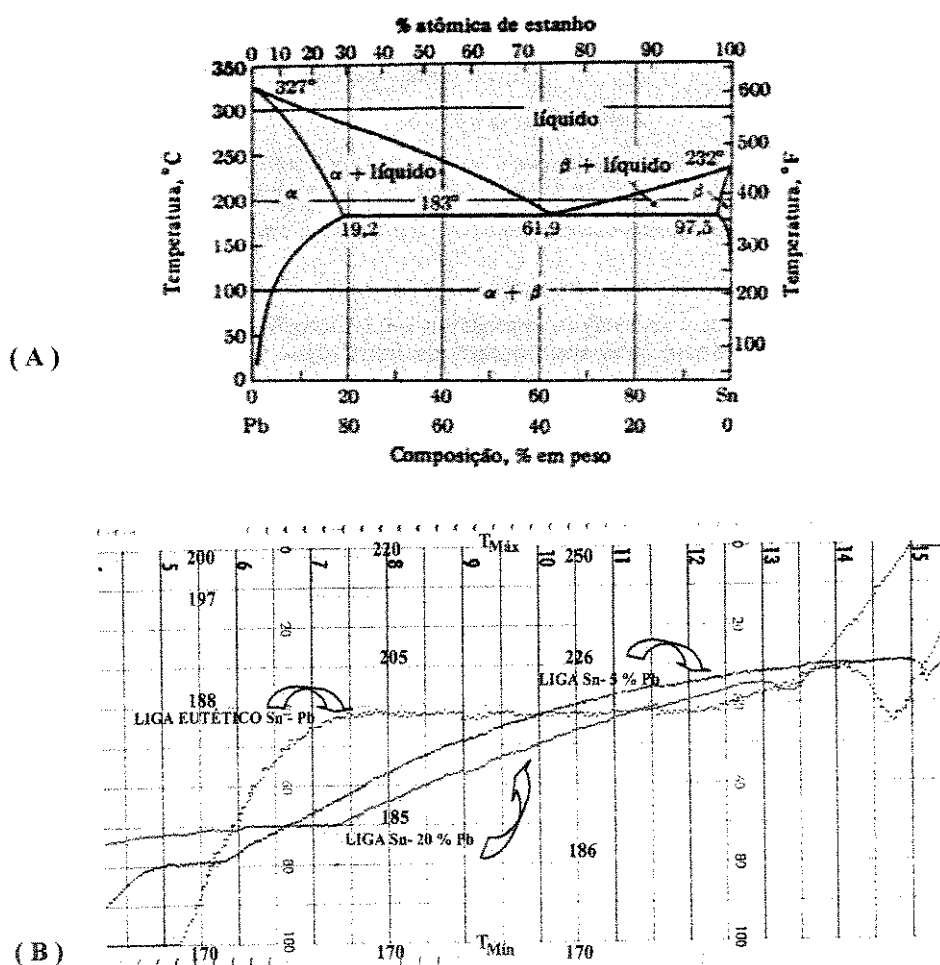


Figura 5.4 - Diagrama de Equilíbrio do sistema Sn-Pb (A) [Van Vlack,1984] e Curvas de resfriamento de três ligas do sistema Sn-Pb (B) obtida para qualificar quimicamente as ligas utilizadas e velocidade de impressão ($= 600\text{ mm / h}$).

Também optou-se por ligas do sistema Al-Cu, devido à grande importância que este sistema apresenta nas indústrias mecânica e metalúrgica, apesar de apresentar níveis de temperaturas de trabalho mais elevados do que o verificado no sistema Sn-Pb.

Especificamente, esses sistemas foram investigados conforme o seguinte detalhamento :

- Sn-Pb, na forma das ligas Sn-5%Pb; Sn-10%Pb; Sn-20%Pb, Sn-38,1%Pb; e na forma de seus elementos puros Sn e Pb.
- Al-Cu, na forma das ligas Al-4,5%Cu; Al-15%Cu; Al-33%Cu e na forma do elemento puro Al.

5.3 Aparato experimental para determinação de EDS e σ_u .

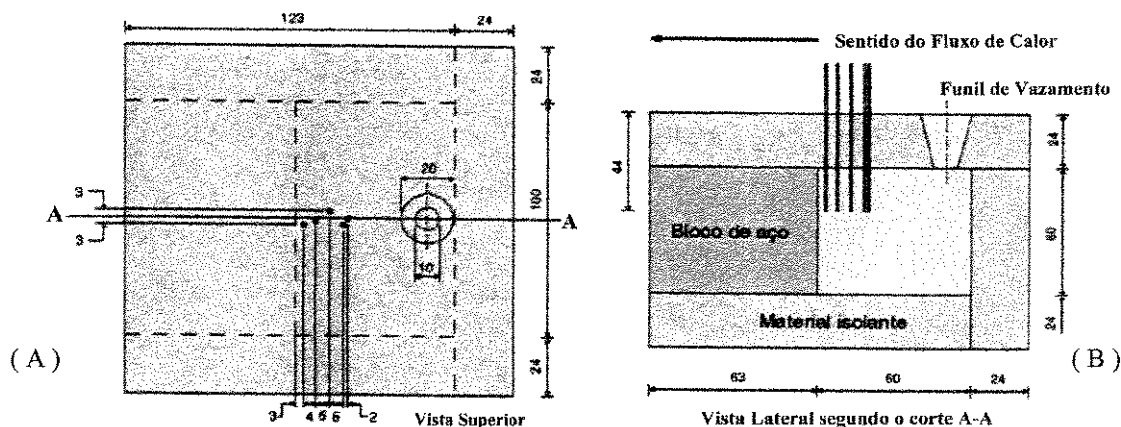


Figura 5.5 - Esquema ilustrativo do sistema metal/molde (A) Vista Superior com destaque para a posição dos termopares no metal relativa a interface metal/molde e (B) Vista lateral destacando o alcance da profundidade da leitura térmica.

- **Molde de aço SAE 1010**, com espessura fixa (= 63 mm), com características de acabamento superficial semelhante àquelas descrita no item 5.2.

- **Neophyt - 32, Zeiss / Gena**; equipamento utilizado na análise metalográfica e na medição dos EDS quando associado ao Software **Q500 MC - Leika Cambridge Ltda.**
- **MTS - Test Star II**, equipamento utilizado na execução dos ensaios de tração em corpos de prova segundo a norma **NBR - 6152** e **ASTM E - 8M**, retirados dos blocos fundidos e posterior usinagem.
- **Materiais utilizados:**

As ligas Al- 4,5% Cu e Al- 15% Cu, apresentam excelente base de estudos de suas propriedades mecânicas pelas seguintes características adicionais:

- melhores condições de lixamento, polimento e ataque químico para análise metalográfica;
- o cobre, como elemento de liga, apresentar excelente condição de inibidor da solubilização do hidrogênio, em ligas à base alumínio (muito melhor do que o silício por exemplo). A Figura 5.6 apresenta informações básicas para o desenvolvimento dos operações de laboratório.

Gás argônio; a presença de poros em peças metálicas fundidas, em particular em peças fundidas de ligas de alumínio, deve ser evitada pois diminui significativamente suas propriedades mecânicas, especialmente a resistência à fadiga e a ductilidade. Em alguns casos, produzem péssimo acabamento superficial quando usinadas ou polidas, fato que tem preocupado estudiosos metalúrgicos ao longo do tempo. O problema da porosidade em fundidos é decorrente da presença de gases nos metais em elevadas temperaturas, causada principalmente pela elevada solubilidade que apresentam quando em presença de metais no estado líquido. Em alguns casos de metais no estado líquido, essa característica cresce drasticamente com pequenas variações de temperatura. No alumínio líquido, por exemplo, o limite de solubilidade do hidrogênio é 0,68ml / 100g e é 20 vezes maior do que no alumínio sólido que é

0,037ml / 100g no ponto de fusão, como pode ser visto na Figura 5.7. As investigações com superaquecimento variável devem estar apoiadas em informações dessa natureza.

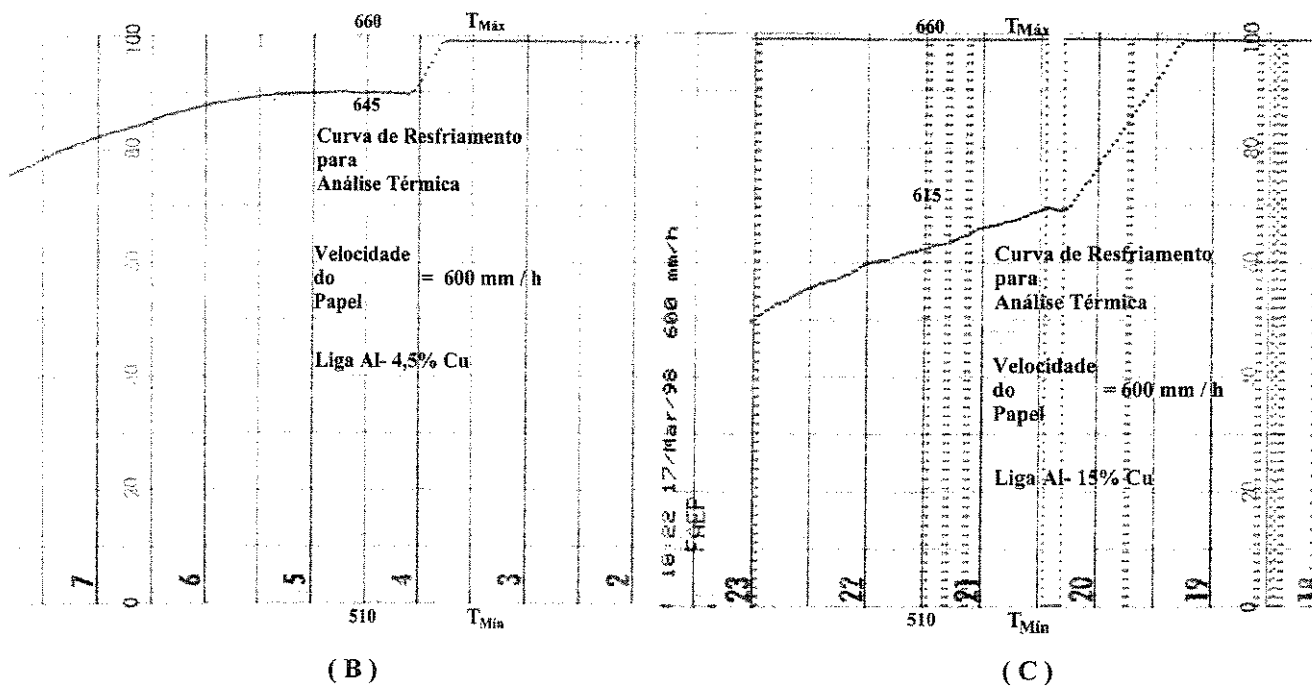
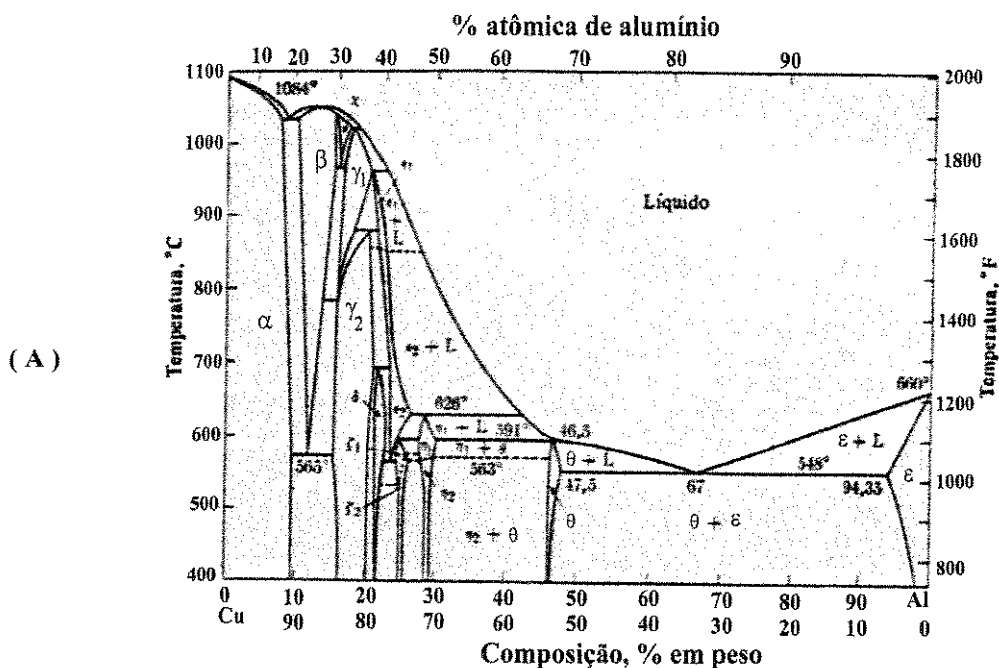


Figura 5.6 - Diagrama de equilíbrio do sistema Al-Cu [Van Vlack,1984] (A) e as Curvas de Resfriamento utilizadas para quantificar e qualificar das duas ligas estudadas (B) liga Al- 4,5% Cu e (C) liga Al- 15% Cu.

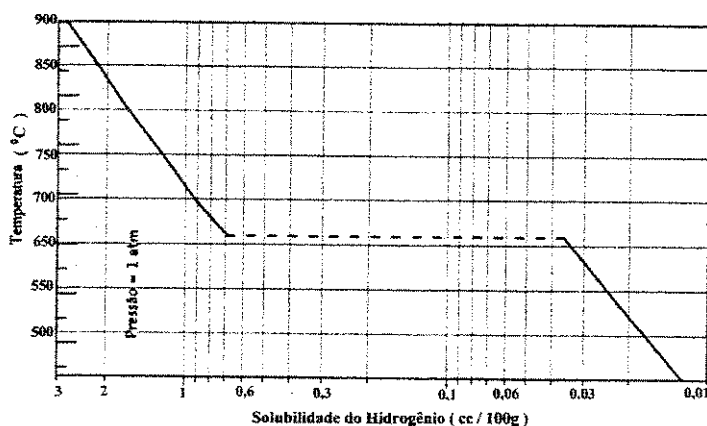


Figura 5.7 - Solubilidade do hidrogênio no alumínio em função da temperatura[Zoqui,1995].

Desta forma, torna-se muito importante identificar as fontes dos gases para se poder evitar o máximo possível sua presença. O gás com maior solubilidade no alumínio é o hidrogênio. Os outros gases (oxigênio e nitrogênio) são menos solúveis e mais rapidamente expulsos, e sua origem é a umidade do ar atmosférico. Entretanto, não podem ser descartadas as fontes como: altas temperaturas do metal líquido, refinadores de grão e sucatas ao serem refundidas, que, na maioria das vezes, estão impregnadas com óleo lubrificante. A presença de hidrogênio durante a solidificação é inevitável porém factível de ser minorada e a única maneira de se conseguir isto é reduzindo o seu teor no metal líquido. Dentre os vários métodos com esta finalidade, destaca-se o da degaseificação, que é feito através da infiltração de outro gás com menor solubilidade no banho de metal líquido, caso do argônio, que injetado no banho arrasta o hidrogênio para a escória na superfície do banho.

5.4 Desenvolvimento experimental para determinação de h_{Amb} e h_i .

A determinação dos resultados de interesse na análise comparativa foi feito com o auxílio de um aparato experimental, muito simples, constituído de um molde com geometria retangular, no qual foi provocado fluxo de extração de calor unidirecional devido à elevada condição de extração de calor de uma das faces, que foi construída de aço carbono comum, em relação às outras cinco, constituídas todas de material altamente isolante, como pode ser visto na Figura 5.1C.

O procedimento no ato do vazamento do metal líquido em todas as oportunidades obedeceu à sistemática de se apoiar o cadinho na borda superior da parede do molde, próxima ao orifício de vazamento, com o duplo objetivo de minimizar ao máximo possível a turbulência no metal líquido e garantir condições mínimas de repetibilidade operacional.

Apoiados no método do confronto de perfis térmicos teóricos/experimentais, conforme já descrito no capítulo 4 deste trabalho, e com o objetivo de determinar os coeficientes de transferência de calor h_{Amb} e h_i , levou-se a efeito as atividades de laboratório, nas quais se buscou investigar o maior número de informações possível. No entanto, para a simulação, admitiram-se condições iniciais necessárias para a melhor representação do sistema real, tais como:

- preenchimento instantâneo do molde;
- propriedades termofísicas da liga variando com a temperatura dentro da região sólido/líquido;
- propriedades constantes para o material do molde; e
- “gap” de ar formado instantaneamente após o preenchimento da cavidade do molde.

5.4.1 Procedimento experimental com molde de espessura variável.

Estas experiências consistiram de vazamentos com a liga **Sn- 10% Pb** com temperatura de vazamento $T_V = 1,2.T_L$ ou superaquecimento $\Delta T \equiv 40^\circ\text{C}$ acima da temperatura liquidus $T_L = 210^\circ\text{C}$, desta liga. As condições relativas do metal e do molde, como as posições dos termopares, encontram-se ilustradas na Figura 5.3 e, como já foi dito, obedeceram às mínimas possibilidades unidirecionais de extração de calor: espessuras do molde com valores iguais a $X = (6; 17; 28; 39 \text{ e } 50) \text{ mm}$ e câmara de vazamento com volume constante e espessura (**60mm**).

5.4.2 Procedimento experimental com superaquecimento (ΔT) variável no metal líquido.

Neste caso repetiu-se a liga **Sn- 10% Pb** e o molde com espessura $X = 50 \text{ mm}$, por ter apresentado melhor concordância entre as curvas dos perfis térmicos teóricos/experimentais comparados, como pode ser visto na Figura 6.5B, indicativo de maior unidirecionalidade no fluxo de extração de calor do metal pelo molde. Os superaquecimentos adotados foram $\Delta T = (20; 40; 70 \text{ e } 100)^\circ\text{C}$.

5.4.3 Procedimento experimental com variação na composição química.

Esta etapa das atividades laboratoriais foram divididas em dois ramos distintos:

(A) sequência experimental que teve por base o molde com espessura $X = 50 \text{ mm}$ e superaquecimento $\Delta T = 0,2T_L(=T_F)$, cuja repetição está apoiada no fato de resultados iguais aos apresentados por $\Delta T = 0,1T_L(=T_F)$, que podem ser vistos nas Figuras 6.5A. e 6.5B. As composições químicas utilizadas estão representadas pelas ligas **Sn- 5% Pb; Sn- 10% Pb; Sn- 20% Pb; Sn- 39,1% Pb e estanho puro.**

(B) sequência experimental que teve por base o molde com espessura $X = 63 \text{ mm}$, superaquecimento $\Delta T = 0,1T_L(T_F)$ e injeção de argônio como forma de inibir a presença de poros na estrutura do fundido por ação do hidrogênio. Neste caso, adotou-se o sistema **Al-Cu** como base nestas experiências na forma das ligas **Al- 4,5% Cu e Al- 15% Cu; Al- 33,2% Cu e o Alumínio puro.** A espessura do molde adotada tem por finalidade garantir a unidirecionalidade mínima no fluxo de extração de calor, assim como o superaquecimento deve-se às condições mínimas aceitáveis para se trabalhar com a solubilidade do hidrogênio no alumínio como pode ser visto na Figura 5.7. Posteriormente procedeu-se a vazamentos com o **alumínio (Al)** com $\Delta T \cong 0,2.T_F$ para efeito de avaliação deste elemento quando submetido a superaquecimentos diferentes.

Todos os vazamentos do sistema Al-Cu em presença do molde de aço com 63 mm de espessura sofreram injeção de argônio, numa vazão de 2 litros / minuto, durante 15 minutos, como forma de inibir a ação do hidrogênio.

5.5 Procedimento experimental para determinação de EDS e σ_u .

A partir do lingote solidificado com as ligas Al- 4,5% Cu e Al- 15% Cu, foram então extraídos os corpos de prova para ensaio de tração e também amostras para análise metalográfica, segundo as posições indicadas na Figura 5.8. Os corpos de prova extraídos foram usinados para atender às dimensões conforme as normas NBR - 6152 e ASTM E -8M tais como ilustrado na Figura 5.9, e posteriormente submetidos a

ensaio de tração, num equipamento de ensaio MTS - Test Star II. Para cada uma das dez posições, foram utilizados quatro corpos de prova. Assim, os valores do limite de resistência à tração utilizados representam uma média dos valores obtidos no ensaio para os corpos de prova em cada posição. Torna-se relevante adicionar que foi escolhido o ensaio de tração por ser um ensaio que permite extrair um conjunto significativo de informações em relação ao comportamento mecânico do material.

A análise metalográfica das amostras visou o mapeamento dos espaçamentos dendríticos secundários (λ_2 ou EDS) ao longo do lingote, a partir da face em contato com o molde até a extremidade final solidificada, como ilustrada na figura 5.8. As amostras foram devidamente lixadas e atacadas eletroliticamente com eletrólito de composição 800 ml de etanol, 40 ml de água destilada e 60 ml de ácido perclórico (HClO_4) por 15 segundos, como forma de garantir boa qualidade de acabamento superficial e de imagem. Foram observados e analisados os espaçamentos dendríticos, com o auxílio do microscópico óptico Neophot - 32 . As medidas do EDS foram realizadas, utilizando-se o software, Q500 MC - Leica Cambridge Ltda, interconectado ao microscópio . Essas medidas foram realizadas de forma sistemática e repetidas. Por exemplo, a uma distância de 13 mm a partir da face do lingote em contato com o molde, foram feitas medidas nas distâncias 12, 13 e 14 mm, num total de 30 medidas (10 para cada uma), das quais foi extraído um valor médio.

A Tabela 5.1 apresenta a relação das propriedades termofísicas dos materiais investigados, empregadas no modelo numérico de diferenças finitas utilizado para simular os perfis térmicos teóricos para efeito dos confrontos com os perfis térmicos experimentais.

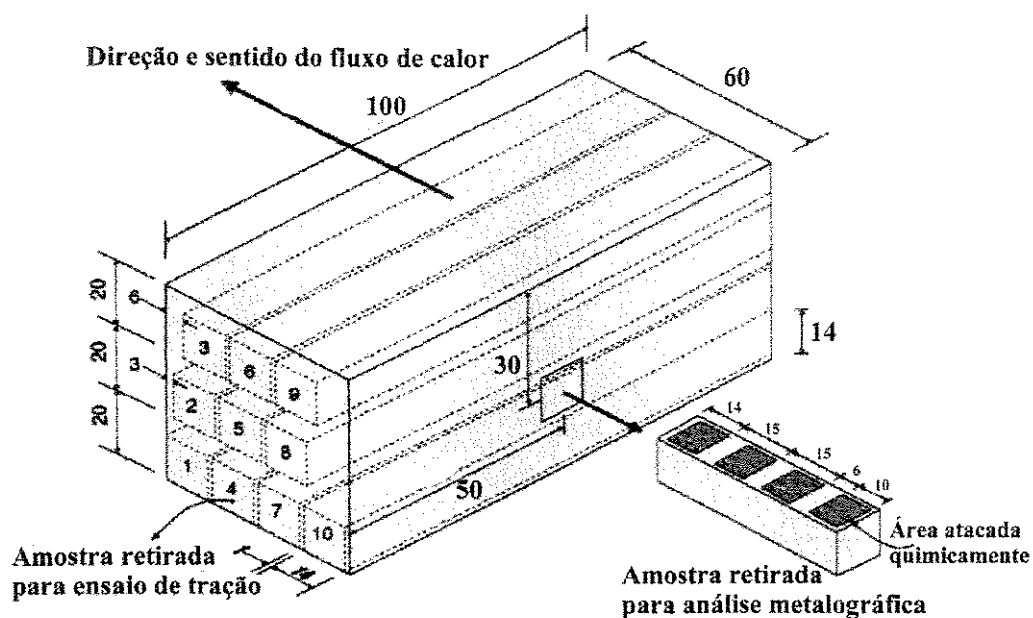


Figura 5.8 -Esquema ilustrando a localização da retirada dos corpos de prova para ensaios de tração e análise metalográfica enfatizando a direção e sentido da retirada do fluxo de calor.

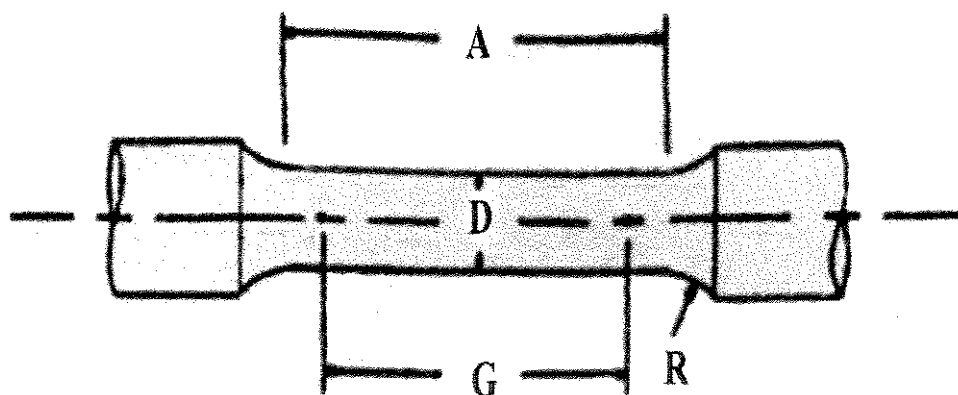


Figura 5.9 - Corpo de prova para ensaio de tração produzido segundo norma ASTM E 8M, no qual $A = 36 \text{ mm}$; $D = R = 6 \text{ mm}$ e $G = 30 \text{ mm}$.

Tabela 5.1 - Características termofísicas dos materiais investigados [Touloukian,1970; Mondolfo,1976; Pehlke,1990; Berry,1991; Hammouda,1992; Bouchard/Kirkaldy,1997].

	Al	Al- 4,5%Cu	Al- 15%Cu	Est. AlCu	Aço SAE 1010	Pb	Est. SnPb	Sn- 20%Pb	Sn- 10%Pb	Sn- 5%Pb	Sn	Aço SAE 1030	Estado de Agregação
Condutividade Térmica	222	193	179	155	46	34,7	54,7	59	63	64	67	52	Sólido
K (W/m.K)	92	85	80	71		29,7	31,7	32	33	33	33		Líquido
Calor Específico	1.123	1.092	1.080	1.070	527	129,8	186,2	200	209	221	221	469	S
C_p (J/kg.K)	1.086	1.059	999	895		138,2	212,9	231	243	259	259		L
Massa Específica	2.550	2.650	2.910	3.410	7.860	11.340	8.840	8.250	7.840	7.720	7.300	7.860	S
ρ (kg/m ³)	2.380	2.480	2.760	3.240		10.678	8.400	7.860	7.480	7.380	7.000		L
Difusividade Térmica	7,75	6,67	5,67	4,25		2,37	3,35	3,58	3,84	3,91	4,15		S
α (m ² /s).10 ⁻⁵	3,36	3,24	2,90	2,45		2,04	1,79	1,76	1,81	1,82	1,82		L
Calor Latente de Fusão L (J / kg)	385.000	381.900	274.270	350.000		26.205	47.560	52.580	56.140	57.120	60.710		S/L
Difusividade Química D_L (m ² / s)		$3,5 \times 10^{-9}$	$3,5 \times 10^{-9}$										S/L
Energia de Superfície σ_{SL} (J / m ²)		$1,7 \times 10^{-5}$	$1,7 \times 10^{-6}$										S/L
Coef. de Distr. de Soluto K_0		0,17	0,17					0,0656	0,0656	0,0656			

Capítulo 6

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES.

6.1 Determinação dos Coeficientes de Transferência de Calor na Interface Molde / Ambiente (h_{Amb}).

As informações para a determinação dos valores dos coeficientes de transferência de calor na interface molde / ambiente foram coletadas por meio de leituras térmicas obtidas dos termopares posicionados nesta interface, rente ao molde, como pode ser visto na Figura 5.3. Tais leituras permitiram a obtenção de gráficos, como os ilustrados na Figura 6.1, onde são também observadas as curvas de resfriamento para os pontos no molde assim como as condições operacionais sob as quais foram obtidas, para as cinco espessuras estudadas.

Pode-se notar que, para a menor espessura, a saturação do molde é imediata, o que faz com que o progresso da solidificação dependa fortemente das condições de troca de calor com o meio ambiente, com o molde atuando mais como veículo de transporte do que realmente como um absorvedor de calor.

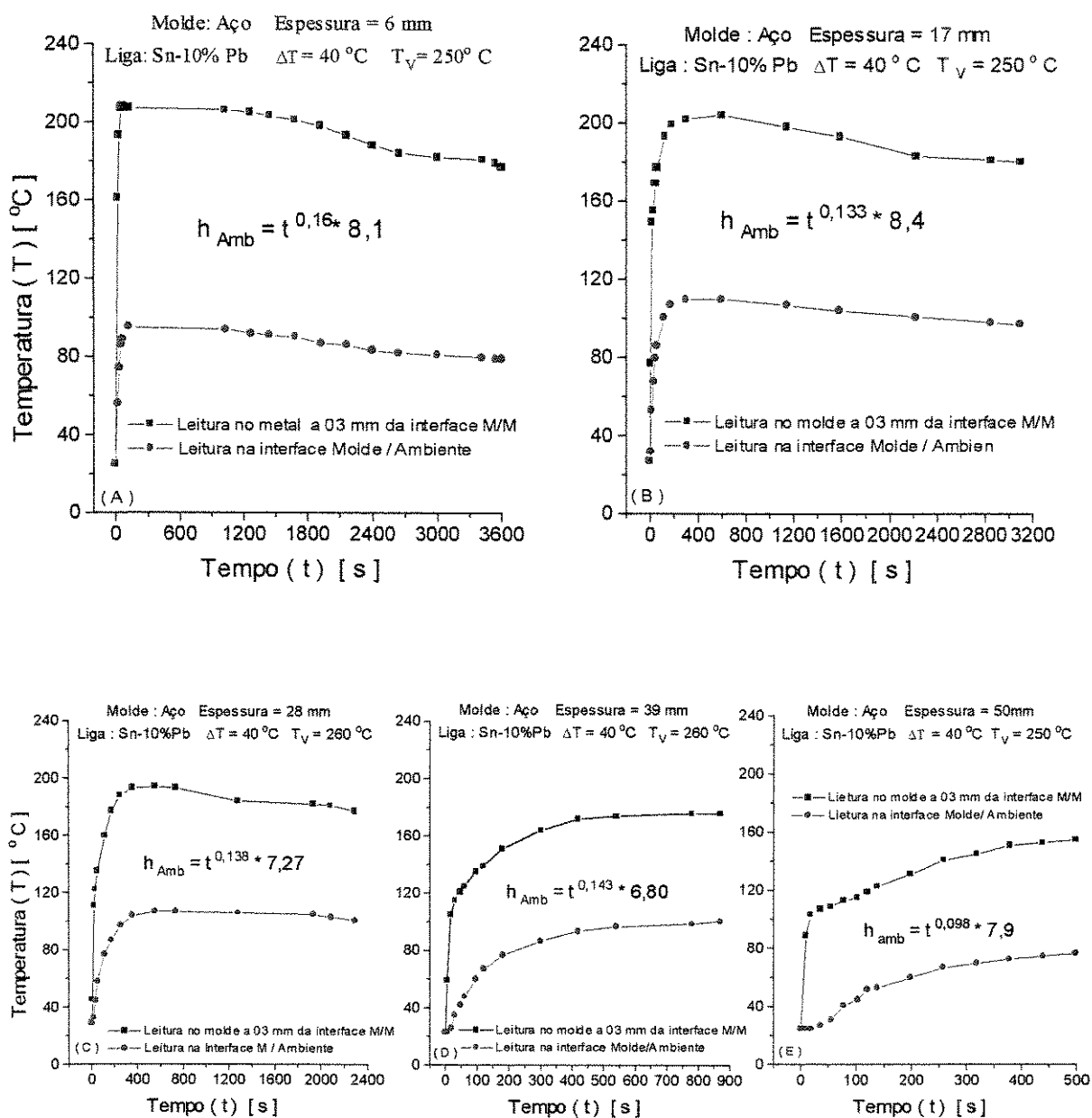


Figura 6.1 - Perfis térmicos obtidos para a liga Sn- 10% Pb para espessuras variáveis de molde de aço (A) 06 mm; (B) 17 mm; (C) 28 mm; (D) 39 mm e (E) 50 mm.

Nestas condições, a correta avaliação de h_{Amb} é fundamental para a modelagem matemática do processo.

Os dados experimentais submetidos ao elenco de equações que compõem o modo analítico para determinar este coeficiente, conforme descrito no capítulo 4

(item 4.1) permitem obter as curvas que retratam os valores destes coeficientes como uma função do tempo para as diferentes espessuras de molde estudadas e que estão representadas na Figura 6.2.

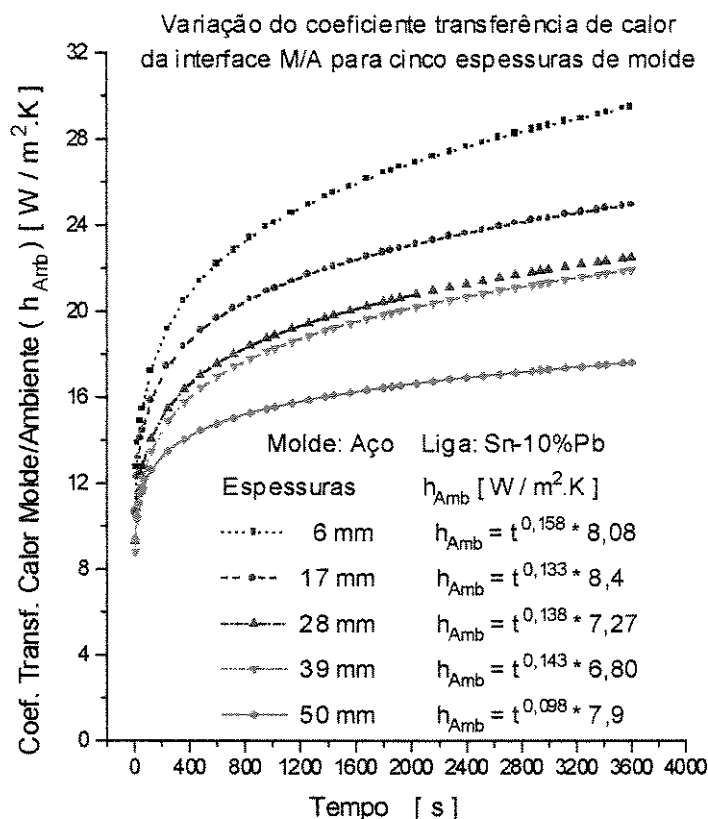


Figura 6.2- Variação do coeficiente de transferência de calor molde/ambiente para liga Sn- 10% Pb vazada em moldes de aço com espessuras de parede variáveis.

A análise feita nas curvas de h_{Amb} , que estão na Figura 6.2, permite visualizar que nos instantes iniciais, há uma tendência de convergência de resultados em função da temperatura externa da parede do molde encontrar-se apenas com ligeiro desequilíbrio com a temperatura ambiente. À medida que a solidificação começa a evoluir e o fluxo de calor proveniente do metal começa a elevar esta temperatura externa, h_{Amb} cresce rapidamente sendo tanto maior esse crescimento quanto menor a

espessura do molde considerada. É importante observar, que, para a análise da solidificação, é um deste trabalho, h_{Amb} é relevante até que o processo seja completado. Nestas condições, com o aumento progressivo da espessura do molde pode-se chegar à situações de molde semi-infinito, ou seja, não ocorre aquecimento externo do molde até o final da solidificação. Neste caso, não há troca de calor com o ambiente e a única interface onde a resistência térmica à passagem de fluxo de energia térmica precisa ser avaliada é a interface metal/molde.

6.2 Determinação dos Coeficientes de Transferência de Calor na Interface Metal/Molde (M/M) para Moldes com Espessura Variável.

A Figura 6.3, contém gráficos nos quais se encontram representados os perfis térmicos resultantes das leituras experimentais e simuladas via computador, por modelo numérico já descrito no item 3.7 deste trabalho, de um ponto no metal a 20 mm da interface metal/molde, e outro no molde a 03 mm desta mesma interface, cuja maior concordância, simultaneamente para as duas posições, define uma equação para h_i em cada espessura.

A simples visualização do comportamento das curvas em cada gráfico permite que se conclua que a unidirecionalidade na extração de calor cresce com a maior espessura do molde, fato retratado na diminuição gradativa do tempo para se obter o volume experimental totalmente solidificado, associado à forma da curva que vai se tornando gradualmente, ascendente no molde e descendente no metal. Isto fica perfeitamente evidente quando se compara a Figura 6.3A, com a Figura 6.3E. As divergências que se verificam entre resultados experimentais e simulados, a partir de um certo ponto para as mesmas espessuras de molde, indicam a perda de unidirecionalidade.

Os diferentes formatos que as curvas de leituras térmicas apresentam representam um indicativo de não serem uma propriedade da liga ou do material estudado. Parecem refletir uma consequência da capacidade que o volume do molde tem em absorver a energia térmica que lhe chega e repassá-la para o meio ambiente.

A Figura 6.4 contém as curvas representativas da variação de h_i com o tempo, obtidas segundo os resultados dos confrontos ilustrados na Figura 6.3, denotando valores elevados para os instantes iniciais do processo de solidificação com queda brusca para os valores que representam a ação das espessuras mais delgadas, tendência que, seqüencialmente, vai se tornando mais suave com o consequente aumento da espessura da parede do molde. A diferença de comportamento entre as curvas da Figura 6.4 pode ser melhor compreendido por meio de uma análise dos dois extremos de espessura de molde. O molde mais espesso permite um escoamento mais fácil de energia térmica por maior tempo, o que não provoca um aquecimento súbito. Estas condições garantem estabilidade ao molde, ao mesmo tempo em que permite uma evolução mais rápida da camada em solidificação. A ação mais rápida da contração volumétrica associada à contração térmica provoca a formação gradual de um *gap* de ar entre metal e molde, o que explica o menor perfil de valores de h_i , observados na Figura 6.4. Já o molde de menor espessura, em função do seu rápido aquecimento, satura rapidamente de calor e sofre uma expansão térmica. Esta expansão provoca um melhor contato térmico entre o metal e molde até que a evolução da camada solidificada provoque a separação gradativa devido à ação das contrações. Como neste caso a solidificação é mais lenta, pois depende mais da troca térmica da superfície externa do molde com o meio ambiente, as contrações ocorrerão para tempos maiores, o que explica o maior perfil de valores de h_i observados.

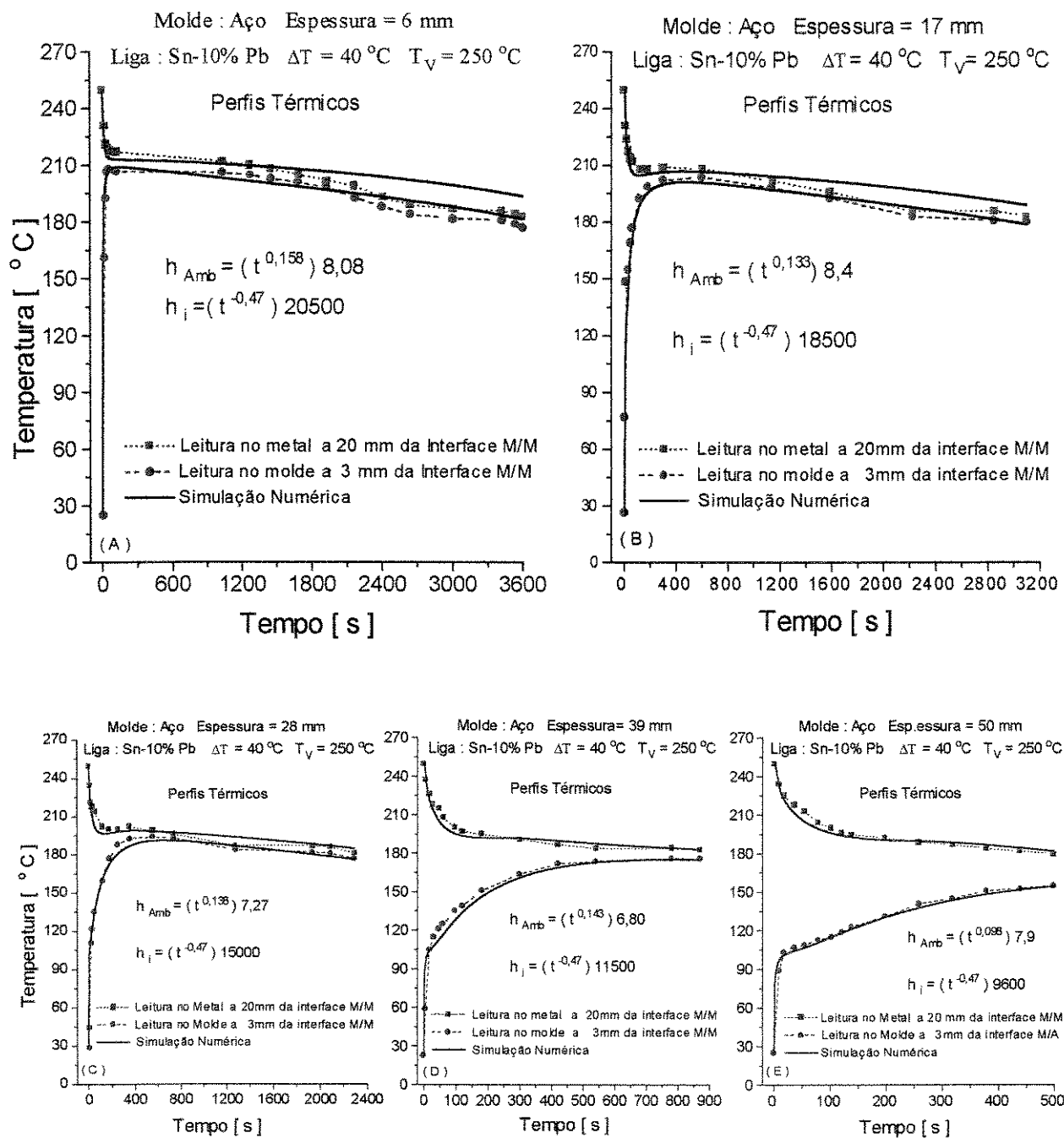


Figura 6.3 - Confronto de perfis térmicos teóricos e experimentais para liga Sn- 10% Pb vazada com superaquecimento $\Delta T = 40^\circ\text{C}$ em moldes de aço com espessuras de (A) 6 mm; (B) 17 mm; (C) 28 mm; (D) 39 mm e (E) 50 mm.

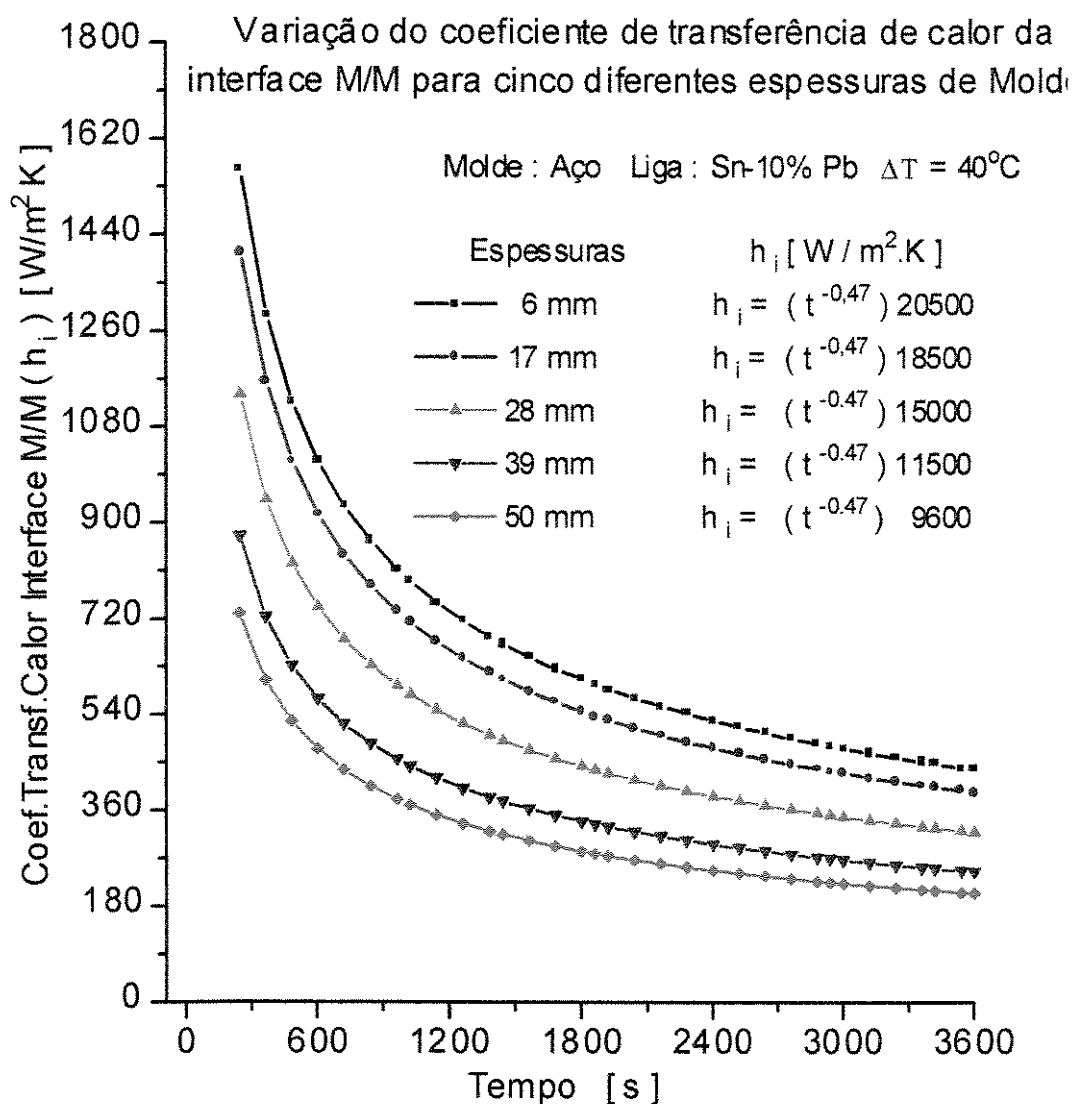


Figura 6.4 - Correlação entre as curvas que representam o comportamento de h_i , obtidas para liga Sn- 10% Pb vazada com superaquecimento $\Delta T = 40^\circ\text{C}$ em moldes de aço com espessuras de paredes variáveis. Encontram-se também representadas as respectivas equações de h_i para cada caso.

6.3 Determinação dos Coeficientes de Transferência de Calor na Interface Metal/Molde para Superaquecimento (ΔT) Variável.

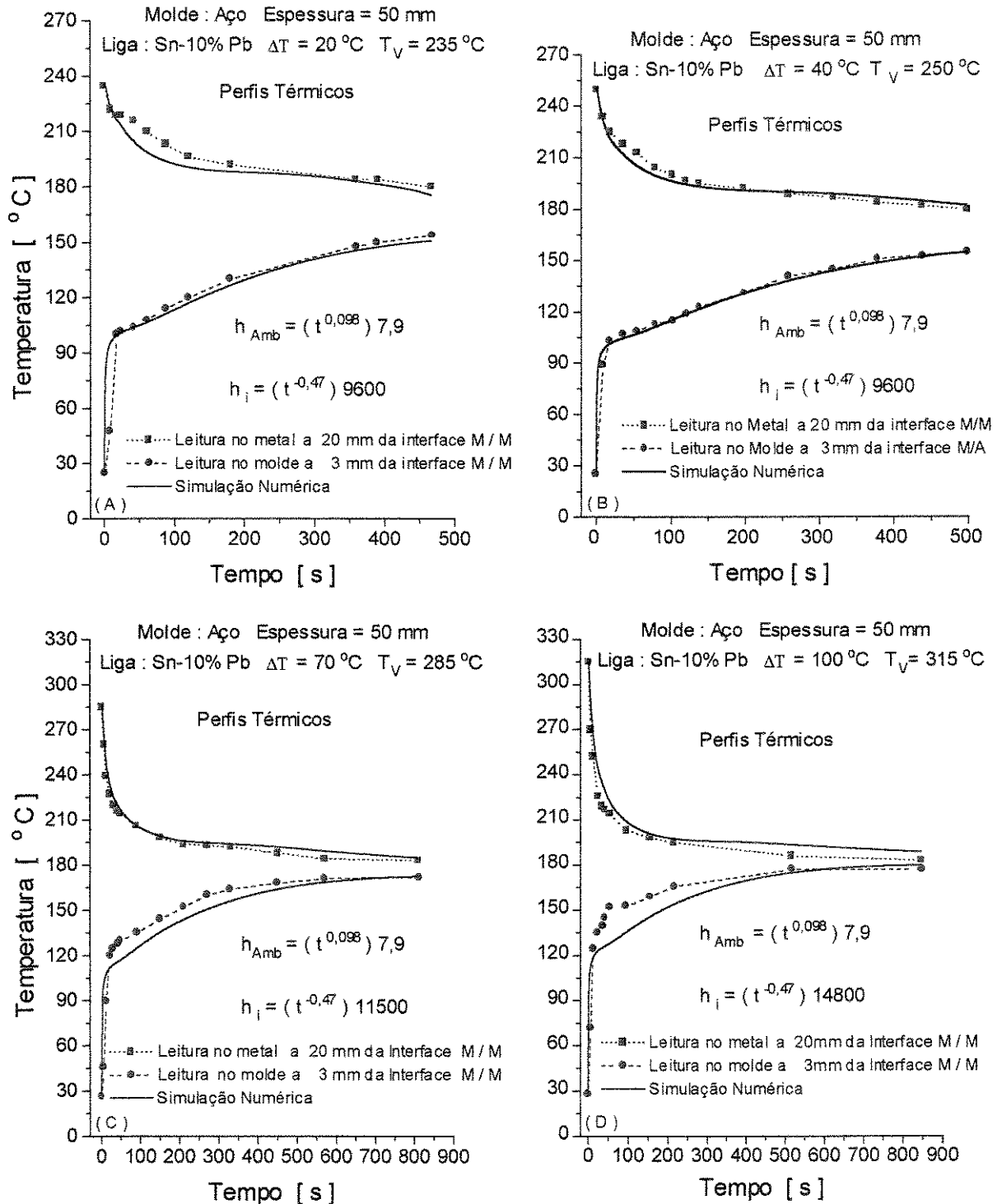


Figura 6.5 - Confronto de perfis térmicos teóricos e experimentais para a liga Sn- 10% Pb vazada em molde de aço com espessura de 50 mm com diferentes superaquecimentos (A) $\Delta T = 20^\circ\text{C}$; (B) $\Delta T = 40^\circ\text{C}$; (C) $\Delta T = 70^\circ\text{C}$; (D) $\Delta T = 100^\circ\text{C}$.

A Figura 6.5, contém os gráficos das curvas resultantes do confronto das leituras térmicas experimentais e os resultados simulados via computador. Pode-se notar que para os dois maiores valores de superaquecimento utilizados, os registros térmicos mais próximos à interface metal/molde quais sejam no molde e a 03mm dessa interface, mostram uma ligeira discordância com os resultados simulados. Os vazamentos do metal líquido com superaquecimentos mais elevados implicam como decorrência em maior presença de convecção atuando na transferência de energia térmica. Isto explica uma certa flutuação nos resultados experimentais, principalmente no uso do maior superaquecimento utilizado, e a discrepância observada entre resultados experimentais e numéricos, já que o modelo numérico considera apenas a condução térmica como modo de transferência de calor no metal e apenas em uma direção.

A Figura 6.6 mostra a influência do grau de superaquecimento sobre os valores do coeficiente de transferência de calor metal/molde, parametrizando-se a composição química (Sn- 10% Pb) e a espessura do molde (50 mm). Vê-se que, para valores de até 40 °C de superaquecimento, não ocorre nenhuma modificação no perfil de valores de h_i . Para valores maiores começa-se a notar a influência da maior fluidez do líquido conferindo maior molhabilidade do metal líquido na superfície interna do molde, o que se traduz nos maiores valores iniciais de h_i que podem ser observados na Figura 6.6. O retardamento da solidificação decorrente da maior impedância térmica provocada pelo superaquecimento retarda também a ação da contração volumétrica, o que provoca como consequência um perfil de valores de h_i mais elevado. De qualquer forma, a influência mais significativa do superaquecimento sobre h_i concentra-se nos instantes iniciais do processo provocada pela elevação da fluidez do metal líquido e a maior molhabilidade.

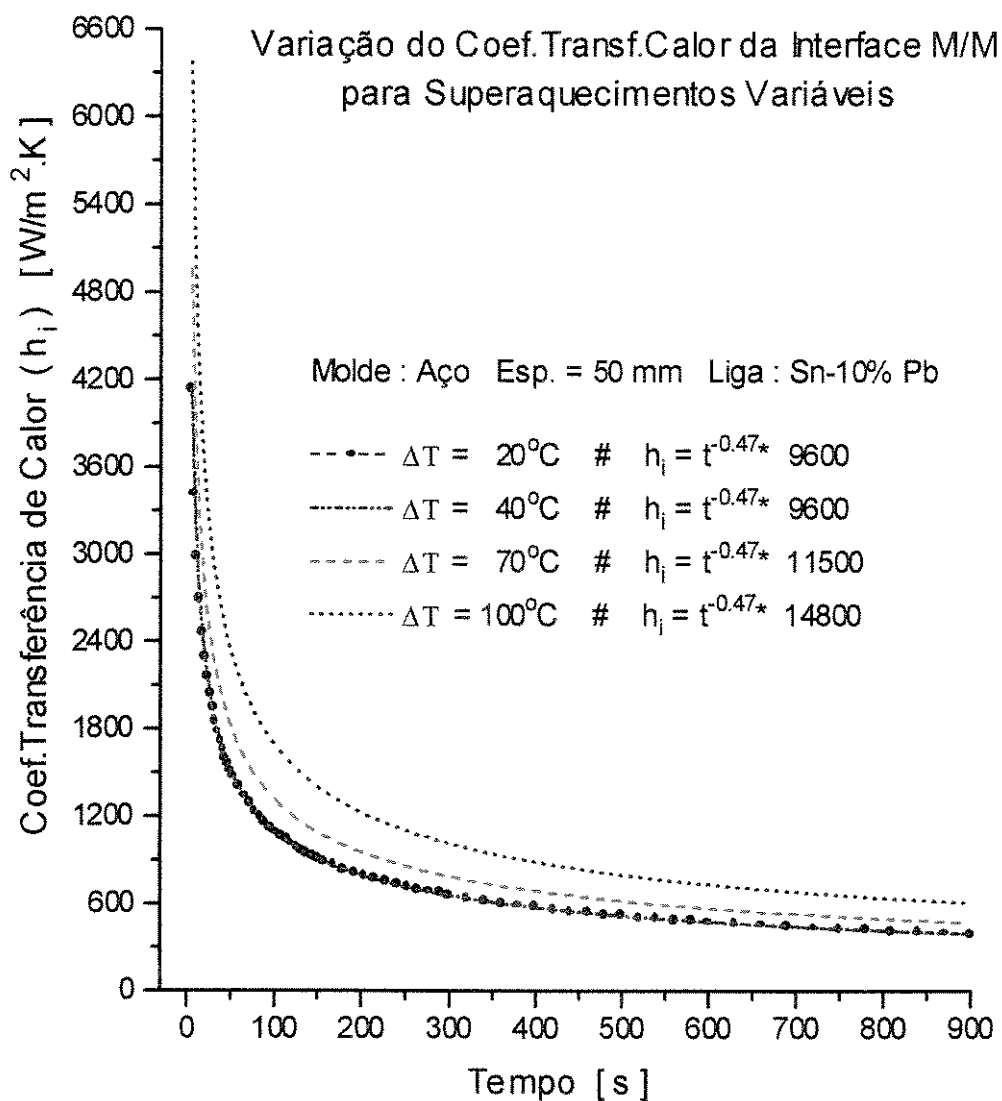


Figura 6.6 - Correlação entre as curvas que representam o comportamento de h_i obtidas para liga Sn- 10% Pb vazada com superaquecimentos variáveis em molde de aço com espessura de parede de 50 mm. Encontram-se também representadas as respectivas equações de h_i para cada caso.

6.4 Determinação dos Coeficientes de Transferência de Calor na Interface Metal/Molde para Composição Química Variável.

Apesar de se haver compartimentado as experiências, no que diz respeito à composição química, em sistemas binários com e sem intervalo de solidificação ou *mushy zone* [itens 5.4.3 e 5.4.4, respectivamente], houve necessidade de um agrupamento dos resultados para melhor interpretá-los. Desta forma, ficou-se com os resultados relativos ao sistema binário Sn-Pb, cujos resultados experimentais, expressos pelas comparações entre as curvas dos perfis térmicos, encontram-se representados nas figuras 6.7 (A). Os resultados relativos ao sistema binário Al-Cu, com valores experimentais expressos pelas comparações entre as curvas dos perfis térmicos, encontram-se representados na figura 6.9 (B).

A Sistema Sn-Pb.

Na Figura 6.8, pode ser constatada a queda brusca dos valores de h_i , nos instantes iniciais da solidificação para a liga Sn 5%Pb, de valores elevados ($\cong 8500 \text{ W / m}^2.\text{K}$) para valores relativamente baixos ($\cong 1600 \text{ W / m}^2.\text{K}$) em 150 segundos, tempo que representa, aproximadamente, 30% do tempo total da solidificação neste sistema. As outras três ligas de maior concentração de soluto apresentam comportamento semelhante, e partem de valores de h_i , comparativamente mais baixos - cerca de 50% menor do que o verificado para a liga mais diluída - e chegam no mesmo intervalo de tempo a valores entre 1000 e 700 [$\text{W / m}^2.\text{K}$] para h_i . A comparação entre o comportamento da liga eutética e o elemento base deste sistema dá conta de que a liga eutética molha melhor o molde no início da solidificação, mas no restante do processo apresenta perfis de valores de h_i quase coincidentes.

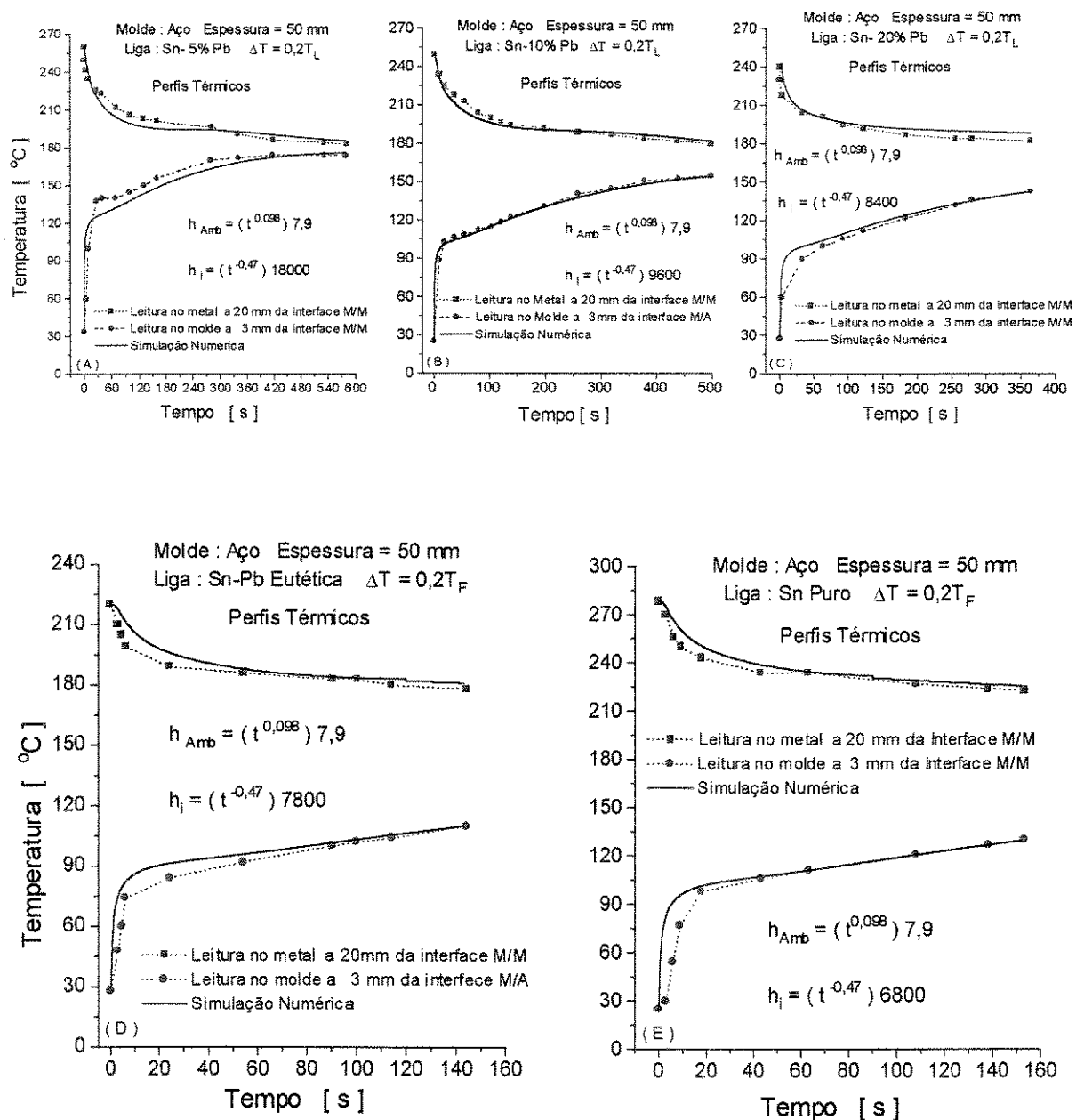


Figura 6.7 - Confronto de perfis térmicos teóricos e experimentais para ligas do sistema Sn-Pb, vazadas em molde de aço com espessura de 50 mm e com $\Delta T = 0,2T_L$ (ou T_F) (A) liga Sn- 5% Pb; (B) liga Sn- 10% Pb; (C) liga Sn- 20% Pb; (D) liga eutética SnPb e (E) estanho puro.

Este comportamento converge para o entendimento da molhabilidade que o material a ser solidificado apresenta em relação ao material do molde, e que tende a ser maior quanto maior o intervalo de solidificação (*mushy zone*). Com ligas de maior intervalo de solidificação há maiores possibilidades de formação de longos canais interdendríticos que podem provocar movimento de fluido em sentido contrário ao da solidificação, ajudando a melhorar o contato metal/molde.

Além disso, a contração volumétrica fica mais diluída para essas ligas o que provoca a formação de *gap's* menores, e como decorrência perfis de evolução de h_i mais elevados do que os observados para ligas de menor intervalo de solidificação. De qualquer forma, vê-se que, para ligas Sn-Pb, após a concentração de 10% Pb até a concentração eutética, não se verificam variações muito significativas nos perfis de h_i .

B Sistema Al-Cu.

No que se refere ao sistema Al-Cu, a análise deve incluir, além dos comentários sobre o intervalo de solidificação já redigidos para o sistema Sn-Pb, a influência diversa da concentração de soluto sobre a molhabilidade do metal líquido. Enquanto no sistema Sn-Pb a molhabilidade diminuía com o aumento do teor de soluto, no sistema Al-Cu a molhabilidade da liga Al-15% Cu é muito maior do que a da liga Al-4,5% Cu, o que se traduz em um perfil de h_i maior nos 8 segundos iniciais do processo. Com a evolução da solidificação o contato térmico para a liga Al- 4,5%% Cu passa a ser mais eficiente em função do maior intervalo de solidificação e pelas mesmas razões já discutidas para o sistema Sn-Pb.

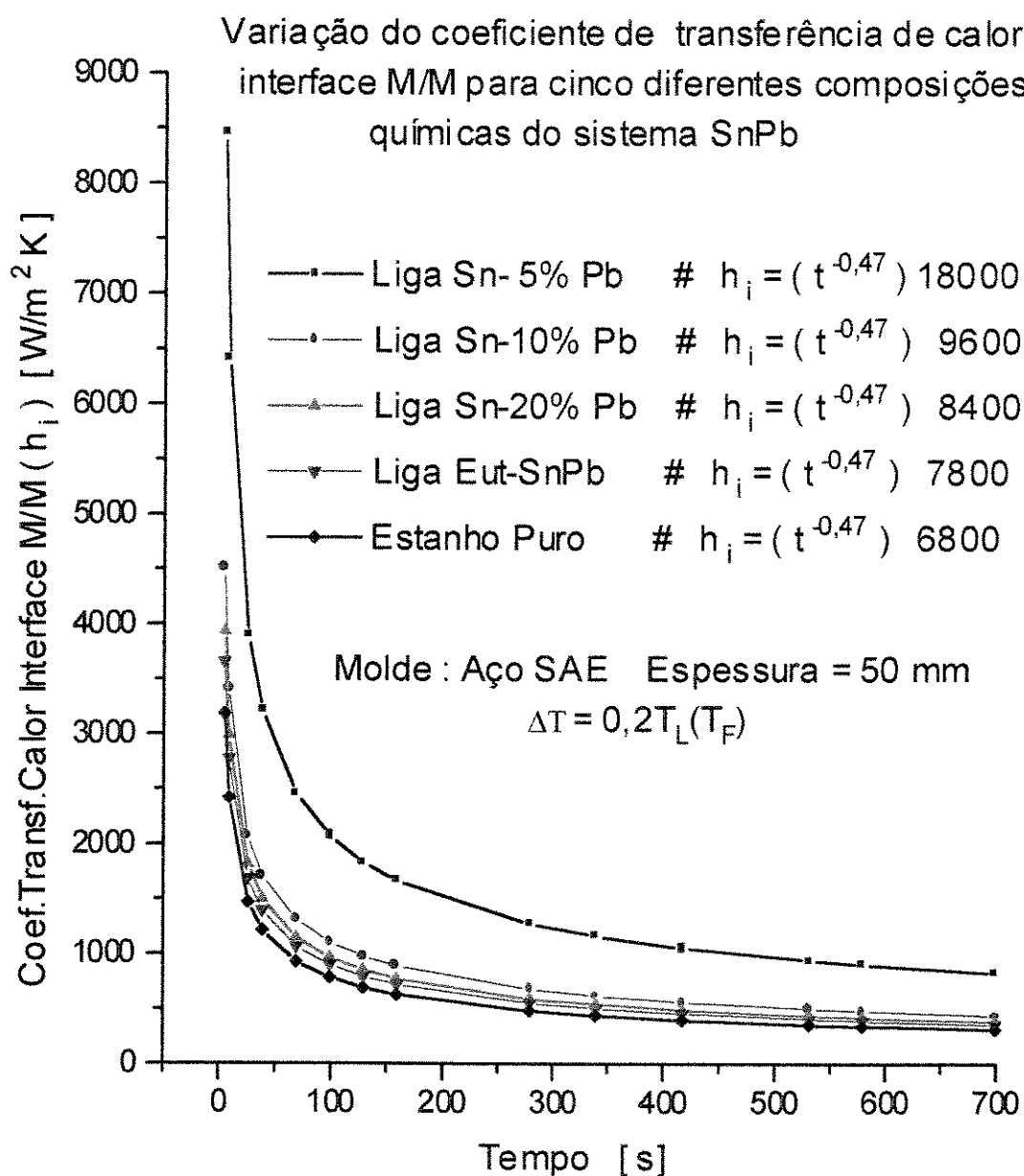


Figura 6.8 - Correlação entre as curvas que representam o comportamento de h_i obtidas para cinco ligas do sistema Sn-Pb vazadas em molde de aço com espessura de 50 mm e $\Delta T = 0,2T_L$ (ou T_F).

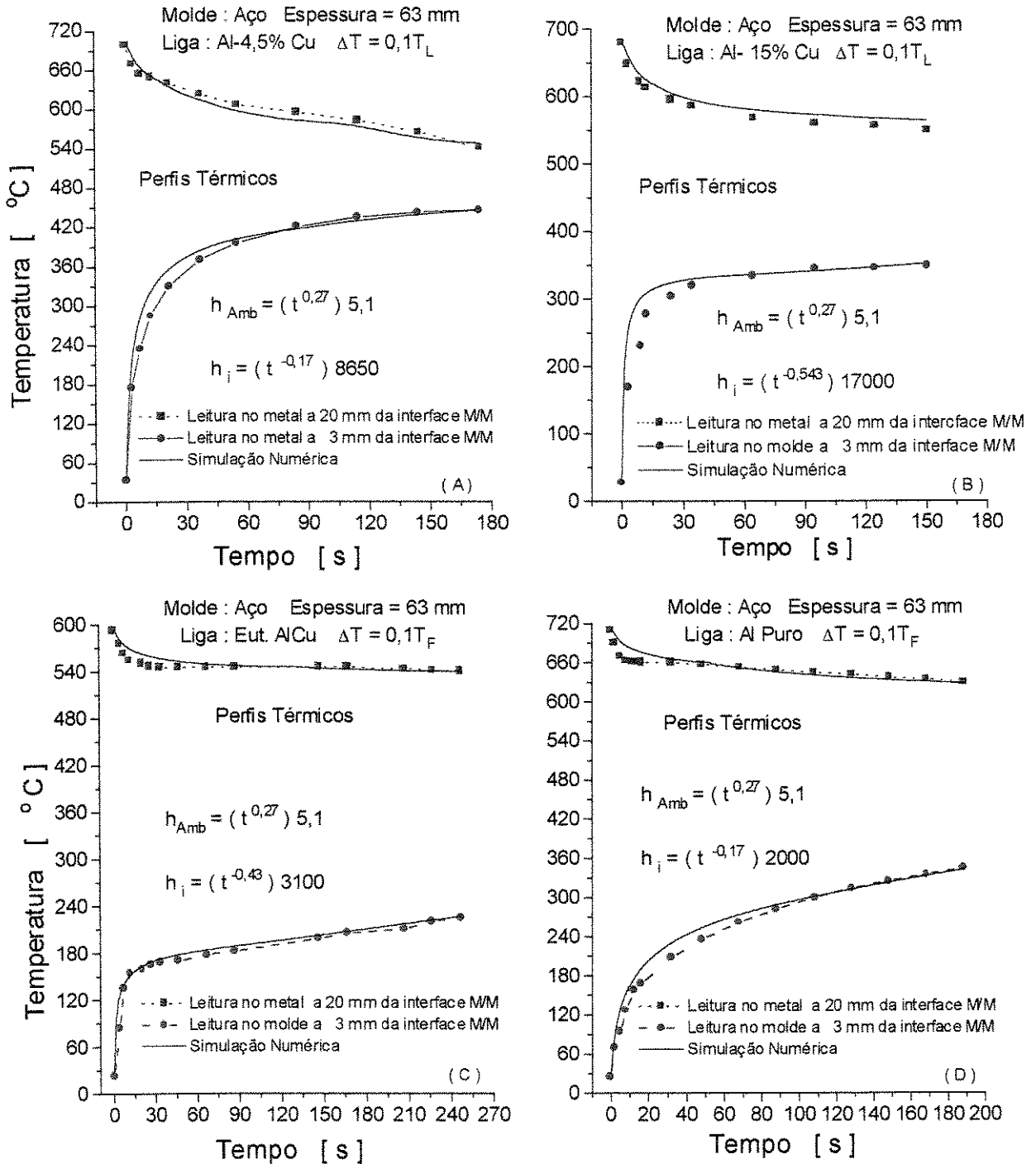


Figura 6.9 - Confronto de perfis térmicos teóricos e experimentais para ligas do sistema Al-Cu, vazadas em molde de aço com espessura de 63 mm e com $\Delta T = 0,1T_L$ (ou T_F) (A) liga Al- 4,5% Cu; (B) liga Al- 15% Cu; (C) liga eutética AL-Cu e (D) alumínio puro.

Enquanto a liga Al- 15% Cu apresenta $h_i \cong 800 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$, no final da solidificação, a liga Al- 4,5% Cu apresenta $h_i \cong 3600 \text{ W/m}^2$. Aliás, a liga Al- 4,5% Cu é conhecida pela formação de longos canais interdendríticos que permitem o movimento de líquido com concentração maior que a nominal da liga até a superfície da peça, provocando o fenômeno da macrossegregação inversa. Entretanto, para a concentração eutética a molhabilidade volta a cair, o que sugere a necessidade de um estudo mais aprofundado sobre a molhabilidade de ligas do sistema Al-Cu.

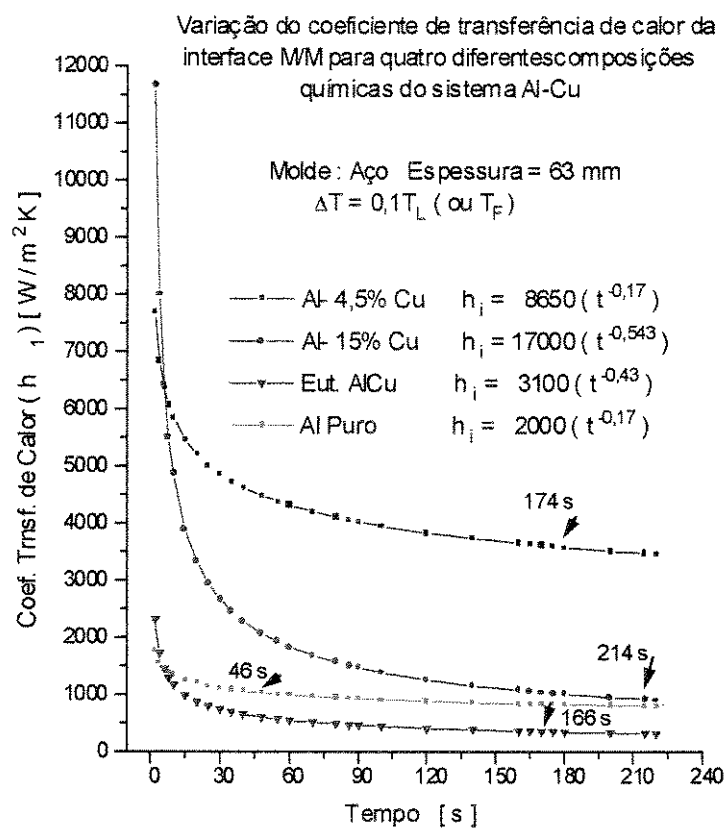


Figura 6.10 - Correlação entre as curvas representativas do comportamento de h_i obtidas para quatro composições químicas do sistema Al-Cu vazadas em molde com espessura de 63 mm e $\Delta T = 0,1T_L$ (ou T_F). As setas indicam o tempo total para ocorrer a solidificação.

Quando comparamos a liga eutética e o elemento base do sistema Al-Cu, constatamos que ela apresenta melhor afinidade físico-química com o material do molde, no início da solidificação, aproximadamente nos oito (08) segundos iniciais, para em seguida formar mais rapidamente o gap de de ar. Esta peculiaridade diferente daquela observada no sistema Sn-Pb deve-se ao fato do sistema Al-Cu ser um sistema eutético muito complexo, uma vez que apresenta muitas fases intermediárias, a exemplo da fase θ , que é o composto químico Al_2Cu , cujas particularidades termofísicas são discutidas por Mondolfo[Mondolfo,1976].

Os resultados para a verificação do comportamento do alumínio puro quando submetido a superaquecimento variável torna mais evidente a questão da molhabilidade, como pode ser visto na Figura 6.11 e 6.12.

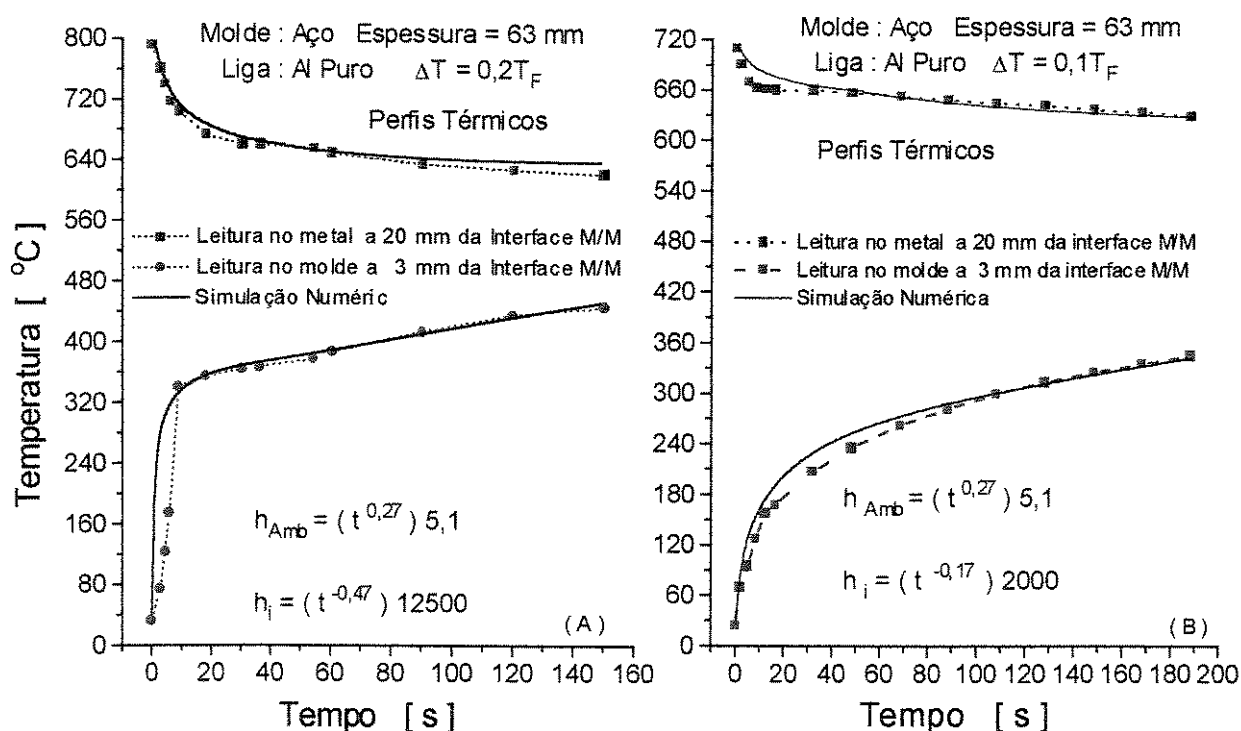


Figura 6.11 - Confronto de perfis térmicos para o alumínio vazado em molde de aço com 63 mm de espessura e superaquecimento variável (A) $\Delta T = 0,2T_F$ e (B) $\Delta T = 0,1T_F$.

A Figura 6.11 relaciona o confronto dos perfis térmicos teórico/experimental obtido para o alumínio puro, vazado em molde de aço com espessura de 63 mm, para dois superaquecimentos. Com os dados extraídos deste confronto foi construída a Figura 6.12, que relaciona as curvas descritivas dos coeficientes assim obtidos. A análise leva ao entendimento da molhabilidade associada à fluidez do material e a constatação de que quanto maior esta, pelo efeito da maior temperatura de vazamento, mais íntimo e permanente é o contato térmico entre o metal e o molde.

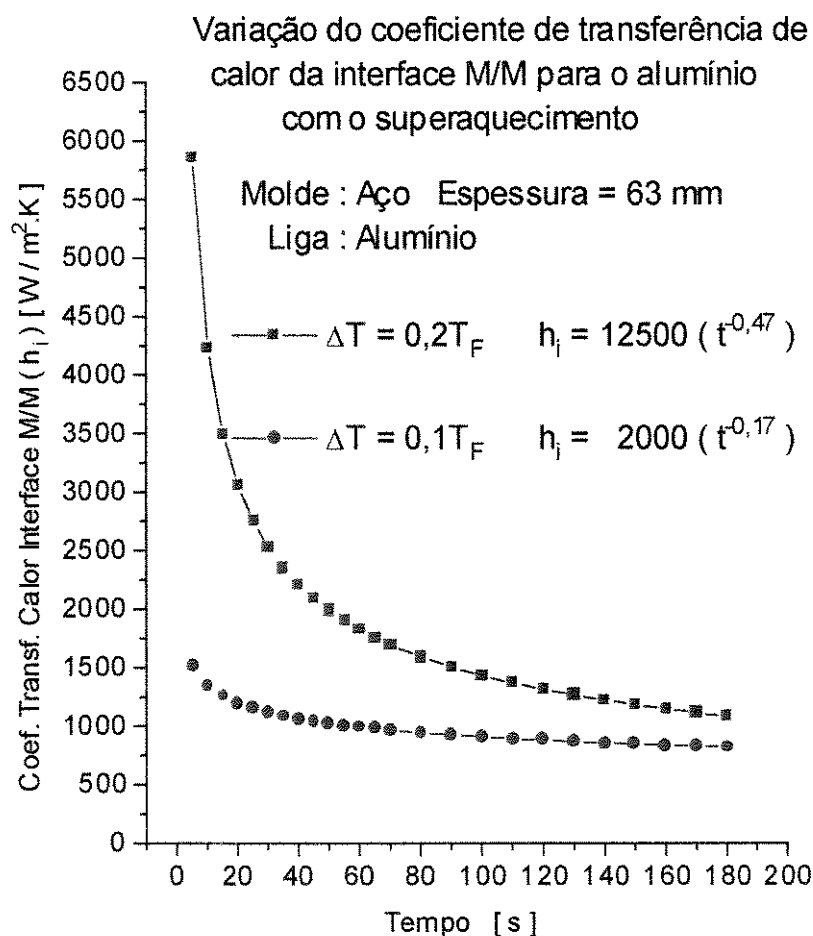


Figura 6.12 - Correlação entre as curvas que representam o comportamento de h_i obtidas para o alumínio solidificado em molde de aço com espessura de 63 mm e vazado com diferentes superaquecimentos.

Vê-se que, ao se aumentar o superaquecimento para 20% da temperatura de fusão, o valor inicial de h_i é aproximadamente seis vezes maior que o valor observado para o superaquecimento de 10% de T_F . Neste caso, verifica-se uma influência muito mais significativa do superaquecimento sobre o perfil de h_i do que a verificada na análise realizada para uma liga do sistema Sn-Pb.

6.5 Determinação de EDS e σ_u

Nesta etapa dos trabalhos os procedimentos experimentais tiveram por base o vazamento das ligas Al- 4,5% Cu e Al- 15% Cu, que foram monitorados como ilustrado na Figura 5.5, e permitiram como resultados a obtenção de leituras térmicas em cada posição. Essas leituras possibilitaram avaliar o efeito da variação do teor de soluto da liga, referentes ao tempo de passagem da isoterma líquidus (t_L) e, conseqüentemente, da velocidade de deslocamento dessa interface (V_L), como pode ser visto nas Figuras 6.13 e 6.14.

A relação das posições (P) de localização dos termopares com os tempos de passagem das isothermas líquidus (t_L), em cada caso, foi necessária para que se pudesse obter a equação matemática da curva que melhor se ajustasse ao conjunto dos pontos. Isso pôde ser feito com o auxílio de um software gráfico. As equações da posição como função do tempo [$P = F (t_L)$] foram então derivadas para a obtenção das equações para as velocidades das isothermas líquidus em função do tempo [$V_L = F (t_L)$], que se encontram representadas nas curvas das Figuras 6.13B e 6.14B. Estas Figuras mostram perfis de velocidades das isothermas líquidus com valores superiores para a liga Al-4,5% Cu. O comportamento confirma os comentários feitos por ocasião da análise da composição química (item 6.4 - Figura 6.10) quando foram apresentadas as seguintes equações:

Al- 4,5% Cu $h_i = 8.650 * t^{-0,17} \text{ W / m}^2.\text{K}$

Al- 15% Cu $h_i = 17.000 * t^{-0,54} \text{ W / m}^2.\text{K}$

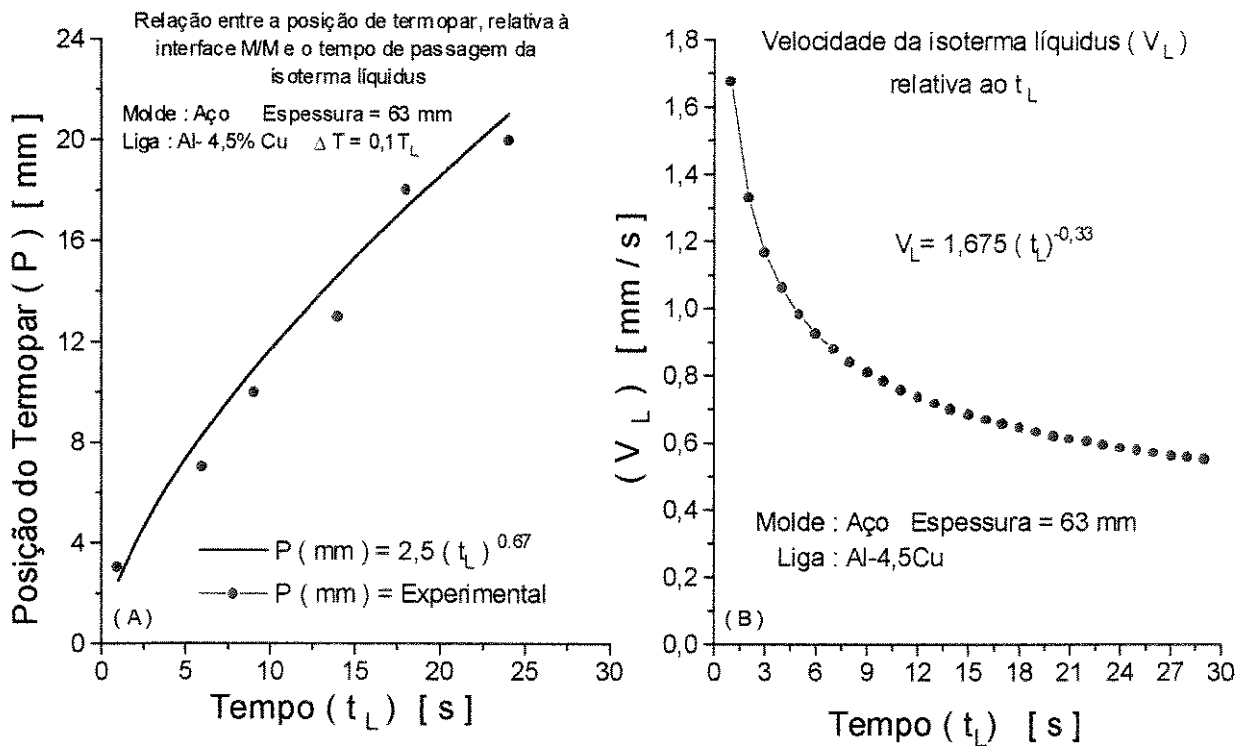


Figura 6.13 - Resultados obtidos a partir de dados experimentais obtidos do vazamento da liga Al- 4,5% Cu em molde de aço de espessura 63 mm, em presença de argônio (A) ajuste matemático da posição monitora de como função do tempo e (B) perfil para V_L como função da posição.

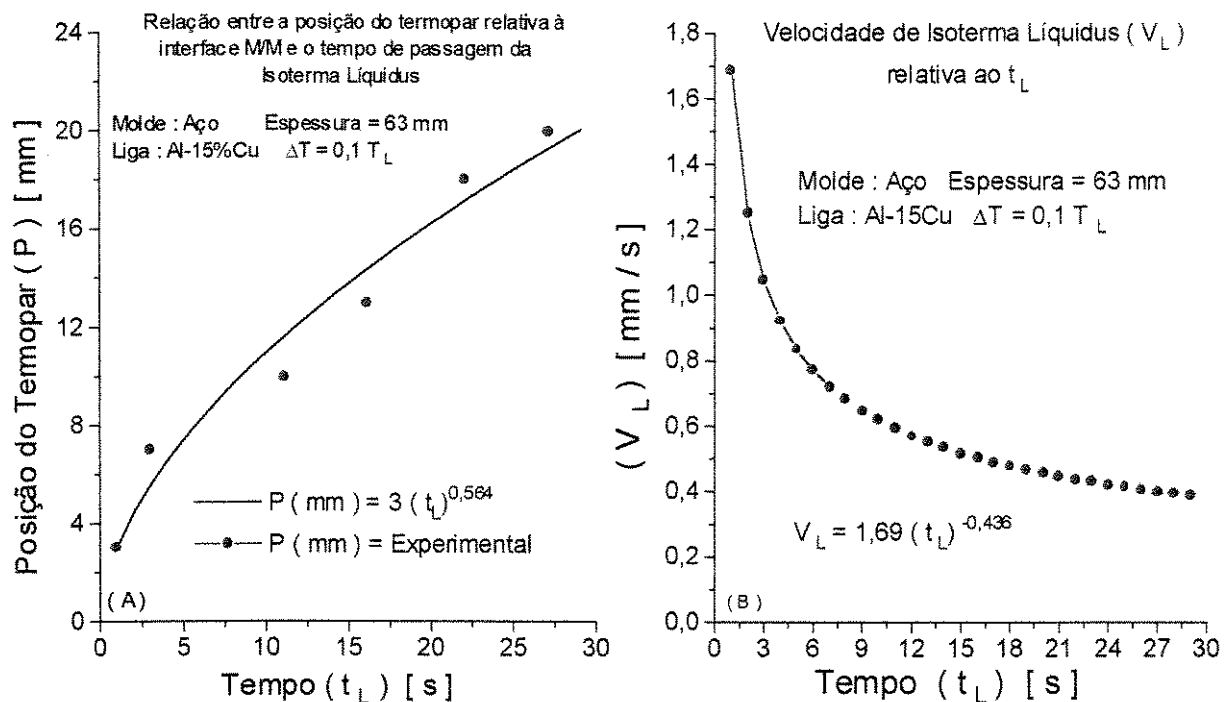


Figura 6.14 - Resultados obtidos a partir de dados experimentais obtidos do vazamento da liga Al- 15% Cu em molde de aço de espessura 63 mm, em presença de argônio (A) ajuste matemático da posição monitora se como função do tempo e (B) perfil para V_L como função da posição.

No início do processo de solidificação, os valores de V_L praticamente confundem-se para ambas as composições químicas devido aos elevados valores de h_i . Ocorre, em seguida, um maior decaimento no perfil de velocidade da isoterma liquidus para a composição Al- 15%Cu, acompanhando a maior queda que também se verifica no perfil de valores dos coeficientes de transferência de calor da interface metal/molde (h_i), dado pela correspondente expressão de $h_i = F(t)$. Esta dependência de V_L com h_i está explicitada de forma muito clara na Equação 3.110, pela sua associação com as Equações 3.45b, 3.91 e 3.93.

A determinação dos espaçamentos dendríticos secundários (EDS) está vinculada a cada posição monitorada no metal, a partir da interface metal/molde e,

nestas circunstâncias, é interessante que o perfil de velocidade de deslocamento da isoterma liquidus esteja representado por uma equação em função dessas posições. Isto novamente foi feito com o auxílio de um software gráfico e se encontra ilustrado nas Figuras 6.15A.e 6.15B, respectivamente para a liga Al- 4,5%Cu e Al- 15%Cu. Nas Figuras 6.16A. e 6.16B, são apresentadas as imagens dos EDS para as posições 1 [7 mm]; 4 [22 mm]; 7 [37 mm] e 10 [53 mm], ilustradas na Figura 5.8.

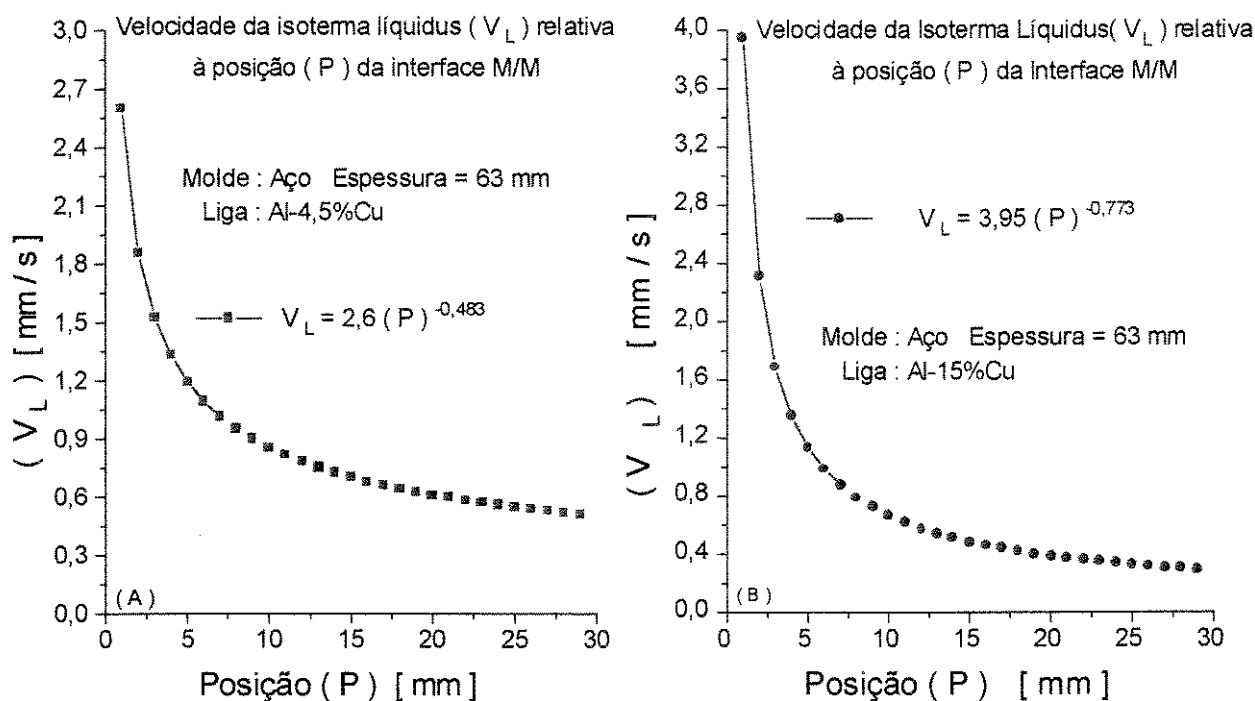


Figura 6.15 - Evolução da velocidade da isoterma liquidus em função da posição relativa à interface metal/molde (A) liga Al- 4,5%Cu e (B) liga Al- 15%Cu.

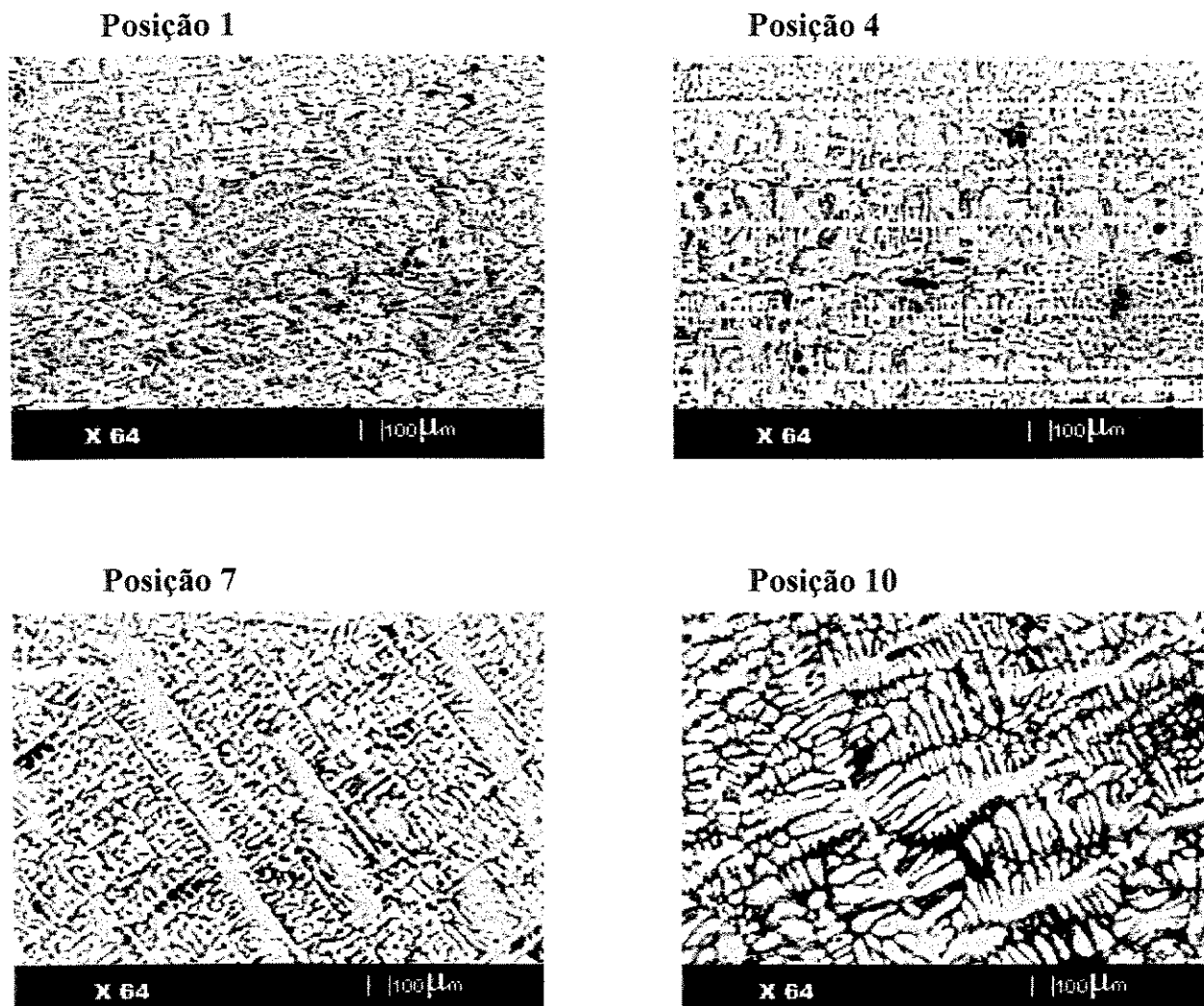
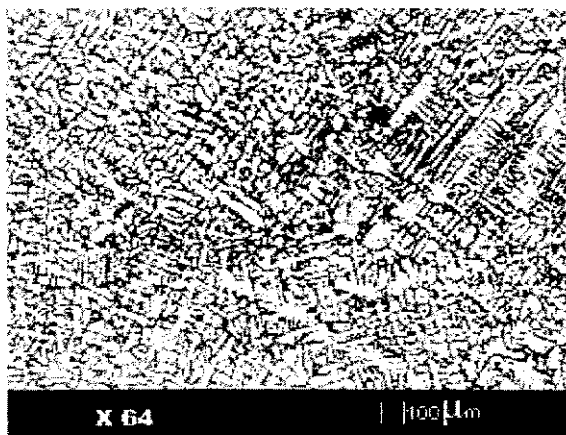
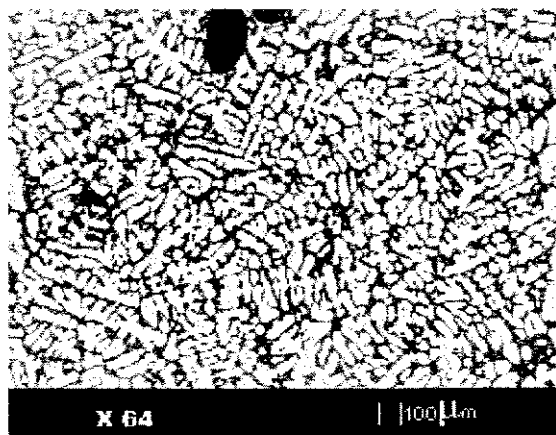


Figura 6.16A - Relação das micrografias para a liga Al- 4,5%Cu conforme posições ilustradas na Figura 5.8. Ataque com eletrólito composto de 800 ml de etanol, 40 ml de água destilada e 60 ml de ácido perclórico ($HClO_4$) por 15 segundos. As posições são relativas à interface metal/molde e correspondem a: posição 1 = 7mm (EDS = 24μm); posição 4 = 22mm (EDS = 42μm); posição 7 = 37mm (EDS = 51μm) e posição 10 = 53mm (EDS = 57,7μm).

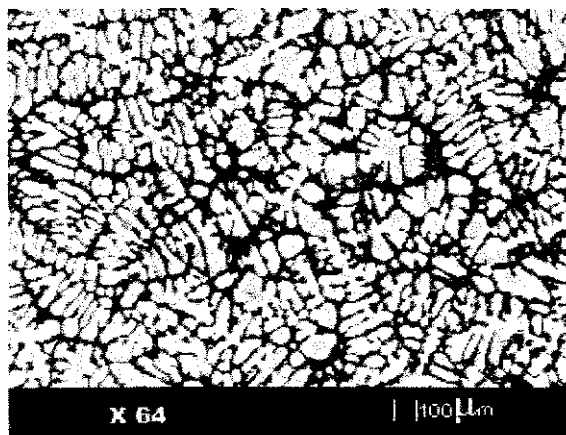
Posição 1



Posição 4



Posição 7



Posição 10

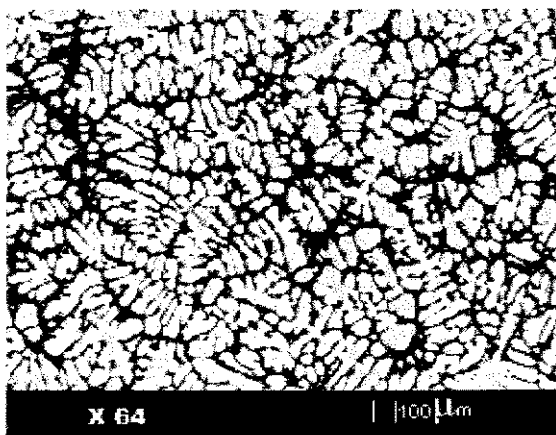


Figura 6.16B - Relação das micrografias para a liga Al- 15%Cu conforme posições ilustradas na Figura 5.8. Ataque com eletrólito composto de 800 ml de etanol, 40 ml de água destilada e 60 ml de ácido perclórico (HClO_4) por 15 segundos. As posições são relativas à interface metal/molde e correspondem a: posição 1 = 7mm (EDS = $21\mu\text{m}$); posição 4 = 22mm (EDS = $44,4\mu\text{m}$); posição 7 = 37mm (EDS = $56\mu\text{m}$) e posição 10 = 53mm (EDS = $62,2\mu\text{m}$).

A partir das expressões de $V_L = F(P)$, apresentadas na Figura 6.15, podem ser determinados valores teóricos de EDS ao aplicar-se a equação de Bouchard/Kirkaldy [Bouchard/Kirkaldy, 1997].

Esses autores sugerem um fator de calibração, g_2 , variando entre 4,0 e 11,0 na Equação 2.79, para alguns sistemas metálicos examinados, aí incluído o sistema Al-Cu, e sugerem como valor geral $g_2 = 5,0$. Entretanto, nos estudos deste trabalho foi verificado que $g_2 = 7,8$ representa melhor a evolução de EDS para as duas ligas estudadas a partir da superfície do metal, conforme pode ser observado na comparação destas previsões teóricas com os resultados experimentais levantados nesses experimentos e relacionados na Figura 6.17. Pode-se notar que, para as posições iniciais, os valores de EDS para as duas composições químicas são muito próximos, com valores pouco menores para a liga Al- 15%Cu, fruto da maior velocidade da isoterma liquidus e do maior coeficiente h_i que a mesma apresenta nos instantes iniciais. Em seguida, fica evidente uma tendência de menor espaçamento dendrítico para a liga Al- 4,5%Cu, por força das maiores taxas de resfriamento que se verificam, e que são decorrentes dos maiores valores de V_L para esta liga nos instantes finais da solidificação. É importante observar que, se fossem mantidas iguais as condições de resfriamento para as duas composições químicas, aquela de maior teor de soluto é a que apresentaria menor valor de EDS. Tal observação é contrária ao que se verifica neste trabalho, onde o perfil de variação de h_i da liga Al- 4,5% Cu é nitidamente maior do que o da liga Al-15% Cu.

Nas Figuras 6.18 e 6.19 são apresentados os resultados dos ensaios de tração a que foram submetidos os corpos de prova retirados de posições ilustradas na Figura 5.8. No exemplo, são mostrados, os resultados obtidos de C.P retirados das posições 1(=7mm) e 10(=53mm) para as duas ligas Al-Cu estudadas. O conjunto de imagens possibilita o entendimento de que o EDS cresce e torna-se mais bem definido à medida que a região analisada se afasta da interface metal/molde. Como resultado, a fragilidade do material aumenta consideravelmente, principalmente no caso da liga Al- 15% Cu.

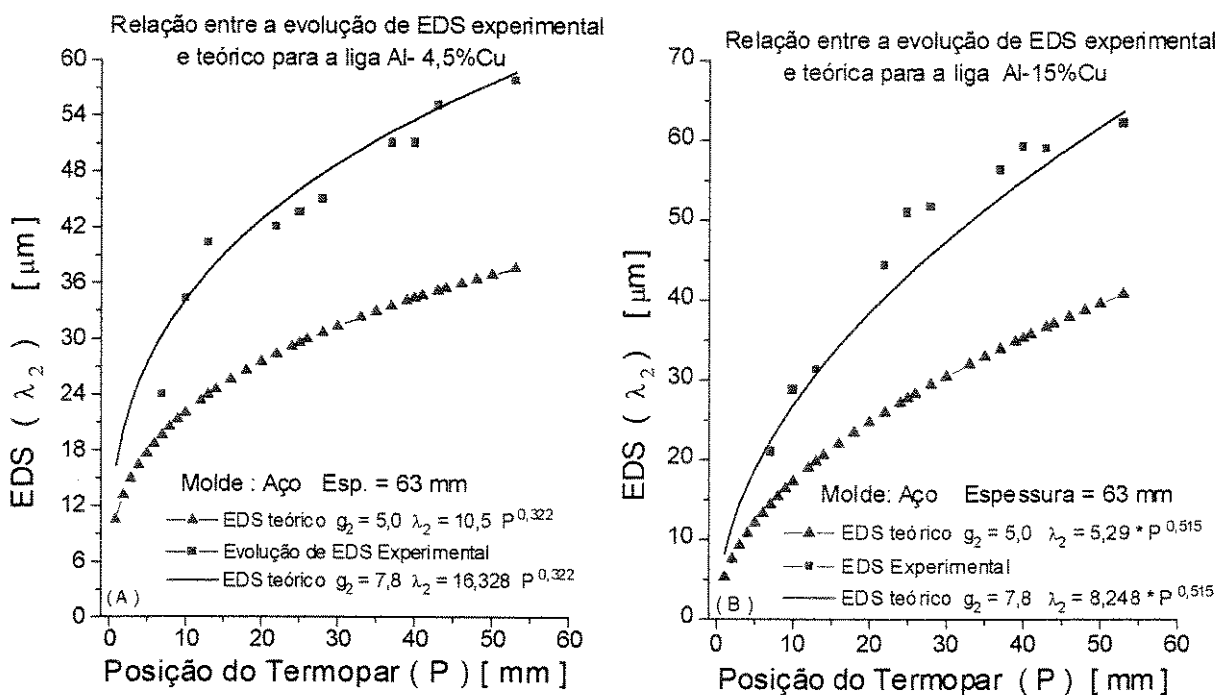


Figura 6.17 - Comparação entre a evolução de EDS teórico e experimental para ligas do sistema Al-Cu vazada em molde de aço com espessura de 63 mm (A) liga Al-4,5%Cu e (B) liga Al- 15%Cu.

Na Figura 6.20, verifica-se que a evolução de EDS com a posição (A) é sempre crescente. Em seguida (B), tem-se a evolução do alongamento específico com o EDS para a ligas Al- 4,5% Cu, onde se observa que as maiores deformações estão associadas aos menores EDS, e cuja correlação permite obter a relação matemática vista na figura. Tal relação não foi possível para a liga Al-15%Cu em virtude de seu elevado grau de fragilidade decorrente da maior quantidade de intermetálico Al_2Cu presente em sua microestrutura. Entretanto, pode-se obter da comparação dos resultados apresentados nos gráficos das Figuras 6.18 C e 6.19 C que a deformação para os menores valores de EDS (24 e 21 μm), respectivamente para Al- 4,5%Cu e Al-15%Cu) é seis vezes maior para a liga Al-4,5%Cu. Para os valores maiores de EDS (57,7 e 62,2 μm), respectivamente para Al- 4,5%Cu e Al-15%Cu, a relação passa para quatorze vezes.

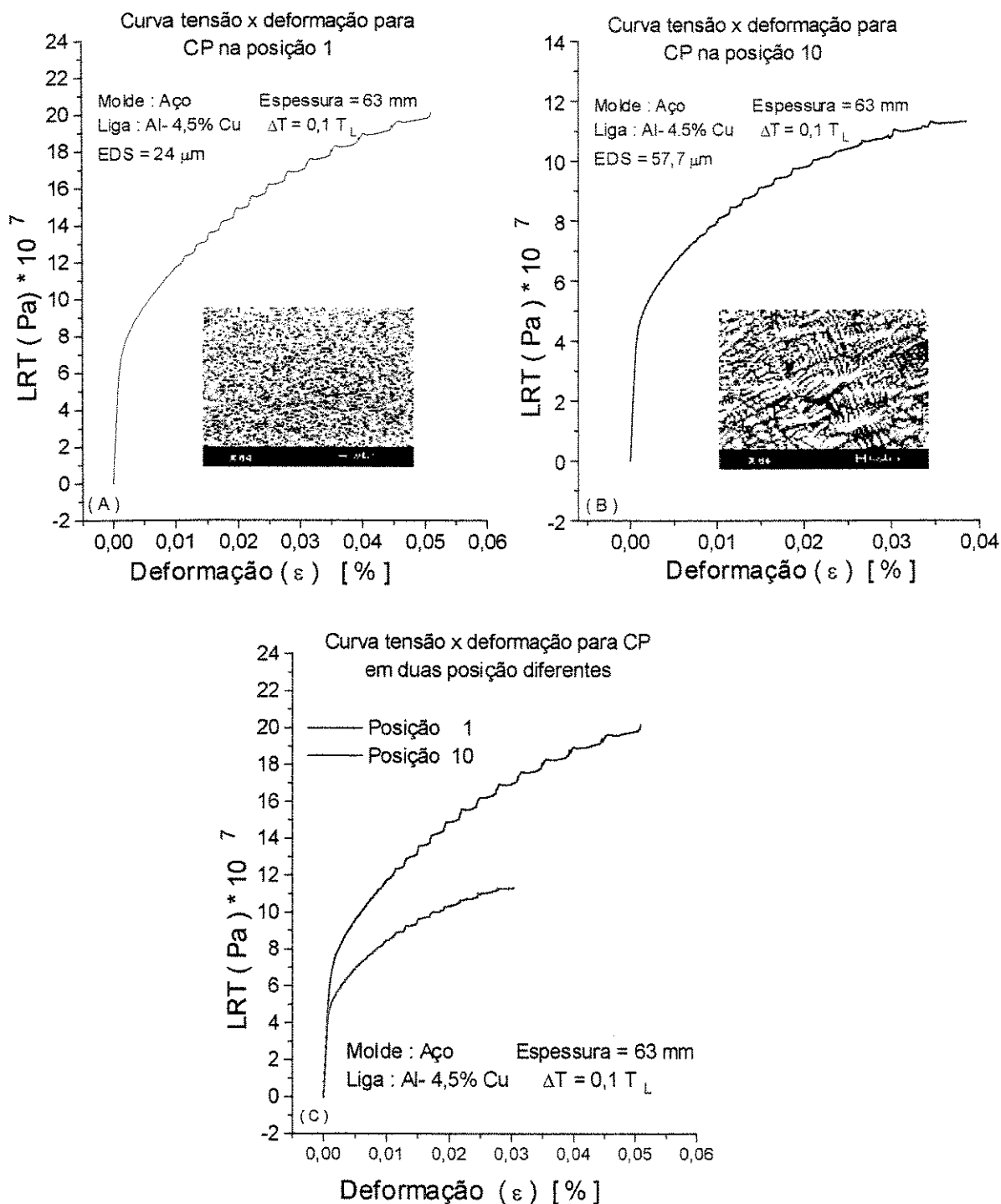


Figura 6.18 - Relações Tensão-Deformação para a liga Al- 4,5% Cu obtida a partir de CPs retirados do lingote fundido nas posições relativas à interface metal/molde, ilustradas na Figura 5.8, e associadas à microestruturas (A) posição 01 a 7mm da interface metal/molde(EDS =24 μm); (B) posição 10 a 53mm da interface metal/molde (EDS = 57.7 μm) e (C) comparação da evolução do desempenho dos dois CPs avaliados.

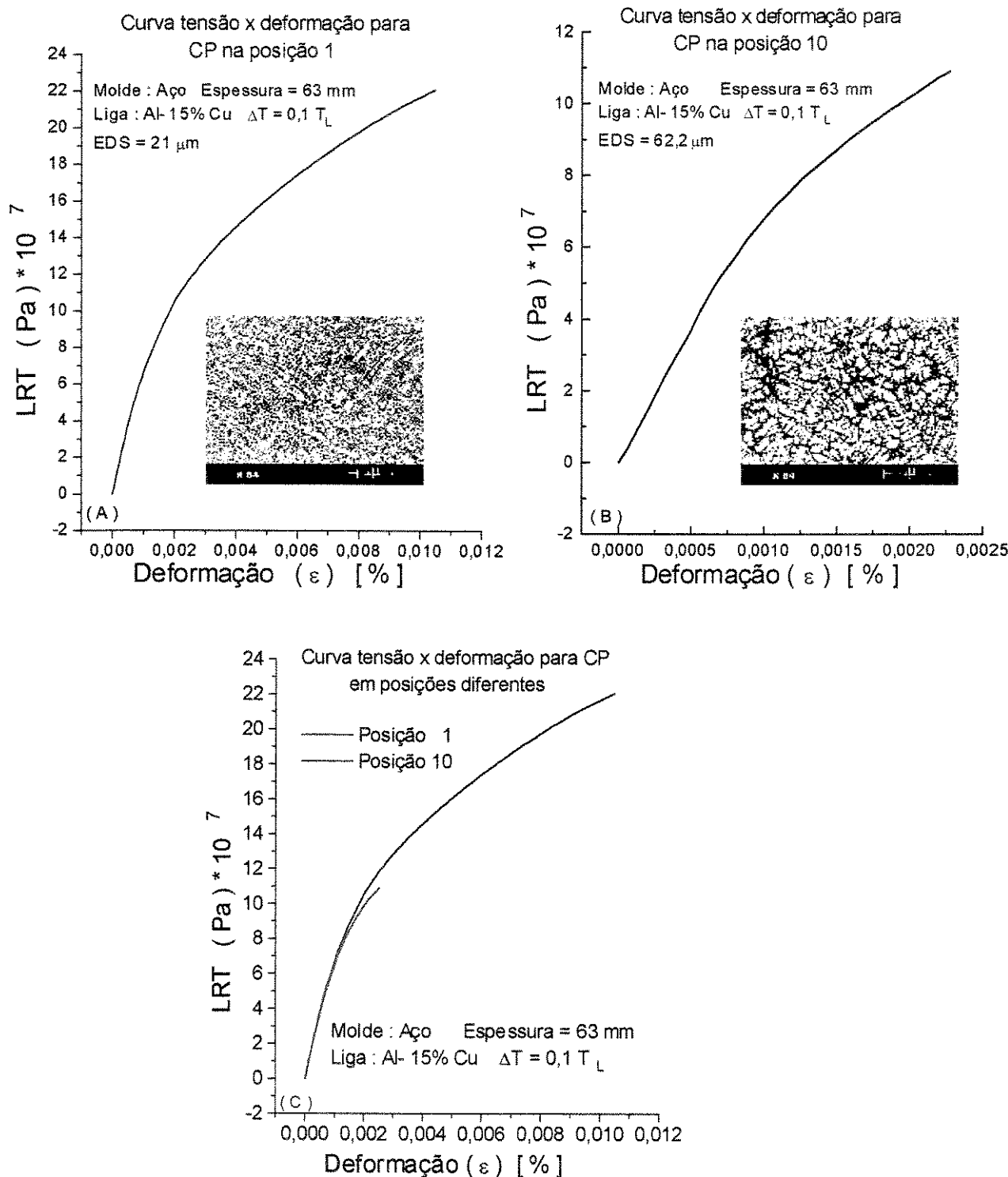


Figura 6.19 - Relações Tensão-Deformação para a liga Al- 15% Cu obtida a partir de CPs retirados do lingote fundido nas posições relativas à interface metal/molde, ilustradas na Figura 5.8, e associadas à microestruturas (A) posição 01 a 7mm da interface metal/molde (EDS = 21 μm); (B) posição 10 a 53mm da interface metal/molde (EDS = 62.2 μm) e (C) comparação da evolução do desempenho dos dois CPs avaliados.

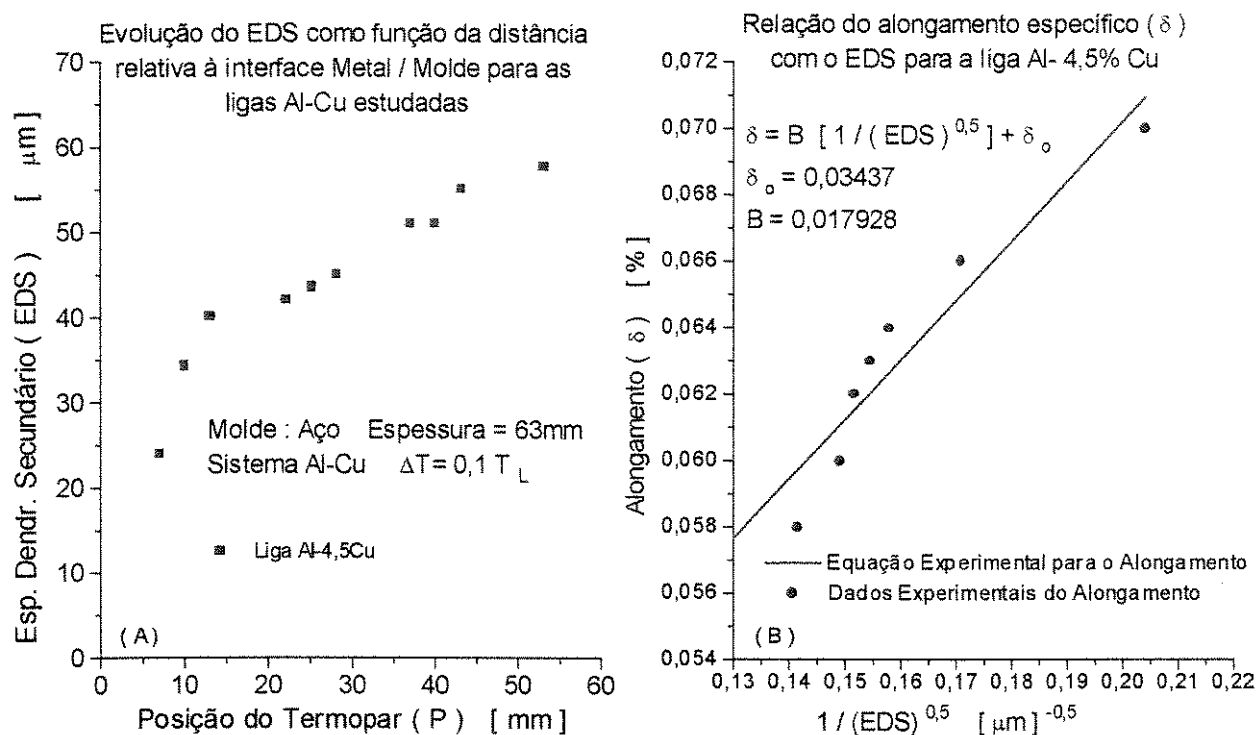


Figura 6.20 - Relação entre o EDS e (A) a posição do termopar e (B) o alongamento específico para as duas ligas estudadas.

A Figura 6.21 apresenta uma correlação entre os resultados experimentais do limite de resistência à tração (σ_u) e os correspondentes valores médios de EDS observados em cada corpo de prova. Pode-se notar, para as duas composições químicas, a nítida tendência de crescimento de σ_u com a diminuição de EDS, tendência que pode ser refletida por expressões semelhantes, na forma à conhecida equação de Hall-Petch [Hall, 1951; Petch, 1953], e que são mostradas na Figura 6.20B para o alongamento específico da liga Al- 4,5%Cu, e na Figura 6.21 para o limite de resistência à tração das duas ligas estudadas. Essas expressões, devidamente conectadas às equações de Bouchard-Kirkaldy [Bouchard/Kirkaldy, 1997], e à equação 3.110, que permite a determinação de V_L , fornecem caminhos de programação de propriedades mecânicas em função das características estabelecidas durante o processo de solidificação. A importância da interligação em série dessas expressões está exatamente na visualização que confere no sentido de se estabelecer quais os parâmetros de solidificação que podem ser modificados (e quanto), para que um

determinado nível de resistência mecânica possa ser alcançado tal como estabelecido no item 3.63 deste trabalho [Equação 3.133].

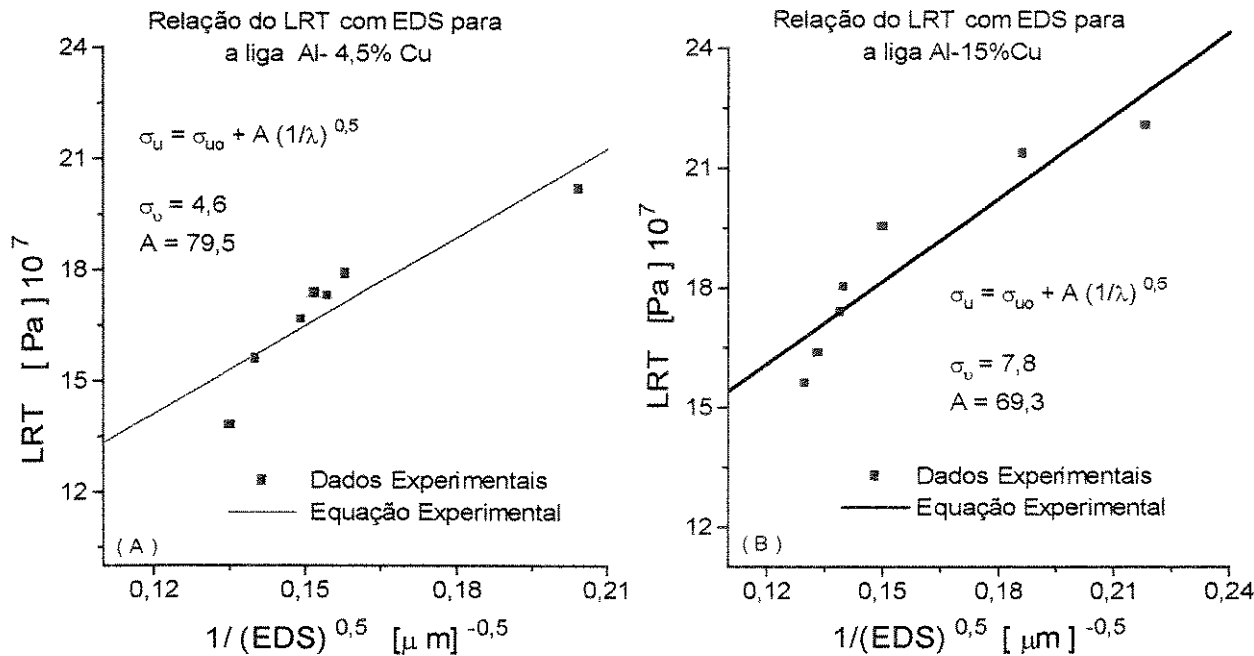


Figura 6.21 - Relação do limite de resistência à tração (LRT) com espaçamento dendrítico secundário (EDS) para (A) liga Al- 4,5%Cu e (B) liga Al- 15%Cu vazadas em molde de aço de espessura **63 mm** e $\Delta T = 0,1T_L$.

Trabalhando-se com a Equação 3.110, pode-se obtê-la na forma apresentada a seguir, modificando-a primeiro com as Equações 3.45a. e b, em seguida com as Equações 3.93; 3.64; 3.91 e 3.53:

$$V_L = \frac{1}{2\alpha_L S_L + \beta_L} = \frac{2a_2 \phi_2^2}{S_L + \frac{\phi_2}{n\phi_1} S_0} = \frac{2a_2 \phi_2^2}{S_L + L_0}, \quad 6.1$$

ou

$$V_L = \frac{2a_2 \phi_2^2}{S_L + \left[\frac{2k_1 \phi_2 (T_S - T_0)}{n\sqrt{\pi} \cdot \exp(\phi_1^2) (T_L - T_0) [\text{erf}(\phi_1) + M] h_i} \right]}. \quad 6.2$$

Com os dados termofísicos retirados da Tabela 5.1 e da Figura 6.23, pode-se chegar a resultados, que comparados com resultados experimentais, resultam nas curvas mostradas na Figura 6.22.

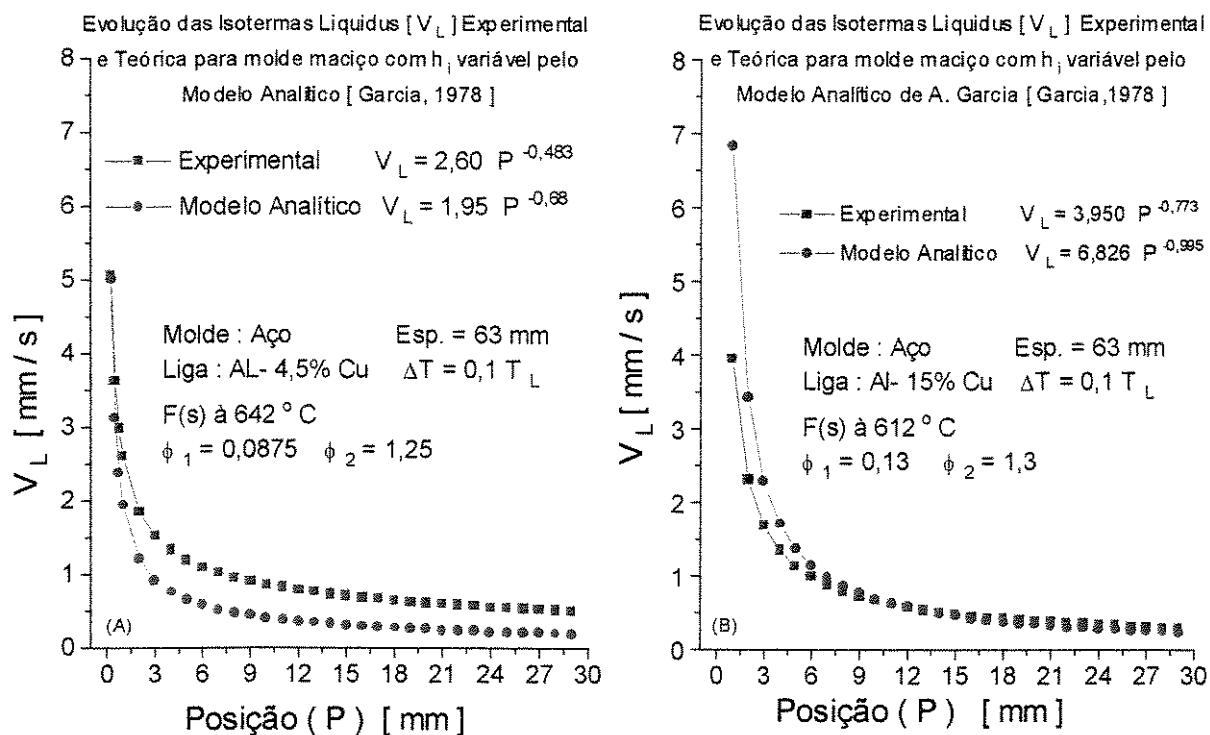


Figura 6.22 - Relação entre V_L obtido experimentalmente e calculado pela Equação 6.2, para as ligas (A) Al- 4.5%Cu e (B) Al- 15%Cu vazadas em moldes maciços de aço.

Apesar da existência de uma diversidade de valores para as propriedades termofísicas de ligas Al-Cu na literatura, e do fato da consideração de valores médios dessas propriedades no intervalo de solidificação na aplicação do modelo analítico, a concordância observada entre os perfis de V_L teóricas e experimentais são bastante razoáveis conforme observa-se na Figura 6.22. Na busca de maior precisão até mesmo um fator de calibração poderia ser adotado a exemplo do sugerido por Bouchard e Kirkaldy [Bouchard/Kirkaldy, 1996; 1997], para o caso dos espaçamentos interdendríticos. Esta concordância observada confere um grau de confiabilidade suficiente para que a Equação 6.2 possa ser inserida na equação que determina EDS, proposta por Bouchard e Kirkaldy (Equação 2.79) que fica dada por:

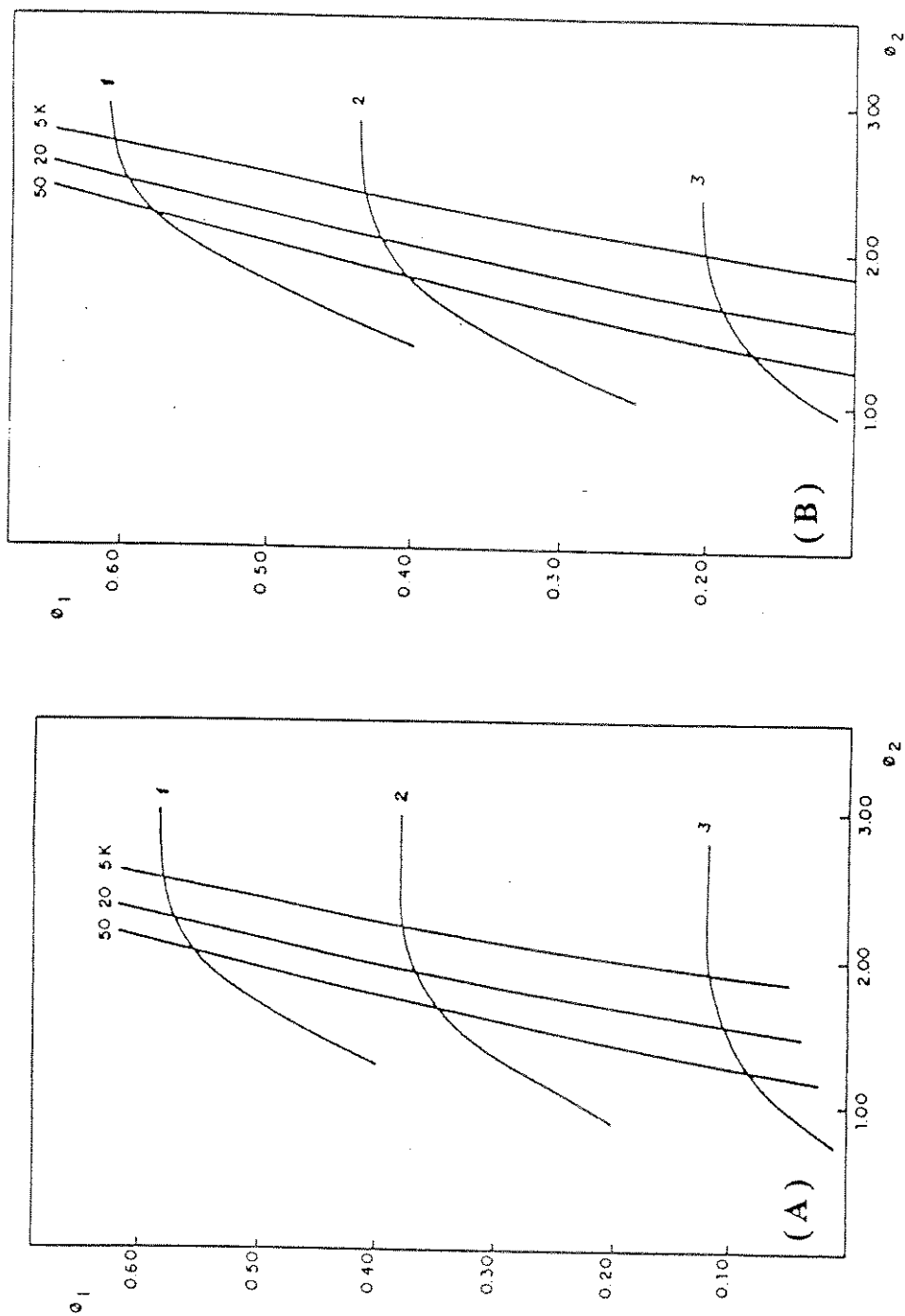


Figura 6.23 - Curvas para determinação das constantes de solidificação, ϕ_1 e ϕ_2 , para diferentes superaquecimentos e moldes (1 - molde refrigerado; 2 - molde maciço de cobre e 3 - molde maciço de aço). A) Al-4,5% Cu B) Al-15% Cu [Ynoue, 1992]

$$\lambda_2 = 2\pi g_2 \left\{ \frac{4\sigma_{SL} D_L^2}{C_0(1-K_0)^2 L} \left[\frac{2a_2 \phi_2^2}{S_L + \frac{2k_1 \phi_2^2 (T_S - T_0)}{n\sqrt{\pi} \exp(\phi_1^2) (T_L - T_0) [\text{erf}(\phi_1) + M] h_i}} \right]^{-2} \right\}^{\frac{1}{3}} \quad 6.3$$

O limite de resistência à tração e o alongamento específico ficam determinados por expressões do tipo das Equações 6.4 e 6.5, dadas a seguir :

$$\sigma_u = \sigma_{u0} + A^* \left\{ 2\pi g_2 \left\{ \frac{4\sigma_{SL} D_L^2}{C_0(1-K_0)^2 L} \left[\frac{2a_2 \phi_2^2}{S_L + \frac{2k_1 \phi_2^2 (T_S - T_0)}{n\sqrt{\pi} \exp(\phi_1^2) (T_L - T_0) [\text{erf}(\phi_1) + M] h_i}} \right]^{-2} \right\}^{\frac{1}{3}} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad 6.4$$

e

$$\delta = \delta_0 + B^* \left\{ 2\pi g_2 \left\{ \frac{4\sigma_{SL} D_L^2}{C_0(1-K_0)^2 L} \left[\frac{2a_2 \phi_2^2}{S_L + \frac{2k_1 \phi_2^2 (T_S - T_0)}{n\sqrt{\pi} \exp(\phi_1^2) (T_L - T_0) [\text{erf}(\phi_1) + M] h_i}} \right]^{-2} \right\}^{\frac{1}{3}} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad 6.5$$

As Equações 6.4 e 6.5 permitem estabelecer uma correspondência direta entre as características mecânicas (σ_u e δ) e as condições de solidificação do sistema metal/molde.

No caso particular das ligas Al-Cu deve-se aplicar $g_2 = 7,8$ conforme discutido anteriormente ou seja :

- Al- 4,5% Cu:

$$\sigma_u = \{4,6 + 305,28 \left\{ \frac{3,918 \phi_2^2}{S_L + 31.487,15 \frac{\phi_2^2}{\exp(\phi_1^2)[\operatorname{erf}(\phi_1) + M]h_i}} \right\}^{\frac{1}{3}} \} 10^7 \quad 6.6$$

onde σ_u é dado em [Pa]

e

$$\delta = 0,03437 + 0,06912 \left\{ \frac{3,918 \phi_2^2}{S_L + 31.478,15 \frac{\phi_2^2}{\exp(\phi_1^2)[\operatorname{erf}(\phi_1) + M]h_i}} \right\}^{\frac{1}{3}} [\%] \quad 6.7$$

- Al- 15% Cu:

$$\sigma_u = \{7,8 + 329,175 \left\{ \frac{6,506 \phi_2^2}{S_L + 42.788,25 \frac{\phi_2^2}{\exp(\phi_1^2)[\operatorname{erf}(\phi_1) + M]h_i}} \right\}^{\frac{1}{3}} \} 10^7 \quad 6.8$$

onde σ_u é dado em [Pa]

Nas Equações 6.6; 6.7 e 6.8 tem-se S_L [mm] e h_i [W / mm².K] .

Vê-se, pelas expressões anteriores, que uma eventual programação estrutural e de resistência mecânica dessas ligas depende de variáveis de solidificação tais como: M , que consiste no parâmetro metal/molde e portanto reflete o molde adotado; M e ΔT , refletidos nos valores de ϕ_1 e ϕ_2 ; S_L , que caracteriza a posição a partir da interface metal/molde e, finalmente, h_i que determina a condutância térmica entre metal e molde.

É interessante acrescentar que se o objetivo fosse estabelecer uma correlação entre as condições de solidificação e o espaçamento dendrítico primário (EDP) como parâmetro estrutural, de acordo com os modelos de crescimento dendrítico teóricos e mais expressivos na literatura (Hunt, Kurz-Fisher, Bouchard-Kirkaldy], EDP teria uma dependência de G_L e V_L e não somente de V_L , como é o caso de EDS. A literatura não mostra nenhum tipo de correlação analítica ligando G_L e V_L . Todos os modelos anteriores mencionados apresentam estas duas variáveis independentes como pode ser visto nas Equações 2.66; 2.67B e 2.69 do capítulo 2 deste trabalho. Em publicações recentes, Bouchard e Kirkaldy[Bouchard/Kirkaldy,1996;1997] chegam a mencionar, por meio de cálculos numéricos que se observa uma relação quase linear entre G_L e V_L . Entretanto, a manipulação analítica desenvolvida no capítulo 3 demonstra exatamente a linearidade entre G_L e V_L e também entre G_{SL} e V_L , dadas pelas Equações 3.115b e 3.118b:

$$G_L = \frac{4m\phi_2(T_V - T_L)\alpha_L}{\sqrt{\pi}[1 - \text{erf}(m\phi_2)]\exp(m\phi_2)} V_L \quad , \quad 6.9$$

e

$$G_{SL} = \frac{4\phi_2(T_L - T_S)\alpha_L}{\sqrt{\pi}[\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)]\exp(\phi_2^2)} V_L \quad . \quad 6.10$$

Uma vez fixado o sistema metal/molde e o superaquecimento utilizado no vazamento, reduzem-se a expressões do tipo:

$$G_L = q_1 \cdot V_L, \text{ e} \quad 6.11$$

$$G_{SL} = q_2 \cdot V_L, \quad 6.12$$

onde q_1 e q_2 são constantes.

Isto demonstra que os modelos de crescimento dendrítico primário podem ser completamente descritos apenas por V_L , já que os gradientes térmicos mencionados apresentam dependência direta desta variável.

Capítulo 7

7 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA PRÓXIMOS TRABALHOS

7.1 Conclusões

A análise teórica desenvolvida neste trabalho, os resultados experimentais obtidos e analisados e as comparações realizadas permitem que sejam extraídas as seguintes conclusões:

7.1.1 - A técnica de confronto de perfis de temperatura teóricos e experimentais na determinação dos coeficientes de transferência de calor (h_i) demonstrou que o modelo numérico aplicado é extremamente versátil e confiável, sendo o coeficiente de transferência de calor molde/ambiente (h_{Amb}) calculado analiticamente.

A) Sistema Sn-Pb.

Influência da Espessura do Molde de Aço:

liga Sn- 10% Pb

$\Delta T = 40\text{ }^{\circ}\text{C}$

Espessuras	h_i [W / m ² .K]	h_{Amb} [W / m ² . K]
06 mm	$h_i = t^{-0,47} * 20.500$	$h_{Amb} = t^{0,158} * 8,08$
17 mm	$h_i = t^{-0,47} * 18.500$	$h_{Amb} = t^{0,133} * 8,40$
28 mm	$h_i = t^{-0,47} * 15.000$	$h_{Amb} = t^{0,138} * 7,27$
39 mm	$h_i = t^{-0,47} * 11.500$	$h_{Amb} = t^{0,143} * 6,80$
50 mm	$h_i = t^{-0,47} * 9.600$	$h_{Amb} = t^{0,098} * 7,90$

Influência do Grau de Superaquecimento do Metal Líquido:

liga Sn- 10% Pb

Espessura do molde de aço = 50 mm

Superaquecimento

$$\Delta T = 20 \text{ }^{\circ}\text{C} \quad h_i = t^{-0,47} * 9.600 \quad [\text{W} / \text{m}^2. \text{K}]$$

$$\Delta T = 40 \text{ }^{\circ}\text{C} \quad h_i = t^{-0,47} * 9.600 \quad [\text{W} / \text{m}^2. \text{K}]$$

$$\Delta T = 70 \text{ }^{\circ}\text{C} \quad h_i = t^{-0,47} * 11.500 \quad [\text{W} / \text{m}^2. \text{K}]$$

$$\Delta T = 100 \text{ }^{\circ}\text{C} \quad h_i = t^{-0,47} * 14.800 \quad [\text{W} / \text{m}^2. \text{K}]$$

$$h_{\text{Amb}} = t^{0,098} * 7,90 \quad [\text{W} / \text{m}^2. \text{K}]$$

Influência do Intervalo de Solidificação:

Espessura do molde de aço = 50 mm

$$\Delta T = 0,2 T_L$$

Composição

$$\text{Liga Sn- 5\% Pb} \quad h_i = t^{-0,47} * 18.000 \quad [\text{W} / \text{m}^2. \text{K}]$$

$$\text{Liga Sn- 10\% Pb} \quad h_i = t^{-0,47} * 9.600 \quad [\text{W} / \text{m}^2. \text{K}]$$

$$\text{Liga Sn- 20\% Pb} \quad h_i = t^{-0,47} * 8.400 \quad [\text{W} / \text{m}^2. \text{K}]$$

$$\text{Liga Sn- 38,1 \% Pb} \quad h_i = t^{-0,47} * 7.800 \quad [\text{W} / \text{m}^2. \text{K}]$$

$$\text{Sn- Puro} \quad h_i = t^{-0,47} * 6.800 \quad [\text{W} / \text{m}^2. \text{K}]$$

$$h_{\text{Amb}} = t^{0,098} * 7,90 \quad [\text{W} / \text{m}^2. \text{K}]$$

B) Sistema Al-Cu.

Influência do Intervalo de Solidificação:

Espessura do molde de aço = 63 mm

$$\Delta T = 0,1 T_L$$

Composição

Liga Al-4,5% Cu	$h_i = t^{-0,17} * 8.650 \text{ [W / m}^2 \cdot \text{K]}$
-----------------	--

Liga Al- 15% Cu	$h_i = t^{-0,543} * 17.000 \text{ [W / m}^2 \cdot \text{K]}$
-----------------	--

Liga Al- 33% Cu	$h_i = t^{-0,43} * 3.100 \text{ [W / m}^2 \cdot \text{K]}$
-----------------	--

Al- Puro	$h_i = t^{-0,17} * 2.000 \text{ [W / m}^2 \cdot \text{K]}$
----------	--

$$h_{Amb} = t^{0,27} * 5,1 \text{ [W / m}^2 \cdot \text{K]}$$

Influência do Grau de Superaquecimento do Metal Líquido:

Alumínio Puro

Espessura do molde de aço = 63 mm

Superaquecimento

$\Delta T = 0,2 T_L$	$h_i = t^{-0,47} * 12.500 \text{ [W / m}^2 \cdot \text{K]}$
----------------------	---

$\Delta T = 0,1 T_L$	$h_i = t^{-0,17} * 2.000 \text{ [W / m}^2 \cdot \text{K]}$
----------------------	--

$$h_{Amb} = t^{0,27} * 5,1 \text{ [W / m}^2 \cdot \text{K]}$$

7.1.2 - A comparação entre resultados experimentais, relativos à velocidade de deslocamento das isotermas liquidus (V_L) das ligas Al- 4,5% Cu e Al- 15% Cu, apresentaram boa concordância com os resultados calculados pelo modelo analítico, o que permite que V_L seja definida por:

$$V_L = \frac{2a_2\phi_2^2}{S_L + \left[\frac{2k_1\phi_2(T_S - T_0)}{n\sqrt{\pi} \cdot \exp(\phi_1^2)(T_L - T_0)[\text{erf}(\phi_1) + M]h_i} \right]}$$

7.1.3 - A análise experimental da estrutura dendrítica das ligas Al- 4,5% Cu e Al- 15% Cu, através dos espaçamentos secundários (EDS), mostrou que a equação de Bouchard-Kirkaldy, devidamente calibrada com o coeficiente $g_2 = 7,8$, permite a determinação confiável de EDS para ligas do sistema Al-Cu. A inserção da expressão analítica de V_L nesta equação permite estabelecer uma correlação direta entre esse parâmetro microestrutural e as condições de solidificação, na forma:

$$\lambda_2 = 2\pi g_2 \left\{ \frac{4\sigma_{SL} \cdot D_L^2}{C_0(1-K_0)^2 L} \left[\frac{2a_2\phi_2^2}{S_L + \frac{2k_1\phi_2^2(T_S - T_0)}{n\sqrt{\pi} \exp(\phi_1^2)(T_L - T_0)[\text{erf}(\phi_1) + M]h_i}} \right]^2 \right\}^{\frac{1}{3}}$$

7.1.4 - A análise das expressões do modelo analítico demonstrou que a velocidade de deslocamento da isoterma liquidus (V_L) pode ser função de outros importantes parâmetros térmicos do processo, como os gradientes térmicos no metal líquido (G_L) e na zona pastosa (G_{SL}) junto à interface zona pastosa/líquido. Neste sentido, verificou-se uma dependência linear desses gradientes com V_L na forma:

$$G_L = \frac{4m\phi_2(T_V - T_L)\alpha_L}{\sqrt{\pi}[1 - \text{erf}(m\phi_2)]\exp(m\phi_2)} V_L, e$$

$$G_{SL} = \frac{4\phi_2(T_L - T_S)\alpha_L}{\sqrt{\pi}[\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)]\exp(\phi_2^2)} V_L.$$

7.1.5 - A análise experimental, relativa aos ensaios de tração realizados com corpos de prova característicos de diferentes valores de EDS para as ligas Al- 4,5% Cu e Al- 15% Cu, demonstrou que o comportamento mecânico é dependente dos valores de EDS na forma :

- Al- 4,5% Cu

$$\sigma_u = [4,6 + \frac{79,5}{\lambda_2^{(1/2)}}].10^7 \text{ [Pa]} .$$

$$\delta = [0,03437 + \frac{0,017928}{\lambda_2^{(1/2)}}].10^7 \text{ [\%]} ;$$

- Al- 15% Cu

$$\sigma_u = [7,8 + \frac{69,3}{\lambda_2^{(1/2)}}].10^7 \text{ [Pa]} .$$

7.1.6 - A inserção da expressão de EDS de Bouchard-Kirkaldy, devidamente calibrada e modificada com a expressão de V_L do modelo analítico, nas equações experimentais de σ_u e δ , permite que sejam determinadas expressões analíticas interligando essas características mecânicas e as condições vigentes durante a solidificação, sendo dadas por:

- **Al- 4,5% Cu**

$$\sigma_u = \{4,6 + 305,28 \left[\frac{3,918 \phi_2^2}{S_L + 31.487,15 \frac{\phi_2^2}{\exp(\phi_1^2)[\operatorname{erf}(\phi_1) + M]h_i}} \right]^{\frac{1}{3}} \} 10^7 \text{ [Pa] , e}$$

$$\delta = 0,03437 + 0,06912 \left[\frac{3,918 \phi_2^2}{S_L + 31.478,15 \frac{\phi_2^2}{\exp(\phi_1^2)[\operatorname{erf}(\phi_1) + M]h_i}} \right]^{\frac{1}{3}} \text{ [\%] .}$$

- **Al - 15% Cu**

$$\sigma_u = \{7,8 + 329,175 \left[\frac{6,506 \phi_2^2}{S_L + 42.788,25 \frac{\phi_2^2}{\operatorname{Exp}(\phi_1^2)[\operatorname{erf}(\phi_1) + M]h_i}} \right]^{\frac{1}{3}} \} 10^7 \text{ [Pa] .}$$

7.1.7 - A análise teórica experimental realizada permitiu o desenvolvimento de expressões analíticas que correlacionam o limite de resistência à tração (σ_u) e o alongamento específico (δ) com o espaçamento dendrítico secundário (EDS) nas seguintes formas genéricas:

$$\sigma_u = \sigma_{u0} + A^* \left\{ 2\pi g_2 \left\{ \frac{4\sigma_{SL} D_L^2}{C_0(1-K_0)^2 L} \left[\frac{2a_2 \phi_2^2}{S_L + \frac{2k_1 \phi_2^2 (T_S - T_0)}{n\sqrt{\pi} \exp(\phi_1^2) (T_L - T_0) [\text{erf}(\phi_1) + M] h_i}} \right]^{-2} \right\}^{\frac{1}{3}} \right\}^{\frac{1}{2}}$$

e

$$\delta = \delta_0 + B^* \left\{ 2\pi g_2 \left\{ \frac{4\sigma_{SL} D_L^2}{C_0(1-K_0)^2 L} \left[\frac{2a_2 \phi_2^2}{S_L + \frac{2k_1 \phi_2^2 (T_S - T_0)}{n\sqrt{\pi} \exp(\phi_1^2) (T_L - T_0) [\text{erf}(\phi_1) + M] h_i}} \right]^{-2} \right\}^{\frac{1}{3}} \right\}^{\frac{1}{2}}$$

7.2 Sugestões para Próximos Trabalhos

7.2.1 - Estender a análise desenvolvida neste trabalho a outras ligas de interesse na fundição, para correlacionar características mecânicas com condições de solidificação.

7.2.2 - Analisar, para o mesmo sistema metálico utilizado, a influência de moldes de diferentes materiais sobre a microestrutura resultante e as características mecânicas finais.

7.2.3 - Analisar a influência da geometria do molde sobre a evolução dos coeficientes de transferência de calor da interface metal/molde durante a solidificação.

7.2.4 - Analisar experimentalmente a evolução de gradientes térmicos no líquido e na zona pastosa e correlacioná-los com a velocidade de deslocamento da isoterma liquidus, no sentido de confirmar a real dependência e até mesmo a eventual necessidade da utilização de um fator de calibração.

Referências Bibliográficas

Artigos Técnico/Científicos

- ADAMS, C.M.** - Thermal Considerations in Freezing, Liquid Metals and Solidification, **American Society for Metals**, 1958.
- BAMBERGER, M.; Weiss, B.Z. & Stupel, M.M.** - Heat Flow and Dendritic Arm Spacing in Chill-Cast Al-Si Alloys, **Materials Science and Technology**, v.03, pp.49-56, 1987.
- BOUCHARD, D. & Kirkaldy, J.S.** - Prediction of Dendrite Arm Spacings in Unsteady-and Steady-State Heat Flow of Unidirectionally Solidified Binary Alloys, **Metallurgical and Materials Transactions B**, v.28B, pp.651-663, 1997.
- BOWER, T.F.; Brody, H.D. & Flemings, M.C.** - Measurements of Solute Redistribution in Dendritic Solidification, **Transactions of the AIME**, v.236, pp.624-634, 1966.
- BRIMACOMBE, J.K.; Samarasekera, I.V. & Bommaraju, R.** - Optimum Design and Operation of Moulds for the Continuous Casting of Steel Billets, Fifth International Iron and Steel Congress, **Steelmaking Proceedings**, Washington D.C., V.69, pp.409-423, 1986.
- BRIMACOMBE, J.K. & Samarasekera, I.V.** - Fundamental Aspects of the Continuous Casting of Near-Net-Shape Steel Products, **The Metallurgical Society**, pp.3-24, 1988.
- BRIMACOMBE, J.K.** - Empowerment with Knowledge-Toward the Intelligent Mold for the Continuous Casting of Steel Billets, **Iron & Steelmaker**, pp.35-47, 1993.
- BRODY, H.D. & Flemings, M.C.** - Solute Redistribution in Dendritic Solidification, **Transactions of the AIME**, v.236, pp.615-624, 1966.
- BURTON, J. A. & Slichter, W.P.** - **Journal of Chemical Physics**, v.21, pp.1997, 1953.
- CALDWELL, T.W.; Campagna, A.J.; Flemings, M.C. & Mehrabian, R.** - Refinement of Dendrite Arm Spacings in Aluminum Ingots Through Heat Flow Control, **Metallurgical Transactions B**, v.8B, n.3, pp.261-270, 1977.

- CARAM, R & Garcia, A.**; The Use of Dendritic Microstructure Growth to Evaluate the Metal-Mold Heat Transfer Coefficient in the Foundry Process; **1 MechE Conference Transactions, The Institution of Mechanical Engineers**, London, V. 2, p 555-559, 1995.
- CHIEN, K. & Kattamis, T.Z.** - Role of Dendritic Coarsening and Coalescence in the Establishment of Cast Microstruture, **Zeitschrift fur Metallkunde**, v.61, n.6, pp.475-479, 1970.
- CHIESA, F.** - Measurement of the Thermal Conductance at the Mold/Metal Interface of Permanent Molds, **AFS Transaction**, v.98, pp.193-200, 1990.
- CLYNE, T.W. & Kurz, W.** - Solute Redistribution During Solidification with Rapid Solid State Diffusion, **Metallurgical Transactions**, v.12A, pp.965-971, 1981.
- CLYNE, T.W.; Garcia, A.; Ackermann, P. & Kurz, W.** - The Use of Empirical, Analytical and Numerical Models to Describe Solidification of Steel During Continuous Casting, **Journal of Metals**, v.34, pp.34-39, 1982.
- DING, G.L. et alli**, - On Primary Dendritic Spacing During Unidirectional Solidification, **Acta Materialia**, v.44, n.9, pp. 3705-3709, 1996.
- DUPOUY, M.D.; Camel, D. & Favier, J.J.** - Natural Convection in Directional Dendritic Solidification of Metallic Alloys - I: Macroscopic Effects, **Acta Metallurgica**, v.37, pp. 1143-1157, 1989.
- EDVARDSSON, T.; Fredriksson,H. & Svensson,I.** - A Study of the Solidification Process in Low-carbon Manganese Steel, **Metals Science**, v.10, n.9, pp298-306, 1976.
- EI-MAHALLAWY, N.A. & Assar, A.M.** - Effect of Melt Superheat on Heat Transfer Coefficient for Aluminium Solidifying Against Copper Chill, **Journal of Materials Science**, v.26, pp.1729-1733, 1991.
- ESHELMAN, M.A.;Seetharaman, V. & Trivedi, J.W.** - Cellular Spacings I: Steady State Growth, **Acta Metallurgica**, v.36, n.4 pp.1165-1174,1988.
- EVANS, J.F.; Kirkwood, D.H. & Bresch, J.** - The Determination of Metal/Mold Interfacial Heat Transfer Coefficients and the Prediction of Gross Shrinkage Cavities in Chill Mold Castings, **The Minerals, Metals & Materials Society**, 1991.

- FEURER, U.** - Influence of Alloy Composition and Solidification Conditions on Dendrite Arm Spacing, Feeding and Hot Tearing Properties of Aluminium Alloys. In: **PROCEEDINGS OF THE SYMPOSIUM ON QUALITY CONTROL OF ENGINEERING ALLOYS**, Delft, pp.131-145, 1977.
- FLEMINGS, M.C.; Poirier, D.R.; Barone, R.V. & Brody, H.D.** - Microsegregation in Iron-Base alloys, **Journal of the Iron and Steel Institute**, v.208, n.4, pp.371-381, 1970.
- FORTIN, G.; Louchez, P. & Samuel, F.H.** - Factors Controlling Heat Transfer Coefficient at the Metal/Mold Interface During Solidification of Aluminum Alloys an Analytical Study, **AFS Transaction**, v.92, pp.863-871, 1992.
- GARCIA, A.** - Mathematical Heat Transfer Model for the Analysis of Solidification of Binary Alloys, In: **Mult-Phase Flow and Heat Transfer III - Part B: Applications**, Elsevier Science Publishers, PP.541-603, Amsterdam, 1984.
- GARCIA, A. & Prates, M.** - Mathematical Model for the Unidirectional Solidification of Metals I: Cooled Molds, **Metallurgical Transactions**, v.98, pp.449-453, 1978.
- GARCIA, A. Clyne, T.W. & Prates, M.** - Mathematical Model for the Unidirectional Solidification of Metals II: Massive Molds, **Metallurgical Transactions**, v.108, pp.85-92, 1979.
- GARCIA, A & Clyne, T.W.;** - A Versatile Technique for Characterization of Metal-Mold Heat Transfer and Correlation with Thermal and Structural Effects. In: **Solidification Technology in the Foundry and Casthouse; The Metals Society**; pp 33-39, 1983.
- GRIFFITH, R.; & Nassersharif, B.** - Comparison of One-Dimensional Interface-Following and Enthalpy Methods for the Numerical of Phase Change, **Numerical Heat Transfer, Part B**, v.18, pp.169-187, 1990.
- HAN, S.H & Trivedi, R.** - Primary Spacing Selection in Directionally Solidified Alloys, **Acta Metallurgica and Materialia**, v.42, n.1, pp. 25-41, 1994.
- HILLS, A.W.D.** - Simplified Theoretical Treatment for the Transfer of Heat in Continous Casting Machine Moulds, **Journal Iron and Steel Institute**, v.203, p18, 1965.
- HILLS, A.W.D.** - Heat and Mass Transfer in Process Metallurgy, **Institute Mineration and Metallurgy, London**, 1967.

- HILLS, A.W.D.** - A Generalized Integral - Profile Method for the Analysis of Unidirectional Heat Flow During Solidification, **Trans. AIME**, v.245, p.1471, 1969.
- HO, K. & Pehlke, R.D.** - Transient Methods for Determination of Metal-Mold Interfacial Heat Transfer; **AFS Transactions** 7 v.91, pp.689-698, 1983.
- HO, K. & Pehlke, R.D.** - Mechanisms of Heat Transfer at a Metal/Mold Interface, **Transactions of the American Foundry Society**, v.92, pp.587, 1984.
- HO, K. & Pehlke, R.D.**, Metal-Mold Interface Heat Transfer; **AFS Transactions**; v.92, pp.587-598, 1985.
- HUANG, S-C; Glicksman, M.E.** - **Acta Metallurgica**, v.29, p.701, 1981.
- HUNT, J.D.** - Keynote Address: Cellular and Primary Dendrite Spacings. In: **INTERNATIONAL CONFERENCE ON SOLIDIFICATION AND CASTING OF METALS**, 1977, Sheffield, Proceedings, London, Metals Society, pp.3-9, 1979.
- HUNT, J.D.** - Steady State Columnar and Equiaxed Growth of Dendrites and Eutectic, **Materials Science and Engineering**, v.65, pp.75-83, 1984.
- IRVING, W.R.** Heat Transfer in Continuous Casting Mould; **Journal of the Iron and Steel Institute**, pp. 271-277 (1967).
- JACKSON, K. A. & Hunt, J.D.** - Lamellar and Rod Eutectic Growth, **Transactions of the AIME**, v.236, pp.1129-1142, 1966.
- JACOBI, H. & Pitsch, W.** - Investigation of the Crystallization Sequence During Solidification of Low Alloy Steels, **Archiv Eisenhüttenwes**, v.46, p.417, 1975.
- JACOBI, H. & Schwerdtfeger, K.** - Dendrite Morphology of Steady-state Unidirectionally Solidified Steel, **Metallurgical Transactions A**, v.7A., pp.811-820, 1976.
- JONG, S.H. & Hwang, W.S.** - Study of Functional Relationship of Fraction of Solid with Temperature in Mushy Range for A356 Al Alloy, **AFS Transactions**, v.100, pp.1067-1077, 1992.
- JUCÁ, P.C.S.** - Malhas Adaptativas: Implantação e Comparação Crítica dos Métodos Disponíveis, **Anais 12 COBEM**, pp.137-140, Brasília, 1993.
- KIRKWOOD, D.H.** - A Simple Model for Dendrite Arm Coarsening During Solidification, **Materials Science and Engineering**, v.73, LI, 1985.

- KOBAYASHI, I.** - Solute Redistribution during Solidification with Diffusion in Solid Phase: A Theoretical Analysis, **Journal of Crystal Growth**, v.88, pp.87-96, 1988.
- KOBAYASHI, I.** - Mathematical Analysis of Solute Redistribution during Dendritic Solidification, **Transation ISIJ**, v.28, pp.535-542, 1988.
- KRISHNAN, M. & Sharma, D.G.R.** - Determination of Heat Transfer Coefficient between Casting and Chill in Unidirectional Heat Flow, **AFS Transactions**, v.99, pp.769-774, 1991.
- KRISHNAN, M. & Sharma, D.G.R.** - Determination of Heat Transfer Coefficient in Unidirectional Heat Flow by Beck's Non Linear Estimation Procedure, **Int. Comm. Heat Mass Transfer**, v.23, n.2, pp.203-214, 1996.
- KOHN, A. & Morillon, Y.** - Étude Mathematique de la Solidification de Lingots de 12 Tonnes, **Revue de Metallurgie**, pp. 321, 1965.
- KUMAR, K.T. & Namburu, R.R.** - Recent Advances, Trends and New Perspectives via Enthalpy-Based Finite Element Formulation for Application to Solidification Problems, **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v.30, pp.803-820, 1990.
- KUMAR,S.; Walker, B.N.; Samarasekera, I.V. & Brimacombe, J.K.** - Chaos at the Menisco- The Generation of Defects in Continuously Cast Steel Billets, **13 th PTD Conference Proceeding**, pp.119-141, 1993.
- KURZ, W. & Fisher, D.J.** - Dendrite Growth at the Limit of Stability: Tip Radius and Spacing, **Acta Metallurgica**,v.29, n.1, pp.11-20, 1981.
- LAXMANAN, V.** Morphological Transitions in the Rapid Solidification Regime: A Reexamination of the Fundamental Validity of the Absolute Stability Concept of Mullins-Sekerka, **Acta Metallurgica**, v.37, n.4, pp.1109-1119, 1989.
- LAXMANAN, V.** - The Gibbs-Thomson Effect during Cellular and Dendritic Solidification, **Scripta Materialia**, v.37, n.7, pp. 955-962, 1997.
- LAXMANAN, V.** - Cellular and Primary Dendritic Spacing in Directionally Solidified Alloys, **Scripta Materialia**, v.38, n.8, pp. 1289-1297, 1998
- LEE,J.; Mohr, J.H & Hwang, K.Y.** - The Effect of Thermal Contact Resistance on the Solidification Process of a Pure Metal, **Metallurgical and Materials Transactions A**, v.26A, pp.2341-2348, 1995.
- LONDON, A.L. & Seban, R.A.** - Rate of Ice Formation, **Trans. AIME**, v.64, p.771, 1943.

- McCARTNEY, D.G. & Hunt, J.D.** - Measurements of Cell and Primary Dendrite Arm Spacings in Directionally Solidified Aluminium Alloys, **Acta Metallurgica**, v.29, pp.1851-1863, 1981.
- MONDOLFO, L.F.** - Effect of Interfacial Energies on Heterogeneous Nucleation, **Materials Science and Technology**, v.05, pp. 118-122, 1989.
- MORTENSEN, A.** - On the Rate of Dendrite Arm Coarsening, **Metallurgical Transactions A**, v.22 A, pp.569-674, 1991.
- MOUJEKWU, C.A.; Samarasekera, I.V. & Brimacombe, J.K.** - Heat Transfer and Microstructure during the Early Stages of Metal Solidification, **Metallurgical and Materials Transaction B**, v.26B, pp. 361382, 1995.
- MULLINS, W.W. & SEKERKA, R.F.** - Stability of Planar Interface During Solidification of Dilute Binary Alloys, **Journal Applied Physics**, v.35, n.2, pp.444-451, 1964.
- MULLINS, W.W. & SEKERKA, R.F.** - A Stability Function for Explicit Evaluation of the Mullins-Sekerka Interface Stability Criterion, **Journal Applied Physics**, v.36, n.1, pp.264-268, 1965.
- NISHIDA, Y.; Droste, W. & Engler, S.** - The Air-Gap Formation Process at the Casting-Mold Interface and the Heat Transfer Mechanism through the Gap; **Metallurgical Transactions B**, v. 17B, pp. 833-844, 1986.
- NIYAMA, E. & Anzay, K.** - Solidification of Pure Metal in Imperfect Contact with a Mold, **Metallurgical Transaction B**, v.24B, pp.542-544, 1993.
- OHNAKA, I.** - Mathematical Analysis of Solute Redistribution during Solidification with Diffusion in Solid Phase, **Transation ISIJ**, v.26, pp. 1045-1051, 1986.
- OKAMOTO, T.; Matsuo, S. & Kishitake, K.** - Dendrite Arm Spacings in Iron-Carbon-Chromium Alloys, **Transactions of the Iron Steel Institute of Japan**, Tokyo, v.18, n.5, pp.289-294, 1978.
- OVERFELT, T.** - The Manufacturing Significance of Solidification Modeling, **The Journal of the Minerals & Materials Society**, pp.17-20, 1992.
- PASCHKIS, V.** - Rapport au Comité de Transfert de Chaleur, **American Foundrymen Society**, p.23, 1945.
- PASCHKIS, V.** - Influence of Properties on Solidification of Metals, **Trans. American Foundrymen's Society**, p.54, 1947

- PASCHKIS, V. - Solidification of Cylinders, **Trans. American Foudrymen's Society**, v. 61, p.161, 1953.
- PASCHKIS, V. - Study on Solidification of Steel Spheres, **Trans. American Foudrymen's Society**, v. 1948, p. 373, 1956.
- PATANKAR, S.V. - Recent Development in Computational Heat Transfer, **Journal of Heat Transfer**, ASME, v.110, pp. 1037-1045, 1988.
- PEREIRA, O. J.; Kuri, J.E. & Prates, M. - Influência da Capacidade de Extração de Calor do Sistema Metal/Molde no Tempo de Solidificação de Lingotes de Alumínio, **Anais do 2º Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais**, São Carlos (SP), 1976.
- PHAM, Q.T. - A Fast, Unconditionally Stable Finite-Difference Scheme for Heat Conduction with Phase Change, **International Journal Heat Mass Transfer**, v.28, n.11, pp.2079-1084, 1985.
- PIRES, O.S.;Prates, M. & Biloni, H. - Unidirectional Solidification of Metals with Zero Superheat-Case of Cooled Molds, **Zeit fur Metallkde**, v.65, p. 143, 1974.
- PIWONKA, T.S. - Process Modeling and Control in Foundry Operations, **Journal of Metals**, pp. 38-42, fevereiro-1989.
- POIRIER, D. & Salcudean, M. - On Numerical Method Used in Mathematical Modeling of Phase Change in Liquid Metals, **Transaction of the ASME**, v.110, pp.562-570, 1988.
- POIRIER, D.R; Yeum, K & Maples, A. C. - A Thermodynamic Prediction for Microporosity formation in Aluminium-Rich Al-Cu Alloys, **Metallurgical Transactions A**, v.18 A, pp. 1979-1987, 1987.
- PRABHU, K.N.; Madheswaran, D.; Kumar, T.S.P & Venkataraman, N. - Computer Modeling of Heat Flow and Microstruture Fineness in Chill-Cast Aluminum Alloy LM-24, **AFS Transactions**, v.92, pp.661-677, 1992.
- PRATES, M.; & Biloni, H. - Variable Affecting the Nature of the Chill Zone, **Metallurgical Transactions**, v.3, pp.1501-1510, 1972.
- PRATES, M.; Fissolo, J. & Biloni, H. - Heat Flow Parameters Affecting the Unidirectional Solidification of Pure Metals, **Metallurgical Transactions**, v.73, pp. 1419, 1972.

- QUARESMA, J.M.V.; Soeiro, N.S. & Garcia, A.** - Mecanismos de Formação de Marcas Superficiais em Lingotes: Fatores de Influência, **Anais do 7º Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais**, pp.131-134, 1986.
- QUARESMA, J. M V., Santos, C. A., Spim, J. A. Jr., Garcia, A.;** Determinação Experimental da Condutância Térmica da Interface Metal/Molde Durante a Solidificação em Sistemas Estáticos de Fundição; **Anais do XII Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciencia dos Materiais**, v.2, pp. 617-620, 1996.
- QUARESMA, J.M.V.; Santos, C.A.; Spim Jr., J.A. & Garcia, A.** - Influência do Material e da Espessura da Parede do Molde nos Coeficientes de Transferência de Calor nas Interfaces Metal/Molde e Mode/Ambiente, **CD do II Congresso Internacional de Tecnologia Metalúrgica e de Materiais - ABM 97**, São Paulo- SP, 1997.
- QUARESMA, J.M.V.; Santos, C.A.; Spim Jr., J.A. & Garcia, A.** - Coeficiente de Transferência de Calor Metal/Coquilha na Solidificação de Ligas do Sistema Al-Cu, **Anais do 13º Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais-CBECIMAT/98**, pp. 80-89,1998.
- QUARESMA, J.M.V.; Santos, C.A.; Spim Jr., J.A. & Garcia, A.** - Medidas dos Coeficientes de Transferência de Calor Metal/Molde na Solidificação de Metais e Ligas, **Anais do VII Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas -ENCIT**, v. 1, pp. 615-620, 1998.
- QUARESMA, J.M.V.; Santos, C.A.; Spim Jr., J.A. & Garcia, A.** - Transferência de Calor na Interface Metal/Molde na Fundição de Metais, **Anais do V Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica Norte-Nordeste- V CEM-NNE 98**, v. IV, pp.9-16, 1998.
- RABIN, Y. & Korin, E.** - An Efficient Numerical Solution for the Multidimensional Solidification (or Melting) Problem using a Microcomputer, **International Journal Heat Mass Transfer**, v.36, n.3, pp.673-683, 1993.
- REDDY, A.V. & Beckermann, C.** - Measurements of Metal-Mold Interfacial Heat Transfer Coefficients During Solidification of Sn and Sn-Pb Alloys, **Experimental Heat Transfer**, v.6, pp.121-129, 1993.
- ROBERTSON, S R Fascetta, E F.** - An Analytical Technique for the Determination of the Thermal Contact Resistance Between a Solidifying Metal and Mold; **Metallurgical Transactions B**; V.813, p.619-624, 1977.
- RUAN, Y.; Liu, J.C. & Richmond, O.** - A Deforming Finite Element Method for Analysis of Alloy Solidificaton Problems, **Finite Elements in Analysis and Design**, v.12, pp.49-63, 1993.

- SALCUDEAN, m. & Abdullah, Z.** On the Numerical Modelling of Heat Transfer During Solidification Processes, **International Journal fot Numerical Methods in Engineering**, v.25, pp. 445-473, 1988.
- SAMARASEKERA, I.V.; Brimacombe, J.K & Wilder, K.** - The Pursuit of Steel Billet Quality, **Iron & Steelmaking**, pp.53-63, 1994.
- SAMARSKII, A.A. et alli** - Numerical Simulation of Convection/Diffusion Phase Problems - A Review, **International Journal of Heat Mass Transfer**, v.36, n.17, pp.4095-4106, 1993.
- SANTOS, C.A.; Cheng, N.; Spim Jr., J.A. & Garcia, A.** - Análise Tridimensional da Solidificação de Ligas através de uma Abordagem Numérica Baseada na Analogia entre Sistemas Térmicos e Circuitos Elétricos, **Anais do VI Congresso Latinoamericano de Transferência de Calor y Materiais e VI Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas**, v.2, pp.969-972, 1996.
- SANTOS, C.A.; Spim Jr., J.A.; Quaresma, J.M.V. & Garcia, A.** - Aplicação de um Modelo Numérico na Determinação Experimental da Condutância Térmica da Interface Metal/Molde em Sistemas Estáticos de Fundição, **Anais do IX Seminário de Metais Não-Ferrosos da Associação Brasileira de Metalurgia e Materiais**, pp.197-202, 1996.
- SCIAMA, G.** - Transmission de Chaleur et Solidification, **Fonderie**, v. 97, p.267, 1968.
- SCIAMA, G.** - Calcul du Temps de Refroidissement de Jets Cylindriques Coules en Moules Metalliques, **Fonderie**, v. 218, p.138, 1964.
- SHARMA, D. G. R. & Krishnan, M.** - Simulation of Heat Transfer at Casting Metal-Mold Interface, **AFS Transaction**, v.91, pp. 429-38, 1991.
- SILVA, R.S. & Galcão, A.C.** - Formulações Adaptativas e sua Aplicação a Problemas de Convecção-Difusão, **Anais do 12º COBEM- Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, pp.197-200, Brasília, 1993.
- SPIM Jr., J.A. & Garcia, A.** - Modelagem Numérica da Solidificação Baseada na Analogia entre Sistemas Térmicos e Elétricos, **Anais do 10º Congresso de Engenharia e Ciências dos Materiais - CBECIMAT**, v.2, pp.594-597, 1995.
- SPIM Jr., J.A. & Garcia, A.** - Aplicação de um Modelo Numérico na Simulação da Solidificação de Secções Radiais em Sistemas Metal/Molde Complexos, **Anais do 50º Congresso da Associação Brasileira de Metais-ABM**, v.2, pp.319-332, 1995.

- SPITTLE, J.A. & Lloyd, D.M.** - Dendrite Arm Spacings in Hypoeutectic Pb-Sb Alloys Directionally Solidified Under Steady and Non-steady Conditions. In: **INTERNATIONAL CONFERENCE ON SOLIDIFICATION AND CASTING OF METALS**, 1977, Sheffield, Proceedings, London, Metals Society, pp.15-20, 1979.
- STEFANESCU, D.M.; Upadhy, G, & Bandyopadhyay, D.** - Heat Transfer-Solidification Kinetics Modeling of Solidification of Castings, **Metallurgical Transactions A**, v.21A, pp.997-1005, 1990.
- SULLY, L.J.D.** - The Thermal Interface Between Castings and Chill molds, **AFS Transactions**, v.84, pp.735-744, 1976.
- SWAMINATHAN, C.R. & Voller, V.R.** - A General Enthalpy Method for Modeling Solidification Processes, **Metallurgical Transactions B**, v. 23B, pp. 651-664, 1992.
- THÉVOZ, Ph; Desbiolles, J.L. & Rappaz, M.** - Modeling of Equiaxed Microstruture Formation in Casting, **Metallurgical Transactions A**, v.20A., pp.311-322, 1989.
- TILLER, W. A.** - The Redistribution of Solute During the Solidification of Metals, **Acta Metallurgica**, v.6, pp.428-437, 1953.
- TRIVEDI, R. et al.** - Interdendritic Spacing: Part I. Experimental Studies, **Metallurgical Transactions A**, v.15A,n.6, pp.967-975, 1984.
- TRIVEDI, R.** - Interdendritic Spacing: Part II. A Comparison of Theory and Experiments, **Metallurgical Transactions A**, v.15A,n.6, pp.977-982, 1984.
- VISKANTA, R.** - Heat Transfer During Melting and Solidification of Metals, **Journal of Heat Transfer**, ASME, v.110, pp. 1205-1229, 1988.
- VOLLER, V.R. & Cross, M.** - Accurate Solutions of Moving Boundary Problems Using the Enthalpy Method, **International Journal of Heat Mass Transfer**, v.24, pp.545-556, 1981.

- VOLLER, V.R. & Prakash, C.** - A Fixed Grid Numerical Modelling Methodology for Convection-Diffusion Mush Region Phase-Change Problems, **International Journal of Heat Mass Transfer**, v.30, n.8, pp.1709-1718, 1987.
- VOLLER, V.R. Brent, A.D. & Prakash, C.** - The Modelling of Heat, Mass and Solute Transport in Solidification Systems, **International Journal of Heat Mass Transfer**, v.32, n.9, pp.1719-1731, 1989.
- VOLLER, V.R.** - Fast Implicit Finite-Difference Method for the Analysis of Phase Change Problems, **Numerical Heat Transfer, Part B**, v.17, pp.155-169, 1990.
- VOLLER, V.R. & Swaminathan, C.R.** - General Source-Based Method for Solidification Phase Change, **Numerical Heat Transfer**, v.19, pp.175-189, 1991.
- VOORHEES, P.W.** - Coarsening in Binary Solid-liquid Mixtures, **Metallurgical Transactions A**, v.21A, pp.27-37, 1990.
- WANQI, J.** - Further Discussion on the Solute Redistribution during Dendritic Solidification of Binary Alloy, **Metallurgical and Materials Transactions**, v.25b, pp.731-739, 1994.
- WEINBERG, F. & Buhr, R.K.** - Solidification Studies of Steel Castings, The Solidification of Metals, **Iron and Steel Institute**, 1968.
- WINEGARD, W. A. & Chalmers, B.** - Supercooling and Dendritic Freezing In: Alloys, **Transactions of the ASM**, Metals Park, v.46, pp.1214-1224, 1954.
- WOLF, M. & Kurz, W.** - Solidification of Steel in Continuous Casting Moulds. In: **SOLIDIFICATION AND CASTING OF METALS**, pp.287-294, The Metals Society, 1979.
- WU, M.H.; Wang, Y.X.; Guo, T. & Zhang, Q.X.** - Computer-Aided Chill Design for Steel Casting, **ASF Transactions**, v.92, pp.27-35, 1992.
- YOUNG, K.P. & Kirkood, D.H.** - The Dendrite Arm Spacing of Aluminium-Copper Alloys Solidified Under Steady-State Conditions, **Metallurgical Transactions**, v.98, pp.871-878, 1975.

Teses

- GARCIA, A.** - Transferência de Calor e Solidificação no Processo de Lingotamento Contínuo, **Tese de Livre Docência, Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP/FEM/DEMA**, Campinas (SP), 1981.
- PIRES, O.S.** - Determinação da Cinética da Solidificação Unidirecional de Metais, **Dissertação de Mestrado**, Instituto Tecnológico da Aeronáutica, S.J. dos Campos(SP), 1972.
- PRATES, M.** - Influência de la Capacidad de Extracción Calórica del Sistema Metal/Molde sobre el Processo de Solidificacion, **Tese de Doutorado, Universidad Nacional del Sur, Argentina**, 1971.
- ROCHA, C.J.-** Efeito do Tratamento Termomecânico na Microssegragação de um Aço Maraging Grau 1900 MPa, **Dissertação de Mestrado**, UNICAMP-FEM-DEMA, Campinas(SP), pp.62 e 97, 1995.
- SANTOS, C.A.** - Influências das Taxas Direcionais de Resfriamento na Evolução da Solidificação em Sistemas Metal/Molde, **Dissertação de Mestrado**, UNICAMP-FEM-DEMA, Campinas(SP), 1997.
- SANTOS, R.G.** - Influência da Espessura da Parede do Molde no Tempo de Solidificação e na Estrutura de Fundição da Liga Al-12%Si, **Dissertação de Mestrado, DEM-UNICAMP**, Campinas(SP), 1977.
- SPIM Jr., J. A.** - Aplicação da Modelagem Matemática na Definição Integral da Solidificação para Projeto ou Reprogramação de Sistemas de Fundição, **Tese de Doutorado, UNICAMP/FEM/DEMA**, 1996.
- YNOUE, M.** - Modelagem Matemática da Solidificação de Ligas Binárias com Aplicação no Cálculo da Macrossegragação Inversa, **Dissertação de Mestrado**, UNICAMP-FEM-DEMA, Campinas(SP), 1992.
- ZIN, S. L. B.** - Determinação Direta e Cálculo da Taxa de Resfriamento de Gotas de Metal Fundido contra um Substrato, **Tese de doutorado, UFRGS - Depto. De Eng. Metalúrgica**, Porto Alegre (RS), 1992

Livros

BEJAN, A. - Heat Transfer, **John Wiley & Sons.**, New York, 1993.

BIDULYA, P. - Steel Foundry Practice, **Peace Publishers**, Moscou, 1960.

CARSLAW, H.S. & Jaeger, J.C. - Heat Conduction in Solids, **Oxford University Press**, 2a. Ed., London, 1959.

CHALMERS, B. - Principles of Solidification, **McGraw-Hill**, New York, 1964.

CHAPRA, S.C. & CANALE, R.P. - Numerical Methods for Engineers, **McGraw-Hill**, 2ª Ed., New York, 1990.

CUNHA, C. - Métodos Numéricos para as Engenharias e Ciências Aplicadas, **Editora da UNICAMP**, Campinas(SP), 1993.

DUSINBERRE, G.M. - Numerical Analysis of Heat Flow, **McGraw Hill Co.** N.Y., 1949.

FLEMINGS, M.C. - Solidification Processing, **McGraw-Hill**, New York, 1974.

GEIGER, G.H. & Poirier, D.R. - Transport Phenomena in Metallurgy, **Addison Wesley Publishing Co.**, 1973.

INCROPERA, F.P. & Dewitt, D.P. - Fundamentals of Heat Transfer, **John Wiley & Sons**, 3ª Edição, 1990.

JALURIA, Y. & Torrance, K.E. - Computational Heat Transfer, **Hemisphere Publishers**, Washington, 1986.

KURZ, W. & Fisher, D.J. - Fundamentals of Solidification, **Trans Tech Publications**, Switzerland, 1984/86/89/92.

- LESOULT, G.** - Fundamentals of Crystal Growth: Basic Concepts in Crystal Growth and Solidification, In.: **Metals Handbook**, v.15:Casting, Metals Park / ASM, pp.109-119, 1988.
- MINKONCZ, W.J.E.** - Numerical Methods for Moving Boundary Problems, Handbook of Numerical Heat Transfer, **John Wiley & Sons, Inc.**, New York, 1988.
- OZISIK, M.N.** - Boundary Value Problems of Heat Conduction, Dover Publication, New York, 1968.
- OZISIK, M.N.** - Basic Heat Transfer, **McGraw-Hill**, New York, 1977.
- OZISIK, M.N.** - Heat Conduction, **John Wiley**, New York, 1980
- POIRIER, D.R. & Poirier, E.J.** - Heat Transfer Fundamentals for Metals Casting, **The Minerals, Metals and Materials Society**, 1994.
- PRATES, M. & DAVIES, G.J.** - Solidificação e Fundição de Metais e suas Ligas, LTC/EDUSP, São Paulo, 1978.
- RUDLLE, R.W.** - The Solidification of Castings, **The Institute of Metals**, London, 1957.
- RUGGIERO, M.A. & Lopes, V.L.R.** - Cálculo Numérico: Aspectos Teóricos e Computacionais, **MAKRON Books do Brasil Editora Ltda.**, 1988
- SANTOS, R.G.** - Métodos Numéricos Aplicados à Solidificação, Apostila do Curso IM 327, **FEM-UNICAMP**, Campinas(SP), 1995.
- SHIH, T.M.** - Numerical Heat Transfer, **Hemisphere Publishers**, Washington, 1984.
- SMITH, G.D.** - Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods, 3rd Ed., **Oxford University Press**, New York, 1985.
- WELTY, J.R.** - Engineering Heat Transfer, **J. Wiley and Sons, Inc.**, New York, 1976.

APÊNDICE A

Procedimento de Estimativa de h_i pelo método não linear de Beck

A estimativa da temperatura da superfície ou da densidade do fluxo de calor utilizando a história da temperatura medida sobre um material, é definido como o problema inverso da condução de calor (IHCP). Se as propriedades são função das temperaturas, o problema inverso torna-se não linear. Para solucionar o IHCP, uma solução exata é avaliada, tal como um método integral, método de diferenças finitas ou método de elementos finitos. Para a solução numérica, é considerada uma forma aproximada da variação do coeficiente de transferência de calor da interface metal/molde com o tempo. Usando esta técnica da temperatura conhecida com o coeficiente não conhecido, a distribuição de temperatura é calculada no sistema por modelo matemático e é comparada com dados experimentais [Beck, 1970].

Krishnan e Sharma [Krishnan, 1996] usaram o IHCP para estimar o melhor valor de fluxo de calor baseado no método de mínimo quadrado. Estes autores investigaram o fluxo de calor através da interface metal/molde usando a equação 1A:

$$q = h_i \cdot A_T (T_{\text{met}} - T_M) \quad 1A$$

onde: q = fluxo de calor [W / m²];

A_T = área de troca térmica [m²];

T_{met} = temperatura do metal [K];

T_M = temperatura do molde [K]; e

h_i = coeficiente de transferência de calor da interface metal/molde [W / m² K].

Nesta equação, h_i pode ser determinado se todas as outras variáveis forem conhecidas. Entretanto, os valores de T_{met} , T_M e q , não podem ser medidos diretamente no sistema.

Similarmente ao procedimento proposto por Beck e utilizado por Krishnan, empregou-se neste trabalho um função objetivo definida por:

$$F(\mathbf{h}) = \sum_{i=1}^n (T_{\text{est}} - T_{\text{med}})^2 \quad 2A$$

onde: T_{est} = temperatura estimada [K];

T_{med} = temperatura medida [K]; e

n = tempo [s].

Para estimar a distribuição de temperatura do sistema, foi considerado um valor inicial de h_i e com ele foi determinado, a distribuição de temperatura no fim de cada intervalo de tempo Δt , por um modelo matemático de diferenças finitas, no seu modo explícito de trabalho, sendo o valor de h_i aceitável para a menor diferença quadrática encontrada pela Equação 2A.

O valor assumido de h_i foi então incrementado ou decrementado por um valor Δh_i e então novos valores de temperaturas [$T_{\text{est}} (h_i + \Delta h_i)$] ou [$T_{\text{est}} (h_i - \Delta h_i)$] foram determinados. Com esses valores, o coeficiente de sensibilidade (ϕ) foi calculado para cada interação durante o processo, sendo dado por:

$$\phi = \frac{T_{\text{est}}(h_i + \Delta h_i) - T_{\text{est}}(h_i)}{\Delta h_i} , \quad 3A$$

e calculado para cada posição em estudo, sendo :

$$h_i (\text{novo}) = h_i (\text{velho}) \pm \Delta h_i , \quad 4A$$

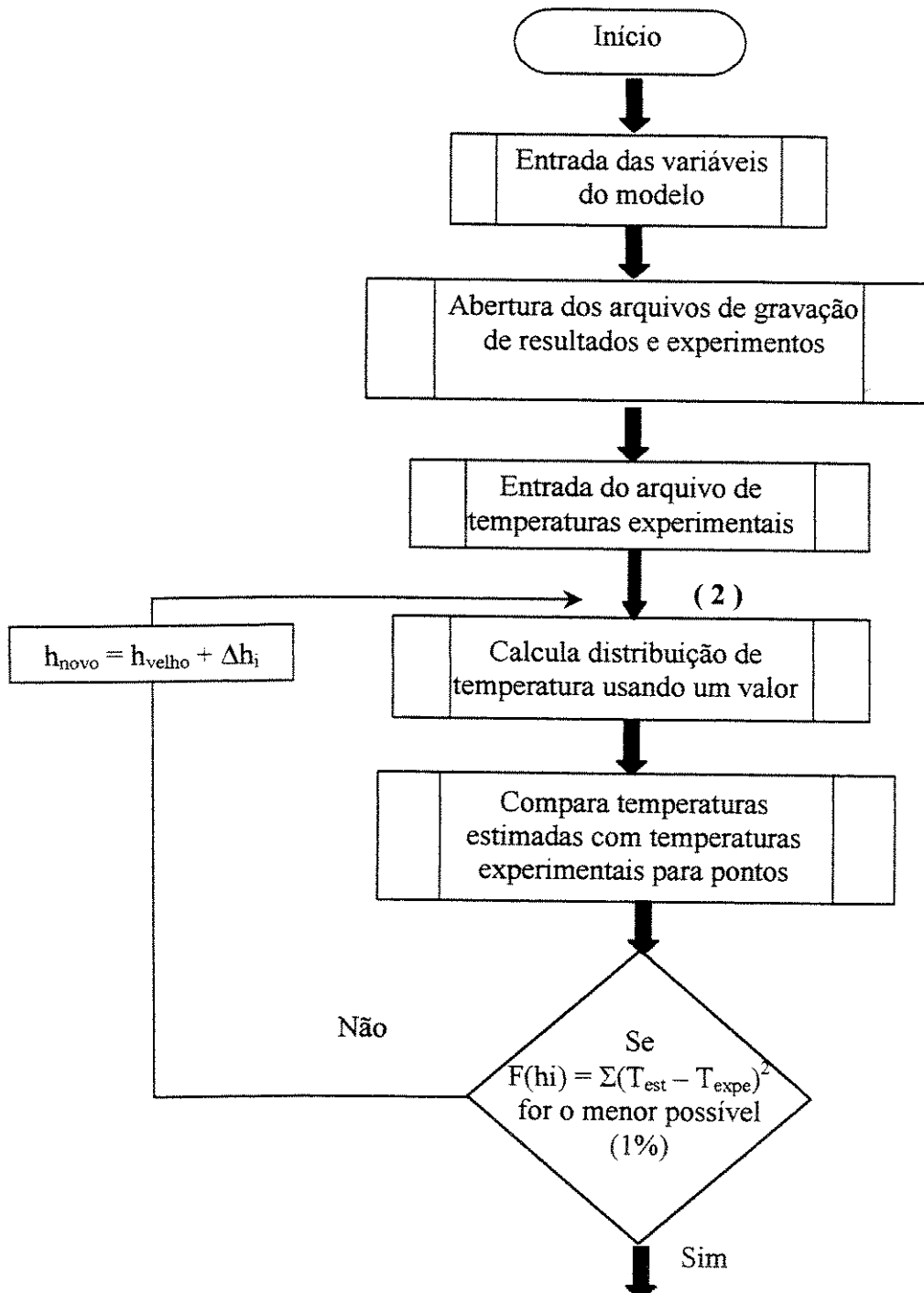
repetido até

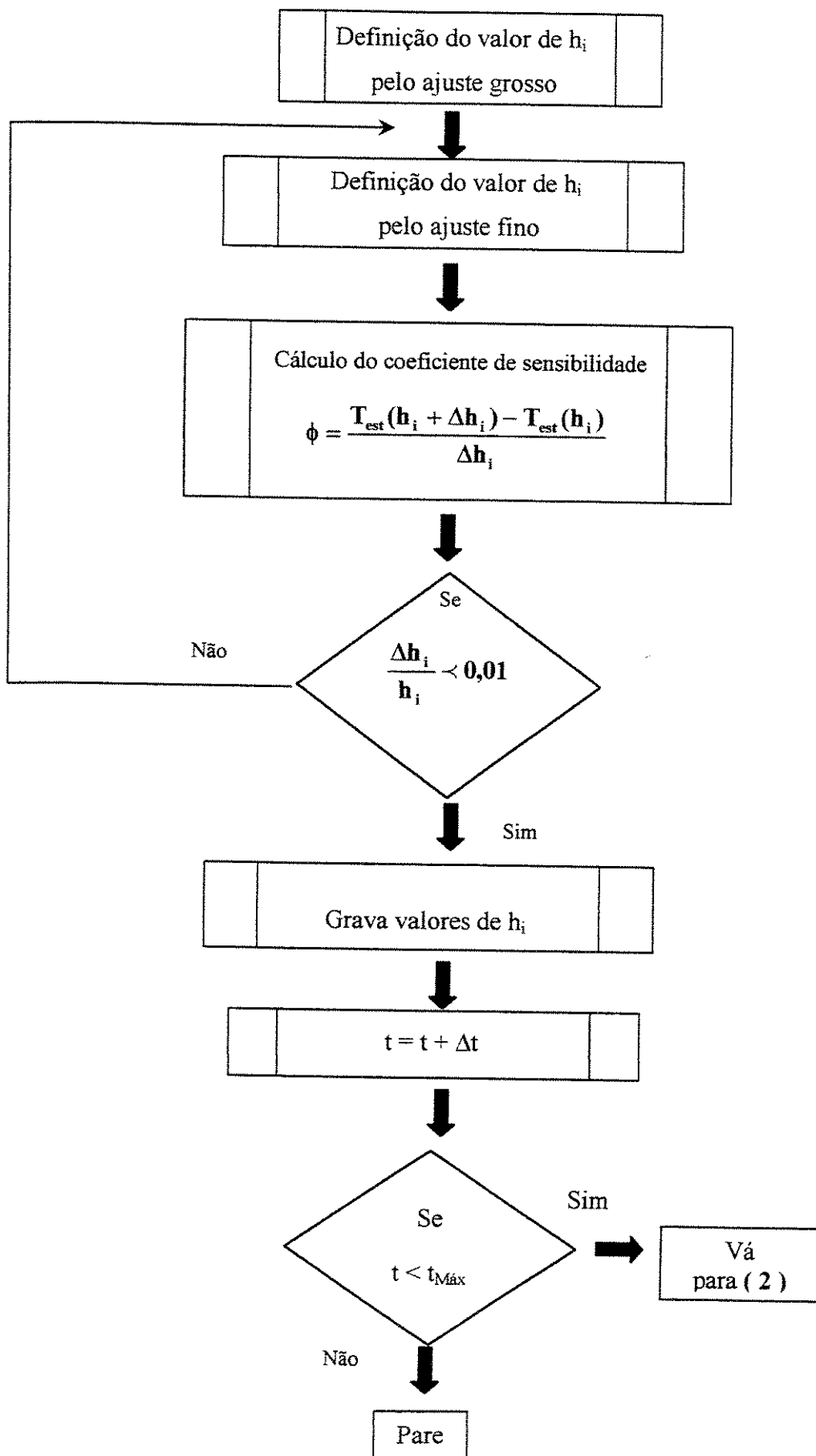
$$\frac{\Delta h_i}{h_i} < 0,01$$

5A

O procedimento utilizado neste trabalho para a determinação do melhor h_i pode ser melhor observado no fluxograma que segue:

ALGORITMO GERAL PARA A DETERMINAÇÃO DE h_i

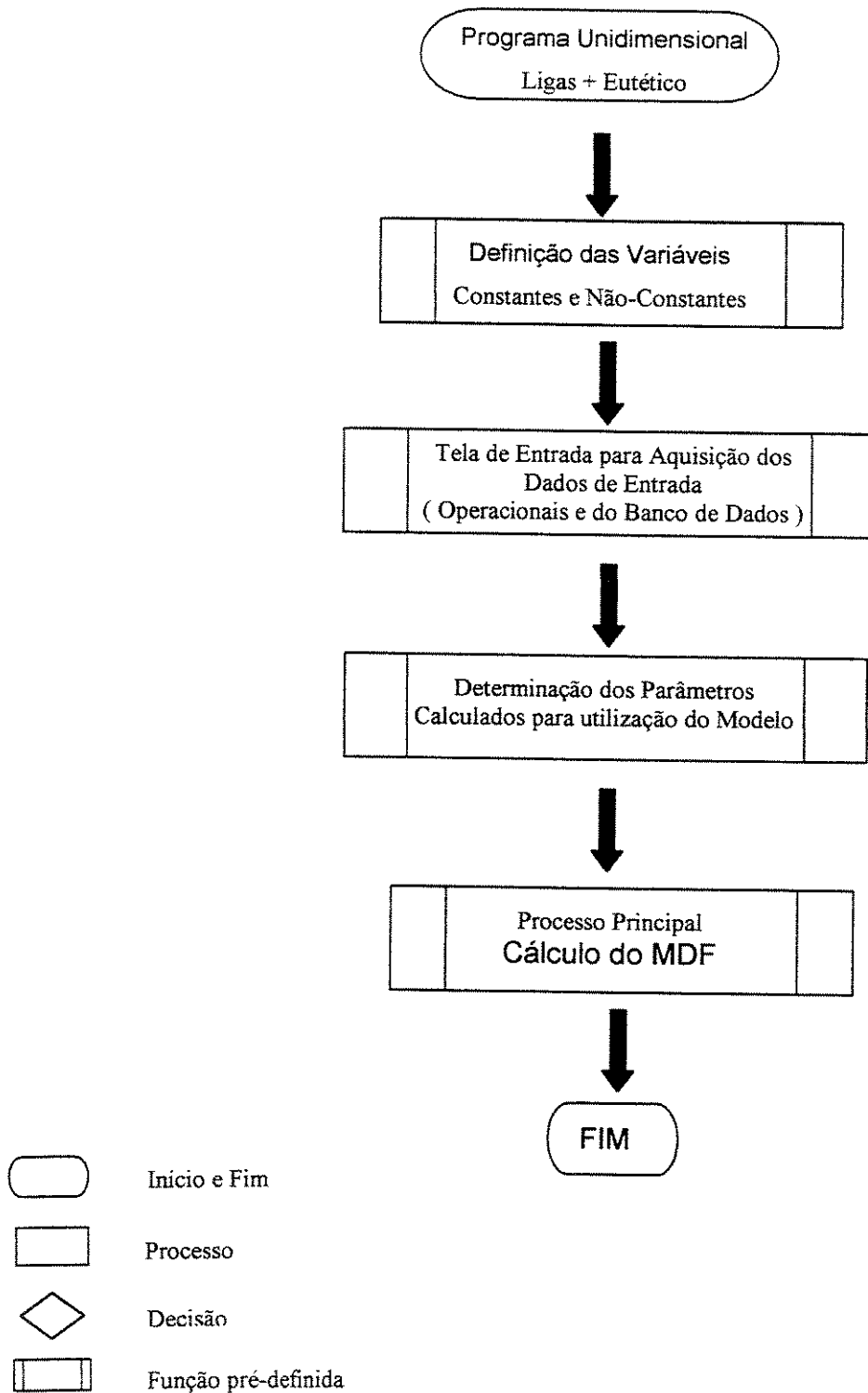




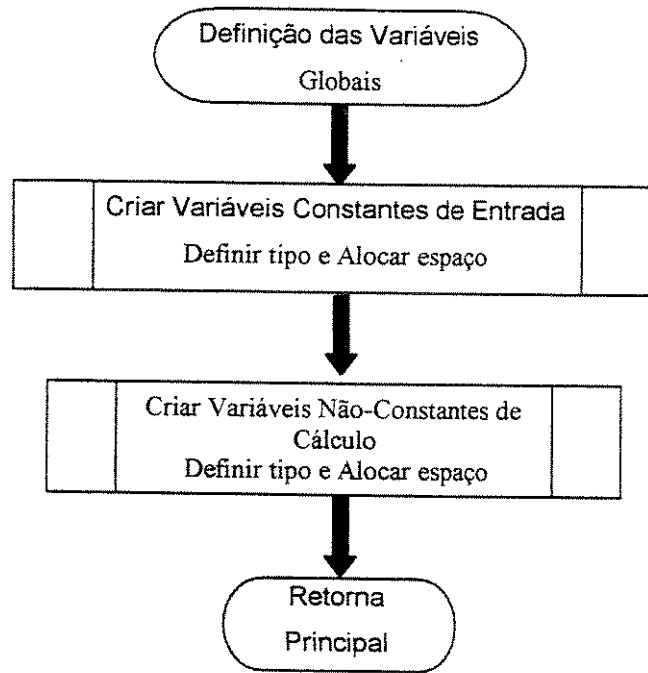
APÊNDICE B

ALGORITMO DO MODELO MATEMÁTICO – Unidimensional

Principal (main)

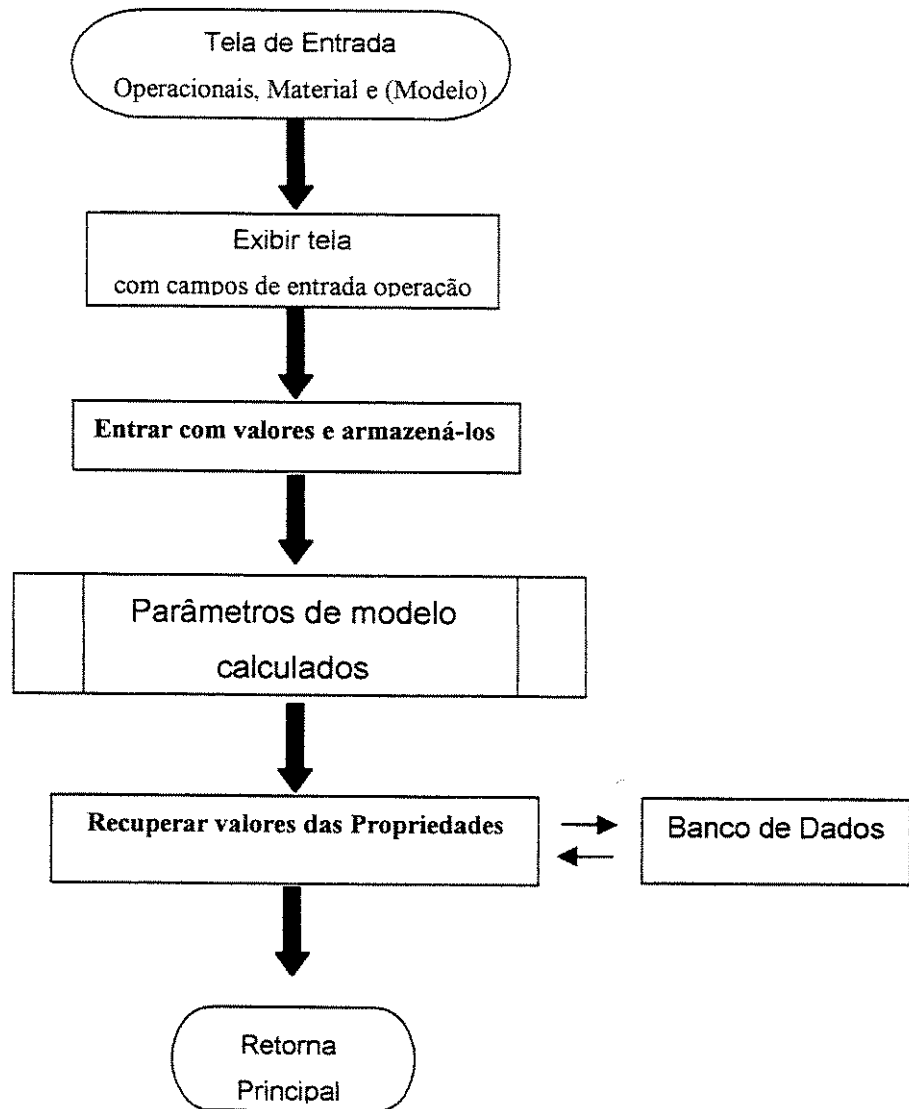


Definição das Variáveis

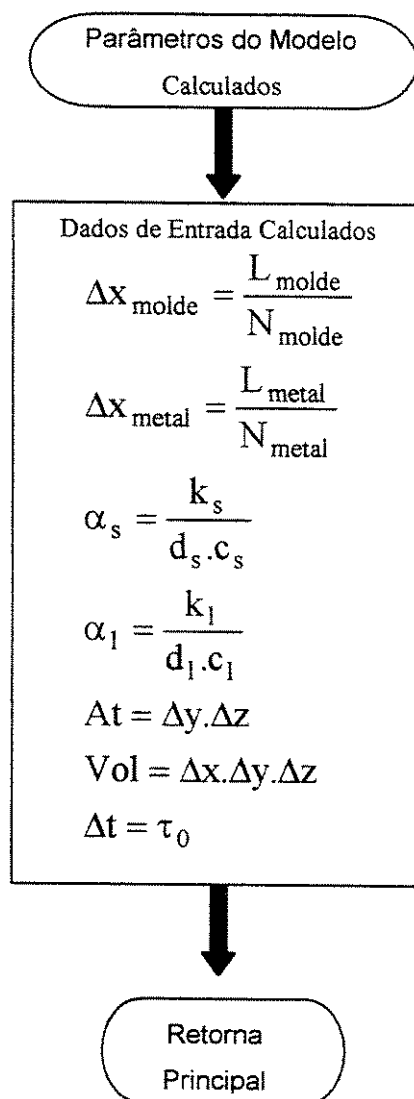


OPERACIONAIS <i>(Teclado)</i>			MATERIAL <i>(Banco de Dados)</i>			NÃO-CONSTANTES <i>(armazenados)</i>		
Parâmetro	Tipo	Descrição	Parâmetro	Tipo	Descrição	Parâmetro	Tipo	Descrição
To	Float	Temp. Amb.	k _{molde}	Float	Condutiv. Molde	T atual	Float	Temp. atual (n)
Tv	Float	Temp. Vaz.	d _{molde}	Float	M.Esp. Molde	T calculado	Float	Temp. calc (n+1)
L _{molde}	Float	Comprim. Molde	c _{molde}	Float	Calor Esp. Molde	k _{sl}	F (fs)	Cond. Mushy
L _{metal}	Float	Comprim. Metal	ks _{metal}	Float	Cond. Sól. Metal	d _{sl}	F (fs)	M.Esp. Mushy
N _{molde}	Int	Nº divisões Mold	kl _{metal}	Float	Cond. Liq. Metal	c _{sl}	F (fs)	Cal. Esp. Mushy
N _{metal}	Int	Nº divisões Met	ds _{metal}	Float	M.Esp. Sól. Metal	Dados de Entrada Calculados		
Dados de Entrada Modelo			dl _{metal}	Float	M.Esp. Liq. Metal			
			cs _{metal}	Float	Calor. Esp. Sol.			
			cl _{metal}	Float	Calor Esp. Liq.	Δx _{molde}	Float	= L _{molde} /N _{molde}
Δy	Float	Largura E.V.	Ko	Float	Coef. Partição	Δx _{metal}	Float	= L _{molde} /N _{molde}
Δz	Float	Altura E.V.	αs _{metal}	Float	Difus. Sól. Metal	αs _{metal}	Float	= ks/ ds . cs
t _{máx}	Float	Tempo máximo	αl _{metal}	Float	Difus. Liq. Metal	αs _{metal}	Float	= kl/ dl . cl
H _i	Eq (t)	Coef. T.C. M/M	L	Float	Calor Latente	At	Float	= Δy.Δz
h _{amb}	Eq (t)	Coef. T.C. M/A	Tf	Float	Temp. Fusão	Vol	Float	= Δx.Δy.Δz
Δt	Float	Incremento de t	Ts	Float	Temp. Solidus	Δt _{min}	Float	= Vol/αs
Δx, At, Vol		Calculados	Tl	float	Temp. Liquidus			
			λ	Float	cl/L			
			Formulação	Escolha	(0) Alavanca (1)Eq. Scheil (2) Scheil + Eut. (3) Metal Puro			

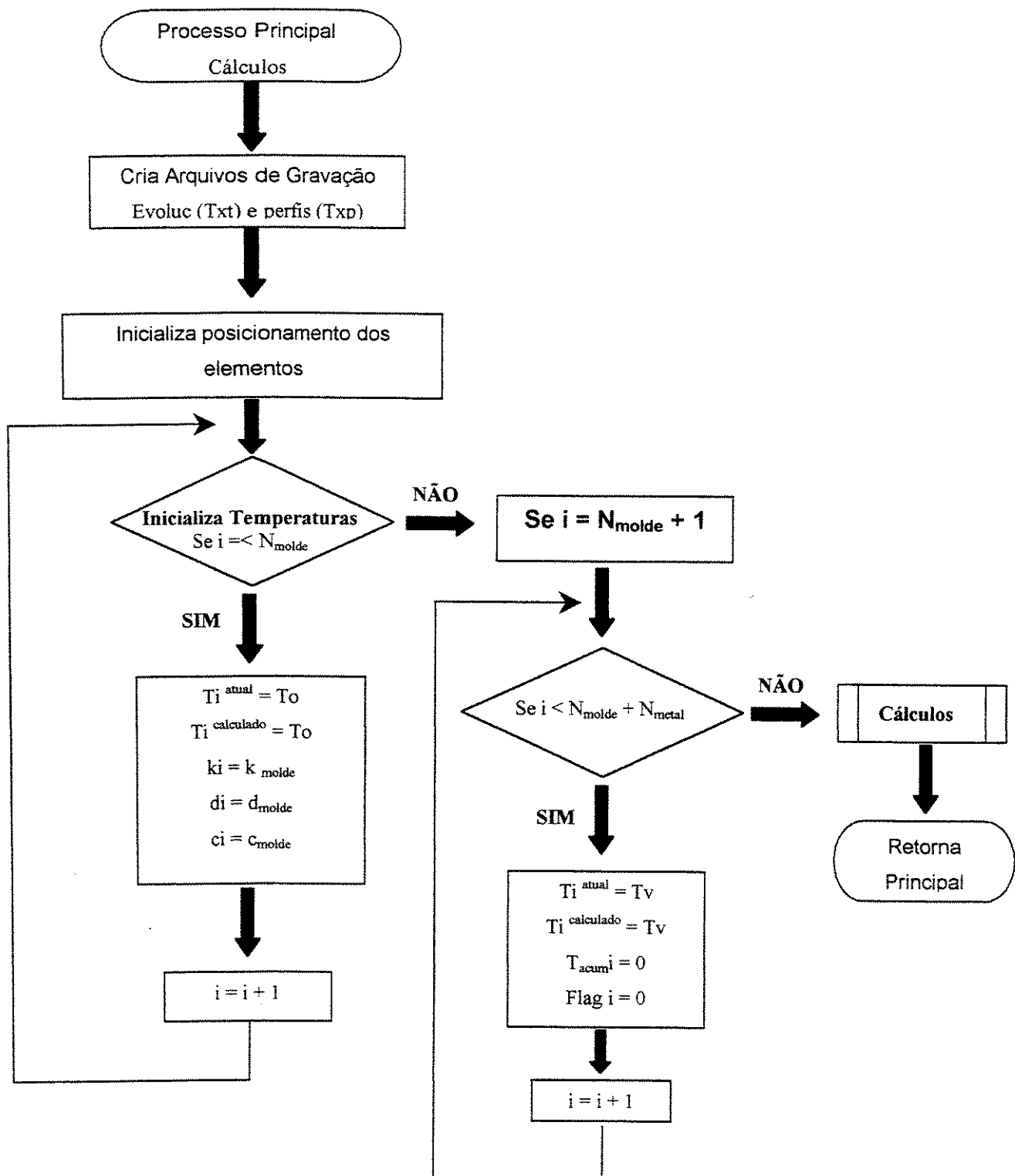
Tela de Entrada e Banco de Dados



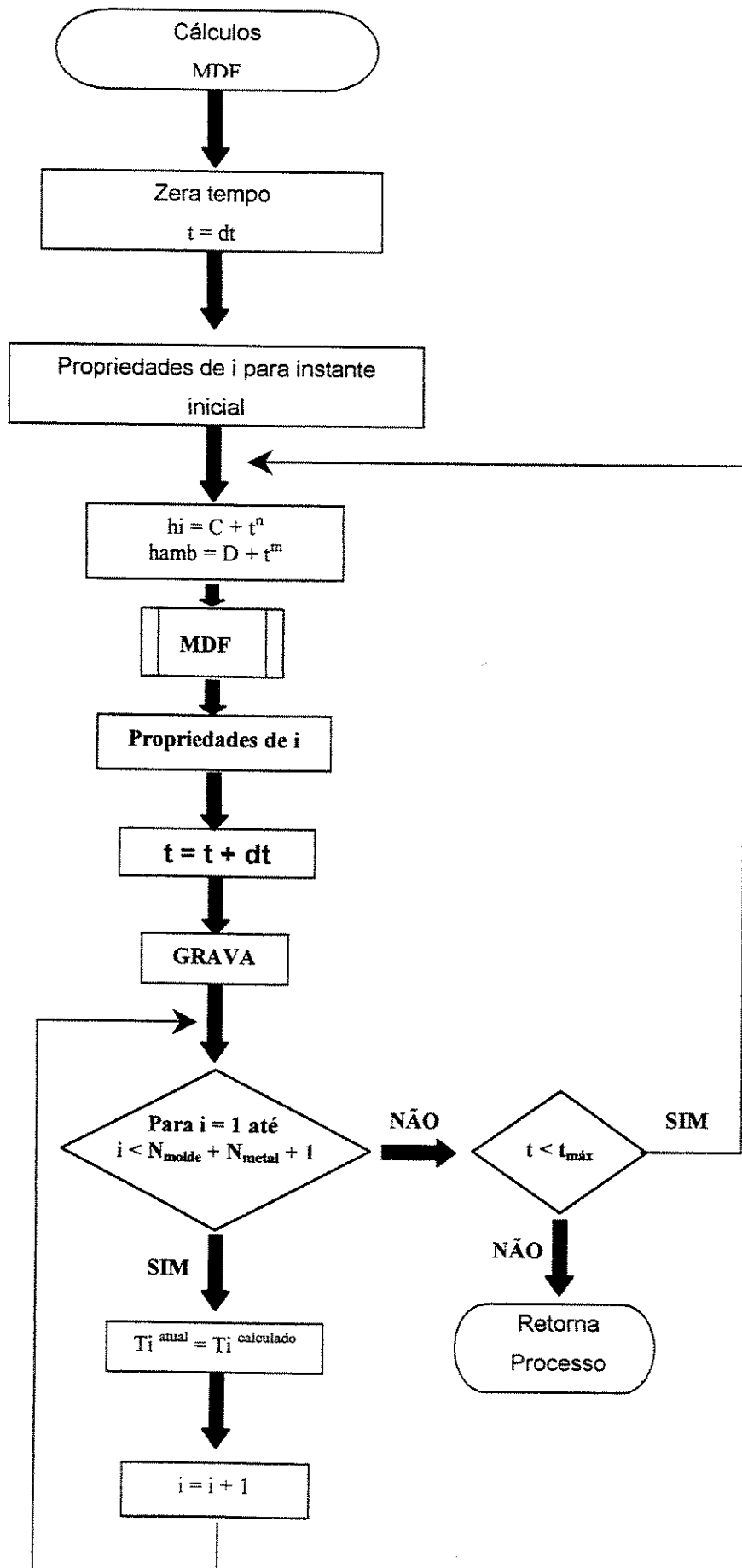
Determinação dos Parâmetros do Modelo



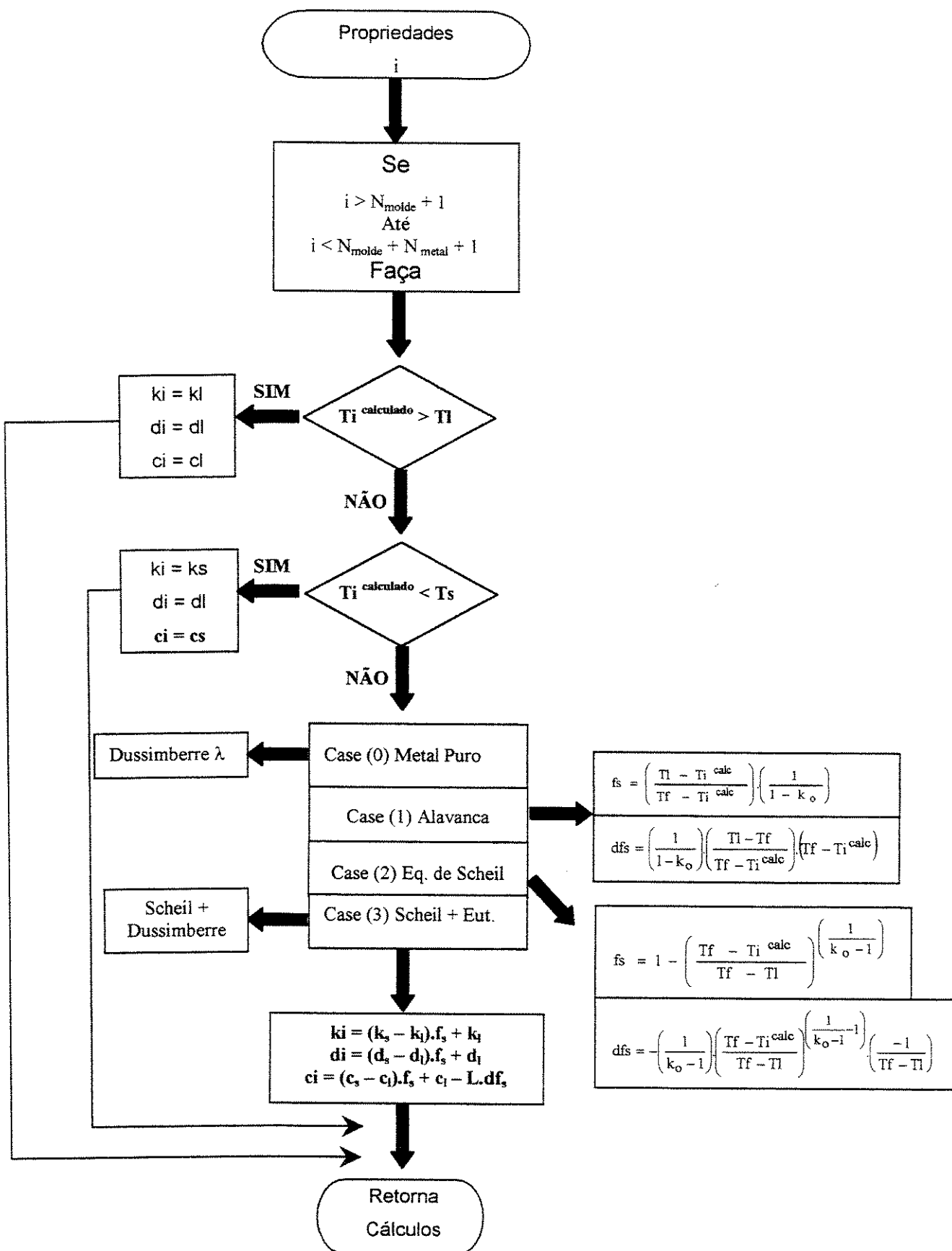
Processo Principal de Cálculos

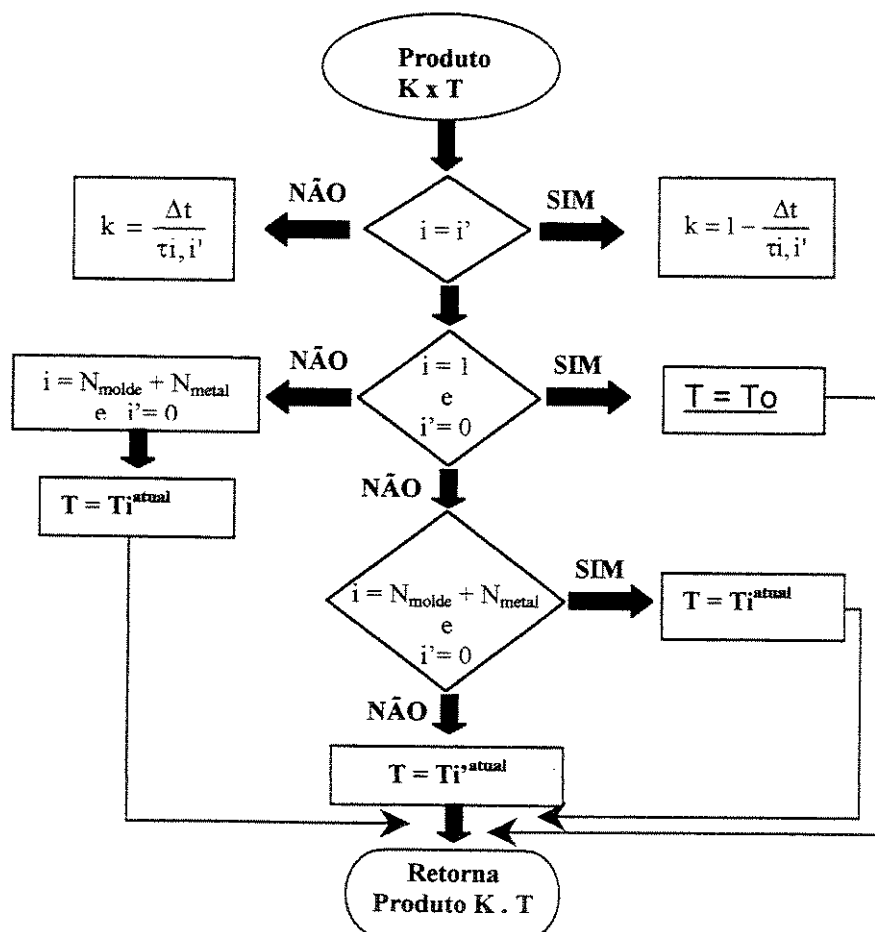
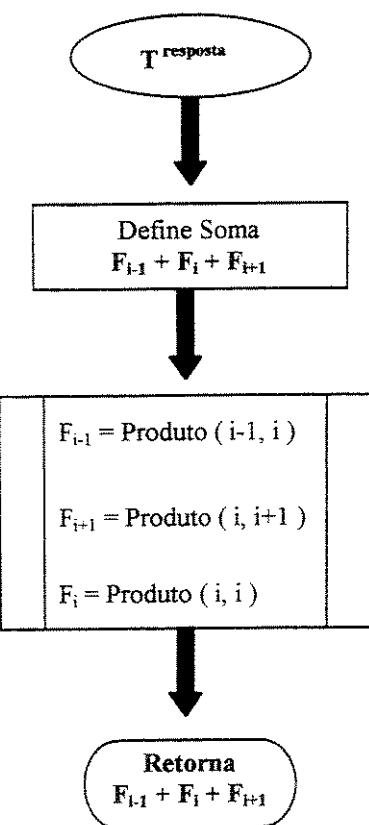
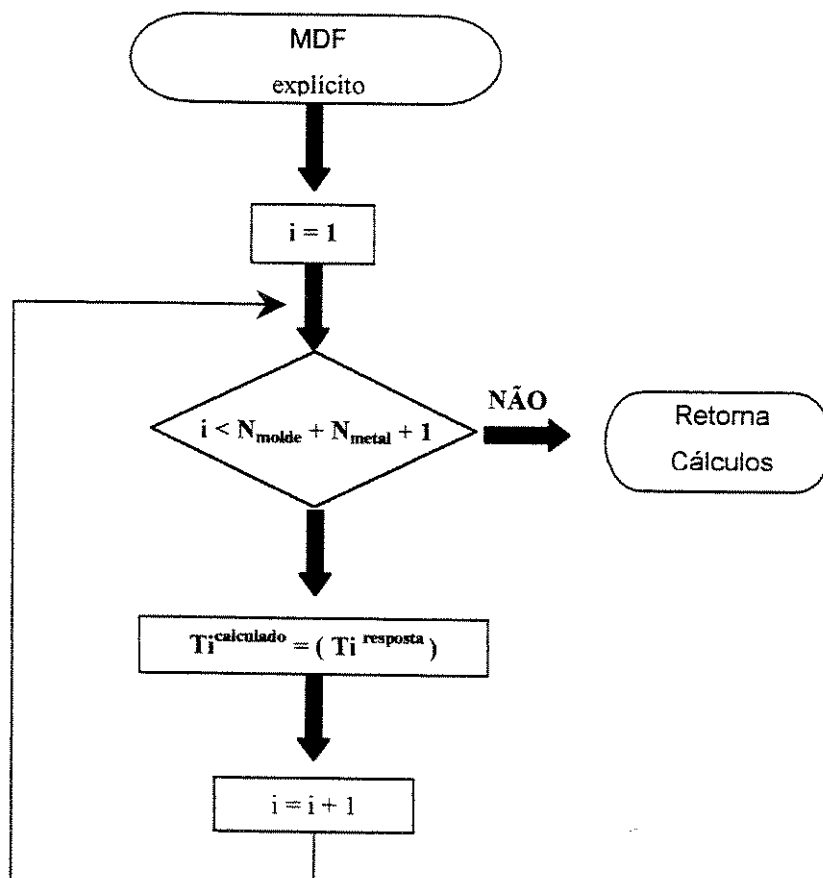


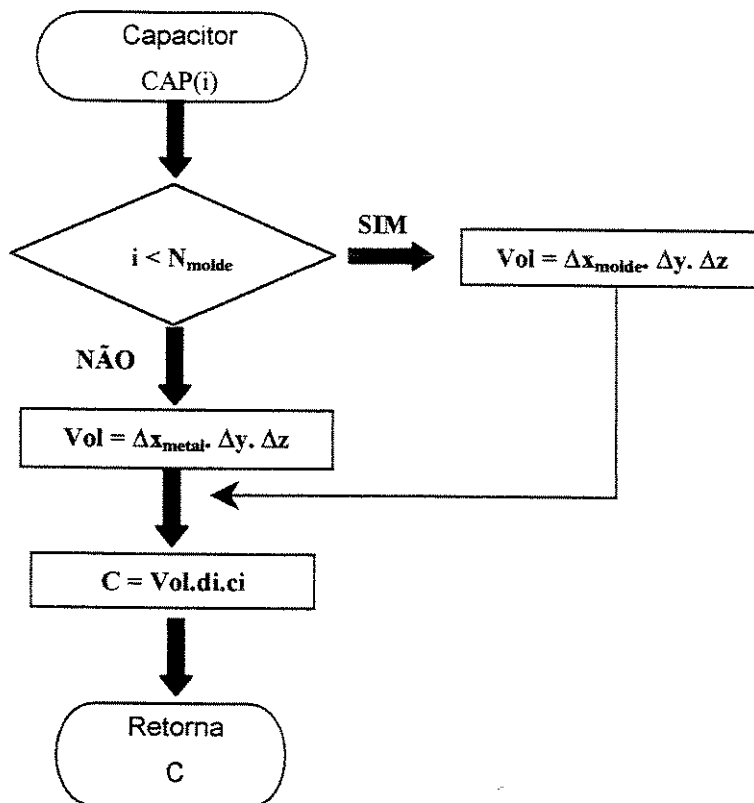
Cálculos



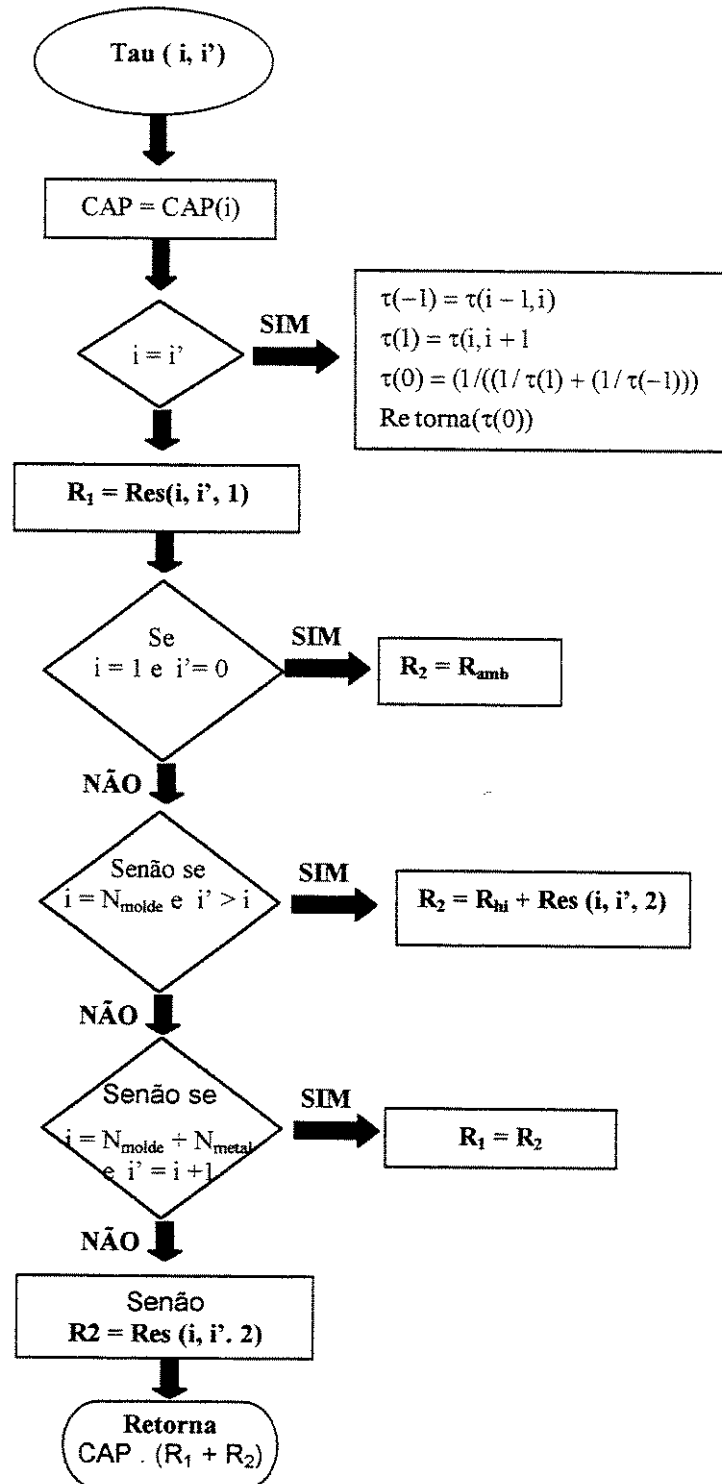
Propriedades

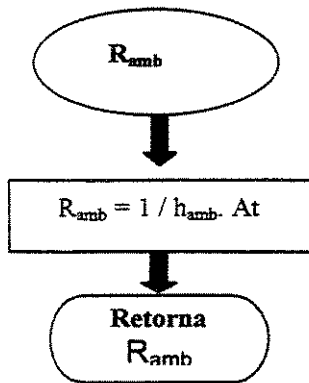
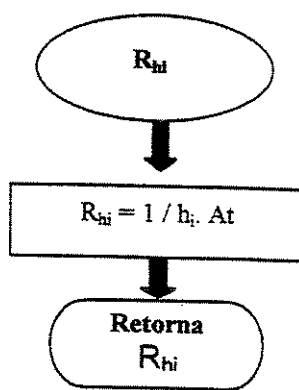


MDF

CAP(i)

Calcula $\tau(i, i')$



R_{amb}  R_{hi}  $Res(i, i', s)$ 