

# MODELO MATEMÁTICO BIDIMENSIONAL DA TRANSIÇÃO COLUNAR-EQUIAXIAL

Marcelo Aquino Martorano <sup>1</sup>

## Resumo

Um modelo matemático determinístico para a previsão da transição colunar-equiaxial na solidificação bidimensional foi implementado. Equações diferenciais desenvolvidas a partir dos princípios de conservação de massa, energia e espécies químicas são combinadas com um método para o acompanhamento da frente colunar, que consiste de uma forma modificada do método do autômato celular original. O modelo foi utilizado para simular a solidificação de uma liga Al-3%Cu em uma cavidade quadrada, mostrando a movimentação da frente de crescimento colunar e da posição da transição colunar-equiaxial. A maior parte dos resultados apresentou boa aderência a dados da literatura e a transição colunar-equiaxial foi prevista utilizando-se malhas mais grosseiras do que as utilizadas no modelo de autômato celular original.

**Palavras-chave:** Transição colunar-equiaxial; Solidificação bidimensional; Frente colunar; Modelo matemático.

## TWO-DIMENSIONAL MATHEMATICAL MODEL OF THE COLUMNAR-TO-EQUIAXED TRANSITION

### Abstract

A deterministic mathematical model of the columnar-to-equiaxed transition has been developed. Differential equations derived from the mass, energy and species conservation principles are combined with a columnar front tracking algorithm based on a modified cellular automaton technique. The model was applied to the solidification of an Al-3%Cu alloy in a square cavity to give the time evolution of the columnar front and the columnar-to-equiaxed transition. Most of the model results showed good agreement with literature data. The columnar-to-equiaxed transition was predicted using meshes that are coarser than those frequently employed in the original cellular automaton technique.

**Key words:** Columnar-to-equiaxed transition; Two-dimensional solidification; Columnar front; Mathematical model.

## 1 INTRODUÇÃO

A estrutura bruta de solidificação pode ser composta de grãos com formas colunares e equiaxiais, apresentando uma região de transição, chamada de transição colunar-equiaxial (CET - "columnar-to-equiaxed transition"). O fenômeno da CET vem sendo investigado há várias décadas e atualmente sabe-se que a transição ocorre quando os grãos equiaxiais bloqueiam o crescimento dos grãos colunares durante a solidificação.<sup>(1)</sup>

Hunt<sup>(2)</sup> propôs o primeiro modelo matemático para a previsão da CET durante a solidificação unidirecional sob condições de estado-estacionário. Ele assumiu que os grãos colunares eram bloqueados quando a fração volumétrica de grãos equiaxiais crescendo à sua frente atingisse o valor de 0,49. Este critério foi chamado de "critério do bloqueio mecânico".<sup>(3)</sup> Posteriormente foram propostos diversos modelos, que podem ser classificados em estocásticos, quando utilizam algum tipo de variável aleatória, ou determinísticos, caso não utilizem.

Flood e Hunt<sup>(4)</sup> propuseram um modelo determinístico para a previsão da CET durante a solidificação unidirecional, porém sob condições transientes, solucionando numericamente a equação de condução de calor. A posição da frente de crescimento colunar foi acompanhada através da equação

$$x_{col}^{t+\Delta t} = x_{col}^t + V \Delta t \quad (1)$$

onde  $\Delta t$  é o passo de tempo do método numérico;  $x_{col}^{t+\Delta t}$  e  $x_{col}^t$  indicam a posição da frente colunar nos instantes de tempo  $t + \Delta t$  e  $t$ , respectivamente, e  $V$  é a velocidade da frente, calculada em função de sua temperatura. Novamente, para prever o instante em que a frente colunar era bloqueada, foi utilizado o critério do bloqueio mecânico.

<sup>1</sup> Professor, Departamento de engenharia Metalúrgica e de Materiais da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.

Wang e Beckermann<sup>(5)</sup> implementaram um modelo determinístico multifásico em regime transiente para calcular a CET durante a solidificação unidirecional. Estes autores utilizaram o conceito de envelope dendrítico e a frente colunar foi também acompanhada através da Eq. (1). O critério do bloqueio mecânico foi utilizado para prever a posição da CET. Martorano, Beckermann e Gandin<sup>(3)</sup> modificaram o modelo de Wang e Beckermann<sup>(5)</sup> para eliminar o critério do bloqueio mecânico, considerando a interação entre os campos de soluto dos grãos equiaxiais e colunares.

Wang e Beckermann<sup>(5)</sup> estenderam seu modelo unidimensional para simular o caso da solidificação bidimensional. Após assumirem que a velocidade da frente colunar era paralela ao fluxo de calor, um único ponto da frente era acompanhado através da Eq.(1). A temperatura neste ponto era obtida e, posteriormente, considerava-se que a frente estava localizada completamente sobre uma mesma isoterma. Jacot, Majjier e Cockroft<sup>(6)</sup> implementaram um modelo determinístico bidimensional em regime transiente para a previsão da CET utilizando uma técnica conhecida como volume de fluido (VOF - "volume-of-fluid"), utilizada para acompanhamento de superfícies livres em fluidos. O método foi capaz de manter o formato correto da frente colunar em crescimento durante a solidificação em um molde cilíndrico.

Os modelos determinísticos discutidos acima consideram os grãos equiaxiais e colunares de forma média, ou seja, não especificam a posição e o formato de cada grão. Os modelos estocásticos, por outro lado, contêm procedimentos para acompanhar a nucleação e o crescimento de cada grão. Esta técnica possibilita o cálculo da macrografia dos grãos, através da qual a CET pode ser identificada. No entanto, a grande desvantagem deste modelo é a necessidade de uma malha numérica suficientemente refinada para modelar os detalhes de cada grão da estrutura. Desta forma, o modelo demanda um poder computacional relativamente alto, principalmente para simular estruturas de grãos refinadas.

Rappaz e Gandin<sup>(7)</sup> propuseram um modelo estocástico baseado na técnica do autômato celular, que atualmente é muito utilizado para previsão da macroestrutura de grãos. Neste modelo, sobrepõe-se ao domínio do metal uma malha de "sítios" aos quais são associados retângulos ou quadrados, que representam

envelopes dendríticos ou partes dos mesmos.

Em muitos problemas deseja-se prever apenas a posição da CET, ou seja, a quantidade de grãos colunares e equiaxiais na estrutura. Nestes casos, os modelos estocásticos seriam desnecessários e os modelos determinísticos seriam mais eficientes. Por outro lado, os modelos determinísticos não estão suficientemente desenvolvidos para prever a CET em problemas bi ou tridimensionais. Logo, o objetivo do presente trabalho é implementar um modelo matemático determinístico para a previsão da transição colunar-equiaxial em problemas de solidificação bidimensional. O modelo desenvolvido combina um conjunto de equações diferenciais com uma técnica para o acompanhamento da frente colunar baseada no método do autômato celular. Finalmente, o modelo será aplicado à solidificação de uma liga Al-3%Cu em uma cavidade quadrada, fornecendo, entre outros resultados, a posição da transição colunar-equiaxial.

## 2 METODOLOGIA

O modelo matemático a ser apresentado a seguir foi subdividido em duas partes: (1) equações diferenciais de conservação de massa, energia e espécies químicas para modelar os campos de fração de sólido, temperatura e concentração de soluto; e (2) algoritmo de acompanhamento da frente colunar.

### 2.1 Equações de Conservação

O conjunto de equações de conservação foi baseado no modelo matemático determinístico proposto por Wang e Beckermann.<sup>(5)</sup> Neste modelo, assumiu-se que o domínio do problema poderia ser dividido em três pseudofases, a saber, sólido (s), líquido interdendrítico (d) e líquido extradendrítico (l). As duas fases líquidas podem ser definidas após posicionar-se um envelope dendrítico imaginário ao redor de cada grão colunar ou equiaxial, formando um contorno que toca a ponta dos braços primários e secundários de dendrita. O líquido interdendrítico é aquele localizado no interior de cada envelope e o extradendrítico, localizado na região externa. As seguintes hipóteses foram utilizadas para a definição das equações diferenciais e algébricas do modelo:<sup>(5)</sup>

- o transporte de calor é bidimensional;
- o transporte de calor e massa ocorre apenas por difusão;
- o líquido interdendrítico (d) possui concentração de soluto homogênea;
- existe equilíbrio local na interface sólido-líquido;
- a difusão de soluto no sólido é desprezível;
- a macrossegregação é desprezível;
- o calor específico e a densidade do sólido e líquido são constantes e iguais para o líquido e sólido;
- todos os grãos equiaxiais nucleiam instantaneamente após um super-resfriamento predefinido para a nucleação ( $\Delta T_N$ ) ter sido ultrapassado.

Considerando estas hipóteses e os princípios de conservação de massa, energia e espécies químicas, o seguinte

conjunto de equações foi obtido e utilizado para modelar a solidificação no sistema estudado:(5)

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \kappa \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \rho L \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} \quad (2)$$

$$V = \frac{4\sigma^* D_l m_l (k-1) C_l^*}{\Gamma} [lv^{-1}(\Omega)]^2 \quad (3)$$

$$\Omega = \frac{C_l^* - C_l}{C_l^* (1-k)} \quad (4)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_l}{\partial t} = -S_e V \quad (5)$$

$$(1-k) C_l^* \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} = \varepsilon_d \frac{\partial C_l}{\partial t} + S_e \frac{D_l}{\delta_e} (C_l^* - C_l) \quad (6)$$

$$\frac{\partial (\varepsilon_l C_l)}{\partial t} = C_l^* \frac{\partial \varepsilon_l}{\partial t} + S_e \frac{D_l}{\delta_e} (C_l^* - C_l) \quad (7)$$

$$C_l^* = \frac{T - T_f}{m_l} \quad (8)$$

$$\varepsilon_s + \varepsilon_d + \varepsilon_l = 1 \quad (9)$$

onde  $\varepsilon$  é a fração volumétrica de cada fase, indicada pelos subscritos 's', 'd' e 'l'; T é a temperatura; t é o tempo;  $\rho$ ,  $c_p$  e L são a densidade, o calor específico e o calor latente, respectivamente;  $\kappa$  é a condutividade térmica média, definida por  $\kappa = \varepsilon_s \kappa_s + (\varepsilon_d + \varepsilon_l) \kappa_l$ ;  $C_l^*$  é a concentração do líquido interdendrítico;  $C_l$  é a concentração média no líquido extradendrítico;  $D_l$  é o coeficiente de difusão de soluto no líquido; k é o coeficiente de partição de soluto;  $S_e$  é a concentração de área superficial de envelope por volume;  $\delta_e$  é a distância efetiva de difusão de soluto ao redor dos envelopes dendríticos;  $T_f$  é a temperatura do metal puro;  $m_l$  é a inclinação da linha liquidus do diagrama de fases;  $C_0$  é a concentração inicial de soluto; V é a velocidade da ponta das dendritas equiaxiais;  $\Omega$  é o super-resfriamento adimensional na ponta das dendritas;  $\Gamma$  é o coeficiente de Gibbs-Thomson;  $\sigma^* \approx 1/(4\pi^2)$  é a constante de estabilidade marginal e  $lv^{-1}$  é o inverso da função de Ivantsov.

As relações utilizadas para o cálculo da concentração de área superficial dos envelopes dendríticos ( $S_e$ ) e da distância efetiva de difusão ( $\delta_e$ ) em função da densidade do número de grãos equiaxiais (n) ou do espaçamento entre os braços primários dos grãos colunares ( $\lambda_1$ ) podem ser obtidas no trabalho de Martorano, Beckermann e Gandin.(3)

As Eqs. (2) a (9) foram solucionadas em um domínio quadrado de lado L, no qual um sistema de referências retangulares foi fixado. O calor foi extraído através das paredes inferior e lateral esquerda definindo-se um coeficiente de transferência de calor h e uma temperatura de referência  $T_a$ , que pode ser a temperatura da água de refrigeração no caso de um molde metálico refrigerado. As outras duas paredes foram assumidas adiabáticas. A temperatura inicial foi considerada uniforme.

O sistema de Eqs. (2) a (9) foi discretizado através do método dos volumes finitos em sua formulação implícita utilizando uma malha de volumes finitos quadrados.(3) O sistema de equações

algébricas resultante do processo de discretização foi solucionado através do método de Gauss-Seidel. Todas as tarefas computacionais foram implementadas em linguagem computacional ANSI C com o auxílio de um compilador Borland® C++ em um computador pessoal com microprocessador Intel Pentium® III.

### 3 ACOMPANHAMENTO DA FRENTE DE CRESCIMENTO COLUNAR

Um algoritmo especial foi implementado para realizar o acompanhamento da posição da frente colunar em crescimento em um domínio bidimensional. Este algoritmo foi inspirado em diversos procedimentos do modelo de autômato celular original, proposto por Rappaz e Gandin.(7) O algoritmo original possibilita o cálculo da macroestrutura completa de grãos, enquanto que, no presente trabalho, o algoritmo acompanha apenas a frente de crescimento colunar, possibilitando a utilização de malhas numéricas mais grosseiras. O algoritmo implementado, que será descrito a seguir, utiliza o campo de temperaturas (T) e o campo de fração de grãos ( $\varepsilon_g = \varepsilon_s + \varepsilon_d$ ) calculados pelas equações diferenciais apresentadas no item anterior.

Uma malha de sítios foi uniformemente distribuída sobre todo o domínio bidimensional do metal. Estes sítios estão inicialmente desativados, o que significa que estão no estado "líquido", e podem ser ativados, ou seja, tornar-se "colunar", a partir de um processo de nucleação ou crescimento. No presente algoritmo, apenas os sítios adjacentes ao contorno do domínio podem ser ativados através de um processo de nucleação. Este procedimento representa a nucleação de grãos colunares na parede de um molde de fundição. Os sítios internos, por outro lado, somente são ativados através do processo de crescimento de um grão associado ao sítio vizinho. Desta forma, os sítios ativados sempre indicarão apenas os grãos colunares.

Um retângulo inicial é associado a cada sítio logo após a sua ativação pelo processo de crescimento. Cada retângulo pode representar um conjunto de diversos grãos colunares delineando a frente de crescimento colunar. O tamanho deste retângulo inicial é calculado de forma semelhante àquela empregada no autômato celular original,(7) porém a sua orientação é definida para manter um de seus lados perpendicular ao gradiente de temperatura no

local. Este retângulo iniciará o crescimento, que é simulado através do aumento da distância entre o seu lado e o sítio ao qual ele está associado. Esta distância é constantemente atualizada utilizando-se a velocidade de crescimento  $V$ . Esta velocidade de crescimento da frente foi calculada através da Eq. (3), sendo que o super-resfriamento foi calculado através da equação abaixo em lugar da Eq. (4):

$$\Omega = \frac{C_1^* - C_0}{C_1^*(1-k)} \quad (10)$$

Nesta equação, a interação entre os campos de soluto das dendritas colunares e equiaxiais não está sendo considerada. No cálculo de  $C_1^*$ , realizado a partir da Eq. (8), utilizou-se a temperatura na posição do lado do quadrado para o qual se deseja determinar a velocidade. A temperatura nesta posição é obtida através de algum processo de interpolação do campo de temperaturas fornecido pelo conjunto de equações diferenciais do item anterior.

Um sítio que está inicialmente líquido pode ser ativado pelo crescimento dos retângulos vizinhos, tornando-se colunar, ou pode ser “bloqueado”, tornando-se equiaxial. O bloqueio é realizado quando  $\varepsilon_g \geq 0,49$  na posição deste sítio, impedindo que ele se torne colunar e, portanto, bloqueando o avanço da frente. Novamente, o valor de  $\varepsilon_g$  na posição do sítio líquido deve ser interpolado a partir do campo calculado pelo conjunto de equações diferenciais apresentado no item anterior.

#### 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

O modelo implementado foi utilizado para simular a solidificação da liga Al-3%Cu em uma cavidade bidimensional quadrada. As propriedades da liga utilizadas na simulação foram:<sup>(5)</sup> coeficiente de difusão de soluto no líquido,  $D_l = 5 \times 10^{-9} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ ; condutividade térmica no sólido e no líquido,  $\kappa_s = 153 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  e  $\kappa_l = 77 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ , respectivamente; calor latente de fusão,  $L = 400 \times 10^3 \text{ Jkg}^{-1}$ ; calor específico,  $c_p = 1333,3 \text{ Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$ ; densidade,  $\rho = 2550 \text{ kgm}^{-3}$ ; inclinação da linha liquidus  $m_l = -3,37 \text{ K\%wt}^{-1}$ ; coeficiente de partição de soluto,  $k = 0,17$ ; coeficiente de Gibbs-Thomson,  $\Gamma = 2,41 \times 10^{-7} \text{ mK}$ ; temperatura de fusão do metal puro,  $T_f = 933 \text{ K}$ ; temperatura liquidus da liga,  $T_L = 922,9 \text{ K}$ ; super-resfriamento para a nucleação,  $\Delta T_N = 0 \text{ K}$ ; temperatura do eutético,  $T_{eut} = 821 \text{ K}$ ; densidade de número de

grãos equiaxiais,  $n = 10^{-5} \text{ m}^{-3}$  e espaçamento entre braços primários de dendrita,  $\lambda_1 = 5 \times 10^{-3} \text{ m}$ . Os outros parâmetros relativos à simulação foram: coeficiente de transferência de calor nas paredes inferior e lateral esquerda,  $h = 65 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$ ; tamanho do lado da cavidade,  $L = 0,1 \text{ m}$ ; temperatura inicial,  $T_V = 942,9 \text{ K}$ ; temperatura de referência para extração de calor,  $T_a = 298 \text{ K}$ .

A Figura 1 apresenta os resultados da simulação, sendo que a Figura 1(a) mostra o campo de temperaturas e de fração de grãos ( $\varepsilon_g$ ), bem como a posição da frente colunar e os sítios bloqueados (equiaxiais) no instante  $t = 440 \text{ s}$ . Observa-se que a fração de grãos  $\varepsilon_g$  varia abruptamente de 0,49 para 0,8 próximo à frente colunar. Grãos equiaxiais, que nuclearam logo abaixo de  $T_L$ , estão crescendo no líquido adjacente à frente colunar. Os sítios indicados por “+” representam aqueles onde o valor de  $\varepsilon_g$  tornou-se maior ou igual a 0,49 antes da frente colunar atingir a sua posição. Portanto, eles estão bloqueados (equiaxiais), impedindo a passagem da frente. O super-resfriamento da frente em relação à  $T_L$  (922,9K) é aproximadamente 1,8 K em média, porém é maior em cerca de 0,4 K no vértice da frente. Como o vértice move-se mais rapidamente em direção ao canto superior direito do domínio, seu super-resfriamento é maior, representando condições mais favoráveis para o crescimento dos grãos equiaxiais. Logo, este vértice é bloqueado localmente por grãos equiaxiais antes do restante da frente. A Figura 1(b) mostra detalhes dos sítios no interior da região colunar e na frente colunar em crescimento. Além disso, são mostrados os retângulos que delimitam a frente em crescimento, bem como os sítios já bloqueados (equiaxiais).

A Figura 1(c) apresenta a posição da frente colunar em diversos instantes de tempo e a transição colunar equiaxial (CET) comparadas com os resultados de Wang e Beckermann.<sup>(5)</sup> Observa-se uma aderência razoável entre estes resultados, porém o presente modelo mostra um bloqueio antecipado do vértice da frente. Este bloqueio antecipado está relacionado à hipótese utilizada por Wang e Beckermann<sup>(5)</sup> de que a frente colunar estaria localizada completamente sobre uma mesma isoterma. A Figura 1(a) mostrou que, na verdade, a temperatura da frente varia ao longo de sua extensão. Portanto, cada uma de suas partes pode ser bloqueada em diferentes instantes, já que o bloqueio tem estreita relação com a sua temperatura de crescimento.<sup>(2)</sup>

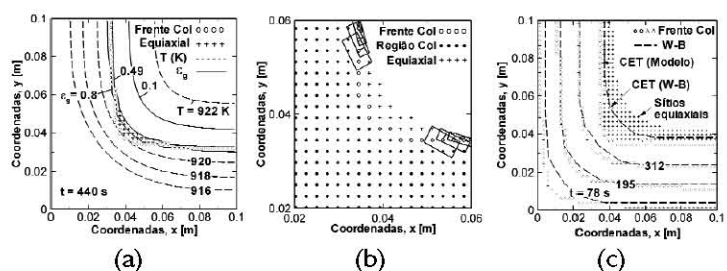


Figura 1. Resultados do modelo para uma malha de 42x42 sítios e volumes finitos destacando a posição da frente colunar e os sítios bloqueados (equiaxiais): (a) campo de temperaturas ( $T$ ) e de fração de grãos ( $\varepsilon_g$ ) para  $t = 440 \text{ s}$ ; (b) detalhe dos retângulos do autômato celular do caso (a); (c) posição da frente colunar em diversos instantes sobreposta aos resultados de Wang e Beckermann (W-B),<sup>(5)</sup> incluindo a posição da transição colunar equiaxial (CET).

## 5 CONCLUSÕES

As seguintes conclusões podem ser obtidas dos resultados apresentados:

O modelo matemático proposto é capaz de acompanhar o crescimento colunar e prever a transição colunar-equiaxial em um problema de solidificação bidimensional em uma cavidade quadrada;

A forma e a posição da frente colunar previstas pelo modelo apresentam boa aderência aos resultados de Wang e Beckermann;<sup>(5)</sup> no entanto, há alguma discrepância em relação à posição da transição colunar-equiaxial;

Observa-se que a temperatura da frente colunar não é constante ao longo de sua extensão, portanto esta frente não pode ser assumida isotérmica, como proposto por Wang e Beckermann.<sup>(5)</sup>

## Agradecimentos

O autor agradece o suporte financeiro da FAPESP (Processo nº 03/08567-7).

## REFERÊNCIAS

- 1 FLOOD, S.C.; HUNT, J.D. Columnar to equiaxed transition. In: ASM INTERNATIONAL. **Casting**. Metals Park, OH, 1988. p. 130-136. (ASM Handbook, 15)
- 2 HUNT, J.D. Steady-state columnar and equiaxed growth of dendrites and eutectic. **Materials Science and Engineering**, New York, v. 65, n. 1, p. 75-83, Jan. 1984.
- 3 MARTORANO, M.A.; BECKERMANN, C.; GANDIN, Ch-A. A solutal interaction mechanism for the columnar-to-equiaxed transition in alloy solidification, **Metallurgical and Materials Transactions A**, Warrendale, v.34A, n. 8, p.1657-1674, Ago. 2003.
- 4 FLOOD, S.C.; HUNT, J.D. Columnar and equiaxed growth: 2. Equiaxed growth ahead of a columnar front, **Journal of Crystal Growth**, London, v. 82, n. 3, p. 552-560, Mar. 1987.
- 5 WANG, C.Y.; BECKERMANN, C. Prediction of Columnar to Equiaxed Transition During Diffusion-Controlled Dendritic Alloy Solidification, **Metallurgical and Materials Transactions A**, Warrendale, v. 25A, n. 5, p. 1081-1093, May 1994.
- 6 JACOT, A.; MAIJER, D.; COCKROFT, S. A two-dimensional model for the description of the columnar-to-equiaxed transition in competing gray and white iron eutectics and its application to calender rolls, **Metallurgical and Materials Transactions A**, Warrendale, v. 31A, n. 8, p. 2059-2068, Ago. 2000.
- 7 RAPPAZ, M.; GANDIN, CH.-A. Probabilistic modeling of microstructure formation in solidification processes. **Acta Metallurgica et Materialia**, London, v. 41, n. 2, p. 345-360, Feb. 1993.

Recebido em: 19/12/05

Aceito em: 28/03/06

Proveniente de: CONAF - CONGRESSO DE FUNDIÇÃO, 12., 2005, São Paulo. São Paulo : ABM, 2005.