

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

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE A REDAÇÃO FINAL
DA TESE DEFENDIDA POR Mario Ynoue
E APROVADA PELA
COMISSÃO JULGADORA EM 13/02/92.
Mario Ynoue
ORIENTADOR

MODELAGEM MATEMÁTICA DA SOLIDIFICAÇÃO
DE LIGAS BINÁRIAS COM APLICAÇÃO NO
CÁLCULO DA MACROSSEGREGAÇÃO INVERSA.

Mario Ynoue

05/92

trabalho apresentado à comissão
de pós-graduação da Faculdade de
Engenharia Mecânica, como parte
dos requisitos para a obtenção do
título de Mestre em Engenharia
Mecânica.

Campinas

1992

I

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

Tese de : MESTRADO

Título da tese : MODELAGEM MATEMÁTICA DA SOLIDIFICAÇÃO DE
LIGAS BINÁRIAS COM APLICAÇÃO NO CÁLCULO
DA MACROSSEGREGAÇÃO INVERSA

Autor : MARIO YNOUE

Orientador: Prof. AMAURI GARCIA†


Aprovado por :



Prof. Dr. AMAURI GARCIA, Presidente



Profa. Dra. MARIA CLARA FILLIPINI IERARDI



Prof. Dr. ODMAR SIMÕES PIRES

Campinas, 13 de fevereiro de 1992

AGRADECIMENTOS

Após o termino desta jornada, obviamente não sendo exclusivamente minha, gostaria de deixar aqui gravados meus sinceros agradecimentos

A COSIPA - Companhia Siderúrgica Paulista -, pela oportunidade de realização deste trabalho;

Ao Prof. Dr. Amauri Garcia, pela orientação, apoio e amizade durante toda etapa de desenvolvimento deste trabalho;

Ao Eng. Antonio Carlos Lemos Gilberto, então Gerente de Aciaria da Cosipa, pela indicação e confiança;

A Prof.^a Dra. Maria Clara Fillipini Ierardi, pela dedicação e proveitosa colaboração em várias simulações de seu modelo;

Ao Eng. Pêrsio de Carvalho Sobrinho, pelas trocas de idéias e pelo constante incentivo;

A Aurélio Pires Neto, pela presteza e, sobretudo, a colega Eng.^a Mirian de Lourdes Motta Melo, pelo inestimável espírito solidário na confecção dos desenhos;

A todos os colegas do agradável convívio diário, pela espontaneidade e companheirismo;

A todos que, direta ou indiretamente, contribuíram para a realização deste trabalho.

RESUMO

Foi desenvolvido um modelo analítico de solidificação estendido, baseado em modelos anteriores de Garcia-Prates, que permite a determinação de distribuições de temperatura e cinética de solidificação de ligas (solidificação com zona pastosa) vazadas com superaquecimento em moldes maciços.

Este modelo de solidificação foi introduzido na equação de redistribuição de soluto local proposta por Flemings-Nereo e o modelo resultante foi aplicado no cálculo de macrossegregação de ligas binárias solidificadas unidirecionalmente, com extensa zona pastosa, que apresentam contração de solidificação. O perfil de concentração de soluto ao longo do lingote é de segregação inversa típica.

Resultados do modelo de solidificação foram comparados com os de um modelo usando método de diferenças finitas e mostraram concordâncias boas e razoáveis.

Perfis de concentração de segregação inversa calculados para a liga Al-4,5%Cu apresentam boa concordância com outros modelos e resultados experimentais encontrados na literatura.

O modelo de segregação desenvolvido permite uma utilização versátil em simulações de condições práticas de solidificação, pois variáveis como coeficiente de transferência de calor metal-molde, superaquecimento, material do molde e liga solidificada são introduzidas diretamente nos cálculos. Deste modo, o modelo torna-se uma boa ferramenta para a análise de possíveis influências de várias condições de solidificação com relação à segregação.

ABSTRACT

An extended analytical model of solidification, based on previous ones introduced by Garcia-Prates, was developed that permits the determination of temperature distributions and solidified thickness of alloys (solidification with mushy zone) solidified in massive mold, poured under superheated melt conditions.

This solidification model was introduced in the local solute redistribution equation proposed by Flemings-Nereo and the resulting model was applied in the calculation of segregation of binary alloys, solidifying unidirectionally, under large mushy zone and showing solidification contraction. The final distribution of mean solute concentration along the ingot presents a typical inverse segregation.

The solidification model results was compared to a finite difference method model and showed good agreement.

The calculated concentration profiles of inverse segregation for the Al-4.5%Cu is in good agreement with other models and experimental results published in literature.

The segregation model permits a very versatile utilization in simulations of currently casting conditions because variables such as metal/mould heat transfer coefficient, pouring temperature, mould material and casting alloy are directly introduced in the calculations. So, it is a good tool to analyse the possible influences of various solidification conditions with respect to segregation.

*a meus pais
e irmãos*

ÍNDICE DA MATÉRIA

	Pág.
1 - INTRODUÇÃO	1
1.1 - Considerações gerais	1
1.2 - Objetivos do trabalho	3
2 - SEGREGAÇÃO NA SOLIDIFICAÇÃO	5
2.1 - Microsegregação	5
2.1.1 - Equação de equilíbrio	5
2.1.2 - Equação de Scheil	6
2.1.3 - Equação de Brody-Flemings	6
2.1.4 - Equação de Clyne-Kurz e de Ohnaka	7
2.1.5 - Soluções exatas de Kobayashi	8
2.1.5.1 - Solução exata para o modelo de Brody-Flemings	8
2.1.5.2 - Solução exata para o modelo de Ohnaka	14
2.2 - Macrosegregação	16
2.2.1 - Segregação normal	17
2.2.2 - Segregação inversa	17
2.2.3 - Macrosegregação em aços	26
2.2.3.1 - Macrosegregação em lingotes ... de aço	27
2.2.3.2 - Macrosegregação em lingota- ... mento contínuo	28
3 - MODELO DE SOLIDIFICAÇÃO	31
3.1 - Hipóteses básicas de caráter físico assumidas.....	31
3.2 - Cinética de solidificação	34
3.3 - Perfis térmicos durante a solidificação	35
3.3.1 - Perfil térmico no molde	35
3.3.2 - Perfil térmico no metal sólido	36
3.3.3 - Perfil térmico na região pastosa	37
3.3.4 - Perfil térmico no metal líquido	39
3.4 - Determinação da temperatura de equilíbrio	
na interface metal-molde, T_i	40
3.5 - Determinação de S_o , L_o e E_o	41
3.6 - Determinação das constantes ϕ_1 e ϕ_2	44
3.7 - Tratamento para h variável	46

4 - MODELO DE SEGREGAÇÃO	49
4.1 - Hipóteses básicas assumidas	49
4.2 - Desenvolvimento do modelo	51
4.3 - Cálculo da concentração final de soluto no..... ponto	55
4.4 - Considerações para o vetor velocidade do líquido	56
4.5 - Aplicação para solidificação unidirecional	58
4.5.1 - Macrossegregação, $x > x_c$	59
4.5.2 - Macrossegregação, $x < x_c$	60
4.6 - Método de resolução das equações	61
5 - RESULTADOS E DISCUSSÕES	64
5.1 - Modelo de solidificação	64
5.1.1 - Verificação da validade do modelo pro-.... posto	64
5.1.2 - Determinação de ϕ_1 e ϕ_2	64
5.1.3 - Cinética de solidificação	65
5.1.4 - Distribuição de temperaturas no molde e no metal	71
5.1.4.1 - Perfil térmico no metal	76
5.1.4.2 - Perfil térmico no molde	76
5.1.5 - Variáveis influentes	81
5.1.5.1 - Influência do molde	81
5.1.5.2 - Influência da liga solidificada.	82
5.1.6 - Condição semi-infinita	84
5.1.7 - Fatores geométricos	85
5.1.8 - Outras simulações	85
5.2 - Modelo de segregação	92
5.2.1 - Simulações	94
5.2.2 - Influência do coeficiente de transfe-.... rência de calor, h	94
5.2.3 - Influência do superaquecimento, ΔT_v	98
5.2.4 - Influência do molde	101
5.2.6 - Condições para se minimizar a segre-.... gação inversa	104
5.2.7 - Comparações com resultados da litera-.... tura	104
6 - CONCLUSÕES	108
7 - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	109

B - APENDICE	119
8.1 - Simbologia utilizada	119
8.2 - Solução exata de Kobayashi	122
8.3 - Expressões da cinética de solidificação e	
perfis de temperatura para moldes refrige-.....	
rados.....	131
8.4 - Propriedades físicas de materiais	134

1 - INTRODUÇÃO

1.1 - CONSIDERAÇÕES GERAIS

Os materiais metálicos contêm, em sua composição química, elementos solutos ou impurezas que, ao longo do processo de solidificação, são redistribuídos da superfície ao centro da peça. Esta redistribuição de soluto ocorre a partir da fronteira sólido-líquido quando se trata de um metal com pequeno grau de impurezas ou a partir da isoterma *solidus* quando se trata da solidificação de ligas. Em ambos os casos, a forma com a qual os solutos e impurezas são distribuídos é fundamental para a qualidade da estrutura bruta de solidificação. A figura 1.1 mostra uma correlação simplificada entre o perfil térmico e o correspondente perfil de distribuição de soluto para um determinado instante durante a solidificação.

A variação de composição química que resulta a nível da microestrutura, isto é, dentro dos limites do contorno de grão, entre ramificações dendríticas ou celulares, é conhecida como microsegregação. O perfil de segregação que ocorre da superfície ao centro da peça, ou seja, a nível macroscópico, é decorrente do que se conhece como macrosegregação. De um modo geral, ambos os tipos de segregação prejudicam as propriedades físicas e químicas dos materiais com sua estrutura original de solidificação e, conseqüentemente, deve-se procurar minimizá-las já durante a solidificação, a fim de que se evite gastos posteriores com tratamentos térmicos com objetivo de diminuir as heterogeneidades de composição química.

Para que se possa atuar sobre as condições operacionais de solidificação, com o intuito de minimizar a segregação durante o processo, é importante que se conheçam as relações de dependência entre o fluxo de calor e o decorrente fluxo de massa durante a solidificação. Isto permitiria conhecer os parâmetros que mais influenciam o fenômeno da segregação e como poderiam ser alterados

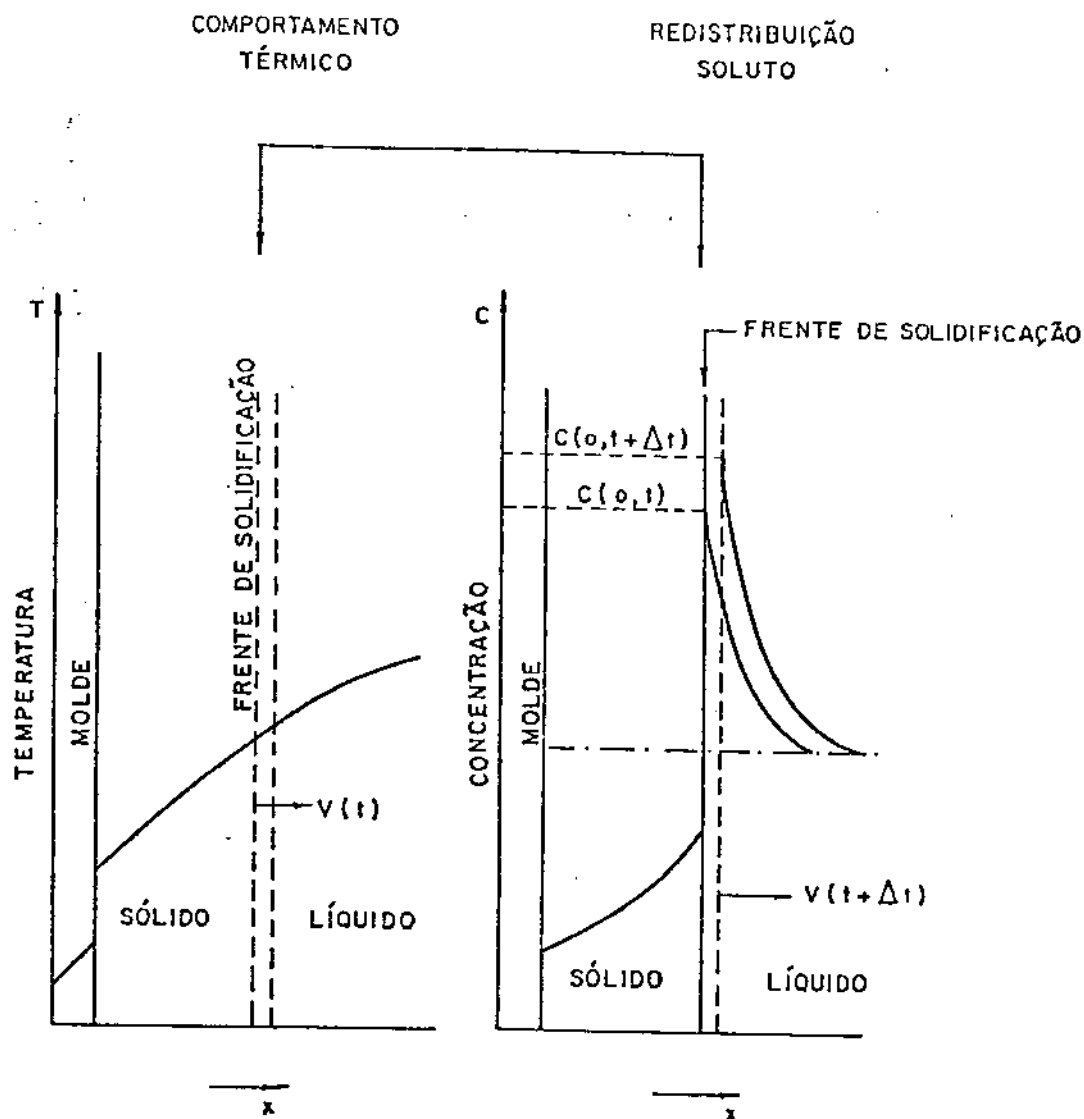


Figura 1.1 - Representação esquemática simplificada da ligação entre a distribuição de temperaturas e o perfil de concentrações durante a solidificação.

no sentido de se obter um perfil de concentração de soluto mais adequado. No que se diz respeito à microsegregação, a literatura apresenta uma série de modelos que permitem calcular a redistribuição de soluto, desde a clássica equação de Scheil até modelos mais complexos que se utilizam de técnicas numéricas^[1-4].

Estes cálculos, juntamente com o elevado número de trabalhos experimentais realizados permitem uma maior compreensão do fenômeno, embora uma estimativa real da microsegregação continue difícil em função da complexidade do fenômeno. Pode-se citar como fatores que mais contribuem na dificuldade de quantificação da segregação: o modo de solidificação celular ou equiaxial, a morfologia das ramificações dendríticas, a ocorrência de transformações de fase durante a solidificação, o efeito de diferentes elementos solutos, o engrossamento e refusão de ramificações dendríticas, o movimento de soluto na região líquida, a dependência do coeficiente de difusão com a concentração e a temperatura.

A macrossegregação é causada pelo movimento de líquido ou soluto de composição química diferente da composição média ou nominal. Pode-se citar, como forças-motrizas deste movimento, a contração de solidificação, a contração térmica, a variação local de composição ou diferenças de densidade, a deformação da fase sólida devido a tensões térmicas ou à pressão metalostática, dentre outras.

Um tipo particular de macrossegregação, conhecido como macrossegregação inversa, ocorre quando o líquido interdendrítico rico em soluto flui em sentido oposto àquele da evolução da solidificação, devido principalmente à contração de solidificação. Este tipo de macrossegregação provoca composições químicas anormalmente elevadas na superfície da peça e a quantificação do fenômeno é complexa. A literatura apresenta um modelo para calcular o perfil de segregação inversa, que é, entretanto, restrito a situações limites (por exemplo, coeficiente de transferência de calor metal-molde infinito) ou a casos específicos^[5-7].

1.2 - OBJETIVOS DO TRABALHO

Tendo em vista a importância da compreensão qualitativa e quantitativa do fenômeno da segregação, estabeleceu-se como meta

deste trabalho a realização de uma análise do fenômeno que, embora restrita, no aspecto quantitativo, à macrossegregação inversa, cobrisse desde os aspectos fundamentais do fenômeno, passando pela análise do campo térmico durante a solidificação e culminando com um modelo geral e versátil de cálculo do perfil de concentração. Para tanto, estabeleceram-se os seguintes objetivos:

- (a) revisão crítica da literatura no que se refere ao fenômeno da segregação, dos modelos de cálculo dos perfis de concentração de soluto e das técnicas experimentais utilizadas.
- (b) desenvolvimento de um modelo analítico de solidificação de ligas binárias em moldes maciços, que permita o cálculo de parâmetros de influência sobre a segregação, tais como gradientes térmicos, taxas de resfriamento e velocidade de deslocamento das isoterms *solidus* e *liquidus*.
- (c) aferição do modelo desenvolvido, através de comparações com um modelo de comprovada eficiência, que utiliza o método de diferenças finitas, e avaliação de seu campo de aplicação com relação a diferentes ligas e moldes de variadas capacidades de absorção de calor.
- (d) modificação de um modelo de macrossegregação inversa da literatura, através da inserção de equações representativas do modelo de solidificação proposto, tornando-o versátil e geral em sua capacidade de aplicação.
- (e) simulação da influência de parâmetros fundamentais da solidificação, como coeficiente de transferência de calor metal-molde, superaquecimento e capacidade de absorção de calor do molde, sobre o perfil de macrossegregação inversa.
- (f) aferição do modelo de macrossegregação inversa modificado através do confronto com resultados experimentais e outros modelos teóricos da literatura.

2. - SEGREGAÇÃO NA SOLIDIFICAÇÃO

A segregação é um fenômeno característico do processo de solidificação de ligas, que ocorre fundamentalmente devido à redistribuição de soluto entre as frações sólida e líquida, durante a passagem do estado líquido para o estado sólido, e pela impossibilidade da completa homogeneização, de razões cinéticas, à medida que a solidificação progride, com o abaixamento progressivo da temperatura.

A análise detalhada de tais fatores permite a compreensão e o desenvolvimento de expressões que possibilitam o estudo quantitativo da segregação de curto alcance, ou seja, da microsegregação. Fatores associados ao escoamento fluido, juntamente com aqueles que provocam a microsegregação, levam ao transporte do líquido enriquecido em soluto, logo adiante da frente de solidificação, para regiões distantes, provocando a segregação de longo alcance, conhecida como macrosegregação.

2.1 MICROSSEGREGAÇÃO

2.1.1 - EQUAÇÃO DE EQUILÍBRIO

Quando se considera que a solidificação ocorre sob a condição de equilíbrio termodinâmico, tem-se implícito que há completa difusão de soluto tanto na fase sólida quanto na fase líquida, para que seja possível coexistir estas fases com composições uniformes e em proporções dadas pelo diagrama de equilíbrio de fases. Nestas condições, a solidificação se processa obedecendo à chamada regra da alavanca, ou equação de equilíbrio, que tem a seguinte forma:

$$C_s = k C_o \left[1 - (1 - k) f_s \right]^{-1} \quad (1)$$

onde C_s é a composição do sólido, k é o coeficiente de partição

de equilíbrio. C_0 é a composição inicial da liga e f_s é a fração sólida em peso.

2.1.2 - EQUACÃO DE SCHEIL

Para a análise da microsegregação, Scheil foi o primeiro a apresentar uma formulação analítica⁽⁸⁾. Supondo que a solidificação se processa sem que haja nenhuma difusão de soluto na fase sólida e mistura completa no líquido, sua teoria é expressa pela chamada equação de Scheil, dada a seguir:

$$C_s^i = k C_0 (1 - f_s)^{k-1} \quad (2)$$

onde C_s^i é a composição do sólido na interface sólido-líquido.

A equação de Scheil, portanto, analisa uma condição extrema, ou seja, aquela de segregação máxima.

2.1.3 - EQUACÃO DE BRODY-FLEMINGS

Nas condições práticas, é de se esperar resultados intermediários aos obtidos pelas equações de equilíbrio e pela equação de Scheil.

Brody-Flemings^(9,10) estenderam a teoria de Scheil a fim de incluir os efeitos da difusão de retorno de soluto no sólido. Sua teoria assume um modelo aproximado de solidificação dendrítica, com morfologia simples, dendrita com geometria plana, difusão completa no líquido e incompleta no sólido, coeficiente de difusão constante e velocidade de crescimento constante ou parabólica.

Sua equação, considerando velocidade de solidificação parabólica é expressa da seguinte forma:

$$C_s^i = k C_0 \left[1 - (1 - \gamma k) f_s \right]^{\frac{k-1}{1-\gamma k}} \quad (3)$$

onde γ é uma constante relacionada ao coeficiente de difusão, D , do soluto no sólido e K a constante de solidificação, K , do crescimento parabólico. Assim,

$$\gamma = \frac{2 D}{K^2} \quad (4)$$

com

$$x_i = K \sqrt{t} \quad (5)$$

onde x_i é a posição da interface sólido-líquido e t é o tempo desde o início da solidificação.

Esta expressão aproxima-se da equação de Scheil quando γ tende a zero. Por outro lado, quando a difusão no sólido é completa, ou seja, γ tende a infinito, a composição de soluto no sólido deve-se aproximar da equação de equilíbrio. Entretanto, a equação de Brody-Flemings coincide com a equação de equilíbrio quando $\gamma = 1$. Desta forma, seus resultados perdem o significado físico quando $\gamma > 1$. Consequentemente, quando a difusão de soluto na fase sólida é elevada, a expressão não fornece resultados confiáveis.

2.1.4 - EQUACÕES DE CLYNE-KURZ E DE OHNAKA

Por esta razão Clyne-Kurz⁽¹¹⁾ e Ohnaka⁽¹²⁾ apresentam novas equações que eliminam a inconsistência física da expressão acima.

Para melhorar a solução de Brody-Flemings, Clyne-Kurz propuseram a substituição do parâmetro γ por outro, Ω , dado por:

$$\Omega = \gamma \left[1 - e^{-2/\gamma} \right] - e^{-1/\gamma} \quad (6)$$

Portanto, sua equação tem forma idêntica à equação de Brody-Flemings, a menos do parâmetro Ω , ou seja,

$$C_S^L = K C_0 \left[1 - (1 - \Omega K) f_s \right]^{\frac{K - 1}{1 - \Omega K}} \quad (7)$$

A derivação das equações (6) e (7), por Clyne-Kurz, foi de modo heurístico e não através de um procedimento rigorosamente matemático.

Já Ohnaka resolveu aproximadamente a equação de difusão pelo método do perfil integral, considerando geometria de dendrita colunar e supondo que a distribuição de soluto no sólido pode ser representada por uma curva quadrática, isto é,

$$C_s = a + b x + c x^2 \quad (8)$$

onde a , b e c são incógnitas dependentes do tempo e x é a distância a partir do centro da dendrita. Desta forma, foi derivada outra expressão para Ω , dada por:

$$\Omega = \frac{\gamma}{1 + \gamma} \quad (9)$$

Tanto a equação de Clyne-Kurz como a de Ohnaka aproximam-se da equação de Scheil ou da equação de equilíbrio, quando γ se aproxima de zero ou infinito, respectivamente. Portanto, elas apresentam consistência física nas condições limites.

Entretanto, sua validade para valores finitos de γ não foi ainda esclarecida.

2.1.5 - SOLUÇÕES EXATAS DE KOBAYASHI

2.1.5.1 - SOLUÇÃO EXATA PARA O MODELO DE BRODY-FLEMINGS

Recentemente, Kobayashi^[19] apresentou uma solução exata do modelo de solidificação de Brody-Flemings, com velocidade de crescimento parabólica.

A solução exata do modelo de solidificação de Brody-Flemings é dada pela seguinte equação:

$$C_S(f_S, z) = k C_0 \sum_{n=0}^{\infty} \zeta_n \frac{F\left[-\frac{n}{2}, \frac{1}{2}; -z\right]}{F\left[-\frac{n}{2}, \frac{1}{2}; -z\right]} f_S^n \quad (10)$$

onde

$$\zeta_n = \prod_{m=0}^{n-1} \left[1 - k \frac{F\left[-\frac{m}{2}, \frac{3}{2}; -z_0\right]}{F\left[-\frac{m}{2}, \frac{1}{2}; -z_0\right]} \right] \quad (11)$$

$$z = \frac{x^*}{2\gamma} = \frac{x/x_i}{2\gamma} \quad \text{e} \quad z_0 = \frac{1}{2\gamma} \quad (12)$$

$F(p, q; z)$ é denominada função hipergeométrica confluyente e é definida como:

$$F(p, q; z) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(p)_r}{(q)_r} \frac{z^r}{r!} \quad (13)$$

onde $(p)_r$ e $(q)_r$ são os símbolos de Pochhammer, definidos como:

$$(p)_r = p(p+1) \dots (p+r-1) \quad (14)$$

$$(p)_0 = 1, (p)_1 = p, \quad \text{etc.}$$

Para maior esclarecimento, a dedução da solução exata pode ser vista no Apêndice.

Em particular, na interface, a expressão toma a forma:

$$C_S^i = k C_0 \sum_{n=0}^{\infty} \zeta_n f_S^n \quad (15)$$

Nas figuras 2.1, 2.2 e 2.3 são apresentados os resultados numéricos, respectivamente, para a segregação de fósforo, enxofre e carbono, obtidos pelos cálculos através da solução exata e das demais equações aproximadas. Desta forma, Kobayashi mostrou que a precisão de todas as soluções aproximadas mencionadas acima é frequentemente ruim.

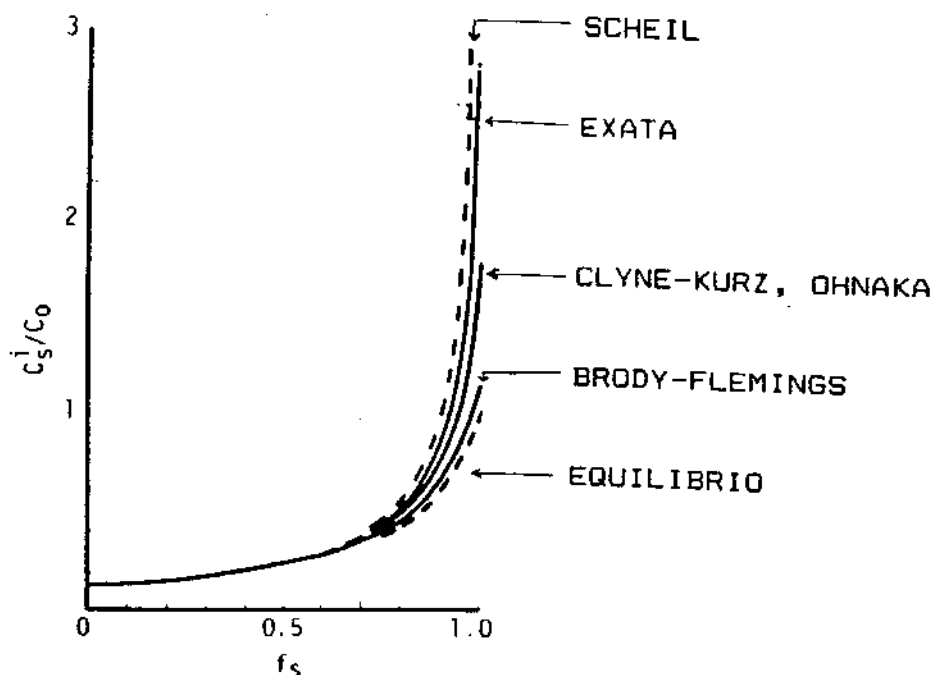


Figura 2.1 - Comparação de várias equações de cálculo da redistribuição de fósforo no Fe- δ durante a solidificação de um aço. $k = 0,13$ e $\gamma = 0,8$ ⁽¹⁹⁾

Ainda segundo Kobayashi, apesar de se ter obtida a solução exata do 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 poderiam 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

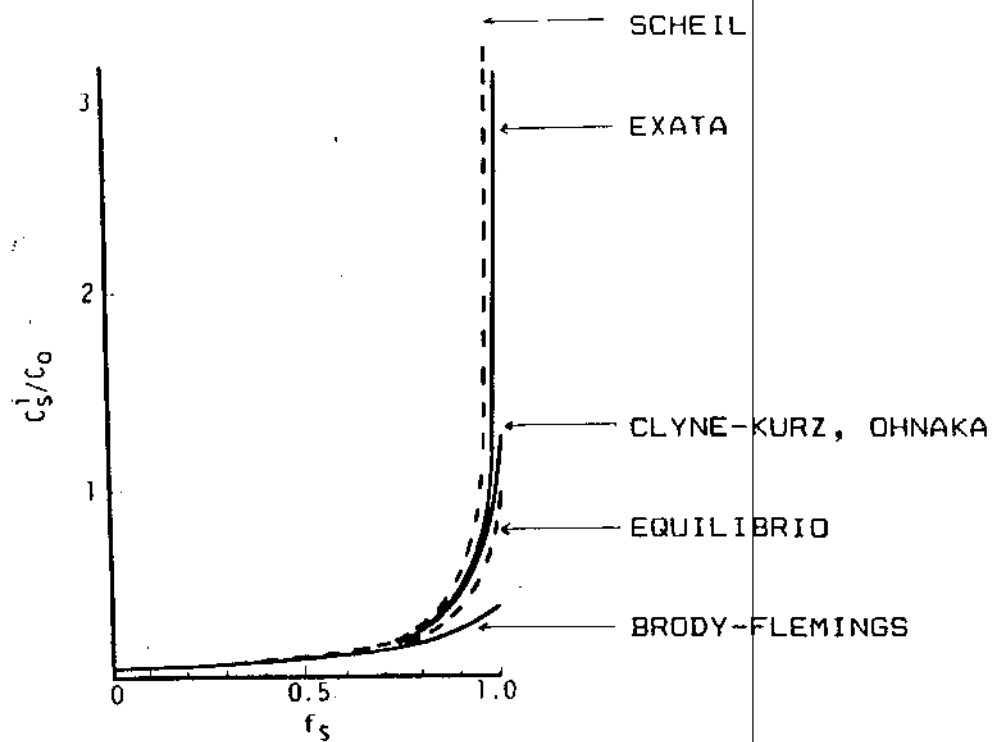


Figura 2.2 - Redistribuição de enxofre no Fe- γ durante a solidificação de um aço. $k = 0,06$ e $\gamma = 3,2$ ^[19].

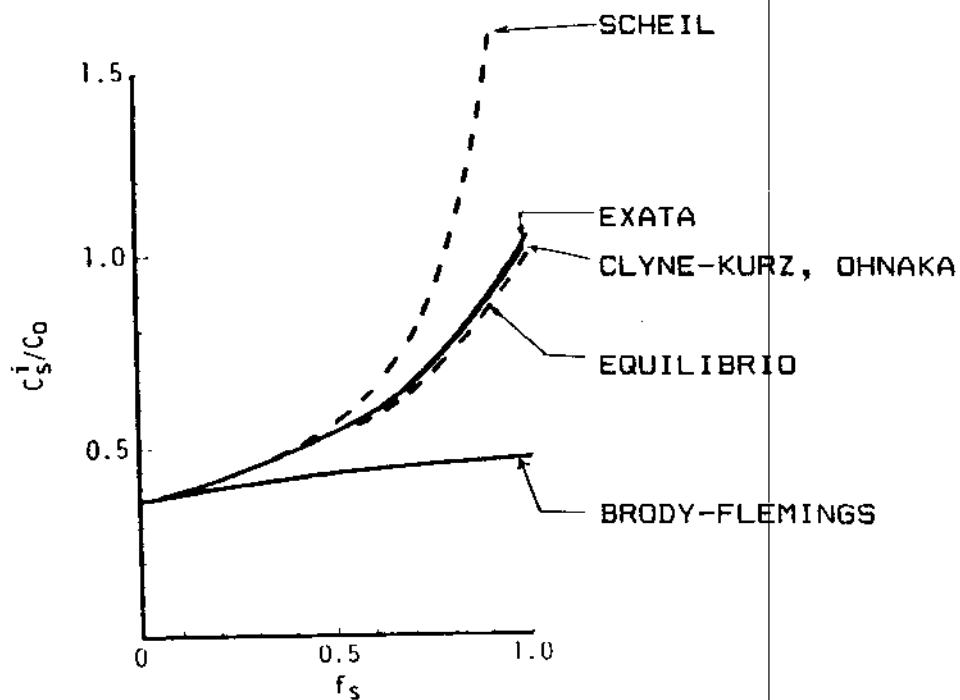


Figura 2.3 - Redistribuição de carbono no Fe- γ durante a solidificação de um aço. $k = 0,36$ e $\gamma = 12,8$ ^[13].

de solidificação ou o tempo de solidificação local. Em seu modelo, a velocidade de solidificação é dada como sendo independente da redistribuição de soluto, o que não parece 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⁽¹⁴⁾, duas soluções aproximadas do modelo de Brody-Flemings. A solução aproximada é incorporado um modelo térmico de solidificação, produzindo-se um modelo matemático estendido para solidificação dendrítica.

Nas aproximações, um termo de segunda derivada na equação de difusão modificada é desprezado ou substituído por uma aproximação, originando as soluções aproximadas de primeira e de segunda ordem, respectivamente.

A equação

$$C_s = k C_o \left[1 - (1 - \Omega k) f_s \sqrt{\frac{1 + 2z}{1 + 2z_o}} \right]^\eta \quad (16)$$

é a solução aproximada de primeira ordem, onde:

$$\eta = \frac{k - 1}{1 - \Omega k} \quad (17)$$

e a equação

$$C_s^{(2)} = k C_o \xi^\eta \left\{ 1 + \Gamma \left[\left(1 - \frac{1 + \Omega}{2} k \right) \left(\frac{1}{\xi^2} - 1 \right) - 5 \left(1 - \frac{2 + 3\Omega}{5} k \right) \left(\frac{1}{\xi} - 1 \right) - 3 \left(1 - \frac{1 + 2\Omega}{3} k \right) \ln \xi \right] \right\} \quad (18)$$

é a solução aproximada de segunda ordem, onde:

$$\xi = 1 - (1 - \Omega k) f_s \quad (19)$$

$$\Gamma = \frac{k (1 - k) \Omega^2}{2 \gamma (1 - \Omega k)^3} \quad (20)$$

Comparando-se os resultados calculados pela solução aproximada de segunda ordem com a solução exata, observou-se boa concordância, apesar de a solução aproximada prever valores ligeiramente maiores que a solução exata, para f_s próximo de 0,97, como mostra a figura 2.4, para $k = 0,13$ e $\gamma = 0,8$, que são os valores usados por Clyne-Kurz para analisar o comportamento do P no ferro δ .

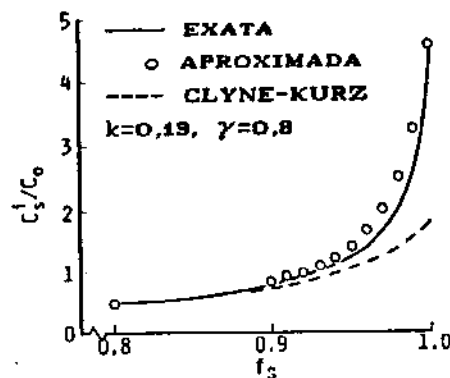


Figura 2.4 - Comparação dos resultados da solução aproximada com os da solução exata. $k = 0,13$ e $\gamma = 0,8$ ^[14].

Incorporando um modelo térmico de solidificação à solução aproximada, Kobayashi propõe um modelo estendido para redistribuição de soluto durante a solidificação, no qual não há a suposição da velocidade de solidificação. Este modelo inclui o tratamento de ligas multicomponentes e da transformação δ/γ nos aços, coeficiente de difusão, coeficiente de partição e

espaçamento dendrítico dependentes da temperatura, e estimação do caminho de difusão. O modelo fornece resultados consistentes com dados experimentais obtidos por Matsumiya et al^[11] e por Kobayashi et al^[15,16].

2.1.5.2 - SOLUÇÃO EXATA PARA O MODELO DE OHNAKA

Utilizando procedimento análogo, Kobayashi formulou, também, uma solução exata para o modelo de dendrita colunar proposto por Ohnaka, acompanhada de outras duas soluções aproximadas, novamente chamadas de primeira e de segunda ordem^[17].

A solução exata considera velocidade de solidificação, coeficiente de partição e coeficiente de difusão no sólido constantes durante a solidificação. Supõe-se, ainda, uma liga binária sem transformação de fase no sólido.

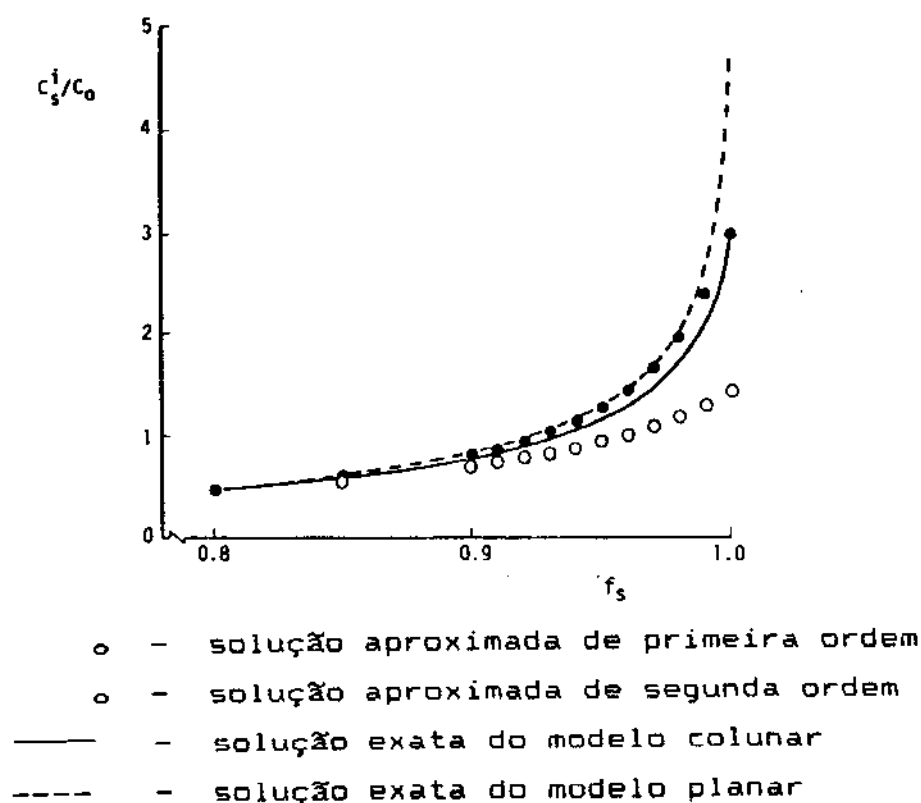


Figura 2.5 - Comparação dos resultados através das soluções exatas e aproximadas para o caso de $k = 0,13$ e $\gamma = 0,8$ ^[17].

A figura 2.5 mostra os resultados calculados com as equações da solução exata e aproximadas do modelo de Ohnaka, bem como da solução exata do modelo de Brody-Flemings, para o caso de $k = 0,13$ e $\gamma = 0,8$. Nota-se boa precisão da equação aproximada de segunda ordem comparada à solução exata. Com relação à solução exata do modelo de Brody-Flemings (que considera velocidade de solidificação parabólica), a microsegregação é subestimada pela solução exata do modelo de Ohnaka (considerando velocidade de solidificação constante).

A solução aproximada Kobayashi incorporou um modelo térmico de solidificação, e outro modelo matemático estendido foi desenvolvido. O modelo considera ligas multicomponentes com transformação de fase, coeficientes de difusão dependente da temperatura e, com a incorporação do modelo de solidificação, exclui a suposição da velocidade de solidificação^[17]. O modelo térmico não é incorporado à solução exata devido à grande complexidade de seu cálculo.

Comparando-se com resultados experimentais e com valores calculados do modelo estendido de dendrita plana proposto anteriormente, este modelo apresenta boa concordância. Conclui-se, também, que a suposição da geometria da dendrita na solidificação não é importante para se quantificar os efeitos de microsegregação, quando se incorpora o modelo térmico.

Recentemente, Cornelissen^[18] utilizou o tratamento dado a um único componente e estendeu a ligas multicomponentes, baseado em modelos anteriores, já discutidos neste capítulo. Aplicando a dois aços, um de baixo carbono (0,04%) e outro de médio carbono (0,18%), obteve dados do coeficiente de partição, de difusão, etc., tanto na solidificação ferrítica como na austenítica e concluiu que somente o carbono, o fósforo e o enxofre têm influência importante na temperatura *solidus*. O manganês influi através da precipitação de MnS. Não se verificou influência de nenhum outro elemento na microsegregação e na temperatura *solidus*. Fujimura-Brimacombe^[19] também apresentaram um modelo para ligas multicomponentes, obtendo boa concordância dos coeficientes de partição efetivos com valores geralmente aceitos.

Porém, as predições de microsegregação para o cromo e o níquel em aços inoxidáveis solidificados unidirecionalmente foram pouco satisfatórios, provavelmente porque o modelo despreza a segregação entre braços dendríticos secundários adjacentes.

Na literatura são reportados vários modelos numéricos para a análise da microsegregação^[1-4,14,17,20,21], além de trabalhos experimentais^[1,22-24] e analíticos^[25].

Matsumiya et al^[1] desenvolveram um modelo numérico para analisar a microsegregação interdendrítica pelo método de diferenças finitas, levando em consideração a difusão nas fases sólida e líquida e a forma da seção transversal da dendrita. Foi considerada uma seção de forma hexagonal. Comparativamente a resultados de testes de laboratório, o modelo mostrou-se confiável quando a estrutura solidificada não apresenta ramificações com braços dendríticos secundários ou terciários. Aplicando a lingotamento contínuo de aços, os resultados foram bons para a análise das segregações de carbono e fósforo.

2.2 - MACROSSEGREGAÇÃO

Como mencionado anteriormente, na macrossegregação, fatores relacionados a transporte de massa que possibilitam o deslocamento do líquido enriquecido em soluto para regiões muito distantes da frente de solidificação no momento da redistribuição de soluto analisado para a microsegregação, são muito importantes e determinantes na estrutura bruta de solidificação final. Alguns desses fatores podem ser destacados, como a contração de solidificação, a contração térmica, a variação das propriedades com a temperatura, a composição química, a precipitação de segundas fases, etc. A análise completa e precisa desse fenômeno requer, geralmente, a consideração simultânea de campos de temperaturas, de velocidades e de concentrações, normalmente acopladas e interdependentes, o que, sem dúvida alguma, torna-se de difícil resolução^[26-30].

A macrossegregação pode-se manifestar sob diversas formas e intensidades. Alguns casos característicos de macrossegregação serão discutidos a seguir.

2.2.1 - SEGREGAÇÃO NORMAL

Este tipo de segregação é provocado pelo movimento de soluto no sentido da evolução da frente de solidificação. Consequentemente, é de se esperar, concentrações crescentes de soluto ao longo do lingote no sentido da evolução da solidificação, para ligas com coeficientes de redistribuição de soluto $k < 1$, ou seja, aquelas em que a solubilidade cai com o decréscimo da temperatura^[30].

Pode-se representar a segregação normal através de uma curva que relaciona a concentração média de soluto no sólido com a distância ao início da solidificação. A forma precisa dessa curva depende de vários parâmetros, como o coeficiente de distribuição, a velocidade de solidificação e a intensidade de convecção. Portanto, não é fácil se estabelecer uma regra para prever o resultado final, porém os casos extremos de segregação normal podem ser estimados com as formas esquematizadas na figura 2.6.

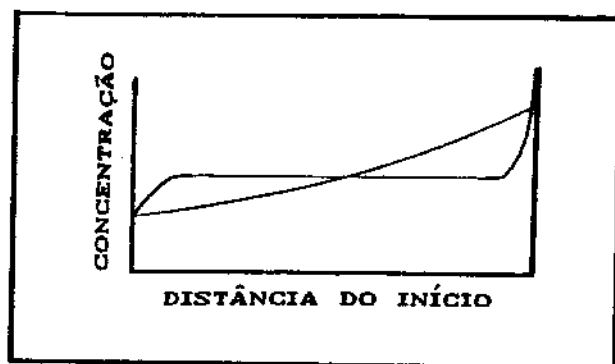


Figura 2.6 - Curvas esquemáticas de casos extremos de segregação normal.

2.2.2 - SEGREGAÇÃO INVERSA

Sob certas condições de solidificação, pode-se observar uma variação de composição média com a distância a partir do início da solidificação contrária àquela descrita para a segregação normal,

ou seja, encontra-se concentração maior de soluto em regiões que solidificaram primeiramente (em ligas com $k < 1$), daí a denominação de segregação inversa.

Após inúmeros estudos, o mecanismo mais aceito quanto à causa da segregação inversa é aquele proposto originalmente por Scheil^[8]: a contração volumétrica que acompanha a solidificação da maioria das ligas pode causar um movimento do líquido residual enriquecido de soluto em sentido oposto ao da evolução da frente de solidificação.

Baseado nesta hipótese, Scheil foi o primeiro a elaborar uma expressão analítica para se calcular a segregação máxima.

A validade desta teoria foi reforçada por observações de Adams^[31], que não verificou a ocorrência de segregação inversa em ligas que se expandem durante a solidificação.

Em certos casos a segregação pode ser muito intensa, a ponto de se observarem elevadíssimas concentrações de soluto localizadas na parede externa da peça. Este tipo de segregação inversa é particularmente conhecido como exsudação. Nestes casos, os valores das concentrações de soluto medidas são muito maiores que aqueles da segregação inversa, por exemplo, próximas à composição eutética em ligas Al-Cu.

Explica-se o surgimento da exsudação da seguinte forma: a liga vazada sobre um molde frio nucleia e forma uma camada de grãos finos. Esta camada pode refundir-se devido a reaquecimentos locais provocados pelo metal líquido quente. Se, ao contrair, a estrutura dendrítica já formada for suficientemente resistente para separar-se da parede interna do molde antes que o líquido interdendrítico tenha-se solidificado, este pode ser succionado até o espaço vazio entre o molde e o metal já sólido, causando a refusão referida^[30].

Kirkaldy-Youdelis^[32] apresentaram a teoria de segregação inversa, através da qual pôde-se calcular a segregação máxima e a distribuição da segregação ao longo do lingote de liga binária solidificada unidirecionalmente. Os valores calculados apresentaram boa concordância com os resultados experimentais para

a liga Al-Cu. Foi demonstrado, assim, que a contração de volume durante a solidificação e consequente fluxo de retorno do líquido residual enriquecido de soluto ao longo dos canais interdendríticos são a causa maior da segregação inversa. Esta segregação, definida como a diferença entre a concentração média de soluto e a local, geralmente reduz a um pequeno valor positivo e constante próximo ao centro do lingote e, finalmente, reverte em sinal próximo à extremidade quente do lingote, para assegurar a conservação de soluto total.

Os cálculos mostraram, também que a segregação é máxima na face coquilhada ("chill face").

As figuras 2.7 e 2.8 mostram seus resultados, podendo-se comparar os valores medidos e calculados, e verificar a validade do modelo.

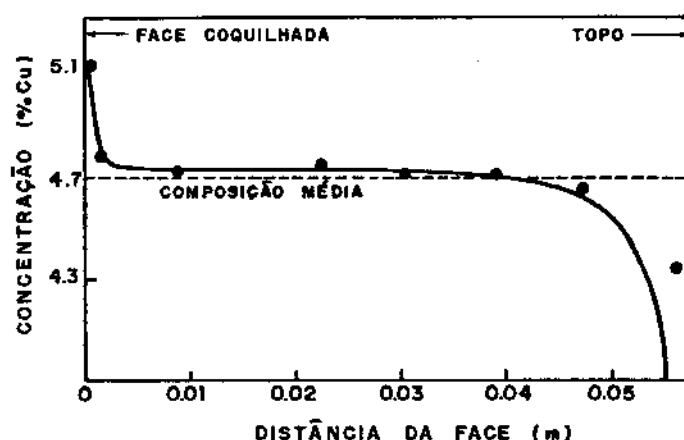


Figura 2.7 - Resultados experimentais e calculados de segregação inversa para a liga Al-4,7%Cu, resfriada rapidamente^[32].

Posteriormente, Youdelis-Colton^[33] repetiram a utilização do modelo para o cálculo da segregação máxima no sistema Al-Zn e verificaram novamente boa concordância com resultados experimentais, como pode ser visto nas figuras 2.9 e 2.10.

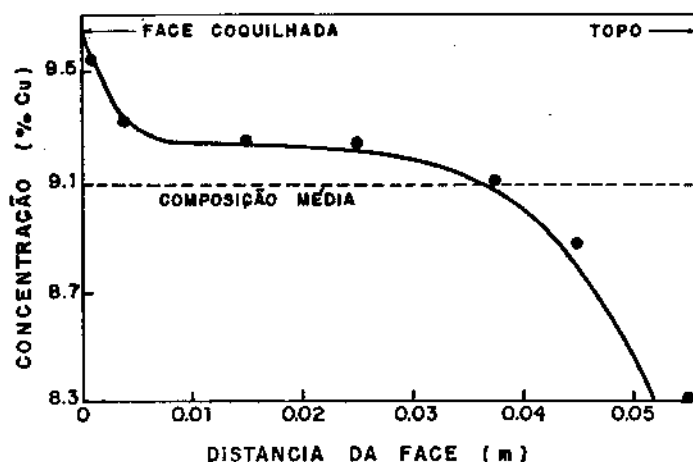


Figura 2.8 - Resultados experimentais e calculados de segregação inversa para a liga Al-9,09%Cu, resfriada rapidamente^[32].

Concluiu-se, assim, que o mecanismo de segregação no sistema Al-Zn é similar àquele no sistema Al-Cu.

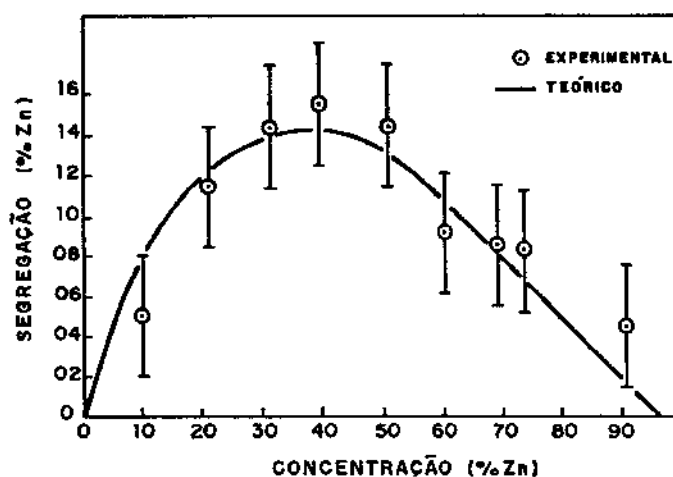


Figura 2.9 - Curvas experimentais e calculadas da segregação máxima para diversas composições da liga Al-Zn^[33].

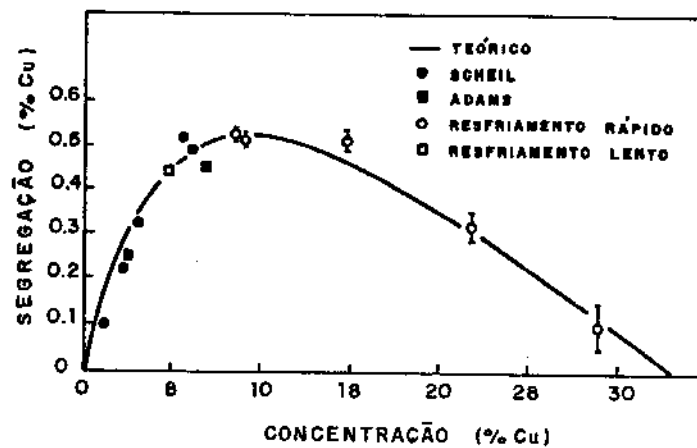


Figura 2.10 - Curvas experimentais e calculadas da segregação máxima para diversas composições da liga Al-Cu^[33].

Cahoon-Youdelis^[34] apresentaram simulações com o modelo anteriormente desenvolvido e verificaram que a distribuição da segregação é controlada pelos comprimentos das várias zonas de

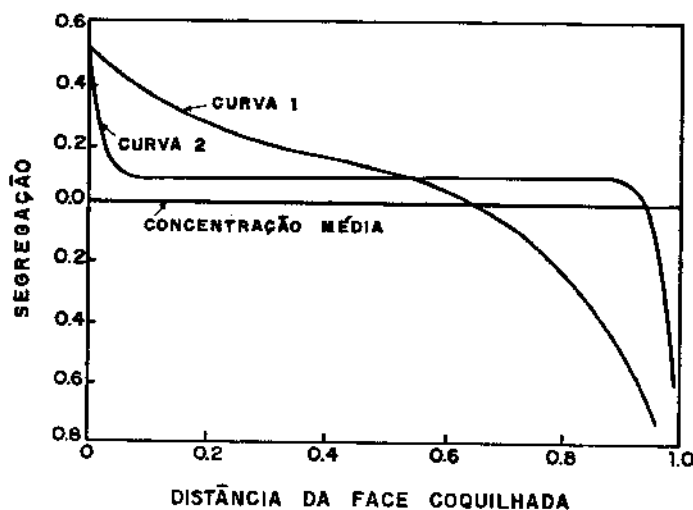


Figura 2.11 - Influência da velocidade de resfriamento na extensão da zona de segregação inversa^[34].

solidificado. Isto é, as zonas solidificadas, que são, por sua vez, controladas pela taxa de resfriamento, podem ser determinadas a partir de curvas de distribuição de temperaturas obtidas durante a solidificação. As distribuições teóricas de segregação mostradas na figura 2.11 ilustram a influência da velocidade de resfriamento sobre a distribuição de segregação.

A curva 1, indicativa de um lingote solidificado lentamente, representa uma solidificação com extensa zona de solidificação, enquanto a curva 2, indicativa de um lingote resfriado rapidamente, representa uma solidificação com zona de solidificação relativamente estreita. Estas distribuições foram calculadas para uma liga Al-10%Cu, porém sua forma de distribuição seria semelhante para qualquer liga binária^[94].

Estas curvas mostram claramente porque pesquisadores anteriores obtiveram resultados que indicavam que a segregação máxima, na face coquilhada, aproxima-se de zero em solidificação com taxas de resfriamento muito altas. Realmente, a segregação máxima é independente da taxa de resfriamento, mas, mesmo em certas distâncias da face coquilhada, o grau de segregação cai consideravelmente, particularmente num lingote resfriado rapidamente, tornando muito difícil medir o grau de segregação que ocorre na face coquilhada.

Mais recentemente a expressão formulada por Kirkaldy-Youdelis foi estendida para casos gerais de macrossegregação por Flemings-Nereo^[5-7]. Esta formulação foi o ponto de partida do desenvolvimento deste trabalho e encontra-se detalhada e discutida no capítulo 4.

Nas investigações até então mostrou-se que ocorre segregação inversa em muitas ligas solidificadas unidirecionalmente. Nelas, as distribuições de soluto foram observadas em lingotes de estrutura colunar e apresentam boa concordância com a teoria de segregação inversa.

Ao formularem a teoria, Kirkaldy-Youdelis e Flemings-Nereo,

não fazem nenhuma restrição à estrutura solidificada, podendo-se aplicá-la a qualquer tipo de estrutura com grãos crescidos a partir de um gradiente de temperaturas, contanto que as condições de solidificação satisfaçam as hipóteses estabelecidas em seu desenvolvimento.

Recentemente, Kato-Cahoon⁽⁹⁵⁾ realizaram trabalho experimental para verificar a influência da estrutura solidificada sobre a segregação inversa. Seu principal objetivo foi o de esclarecer resultados conflitantes apresentados por outros pesquisadores em lingotes de estrutura equiaxial. Nakano et al⁽⁹⁶⁾ analisaram a distribuição de soluto em ligas Cu-Sn com estrutura equiaxial e obtiveram segregação inversa similar àquela de estrutura colunar. Kato-Cahoon em trabalho anterior também obtiveram resultado semelhante. Por outro lado, Motegi-Ohno⁽⁹⁷⁾ não encontraram segregação inversa em lingotes de Al-Cu solidificados horizontalmente, contendo estrutura equiaxial, nem em lingotes de estrutura de transição colunar-equiaxial.

Para isso, foram solidificados unidirecionalmente, a partir da base, lingotes de Al-4,0%Cu e Al-4,0%Cu-0,2%Ti, obtendo-se estrutura colunar no primeiro e equiaxial no segundo. O Ti foi adicionado intencionalmente para induzir a formação de grãos equiaxiais.

Foi observada segregação inversa tanto no lingote de estrutura colunar, como era esperado, quanto no de estrutura equiaxial. O lingote de grãos colunares exibiu segregação inversa típica e a distribuição de soluto apresenta boa concordância com a teoria. Para os lingotes de grãos equiaxiais, as distribuições de soluto experimentais concordam com a distribuição teórica somente na primeira metade do lingote solidificado.

Portanto, parece que nos primeiros estágios de solidificação a redistribuição de soluto macroscópica na estrutura equiaxial é controlada pelo fluxo de retorno do líquido, que é a suposição básica da teoria da segregação inversa. Próximo à superfície

coquilhada, a distribuição de soluto flutua ao redor da curva teórica. Esta flutuação é causada pela exsudação, que é um fenômeno observado frequentemente em lingotes de estrutura colunar. A presença de exsudação que é de composição próxima à do eutético, provoca concentrações muito altas na superfície do lingote: 6,4% Cu no lingote de grãos equiaxiais e 7,0% Cu no lingote de grãos colunares. Entretanto, como a ocorrência de exsudação não é parte do processo de segregação inversa propriamente dito, suas concentrações foram excluídas dos resultados.

Entretanto, comparando-se com dados teóricos calculados a partir do modelo de Kirkaldy-Youdelis, a distribuição de soluto ao longo do lingote é mais precisa nos lingotes de grãos colunares. Nos lingotes de grãos equiaxiais, observou-se gradativo desvio dos resultados obtidos com os dados teóricos a partir de 50% do comprimento do lingote. De 50 a 90% do comprimento, o teor de soluto apresenta-se abaixo do teórico e, para os 10% finais, a distribuição está acima dos valores teóricos. Este desvio deve ser causado pela diferença entre o processo de solidificação real e aquele das suposições adotadas no desenvolvimento da teoria.

A teoria de segregação inversa é baseada nas seguintes suposições:

1. não ocorre exsudação.
2. não há porosidade de contração.
3. existem condições de equilíbrio na interface sólido-líquido.
4. não ocorre difusão no sólido e existe equilíbrio local entre o líquido interdendrítico e a superfície da dendrita adjacente.
5. a distribuição de massa líquida e sólida é conhecida em qualquer instante.
6. não há difusão no líquido na direção de crescimento.
7. a solidificação processa-se unidirecionalmente de uma extremidade a outra.
8. somente o líquido se movimenta; o sólido permanece estacionário.

Analisando, uma a uma, as suposições adotadas na teoria, Kato-Cahoon concluíram, observando macrografias dos lingotes, que a suposição de que não há formação de poros só é válida para os lingotes de estrutura colunar e para os primeiros 50% do lingote de estrutura equiaxial. O desvio da distribuição de soluto a partir da metade do lingote foi relacionado ao grande aumento na porosidade verificado a partir deste ponto nos lingotes de grãos equiaxiais quando comparada à dos lingotes com estrutura colunar. Talvez também a suposição B só seja válida para a estrutura colunar, onde as dendritas primárias estão atadas à "chill face" e as dendritas secundárias às dendritas primárias. Entretanto, no caso de uma estrutura equiaxial, existe a possibilidade de as pequenas dendritas que formam os grãos equiaxiais não estarem atadas ao sólido e, conseqüentemente, poderem mover-se juntamente com o líquido na direção vertical. Para o sistema Al-Cu, este mecanismo não pareceu ser significativo, visto que a distribuição de soluto experimental concorda com a teórica para os primeiros 50% do lingote.

Prabhakar-Weinberg^[38] realizaram medidas cuidadosas e verificaram que a segregação inversa era confinada a uma região estreita muito próxima à face coquilhada, contrário aos resultados reportados anteriormente, e dependia de fatores não considerados no desenvolvimento teórico. Especificamente, verificou-se que a segregação na "chill face" diminui com maior temperatura de vazamento ou com maior condutividade do material do molde.

Minakawa et al^[39] desenvolveram um modelo, utilizando análise de diferenças finitas, que determina quantitativamente a segregação inversa em ligas fundidas. O modelo calcula a segregação na face coquilhada e na região adjacente a ela, considerando-se os efeitos quantitativos das variações de composição e temperatura, bem como da contração durante a solidificação.

Foi calculada a segregação para as ligas Al-Cu, Al-Zn e Sb-Bi. Em geral, os cálculos concordam com os valores medidos

reportados da segregação na face coquilhada para as ligas Al-Cu e Sb-Bi. Eles diferem apreciavelmente na região de composição 40% Zn das ligas Al-Zn, onde foi obtida uma depressão em vez de um pico na curva de composição versus segregação na face coquilhada.

Na região adjacente à face coquilhada, verificou-se que a segregação inversa cai rapidamente com a distância, a taxa diminuindo com a concentração crescente de soluto da liga.

A presença de um "gap" de ar entre o metal em solidificação e o molde pode influir significativamente a segregação tanto na face coquilhada como adjacente a ela. A extensão desse "gap" de ar, por sua vez, é dependente da temperatura de vazamento e do material da coquilha. Eles reportam que a segregação na face coquilhada em molde de cobre cai rapidamente com superaquecimentos crescentes. Isto pode ser explicado pela diminuição na espessura do "gap" de ar que se forma com o aumento do superaquecimento, reduzindo o comprimento da região sólido-líquido e diminuindo a segregação na face coquilhada.

Outro resultado observado foi que as ligas Al-Cu exibem expansão na solidificação, o que causou surpresa inicialmente. Verificou-se que, quando ocorre a solidificação, cobre é rejeitado pelo sólido, contribuindo para a diminuição de sua densidade e, apesar de o Al ter uma grande contração de volume na solidificação, a diminuição na densidade, resultante do decréscimo do teor de Cu no sólido, é maior que a contração de solidificação, resultando numa contração negativa, ou expansão de volume. Isto continua até o ponto em que se atinge a transição para a solidificação eutética, quando ocorre contração positiva, uma vez que não há segregação de soluto. Entretanto, a contração total de todo o sistema, incluindo tanto o sólido quanto o líquido, é positiva. A contração de volume do sólido quando ele resfria é também significativa na análise da segregação inversa.

2.2.3 - MACROSSEGREGAÇÃO EM AÇOS

A segregação em aços merece uma abordagem particular, tanto

por ser o metal de maior utilização, como por apresentarem formas características de macrossegregação.

2.2.3.1 - MACROSSEGREGAÇÃO EM LINGOTES DE AÇO

A macroestrutura de lingotes de aço, de dimensões normalmente fabricadas, mostra segregação em canais, conhecida como segregação em A ou em V, conforme a inclinação que estes canais tiverem em relação a um eixo vertical imaginário, passando pelo seu centro.

Inúmeros estudos experimentais e teóricos foram realizados para a análise deste tipo de segregação^[42-53]. Suzuki e colaboradores mostraram que a forma da lingoteira (de topo maior que a base, conhecidas por "big-end-up", ou de base maior que o topo, conhecidas por "big-end-down") bem como a composição química do aço, além de outros parâmetros do processo, exercem forte influência sobre a segregação em canais^[40-43]. Segundo eles, é possível diminuir sua intensidade ou até mesmo eliminar a segregação em A, através de criteriosa escolha de elementos de liga do aço, sendo os elementos de densidade maior ou igual à do ferro os mais favoráveis. O mesmo resultado pode ser obtido para a segregação em V através da alteração da conicidade da lingoteira, sendo que maior conicidade é melhor.

Após vários trabalhos ao longo dos últimos anos, chegou-se a um consenso, ou seja, o de que a segregação em canais é causada fundamentalmente pelo escoamento fluido do líquido enriquecido em soluto através dos canais interdendríticos, existentes durante o processo de solidificação de um lingote^[42-53].

Este fluxo interdendrítico é influenciado por todos os fatores provocadores de convecção no líquido, tais como o campo térmico, a contração de solidificação, a contração térmica, a variação de densidade com a composição química, etc.

Vários trabalhos fazem uma abordagem teórica objetivando analisar a segregação em canais^[15-7,46-56], considerando

escoamento fluido. A formulação desenvolvida por Flemings-Nereo^[5-7,55-57] permite prever situações limites para a formação deste tipo de segregação, considerando o gradiente térmico, a velocidade de resfriamento e a velocidade do fluido interdendrítico. Outros pesquisadores^[51-53], modificando as expressões apresentadas por Flemings-Nereo, ou fazendo outras formulações teóricas^[43-48], também analisam a formação da segregação em canais.

Da análise feita, concluiu-se que a segregação em canais dá-se sob condições de instabilidade do fluxo do líquido interdendrítico. Esta instabilidade ocorre quando a velocidade do fluido interdendrítico é menor que a velocidade de solidificação. Nesta condição, localmente, ao invés da continuidade da solidificação, ocorre refusão, dando origem a um canal por onde o líquido rico em soluto pode fluir e, posteriormente, solidificar formando a segregação em canais.

Devido à sua natureza, e das inúmeras influências, é extremamente difícil o modelamento deste tipo de segregação. São necessários cálculos para a resolução de equações para obtenção de campos térmicos, campos de velocidade e campos de concentração. Estes três tipos de equação não são independentes, mas sim acopladas, o que torna difícil sua realização a menos que fortes simplificações sejam feitas. Estas simplificações quase sempre provocam resultados calculados muito longe daqueles observados nas condições práticas.

2.2.3.2 - MACROSSEGREGAÇÃO EM LINGOTAMENTO CONTÍNUO

Em lingotamento contínuo de placas de aços, a solidificação processa-se de forma muito mais rápida que no lingotamento convencional, principalmente por ser realizada, primeiramente, em molde de cobre refrigerado a água seguida de jateamento direto de água, através de bicos aspersores, e também devido às menores espessuras do produto solidificado.

A segregação característica é a conhecida por segregação central, amplamente relatada na literatura^[58-68]. Nestes casos, devido à solidificação rápida e à estrutura predominantemente colunar, o soluto rejeitado durante a solidificação é empurrado para a frente até os estágios finais culminando com a formação de praticamente uma fina camada segregada no centro da placa.

A diminuição da zona colunar e o consequente aumento da zona equiaxial central são favoráveis para a diminuição da segregação central. Por esta razão, soluções práticas como agitação eletromagnética e adição de metais terras-raras têm sido utilizadas em muitas usinas siderúrgicas, bem como estudos detalhados de suas influências^[69-80]. Pesquisas com o objetivo de se melhor conhecer a transição colunar-equiaxial também têm sido realizadas^[81-83]. A nível de parâmetros normais de processo, a solução mais comum é a de se trabalhar com menor superaquecimento possível^[69,70].

Muitos trabalhos experimentais têm sido realizados para se analisar este fenômeno e também alguns trabalhos teóricos.

Como mencionado para a segregação em canais, também para a segregação central, as formulações devem considerar o escoamento fluido.

Assim, no lingotamento de placas, dois parâmetros muito importantes devem ser levados em consideração, além daqueles já mencionados como causadores do escoamento fluido: o abaulamento da placa nos locais onde ocorre o final da solidificação e a posição destes locais em relação ao ponto de desempenho da placa na máquina de lingotamento^[69,70,84]. O ponto final de solidificação depende principalmente, da velocidade de lingotamento e da temperatura, além das vazões de água utilizadas. O abaulamento nestas regiões é provocado por desajustes na máquina, quanto ao espaçamento entre os rolos e ao alinhamento do conjunto de rolos e segmentos.

A razão da importância do abaulamento deve-se ao escoamento do líquido rico em soluto no centro da placa, quando ele se apresenta em níveis elevados.

Miyazawa-Schwerdtfeger fizeram um estudo teórico preliminar da influência do abaulamento na segregação central⁽¹⁸⁵⁾, após uma investigação teórica que considerou apenas um modelo de difusão⁽¹⁸⁶⁾. O modelo de difusão mostra que apenas a difusão molecular de soluto não é capaz de gerar significativa macrossegregação. Por outro lado, o modelo que considera o abaulamento mostrou resultados de perfis de concentração similares aos observados normalmente em placas. Entretanto, não há ainda uma boa precisão dos resultados. O modelo tem validade apenas qualitativa na análise das influências de parâmetros de processo. Cálculos desconsiderando a existência de abaulamento, onde só atua o fluxo interdendrítico movido pela contração de solidificação, revelaram que a macrossegregação central, nestas condições é muito pequena.

3. - MODELO DE SOLIDIFICAÇÃO

MODELO ANALÍTICO DE SOLIDIFICAÇÃO UNIDIRECIONAL, EM MOLDES SEMI-INFINITOS, COM ZONA PASTOSA E PRESENÇA DE SUPERAQUECIMENTO

O modelo analítico desenvolvido por Garcia-Prates⁽⁸⁵⁻⁹⁴⁾ será estendido para o caso de solidificação unidirecional de ligas (isto é, solidificação com zona pastosa), em moldes semi-infinitos e em presença de superaquecimento, a fim de torná-lo mais geral e versátil.

O modelo de Garcia-Prates concebido inicialmente^(85,86) cobria apenas a solidificação de metal puro, sem superaquecimento, em moldes refrigerados. Posteriormente, foi estendido para metal puro em moldes maciços⁽⁸⁷⁾ e, finalmente, para solidificação de ligas em moldes refrigerados, com superaquecimento⁽⁸⁸⁻⁹⁴⁾. Este último caso foi aplicado na solidificação de aço por lingotamento contínuo.

3.1 - HIPÓTESES BÁSICAS DE CARÁTER FÍSICO ASSUMIDAS

- 1) O fluxo de calor por condução é unidirecional.
- 2) A resistência térmica newtoniana junto à interface metal-molde é representada por um coeficiente de transmissão de calor, h , constante.
- 3) As propriedades físicas dos materiais são invariáveis dentro de uma mesma fase.
- 4) No metal líquido, considera-se fluxo de calor somente por condução.
- 5) O calor latente de solidificação liberado durante a solidificação é levado em consideração através de um ajuste no valor do calor específico dentro da faixa de solidificação, ou seja,

$$c_P = c_L + \frac{H_F}{T_L - T_S}$$

A hipótese fundamental para o desenvolvimento do modelo é a consideração da resistência newtoniana como equivalente a duas parcelas: a primeira, proveniente de uma espessura virtual acrescida ao molde e a segunda, resultante de uma camada virtual de metal "previamente" solidificada. Os sistemas real e virtual estão esquematizados na figura 2.1.

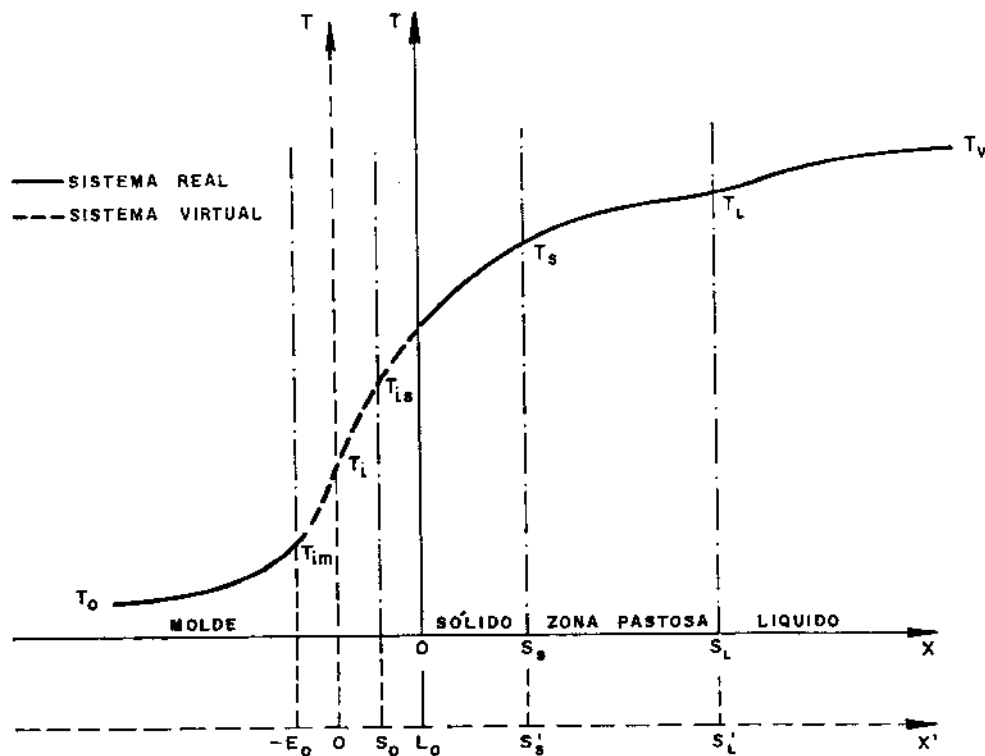


Figura 3.1 - Perfil térmico nos sistemas real e virtual durante o processo de solidificação.

Desta forma, no sistema virtual, assume-se como perfeito o contato térmico entre o metal e o molde, permitindo a análise da solidificação neste sistema através da equação de Fourier para condução de calor em regime não estacionário:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (1)$$

cuja solução geral é da seguinte forma:

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

Esta solução aplica-se no molde, no sólido, na região pastosa e no líquido, com diferentes coeficientes A e B para cada um dos estados de agregação.

A transposição do sistema real para o sistema virtual é feita através das seguintes relações:

$$x' = x + L_0, \quad x > 0 \quad (3)$$

$$x' = x - E_0, \quad x < 0 \quad (4)$$

$$S'_s = S_s + L_0 \quad (5)$$

$$S'_L = S_L + L_0 \quad (6)$$

$$t' = t + t_0 \quad (7)$$

onde t_0 é o tempo no qual ocorre solidificação da espessura virtual S_0 .

Aplicam-se as seguintes condições de contorno ao sistema virtual:

$$x' = -\infty, \quad T_M = T_0 = \text{constante} \quad (8)$$

$$x' = 0, \quad T_M = T_1 = T_i = \text{constante} \quad (9)$$

$$x' = S'_s, \quad T_1 = T_s = \text{constante} \quad (10)$$

$$x' = S'_s, \quad T_2 = T_s = \text{constante} \quad (11)$$

$$x' = S'_L, \quad T_2 = T_L = \text{constante} \quad (12)$$

$$x' = S'_L, \quad T_3 = T_L = \text{constante} \quad (13)$$

$$x' = +\infty, \quad T_s = T_v = \text{constante} \quad (14)$$

3.2 - CINÉTICA DE SOLIDIFICAÇÃO

Aplicando-se a C.C. (10) na equação (2) e igualando-se o argumento da função desta equação à constante ϕ_1 , tem-se:

$$t' = \frac{S_s^2}{4 a_1 \phi_1^2} \quad (15)$$

Em particular, para $x' = S_o$ e $t' = t_o$:

$$t_o = \frac{S_o^2}{4 a_1 \phi_1^2} \quad (16)$$

Combinando-se as equações (5), (7), (15) e (16):

$$t = \frac{S_s^2}{4 a_1 \phi_1^2} + \frac{L_o S_s}{2 a_1 \phi_1^2} + \frac{L_o^2 - S_o^2}{4 a_1 \phi_1^2} \quad (17)$$

ou, de forma simplificada:

$$t = \alpha_s S_s^2 + \beta_s S_s + \delta \quad (18)$$

Esta última equação descreve o deslocamento da isoterma solidus em função do tempo, durante o processo de solidificação.

Aplicando-se, agora, a C.C. (12) na equação (2) e igualando-se o argumento da função erro dessa equação à constante ϕ_2 , segue, de forma análoga:

$$t' = \frac{S_L^2}{4 a_2 \phi_2^2} \quad (19)$$

Combinando-se as equações (6), (7) e (19), tem-se:

$$t = \frac{S_L^2}{4 a_2 \phi_2^2} + \frac{L_o S_L}{2 a_2 \phi_2^2} \quad (20)$$

ou, de forma simplificada:

$$t = \alpha_L S_L^2 + \beta_L S_L \quad (21)$$

Esta última equação descreve o deslocamento da isoterma liquidus durante a solidificação. A figura 2.2 ilustra o deslocamento das duas isotermas (*solidus* e *liquidus*) nos sistemas real e virtual.

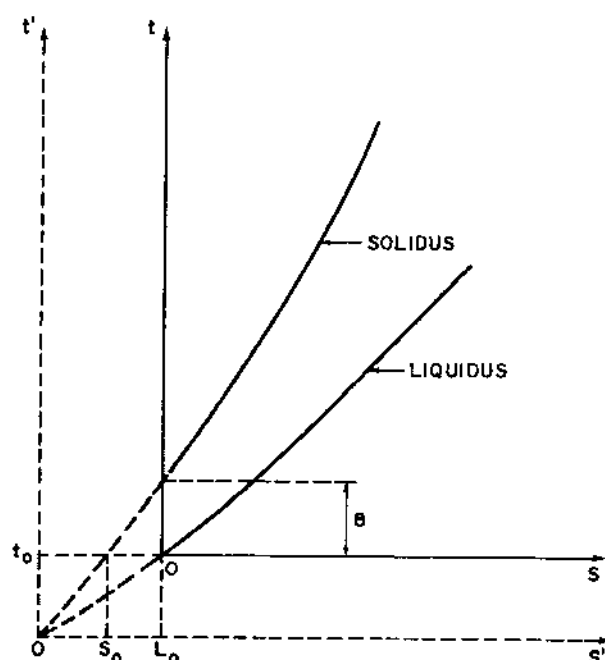


Figura 3.2 - Deslocamentos das isotermas *solidus* e *liquidus* nos sistemas real e virtual, segundo o modelo proposto.

3.3 - PERFIS TÉRMICOS DURANTE A SOLIDIFICAÇÃO

3.3.1 - PERFIL TÉRMICO NO MOLDE

De acordo com a equação (2), o perfil térmico no molde é expresso por:

$$T_M = A_M + B_M \operatorname{erf} \left[\frac{x'}{2 \sqrt{a_M t'}} \right] \quad (22)$$

As constantes A_M e B_M são facilmente determinadas pela aplicação das C.C. (8) e (9) na equação (22). Assim,

$$A_M = T_i \quad (23)$$

$$B_M = T_i - T_o \quad (24)$$

O argumento da função erro na equação (2) pode ser modificado, utilizando-se as relações (4), (5) e (15) da seguinte forma:

$$\frac{x'}{2 \sqrt{a_M t'}} = \phi_1 \frac{x'}{S'_S} \frac{\sqrt{a_1}}{\sqrt{a_M}} = N \phi_1 \frac{x'}{S'_S} = N \phi_1 \frac{x - E_o}{S_S + L_o} \quad (25)$$

$$\text{onde } N = \sqrt{a_1 / a_M} \quad (26)$$

Combinando-se as equações (22), (23), (24) e (25), tem-se:

$$T_M = T_i + (T_i - T_o) \operatorname{erf} \left[N \phi_1 \frac{x - E_o}{S_S + L_o} \right] \quad (27)$$

Utilizando-se a equação (54) que será determinada mais adiante, elimina-se T_i e a equação (27) toma a seguinte forma:

$$T_M = T_o + \frac{M (T_S - T_o)}{M + \operatorname{erf}(\phi_1)} \left[1 + \operatorname{erf} \left[N \phi_1 \frac{x - E_o}{S_S + L_o} \right] \right] \quad (27a)$$

3.3.2 - PERFIL TÉRMICO NO METAL SÓLIDO

O perfil térmico no metal sólido é dado por:

$$T_1 = T_i + (T_s - T_i) \operatorname{erf} \left[N \phi_1 \frac{x + L_o}{S_s + L_o} \right] \quad (28)$$

Aplicando-se as C.C. (9) e (10), obtêm-se as constantes A_1 e B_1 :

$$A_1 = T_i \quad (29)$$

$$B_1 = \frac{T_s - T_i}{\operatorname{erf}(\phi_1)} \quad (30)$$

Porém,

$$\frac{x'}{2 \sqrt{a_1 t'}} = \phi_1 \frac{x'}{S_s} = \phi_1 \frac{x + L_o}{S_s + L_o} \quad (31)$$

Combinando-se as equações (28), (29), (30) e (31):

$$T_1 = T_i + \frac{T_s - T_i}{\operatorname{erf}(\phi_1)} \operatorname{erf} \left[\phi_1 \frac{x + L_o}{S_s + L_o} \right] \quad (32)$$

Utilizando-se a equação (54), determinada mais adiante, elimina-se T_i , e obtém-se:

$$T_1 = T_o + \frac{T_s - T_o}{M + \operatorname{erf}(\phi_1)} \left[M + \operatorname{erf} \left[\phi_1 \frac{x + L_o}{S_s + L_o} \right] \right] \quad (32a)$$

3.3.3 - PERFIL TÉRMICO NA REGIÃO PASTOSA

De modo similar, o perfil térmico na zona pastosa é dado por:

$$T_2 = A_2 + B_2 \operatorname{erf} \left[\frac{x'}{2 \sqrt{a_2 t'}} \right] \quad (33)$$

Aplicando-se as L.C. (11) e (12) na equação (33):

$$T_s = A_2 + B_2 \operatorname{erf} \left[\frac{S'_s}{2 \sqrt{a_2 t'}} \right] \quad (34)$$

$$T_L = A_2 + B_2 \operatorname{erf} \left[\frac{S'_L}{2 \sqrt{a_2 t'}} \right] \quad (35)$$

Fazendo

$$\frac{S'_s}{2 \sqrt{a_2 t'}} \frac{\sqrt{a_1}}{\sqrt{a_1}} = \phi_1 \frac{\sqrt{a_1}}{\sqrt{a_2}} = n \phi_1 \quad (36)$$

e combinando-se as equações (34), (35) e (36), obtêm-se os coeficientes A_2 e B_2 :

$$A_2 = T_L - \frac{T_L - T_s}{\operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf}(n\phi_1)} \operatorname{erf}(\phi_2) \quad (37)$$

$$B_2 = \frac{T_L - T_s}{\operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf}(n\phi_1)} \quad (38)$$

Porém,

$$\frac{x'}{2 \sqrt{a_2 t'}} = \phi_1 \frac{x'}{S'_s} \frac{\sqrt{a_1}}{\sqrt{a_2}} = n \phi_1 \frac{x'}{S'_s} = \phi_2 \frac{x'}{S'_L} = \phi_2 \frac{x + L_o}{S_L + L_o} \quad (39)$$

Finalmente, combinando-se as equações (33), (37), (38) e (39), chega-se a:

$$T_2 = T_L - \frac{T_L - T_s}{\operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf}(n\phi_1)} \left[\operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf} \left(\phi_2 \frac{x + L_o}{S_L + L_o} \right) \right] \quad (40)$$

3.3.4 - PERFIL TÉRMICO NO METAL LÍQUIDO

Analogamente, o perfil térmico no metal líquido é dado por:

$$T_s = A_s + B_s \operatorname{erf} \left[\frac{x'}{2 \sqrt{a_s t'}} \right] \quad (41)$$

Aplicando-se as C.C. (13) e (14) na equação (41):

$$T_L = A_s + B_s \operatorname{erf} \left[\frac{S'_L}{2 \sqrt{a_s t'}} \right] \quad (42)$$

$$T_v = A_s + B_s \quad (43)$$

Fazendo

$$\frac{x'}{2 \sqrt{a_s t'}} = \phi_2 \frac{x'}{S'_L} \frac{\sqrt{a_2}}{\sqrt{a_s}} = m \phi_2 \frac{x'}{S'_L} = m \phi_2 \frac{x + L_o}{S_L + L_o} \quad (44)$$

Combinando-se (42), (43) e (44):

$$A_s = T_v - \frac{T_v - T_L}{1 - \operatorname{erf}(m\phi_2)} \quad (45)$$

$$B_s = \frac{T_v - T_L}{1 - \operatorname{erf}(m\phi_2)} \quad (46)$$

Portanto, a distribuição de temperatura no líquido será dada por:

$$T_s = T_v - \frac{T_v - T_L}{1 - \operatorname{erf}(m\phi_2)} \left[1 - \operatorname{erf} \left[m \phi_2 \frac{x + L_o}{S_L + L_o} \right] \right] \quad (47)$$

Através das equações (27a), (32a), (40) e (47) pode-se calcular as distribuições de temperaturas em qualquer ponto do molde, do sólido, da zona pastosa e do líquido e em qualquer instante do processo de solidificação.

3.4 - DETERMINAÇÃO DA TEMPERATURA DE EQUILÍBRIO NA INTERFACE METAL-MOLDE, T_i

Fazendo-se um balanço térmico em $x' = 0$, tem-se:

$$K_M \left[\frac{\partial T_M}{\partial x'} \right]_{x'=0} = K_1 \left[\frac{\partial T_1}{\partial x'} \right]_{x'=0} \quad (48)$$

Derivando-se a equação (27) em relação a x' , tem-se:

$$\frac{\partial T_M}{\partial x'} = \frac{2 N \phi_1 (T_i - T_0)}{\sqrt{\pi} S'_S \exp \left[\frac{N^2 \phi_1^2 x'^2}{S'_S} \right]} \quad (49)$$

Daí, em $x' = 0$:

$$\left[\frac{\partial T_M}{\partial x'} \right]_{x'=0} = \frac{2 N \phi_1 (T_i - T_0)}{\sqrt{\pi} S'_S} \quad (50)$$

Derivando a equação (32) em relação a x' , tem-se:

$$\frac{\partial T_1}{\partial x'} = \frac{2 \phi_1 (T_S - T_i)}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\phi_1) S'_S \exp \left[\frac{\phi_1^2 x'^2}{S'^2} \right]} \quad (51)$$

Daí, em $x' = 0$, tem-se:

$$\left[\frac{\partial T_1}{\partial x'} \right]_{x'=0} = \frac{2 \phi_1 (T_S - T_i)}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\phi_1) S'_S} \quad (52)$$

Substituindo-se as equações (62) e (64) na equação (60):

$$K_M N (T_i - T_0) = \frac{K_1 (T_S - T_0)}{\operatorname{erf}(\phi_1)} \quad (53)$$

Rearranjando-se:

$$T_1 = T_0 + \frac{M}{M + \operatorname{erf}(\phi_1)} (T_s - T_0) \quad (54)$$

onde

$$M = \frac{b_1}{b_M} = \frac{\sqrt{K_1 c_1 d_1}}{\sqrt{K_M c_M d_M}} \quad (55)$$

3.5 - DETERMINAÇÃO DE S_0 , L_0 E E_0

A transferência de calor através da interface metal-molde é abordada introduzindo-se três coeficientes de transmissão de calor parciais, h_M , h_1 e h_2 , relativos, respectivamente às camadas virtuais de molde e metal sólido e pastoso "pré-existent" no sistema virtual. A figura 2.3 ilustra esta condição inicial.

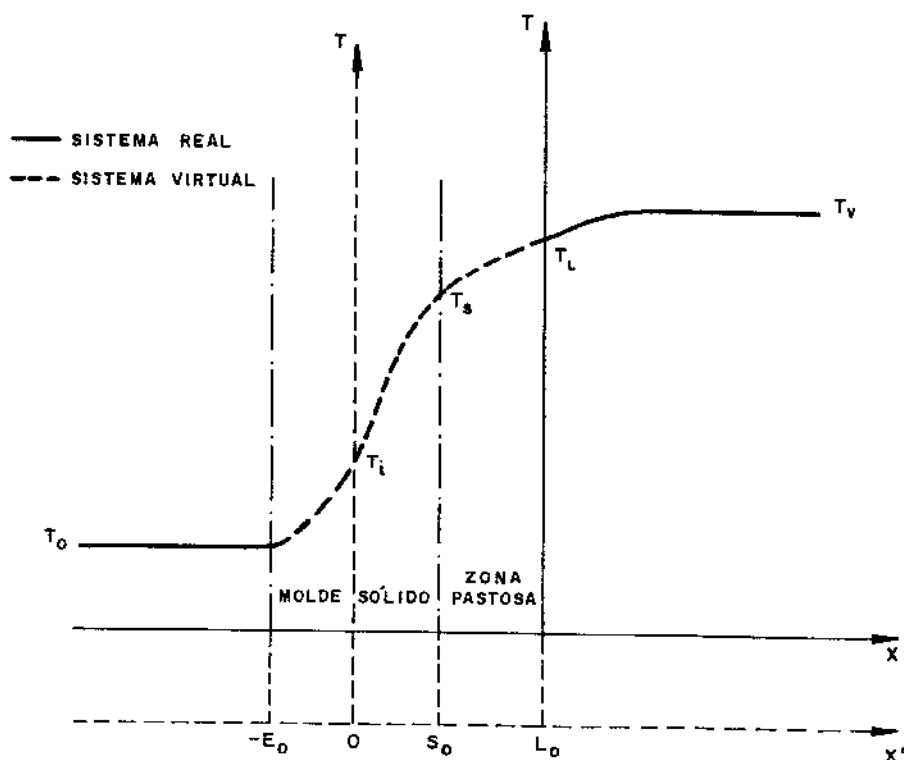


Figura 3.3 - Configuração inicial do processo de solidificação nos sistemas real e virtual.

Efetuada-se um balanço térmico na interface metal-molde do sistema real, no instante inicial do processo de solidificação, $t \rightarrow 0$, assumindo que nesse instante o metal líquido que está em contato com a parede fria do molde atinge a temperatura liquidus, conforme a figura 2.3, e fazendo a equivalência de fluxo de calor no sistema virtual em $t' = t_0$ e $x' = S_0$, obtém-se:

$$h_1 (T_s - T_i) = K_1 \left[\frac{\partial T_1}{\partial x'} \right]_{x' = S_0} \quad (56)$$

Avaliando-se a equação (51) na posição $x' = S_0$ ($S'_s = S_0$) e substituindo a expressão acima, tem-se:

$$S_0 = \frac{2 K_1 \phi_1}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\phi_1) \exp(\phi_1^2) h_1} \quad (57)$$

Considerando-se, no sistema real, no instante $t \rightarrow 0$, a existência de um plano virtual de referência de temperatura solidus, T_s , entre o molde e a superfície do metal líquido à temperatura liquidus, pode-se relacionar o coeficiente de transmissão de calor global, h_g , com as componentes h_m , h_1 e h_2 através da igualdade de fluxo calor, ou seja,

$$h_g (T_L - T_0) = h_m (T_i - T_0) = h_1 (T_s - T_i) = h_2 (T_L - T_s) \quad (58)$$

$$\text{ou} \quad h_1 = h_g \frac{T_L - T_0}{T_s - T_i} \quad (59)$$

Substituindo-se as equações (54) e (59) na equação (57), tem-se:

$$S_0 = \frac{2 K_1 \phi_1 (T_s - T_0)}{\sqrt{\pi} \exp(\phi_1^2) h_g (T_L - T_0) \left[\operatorname{erf}(\phi_1) + M \right]} \quad (60)$$

Das equações (15) e (19):

$$S'_s = n \frac{\phi_1}{\phi_2} S'_L \quad (61)$$

Considerando-se a equação (61) para $t = t_0$ (assim, $S'_S = S_0$ e $S'_L = L_0$), obtém-se:

$$L_0 = \frac{\phi_2}{n \phi_1} S_0 \quad (62)$$

Em conformidade com a figura 2.3, fazendo-se um balanço térmico em $x' = -E_0$ no instante $t' \rightarrow t_0$ (isto é, $t \rightarrow 0$), resulta:

$$h_M (T_i - T_0) = K_M \left[\frac{\partial T_M}{\partial x'} \right]_{x' = -E_0} \quad (63)$$

Da equação (49), com $x' = -E_0$, tem-se:

$$\left[\frac{\partial T_M}{\partial x'} \right]_{x' = -E_0} = \frac{2 N \phi_1 (T_i - T_0)}{\sqrt{\pi} L_0 \exp \left[\frac{N^2 \phi_1^2 E_0^2}{L_0^2} \right]} \quad (64)$$

Introduzindo-se a equação (64) na equação (63) e rearranjando-se:

$$E_0 = \frac{L_0}{N \phi_1} \sqrt{\ln \left[\frac{2 N \phi_1 K_M}{\sqrt{\pi} h_M L_0} \right]} \quad (65)$$

Utilizando-se as relações dadas pela equação (58), pode-se obter uma relação entre h_M e h_g :

$$h_M = h_g \frac{T_L - T_0}{T_i - T_0} \quad (66)$$

Introduzindo-se a equação (54) na equação (66), tem-se:

$$h_M = h_g \frac{T_L - T_0}{T_s - T_0} \left[1 + \frac{\text{erf}(\phi_1)}{M} \right] \quad (67)$$

Substituindo-se as equações (60) e (67) na equação (65).

esta se simplifica, obtendo-se:

$$E_o = \frac{S_o}{N} \quad (68)$$

3.6 - DETERMINAÇÃO DAS CONSTANTES ϕ_1 e ϕ_2

Fazendo-se um balanço térmico na interface sólido-pastoso, isto é, $x' = S'_s$, tem-se:

$$K_1 \left[\frac{\partial T_1}{\partial x'} \right]_{x' = S'_s} = K_2 \left[\frac{\partial T_2}{\partial x'} \right]_{x' = S'_s} \quad (69)$$

Diferenciando-se a equação (40):

$$\frac{\partial T_2}{\partial x'} = \frac{2 (T_L - T_s) \phi_1}{\sqrt{\pi} \left[\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1) \right] S'_s \exp \left[\frac{n^2 \phi_1^2 x'^2}{S_s'^2} \right]} \quad (70)$$

Considerando-se (51) e (70) em $x' = S'_s$, introduzindo em (69) juntamente com (54), e rearranjando, obtém-se:

$$\frac{T_L - T_s}{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)} = \frac{K_1 \exp \left[(n^2 - 1) \phi_1^2 \right]}{K_2 n \left[M + \text{erf}(\phi_1) \right]} (T_s - T_o) \quad (71)$$

fazendo-se, agora, um balanço térmico na interface pastoso-líquido, isto é, $x' = S'_L$, tem-se:

$$K_2 \left[\frac{\partial T_2}{\partial x'} \right]_{x' = S'_L} = K_3 \left[\frac{\partial T_3}{\partial x'} \right]_{x' = S'_L} \quad (72)$$

Diferenciando a equação (47):

$$\frac{\partial T_g}{\partial x'} = \frac{2 (T_v - T_L) m \phi_2}{\sqrt{\pi} \left[1 - \operatorname{erf}(m\phi_2) \right] S_L' \exp \left(\frac{m \phi_2^2 x'^2}{S_L'^2} \right)} \quad (73)$$

Considerando-se as equações (70), (73) em $x' = S_L'$, introduzindo-se (61) em (70) e substituindo-se na equação (72), obtém-se, após rearranjo:

$$\frac{T_L - T_s}{\operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf}(n\phi_1)} = \frac{K_g m \exp \left\{ (1 - m^2) \phi_2^2 \right\}}{K_2 \left[1 - \operatorname{erf}(m\phi_2) \right]} (T_v - T_L) \quad (74)$$

As equações (71) e (74) devem ser resolvidas simultaneamente por iteração para permitir a determinação das constantes ϕ_1 e ϕ_2 .

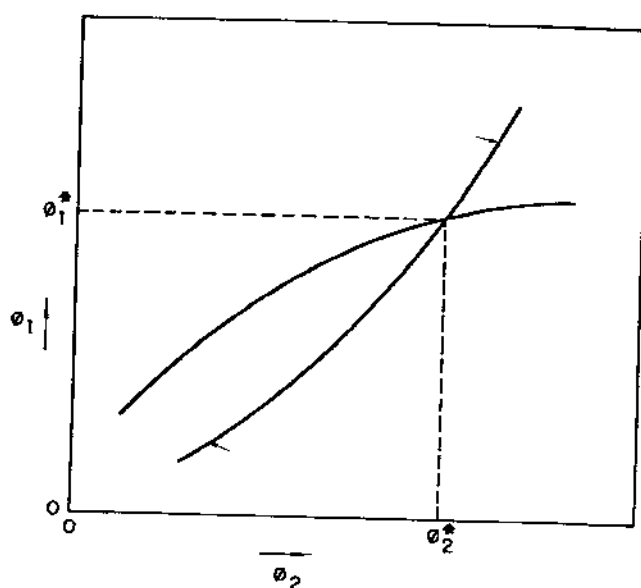


Figura 3.4 - Representação esquemática da determinação das constantes de solidificação ϕ_1 e ϕ_2 .

O modo mais simples de se determinar tais constantes consiste em atribuir valores arbitrários a ϕ_1 na equação (71), determinando-se uma série de valores de ϕ_2 e, em seguida, utilizar o mesmo procedimento, porém de forma inversa, na equação (74). Isto permite a determinação de duas curvas correspondentes às equações (71) e (74), caso os valores de ϕ_1 e ϕ_2 sejam colocados um em função do outro. O cruzamento destas duas curvas define o ponto de coordenadas (ϕ_1^*, ϕ_2^*) correspondente à solução das duas equações. Este procedimento encontra-se esquematizado na figura 2.4.

Vale observar que, ao fazer $M = 0$ (moldes refrigerados), a equação (71) para a determinação de ϕ_1 e ϕ_2 , as equações (27a) e (32a) para o cálculo dos perfis térmicos no molde e no sólido, e a equação (60) para a determinação de S_0 igualam-se àquelas do modelo de solidificação em moldes refrigerados, desenvolvido anteriormente, o que mostra ser aquele um caso particular do modelo aqui proposto.

3.7 - TRATAMENTO PARA h VARIÁVEL

Para o desenvolvimento do modelo analítico de solidificação, partiu-se da suposição simplificadora de que a resistência térmica newtoniana junto à interface metal-molde é representada por um coeficiente de transmissão de calor, h , constante.

Esta condição, entretanto, não representa, na maioria dos casos, as situações reais de solidificação, uma vez que o coeficiente de transferência de calor varia durante o processo de solidificação. Esta variação deve-se ao progressivo descolamento da casca solidificada, devido às contrações térmica e de solidificação, que aumenta a espessura do "gap" de ar entre o metal e o molde, alterando as condições de transferência de calor nesta região. Em solidificação unidirecional, a partir da base do lingote, devido à ação da gravidade, o contato metal-molde é praticamente mantido, fazendo com que esta variação de h seja menos sensível, podendo ser desprezada.

Felizmente, não é difícil mostrar que o tratamento de h variável pode ser aplicado no modelo, supondo-se que h varie de forma descontínua, como mostrado na figura 2.5.

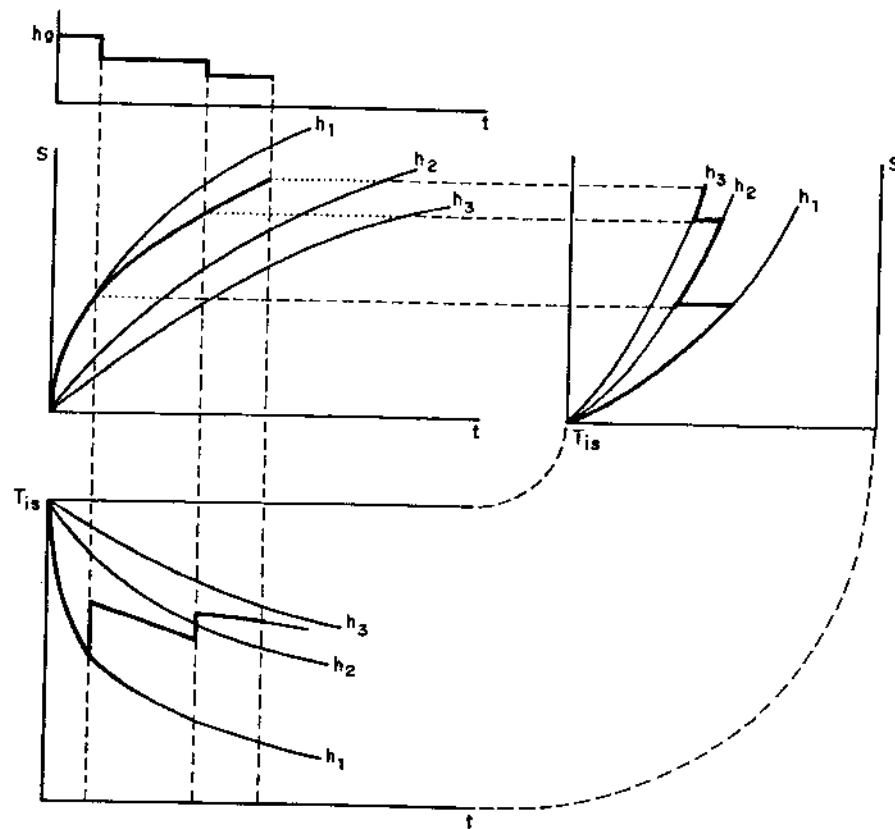


Figura 3.5 - Representação gráfica da aplicação do modelo para h variável durante o processo de solidificação.

A cada variação de h , a espessura solidificada, bem como a temperatura, pode ser obtida para qualquer instante t através da construção esquematizada na figura 2.5.

Para o primeiro valor de h , isto é, h_1 na figura, o modelo é aplicado de modo idêntico ao caso de h constante. Para se calcular a espessura solidificada para o novo valor h , ou seja, h_2 , define-se uma nova variável, te_i , que pode ser entendida como um "tempo equivalente", dado por

$$te_i = t'_{i-1} + \Delta t \quad (75)$$

onde t_{i-1} é o tempo necessário para solidificar a espessura S_{i-1} durante o intervalo de tempo Δt , levando-se em conta a variação de h .

A continuação deste procedimento até $i = n$ permite que o perfil de solidificação seja obtido. Procedimento similar deve ser aplicado para o cálculo da distribuição de temperaturas.

Na prática, este procedimento não acarreta cálculo extra excessivo, ainda que se tome um número razoável de degraus tal que se aproxime mais fielmente de uma variação contínua de h assumida (de 3 a 10 degraus).

Convém observar, ainda, que quando se aplica o modelo segundo este procedimento, está-se incorporando uma aproximação física adicional. Na realidade, nem a temperatura, nem o crescimento da espessura solidificada respondem instantaneamente a uma variação descontínua de h . O erro estará restrito a uma pequena região imediatamente posterior à descontinuidade, pois o tratamento permanece matematicamente exato, naturalmente sem levar em conta quão próxima está a variação assumida da variação real de h . A variação em degrau pode-se aproximar da variação assumida de h pelo simples aumento do número de degraus e, conseqüentemente, do número de cálculos necessários.

4. - MODELO DE SEGREGAÇÃO

O modelo de segregação é baseado na equação de redistribuição de soluto local desenvolvida por Flemings-Nereo⁽⁵⁻⁷⁾ para cálculo da macrossegregação de um modo geral. Esta equação é baseada num balanço de massa considerando um pequeno elemento de volume de coordenadas (x,y,z) dentro de um lingote em solidificação.

O elemento de volume é suficientemente grande, tal que a fração sólida dentro dele, em qualquer instante, é exatamente a média local, mas é, também, pequeno o suficiente para que possa ser tratado como um elemento diferencial. Esta é a mesma consideração feita para o elemento diferencial normalmente empregado em problemas de escoamento bifásico.

4.1 - HIPÓTESES BÁSICAS ASSUMIDAS

As suposições iniciais para a formulação do problema são sumarizadas a seguir:

1. Não há material entrando ou saindo do elemento de volume durante a solidificação.
2. Solute entra ou deixa o elemento de volume somente através do fluxo do líquido para alimentar a contração de solidificação.
3. O fluxo de massa entrando ou saindo do elemento de volume por difusão é desprezível.
4. A composição e a temperatura do líquido dentro do elemento de volume, em qualquer instante, são uniformes (dentro de uma ordem de grandeza diferencial).

A distribuição de soluto na solidificação de uma liga sob a hipótese de não haver difusão de soluto no sólido e haver mistura completa de soluto no líquido, é descrita pela equação de Scheil. Esta equação foi obtida a partir de um balanço de massa de soluto que se transfere do líquido para o sólido num intervalo de tempo dt , portanto:

$$(1 - k_0) C_L df_L = - f_L dC_L \quad (1)$$

onde: k_0 = coeficiente de partição

C_L = composição do líquido no elemento de volume

f_L = fração líquida em peso no elemento de volume

Esta expressão significa fisicamente que, durante a solidificação, ocorre conservação de soluto, ou melhor, quando a fração líquida, df_L , se solidifica, ocorre enriquecimento de soluto, dC_L , no líquido local.

Para um coeficiente de partição, k_0 , constante, tem-se:

$$\frac{df_L}{f_L} = \frac{- dC_L}{(1 - k_0) C_L} \quad (2)$$

Integrando de $f_L = 1$, $C_L = C_0$ para f_L , C_L :

$$\ln f_L = \frac{-1}{1 - k_0} \left[\ln C_L - \ln C_0 \right] \quad (3)$$

$$\text{ou} \quad f_L = \left(\frac{C_L}{C_0} \right)^{\frac{-1}{1 - k_0}} \quad (4)$$

Sendo $C_S = k_0 C_L$ e $f_S = (1 - f_L)$

Então,

$$C_S = k_0 C_0 (1 - f_S)^{k-1} \quad (5)$$

onde C_S = composição do sólido na interface sólido-líquido

f_S = fração sólida

A equação (5) acima é a clássica equação de Scheil para análise da solidificação de não-equilíbrio, e cálculo da segregação máxima. Trata-se, portanto, de uma condição limite.

4.2 - DESENVOLVIMENTO DO MODELO

A equação de redistribuição de soluto local é uma modificação desta equação, cuja formulação avalia o fluxo de massa através do volume elementar.

A conservação de massa de soluto no elemento de volume requer que, durante a solidificação,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\bar{\rho} \bar{C} \right] = - \nabla \cdot \rho_L g_L C_L v \quad (6)$$

onde: $\bar{\rho}$ = densidade média local (líquido + sólido)
 \bar{C} = composição média local (líquido + sólido)
 ρ_L = densidade do líquido
 g_L = fração líquida em volume
 C_L = composição do líquido
 v = velocidade local do líquido interdendrítico, relativa ao sólido

A conservação de massa total no elemento de volume fornece:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} = - \nabla \cdot \rho_L g_L v \quad (7)$$

Esta expressão significa que a variação na densidade do elemento de volume é igual ao fluxo de massa que entra ou deixa o elemento de volume.

Expandindo o lado direito da equação (6), tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\bar{\rho} \bar{C} \right] = C_L \nabla \cdot \rho_L g_L v - \rho_L g_L v \cdot \nabla C_L \quad (8)$$

e, substituindo a equação (7):

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\bar{\rho} \bar{C} \right] = C_L \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} - \rho_L g_L v \cdot \nabla C_L \quad (9)$$

Esta equação exprime que a variação de massa que ocorre no elemento de volume, num instante t , é igual à soma da variação de massa devido à variação de densidade do elemento de volume e da variação de massa devido ao fluxo de massa através do elemento de volume devido à variação de composição química na fase líquida.

Sabendo-se que a variação de massa de soluto do elemento de volume, por unidade de tempo, é a soma das variações nas fases sólida e líquida, tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\bar{\rho} \bar{C} \right] = \frac{\partial}{\partial t} \left[\bar{C}_s \bar{\rho}_s g_s + C_L \rho_L g_L \right] \quad (10)$$

onde: \bar{C}_s = composição média do sólido
 $\bar{\rho}$ = densidade média do sólido
 g_s = fração sólida em volume

Supondo que se possa aplicar o coeficiente de partição de equilíbrio na interface sólido-líquido, que não haja difusão no sólido e que a densidade do sólido é constante durante a solidificação*, então:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\bar{C}_s \bar{\rho}_s g_s \right] = k C_L \rho_s \frac{\partial g_s}{\partial t} \quad (11)$$

e, se não há formação de poros:

$$g_s + g_L = 1 \quad \text{ou} \quad dg_s = - dg_L \quad (12)$$

Substituindo as equações (11) e (12) na equação (10):

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\bar{\rho} \bar{C} \right] = - k C_L \rho_s \frac{\partial g_L}{\partial t} + \rho_L g_L \frac{\partial C_L}{\partial t} + C_L \frac{\partial (\rho_L g_L)}{\partial t} \quad (13)$$

Uma expressão similar à equação (10) é escrita agora para a massa total do elemento é:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho_s g_s + \rho_L g_L \right) \quad (14)$$

Substituindo as equações (12), (13) e (14) na equação (9) e rearranjando:

$$-k C_L \rho_s \frac{\partial g_L}{\partial t} + \rho_L g_L \frac{\partial C_L}{\partial t} = -C_L \rho_s \frac{\partial g_L}{\partial t} - \rho_L g_L v \cdot \nabla C_L \quad (15)$$

ou

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} = - \left(\frac{1-k}{1-\beta} \right) \frac{C_L}{g_L} \frac{\partial g_L}{\partial t} - v \cdot \nabla C_L \quad (16)$$

onde β é a contração de solidificação dada por:

$$\beta = \frac{\rho_s - \rho_L}{\rho_s}$$

Como $T = f(x, y, z, t)$, então:

$$d T = d l \cdot \nabla T + \frac{\partial T}{\partial t} dt = 0 \quad (17)$$

onde:

$$d l = i dx + j dy + k dz$$

$$\nabla T = i \frac{\partial T}{\partial x} + j \frac{\partial T}{\partial y} + k \frac{\partial T}{\partial z}$$

e i, j, k são vetores unitários ao longo dos eixos x, y e z , respectivamente. $d l$ é o vetor que descreve a distância e a direção do movimento das isotermas em x, y, z no tempo dt .

Então:

$$\frac{d l}{d t} \cdot \nabla T = - \frac{\partial T}{\partial t} = - \varepsilon \quad (18)$$

onde:

v = taxa de variação de temperatura em x,y,z

∇T = gradiente de temperatura

$\frac{d l}{d t}$ = vetor que descreve a velocidade da isoterma em x,y,z

No modelo de solidificação empregado, C_L depende somente da temperatura e, conseqüentemente, da posição e do tempo. Assim, uma expressão similar à equação (18) pode ser escrita, descrevendo o movimento de isoconcentrados:

$$\frac{d l}{d t} \cdot \nabla C_L = - \frac{\partial C_L}{\partial t} \quad (19)$$

Combinando-se as equações (16), (18) e (19):

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} = - \left[\frac{1 - k}{1 - \beta} \right] \frac{C_L}{g_L} \frac{\partial g_L}{\partial t} - \left[\frac{v \cdot \nabla T}{\epsilon} \right] \frac{\partial C_L}{\partial t} \quad (20)$$

ou, eliminando-se a variável t:

$$\frac{\partial g_L}{\partial C_L} = - \left[\frac{1 - \beta}{1 - k} \right] \left[1 + \frac{v \cdot \nabla T}{\epsilon} \right] \frac{g_L}{C_L} \quad (21)$$

onde $(\partial g_L / \partial C_L)$ = variação diferencial da fração líquida com a variação diferencial da composição do líquido (e, conseqüentemente, a variação diferencial da temperatura) dentro do elemento de volume localizado em x,y,z.

A equação (21) é a "equação de redistribuição de soluto local" básica, usada daqui para diante para calcular a macrossegregação. Ela foi escrita para o caso geral de fluxo de calor e escoamento fluido tridimensional, assumindo a densidade do sólido, mas não necessariamente a do líquido, constante durante a solidificação, variação de soluto por difusão desprezível e não formação de poros.

O coeficiente de partição, k , e a contração de solidificação, β , são funções de C_L . A taxa de resfriamento, s , e o gradiente de temperatura, ∇T , são funções da temperatura e, consequentemente, de C_L . Estas variáveis são facilmente medidas experimentalmente ou, em princípio, calculadas a partir de considerações de fluxo de calor. A avaliação de da velocidade, v , é discutida a seguir. Se também ela puder ser considerada como função de C_L (ou g_L), a equação (21) torna-se facilmente integrável.

4.3 - CÁLCULO DA CONCENTRAÇÃO FINAL DE SOLUTO NO PONTO

A macrossegregação, propriamente dita, em (x,y,z) é definida como:

$$\Delta C = \bar{C}_S - C_0 \quad (22)$$

onde \bar{C}_S é a composição média em (x,y,z) , após solidificação e C_0 é a composição inicial da liga.

Denomina-se segregação positiva quando $\bar{C}_S > C_0$ e segregação negativa quando $\bar{C}_S < C_0$.

Para uma liga binária com fase sólida primária de densidade ρ_S constante e sólido eutético de densidade ρ_{SE} , fração em volume g_E e composição C_E , tem-se:

$$\bar{C}_S = \frac{\rho_S \int_0^{1-g_E} C_S \partial g_S + \rho_{SE} g_E C_E}{\rho_S (1 - g_E) + \rho_{SE} g_E} \quad (23)$$

A integral deve ser resolvida utilizando-se a equação (21), lembrando que $C_S = k C_L$ e que $g_S = 1 - g_L$.

4.4 - CONSIDERAÇÕES PARA O VETOR VELOCIDADE DO LÍQUIDO

Será analisada, agora, a formulação para o vetor velocidade do fluxo de líquido. Para o cálculo da segregação, interessa-nos que a velocidade do fluxo de líquido, v , seja função da posição e da fração líquida. Devido às dificuldades de se tratar a condição tridimensional, será considerado somente o caso do movimento de isoterma planas perpendiculares ao eixo x , sendo x a distância da isoterma à parede do molde.

Portanto, sendo $\partial T / \partial y = \partial T / \partial z = 0$, a equação (21) torna-se:

$$\frac{\partial g_L}{\partial C_L} = - \left[\frac{1 - \beta}{1 - k} \right] \left[1 + \frac{v_x G}{\epsilon} \right] \frac{g_L}{C_L} \quad (24)$$

onde v_x é a componente do fluxo na direção x e G é o gradiente térmico, $\partial T / \partial x$.

Analisaremos somente os casos simples $v_x = 0$ e $v_y = v_z = 0$, considerando que o fluxo é aquele requerido para alimentar a contração de solidificação.

1) $v_x = 0$. Esta condição aplica-se na superfície de lingotes e peças fundidas usuais e como caso limite próximo à linha central. A solução da equação (21) é particularmente simples neste caso, conduzindo à seguinte equação:

$$C_L = C_0 g_L^{- \left[\frac{1 - k}{1 - \beta} \right]} \quad (25)$$

2) $v_y = v_z = 0$. Neste caso, todo o fluxo é perpendicular às isoterma. As equações (7) e (14) tornam-se, agora, para locais x' :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x'} \left[\rho'_L g'_L v'_x \right] = \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho'_S g'_S + \rho'_L g'_L \right] \quad (26)$$

onde x' é a distância da face coquilhada ao local considerado,

sendo que o apóstrofe nas demais variáveis denotam que estas estão em x' .

Supondo ρ_S constante e considerando o caso onde a face coquilhada ($x' = 0$) está acima da temperatura solidus de não-equilíbrio, T_E , integra-se a equação (26) entre os limites:

$$\rho'_L g'_L v'_x = 0 \quad \text{em } x' = 0$$

$$\rho'_L g'_L v'_x = \rho_L g_L v_x \quad \text{em } x' = x$$

originando a seguinte equação:

$$\rho_L g_L v_x = \int_{x'=0}^{x'=x} (\rho'_S - \rho'_L) \left[\frac{\partial g'_L}{\partial t} \right] \partial x' - \int_{x'=0}^{x'=x} g'_L \left[\frac{\partial \rho'_L}{\partial t} \right] \partial x' \quad (27)$$

Quando a temperatura na face coquilhada é menor que a temperatura solidus de não-equilíbrio, T_E , (no caso de uma liga com formação de algum eutético), a fração em volume de eutético, g_E , solidifica-se em $x' = x_E$. Supondo, novamente, que ρ_S é constante (entre x_E e x), porém que a densidade do sólido eutético seja ρ_{SE} , integra-se a equação (24) entre os limites:

$$\rho'_L g'_L v'_x = \rho_{LE} g_E v_{xE} = -(\rho_{SE} - \rho_{LE}) g_E U_E \quad \text{em } x' = x_E$$

$$\rho'_L g'_L v'_x = \rho_L g_L v_x \quad \text{em } x' = x$$

onde ρ_{SE} e ρ_{LE} são as densidades do sólido e do líquido eutético, respectivamente, v_{xE} é a velocidade do fluxo em $x' = x_E$ e U_E é a velocidade da isoterma eutética, T_E . A integração da equação (26) entre estes limites resulta em:

$$\begin{aligned} \rho_L g_L v_x = & \int_{x'=0}^{x'=x} (\rho'_S - \rho'_L) \left[\frac{\partial g'_L}{\partial t} \right] \partial x' - \int_{x'=0}^{x'=x} g'_L \left[\frac{\partial \rho'_L}{\partial t} \right] \partial x' - \\ & - (\rho_{SE} - \rho_{LE}) g_E U_E \end{aligned} \quad (28)$$

Assim, as equações (27) e (28) são usadas na equação (24), para o cálculo da segregação, para o caso de isotermas planas.

Entretanto, $(\partial g'_L / \partial t)$ é função de v'_x , bem como de x' . Por esta razão, e também porque k e ρ_L podem ser variáveis, a solução destas equações requer, no caso geral, métodos numéricos.

Por tornar o cálculo mais simples, sem introduzir graves erros, o procedimento alternativo empregado assume k , ρ_L , bem como ρ_S constantes e, para o cálculo da velocidade, supõe que g_L varia linearmente com a temperatura dentro da zona sólido-líquido.

Deste modo, para ρ_L e k constantes, a equação (27) torna-se:

$$v_x = \frac{\beta}{1 - \beta} \left[\frac{1}{g_L} \right] \int_0^x \left[\frac{\partial g'_L}{\partial t} \right] dx' \quad (27a)$$

e, se a fração eutética for pequena, a equação (28) torna-se:

$$v_x = \frac{\beta}{1 - \beta} \left[\frac{1}{g_L} \right] \int_{x_E}^x \left[\frac{\partial g'_L}{\partial t} \right] dx' \quad (28a)$$

As equações (27) e (28) ou suas formas simplificadas (27a) e (28a), juntamente com a equação de redistribuição de soluto local (24) devem ser utilizadas para o cálculo da macrossegregação.

4.5 - APLICAÇÃO PARA SOLIDIFICAÇÃO UNIDIRECIONAL

Nos exemplos de aplicação, será considerado o caso de solidificação unidirecional, isto é, solidificação com isotermas planas e fluxo de calor unidirecional. Assumiremos k e β constantes e um sistema binário simples com formação de pequena fração eutética, g_E após solidificação.

Para se obter uma solução mais simples da expressão de redistribuição de soluto, é conveniente assumir uma distribuição

da fração líquida na zona pastosa, g_L versus x , que seja independente da macrossegregação. Esta é uma aproximação razoável para a maioria dos casos de interesse, uma vez que um grau elevado de segregação, num dado local, resulta numa pequena variação na fração líquida local, durante a maior parte da solidificação.

4.5.1 - MACROSSEGREGAÇÃO, $x > x_C$

Supondo distribuição de líquido na zona pastosa como esquematizada na figura 3b, então:

$$\frac{g'_L - g_E}{x' - x_E} = \frac{1 - g_E}{x_L - x_E} \quad (29)$$

Diferenciando (29) com relação a t para x' constante:

$$\frac{\partial g'_L}{\partial t} = - \left[\frac{1 - g_E}{x_L - x_E} \right] \left[\frac{d x_E}{d t} + \left(\frac{x' - x_E}{x_L - x_E} \right) \frac{d}{d t} (x_L - x_E) \right] \quad (30)$$

Reescrevendo (29) para $x' = x$, $g'_L = g_L$, diferenciando com relação a t para g_L constante e igualando a $-\left(\varepsilon / G\right)$, para distribuições lineares de g_L versus x e T versus x , tem-se:

$$\left(\frac{\partial x}{\partial t} \right)_{g_L} = - \frac{\varepsilon}{G} = \left[\frac{g_L - g_E}{1 - g_E} \right] \frac{d}{d t} (x_L - x_E) + \frac{d x_E}{d t} \quad (31)$$

Para ρ_L constante, a equação (28) resulta em:

$$g_L v_x = \frac{\beta}{1 - \beta} \left[\int_{x_E}^x \frac{\partial g'_L}{\partial t} \partial x' - g_E \frac{d x_E}{d t} \right] \quad (32)$$

Substituindo a equação (30) na equação (32):

$$g_L v_x = - \left[\frac{\beta}{1 - \beta} \right] \left\{ (1 - g_E) \left[\frac{x - x_E}{x_L - x_E} \right] \left[\frac{d x_E}{d t} + \frac{1}{2} \left[\frac{x - x_E}{x_L - x_E} \right] \frac{d}{d t} (x_L - x_E) \right] + g_E \frac{d x_E}{d t} \right\} \quad (33)$$

Combinando-se (31) e (33):

$$\frac{v_x G}{\varepsilon} = \frac{\beta}{1 - \beta} \frac{1}{g_L} x \frac{(1 - g_E) \frac{x - x_E}{x_L - x_E} \left[\frac{d x_E}{d t} + \frac{1}{2} \frac{x - x_E}{x_L - x_E} \frac{d}{d t} (x_L - x_E) \right] + g_E \frac{d x_E}{d t}}{\frac{g_L - g_E}{1 - g_E} \frac{d}{d t} (x_L - x_E) + \frac{d x_E}{d t}} \quad (34)$$

A equação de redistribuição de soluto é obtida combinando-se a expressão para v_x acima com a equação (24) e integrando-a de $g_L = 1$ em $C_L = C_0$ até g_L, C_L .

Para o cálculo da macrossegregação, deve-se utilizar o resultado da operação acima, calcular C_S e, em seguida, combinar com a equação (23) para obter o valor de \bar{C}_S .

4.5.2 - MACROSSEGREGAÇÃO, $x < x_c$

Para se obter a equação de redistribuição de soluto em regiões próximas à face coquilhada, utiliza-se procedimento similar ao usado acima, porém, para $x < x_c$ e $g_L > g_L^c$, calcula-se $g_L v_x$ pela integração da equação (27a) de 0 a x e não de x_E a x .

Este procedimento deve ser aplicado até $g_L = g_L^c$, onde g_L^c é a

fração líquida no ponto x quando $x_E = 0$. Após se atingir g_L^C , a redistribuição de soluto deve ser calculada por uma equação similar à anterior, porém integrando entre os limites $g_L = g_L^C$ em $C_L = C_L^C$ e g_L, C_L .

4.6. - MÉTODO DE RESOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES

Abaixo pode ser visto o fluxograma das operações realizadas para o cálculo da segregação ao longo de um lingote solidificado unidirecionalmente.

O cálculo é efetuado na seguinte sequência:

- 1) Fixar uma dada posição do lingote, x .
- 2) Variar a fração líquida em volume, g_L .
- 3) Calcular a temperatura, T , e o instante, t , correspondentes.
- 4) Calcular o gradiente de temperatura, G , e a taxa de resfriamento, $\dot{\epsilon}$.
- 5) Calcular as velocidades das isothermas solidus e liquidus.
- 6) Calcular a velocidade do fluxo, v_x .
- 7) Calcular a composição do líquido, C_L .
- 8) Verificar se foi atingida a composição eutética, C_E .
- 9) Se não foi, incrementar Δg_L em g_L e voltar à operação 3.
- 10) Caso contrário, calcular a fração eutética e a composição média (macrossegregação) do sólido, \bar{C}_S .
- 11) Incrementar Δx em x e repetir o procedimento a partir da operação 2.

O fluxograma da sequência de operações para o cálculo da macrossegregação ao longo do lingote está mostrado na figura 4.1.

As operações 3, 4 e 5 podem ser calculadas analiticamente, pelas equações (18), (21), (32a), (40) e (47) do modelo analítico de solidificação apresentado no capítulo anterior, para moldes maciços, ou suas equações correspondentes para moldes refrigerados (apresentados no apêndice), por modelo numérico de solidificação ou obtidas por medidas através de termopares.

Neste trabalho, estas operações foram efetuadas utilizando o modelo analítico de solidificação de Garcia e Prates, para moldes refrigerados, e o modelo estendido, desenvolvido neste trabalho, para moldes maciços.

Para a determinação de T e t , devido à necessidade de calcular o argumento da função erro, fez-se por resolução numérica de zeros de funções pelo método de Newton-Raphson com o cálculo da primeira aproximação utilizando o método da bissecção^[121].

Para os itens 7 e 10, os cálculos foram efetuados por integração numérica, através da regra trapezoidal, usando-se o método de Romberg devido às suas características de precisão e menor número de passos na execução^[121-124].

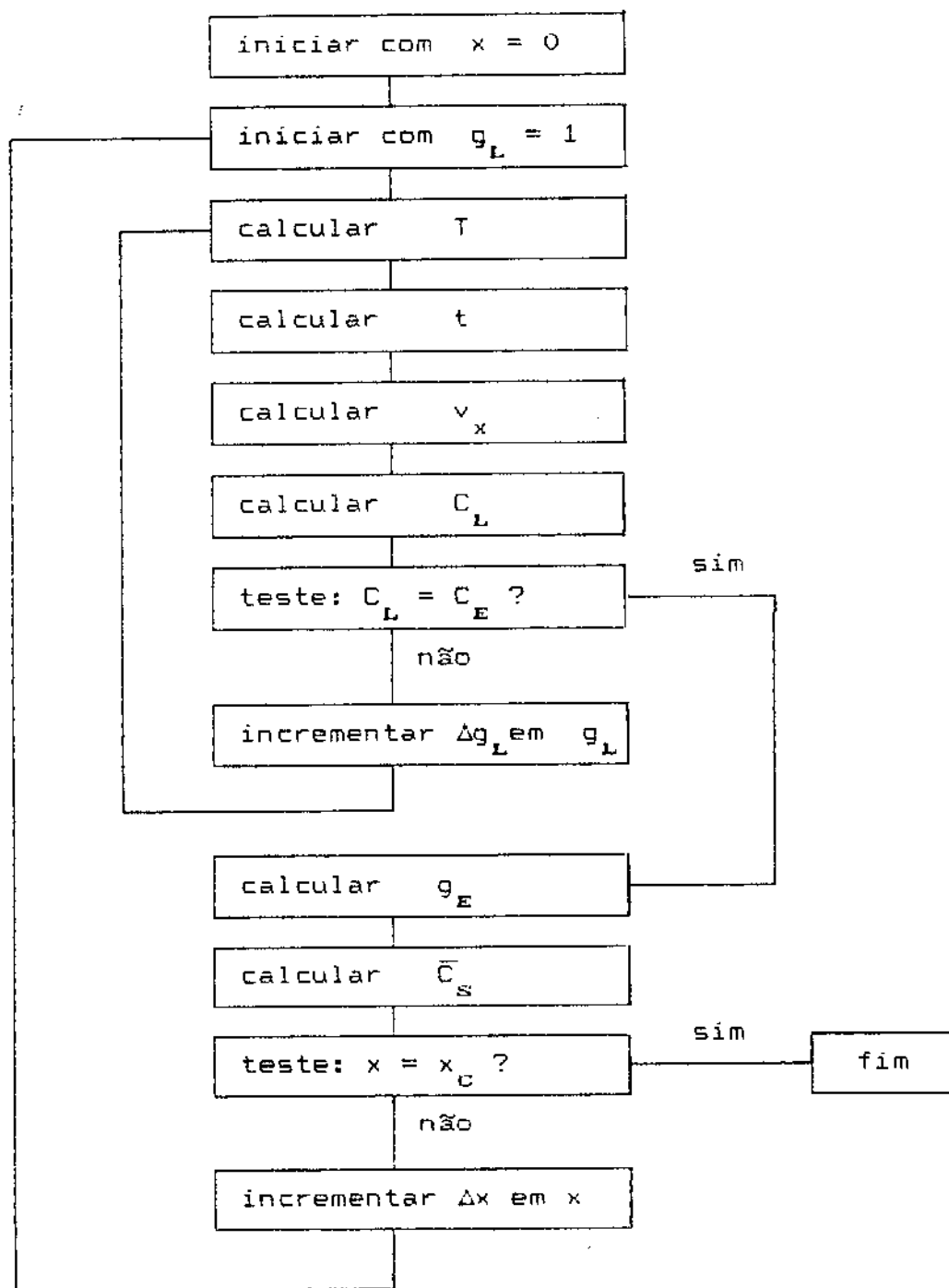


Figura 4.1 - FLUXOGRAMA PARA O CÁLCULO DA MACROSSEGREGAÇÃO INVERSA, UTILIZANDO O MODELO DA SOLIDIFICAÇÃO ANTERIORMENTE DESENVOLVIDO.

5. - RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 - MODELO DE SOLIDIFICAÇÃO

Como já mencionado, foi desenvolvida, na primeira parte deste trabalho, uma extensão do modelo analítico de solidificação apresentado por Garcia-Prates, a fim de que permita a análise da solidificação de ligas, vazadas com superaquecimento em molde maciços.

5.1.1 - VERIFICAÇÃO DA VALIDADE DO MODELO DESENVOLVIDO

Vale enfatizar que os primeiros modelos analíticos desenvolvidos, inicialmente para solidificação de metais puros e moldes refrigerados, posteriormente moldes maciços e, finalmente para solidificação de ligas (isto é, com zona pastosa) em molde refrigerados, são modelos cuja validade foi comprovada por extensa verificação experimental.

Modelos numéricos, utilizando métodos de diferenças finitas MDF, ou elementos finitos, MEF, também são de validade comprovada geralmente com a vantagem da obtenção de resultados ainda mais precisos. Em contrapartida, modelos analíticos permitem análise mais rápida e abrangente, servindo, inclusive, para avaliação da consistência dos resultados de modelos numéricos.

Para verificar a validade do modelo proposto, foram feitas várias simulações de solidificação em moldes maciços, variando-se parâmetros de entrada do modelo, como o grau de superaquecimento, o coeficiente de transferência de calor na interface metal-molde, o material do molde e a liga solidificada.

Na maioria dos casos, fez-se a simulação de pelo menos três situações diferentes para a avaliação da influência de cada parâmetro.

Assim, para analisar a influência do molde, foram considerados, em ordem decrescente de capacidade de extração de calor, molde refrigerado, molde de cobre e molde de aço. Para a liga solidificada, utilizou-se aço baixo-carbono, liga Al-15%Cu e liga Al-4,5%Cu, em ordem crescente de difusividade térmica. Situações com superaquecimentos de 5, 20 e 50 K foram simuladas. Finalmente, o coeficiente de transferência de calor variou de 800 a 5.000 W/m².K.

Os resultados obtidos foram comparados com resultados de modelos numéricos calculados pelo método de diferenças finitas de conhecida validade e precisão^[120]. Algumas destas situações simuladas, elucidativas e necessárias para os comentários e as conclusões, serão apresentadas a seguir.

5.1.2 - DETERMINAÇÃO DE ϕ_1 E ϕ_2

Primeiramente, a fim de possibilitar a determinação da evolução das isothermas solidus e liquidus, bem como o cálculo da distribuição de temperaturas no molde e nas regiões sólida, pastosa e líquida da liga solidificada, foram calculados os valores das constantes de solidificação, ϕ_1 e ϕ_2 , das ligas Al-4,5%Cu, Al-15%Cu e Aço-0,1%C, mostradas, respectivamente, nas figuras 5.1, 5.2 e 5.3, para diferentes graus de superaquecimento.

Os valores de ϕ_1 e ϕ_2 a serem utilizados no modelo são obtidos pela intersecção das curvas para o molde e o superaquecimento considerados. Pode-se observar que há significativa influência tanto do superaquecimento quanto do tipo de molde sobre as constantes de solidificação ϕ_1 e ϕ_2 .

5.1.3 - CINÉTICA DE SOLIDIFICAÇÃO

As figuras 5.4 e 5.5 mostram os resultados da simulação da cinética de solidificação (evolução da *solidus* e da *liquidus*) para aços 0,1% C em moldes de cobre e aço, respectivamente.

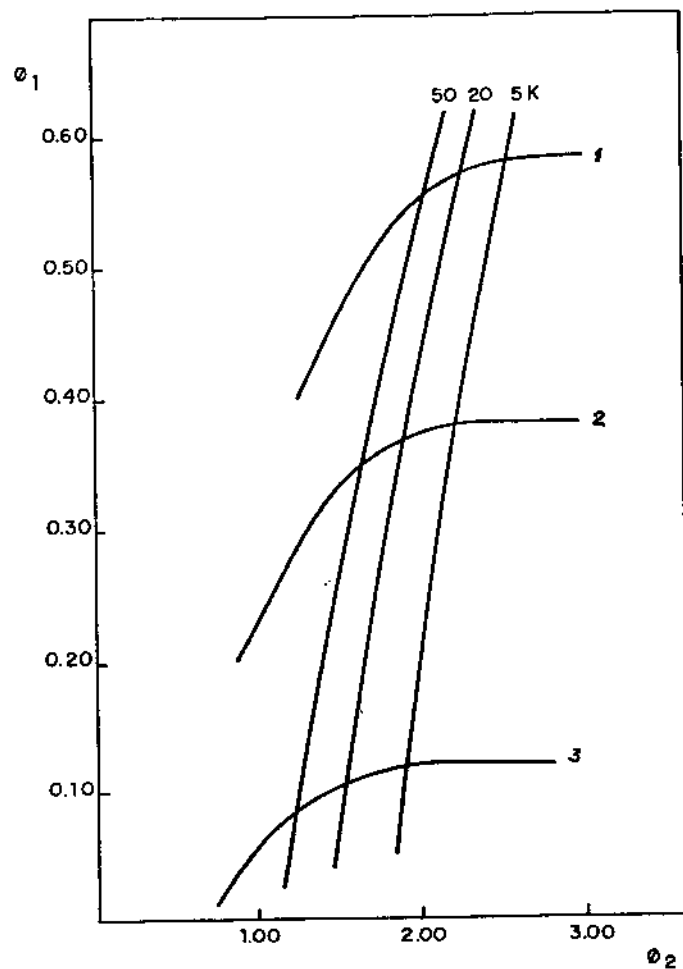


Figura 5.1 - Curvas para determinação das constantes d solidificação, ϕ_1 e ϕ_2 , da liga Al-4,5%Cu par diferentes superaquecimentos e moldes utilizados.

- 1 - molde refrigerado
- 2 - molde de cobre
- 3 - molde de aço

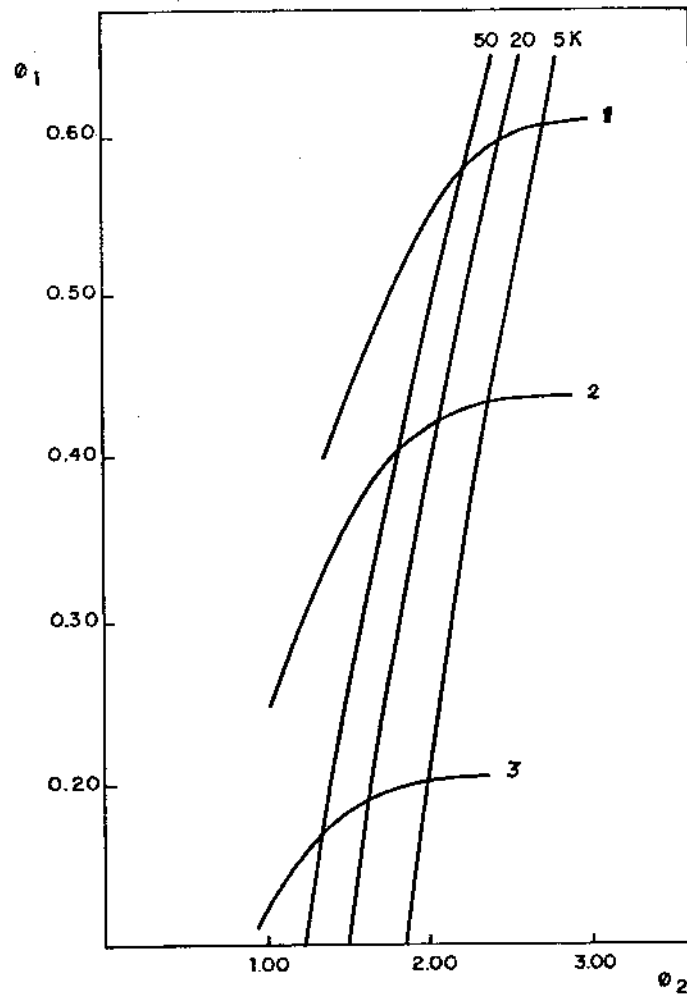


Figura 5.2 - Curvas para determinação das constantes de solidificação, ϕ_1 e ϕ_2 , da liga Al-15%Cu para diferentes superaquecimentos e moldes utilizados.

- 1 - molde refrigerado
- 2 - molde de cobre
- 3 - molde de aço

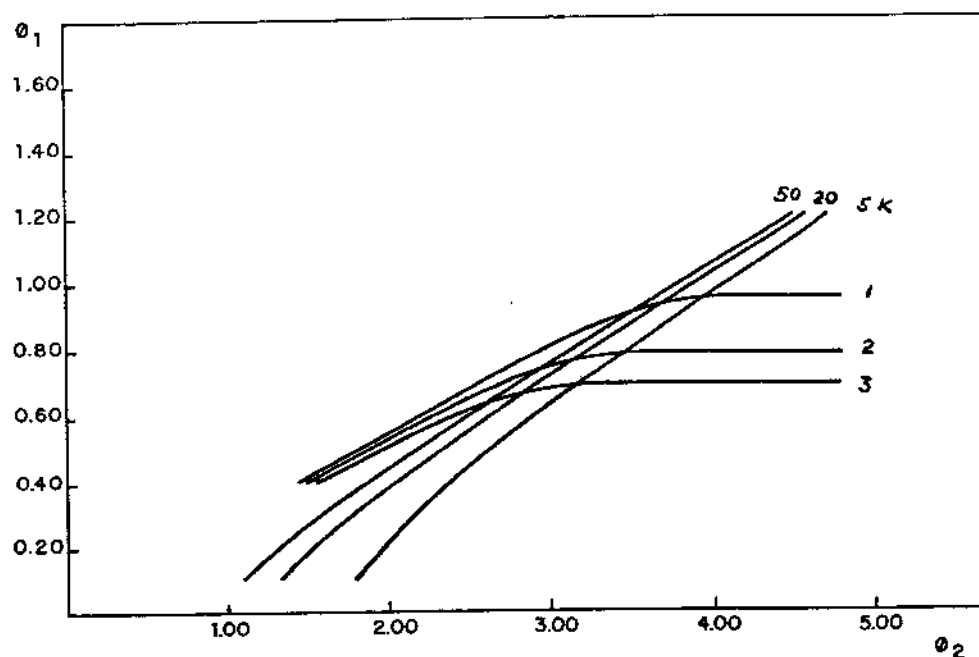


Figura 5.3 - Curvas para determinação das constantes de solidificação, ϕ_1 e ϕ_2 , de aço 0,1%C para diferentes superaquecimentos e moldes utilizados.

- 1 - molde refrigerado
- 2 - molde de cobre
- 3 - molde de aço

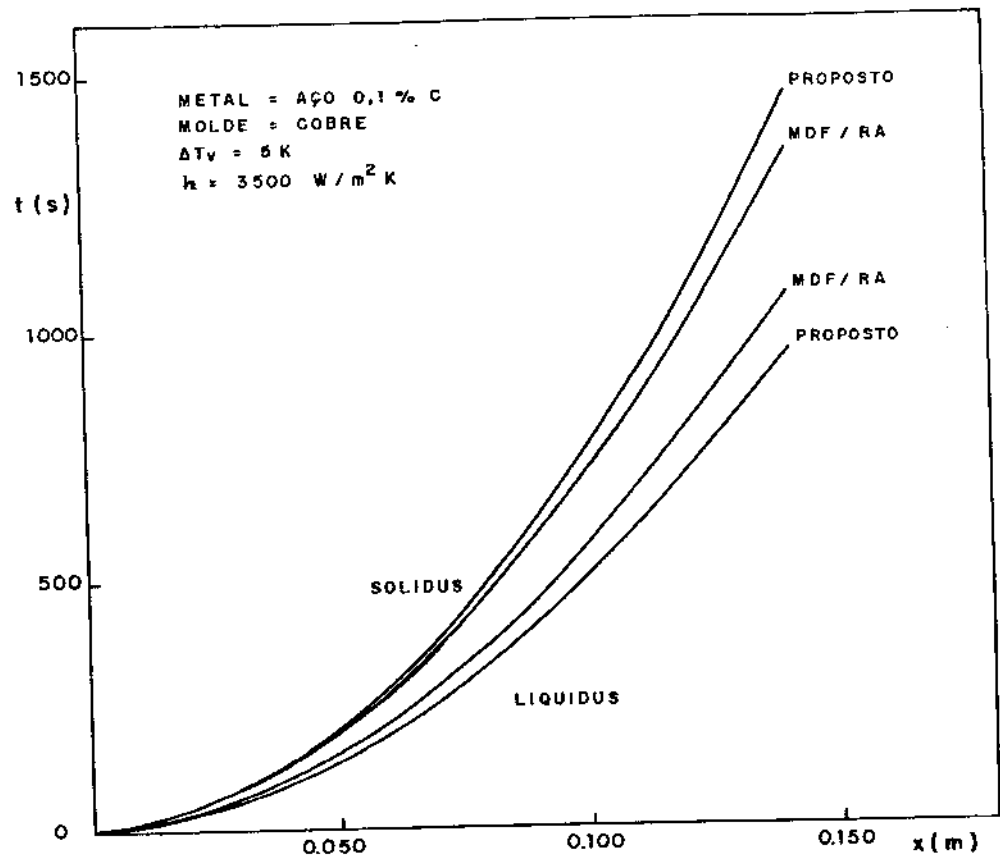


Figura 5.4 - Evolução das isothermas *solidus* e *liquidus* na solidificação de aço 0,1%C em moldes de cobre pelo modelo proposto e pelo MDF.

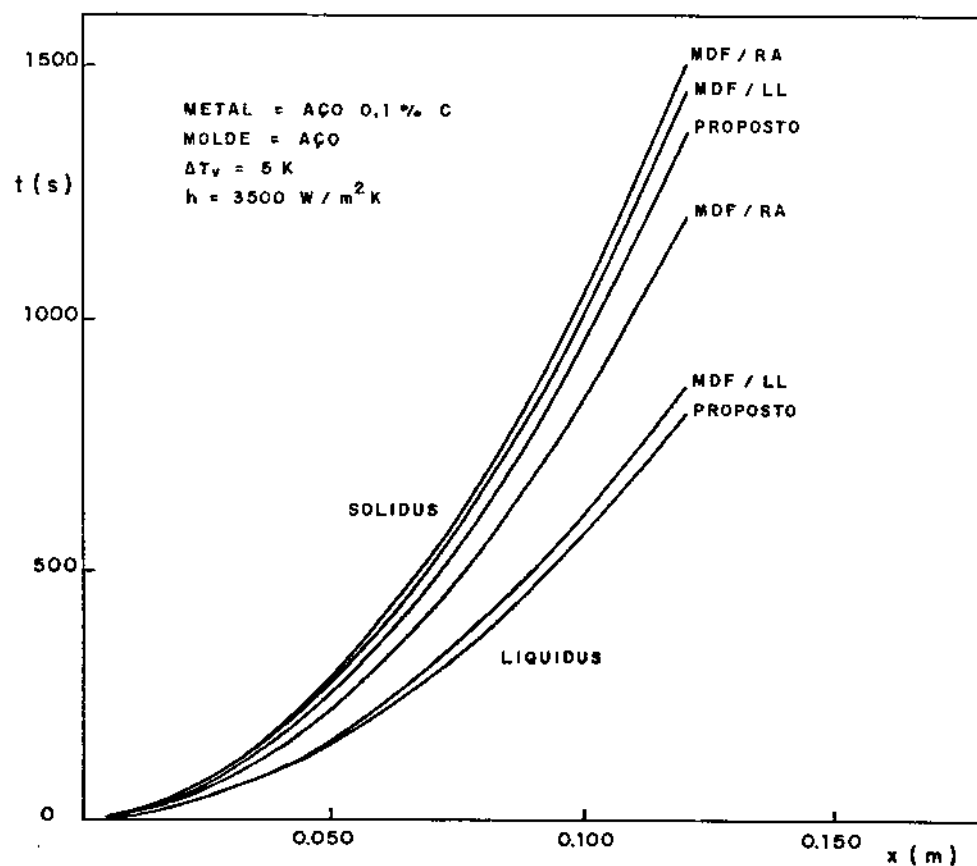


Figura 5.5 - Evolução das isothermas *solidus* e *liquidus* na solidificação de aço 0,1%C em moldes de aço pelo modelo proposto e pelo MDF.

Pode-se notar que há boa concordância dos resultados obtidos pelo modelo proposto com os obtidos pelo método numérico de diferenças finitas, principalmente para molde de cobre. A concordância verificada para a *solidus* é sempre boa, tanto para moldes de cobre quanto para moldes de aço. Portanto, para a análise da maioria dos fenômenos da solidificação, onde o importante é saber a evolução da *solidus*, a aplicação do modelo é confiável. Para a *liquidus*, a divergência entre o modelo analítico e o modelo de diferenças finitas com liberação linear de calor latente é pequena e é ligeiramente maior quando se usa a regra da alavanca. Análise mais detalhada, discutindo as influências do molde e do modo de liberação do calor latente, será feita mais adiante.

Como era de se esperar, os resultados para as ligas Al-Cu não são tão bons quanto aqueles observados para o aço, como pode ser visto nas figuras 5.6 e 5.7, para as ligas de 4,5%Cu e 15%Cu, respectivamente. Este afastamento dos valores obtidos pelo modelo com relação ao real, para as ligas Al-Cu em comparação ao aço, já foi observado e relatado anteriormente na aplicação do modelo analítico a moldes refrigerados^[90-96]. A análise destes casos deve considerar parâmetros da liga, como difusividade térmica e forma de liberação do calor latente, como será discutido nos próximos itens.

5.1.4 - DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURAS NO MOLDE E NO METAL

A nível de exemplos, segue uma série de figuras de perfis térmicos no sistema metal/molde que confirmam as análises feitas anteriormente, mostrando mais uma vez que, no caso do aço, as diferenças praticamente inexistem.

Distribuições de temperaturas no molde e na liga em solidificação, para dois instantes diferentes, estão mostradas nas figuras 5.8 e 5.9, respectivamente, para aço solidificado em molde de cobre e em molde de aço. Analogamente, seguem os perfis

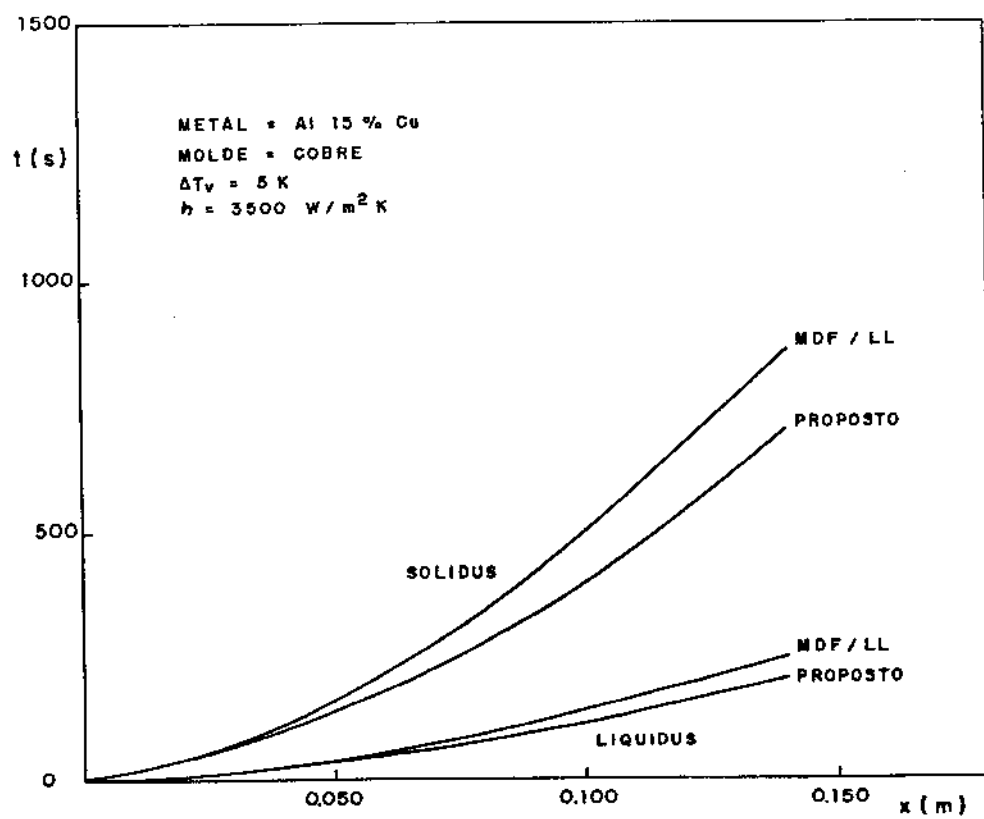


Figura 5.6 - Evolução das isothermas *solidus* e *liquidus* na solidificação de Al-15%Cu em moldes de cobre pelo modelo proposto e pelo MDF.

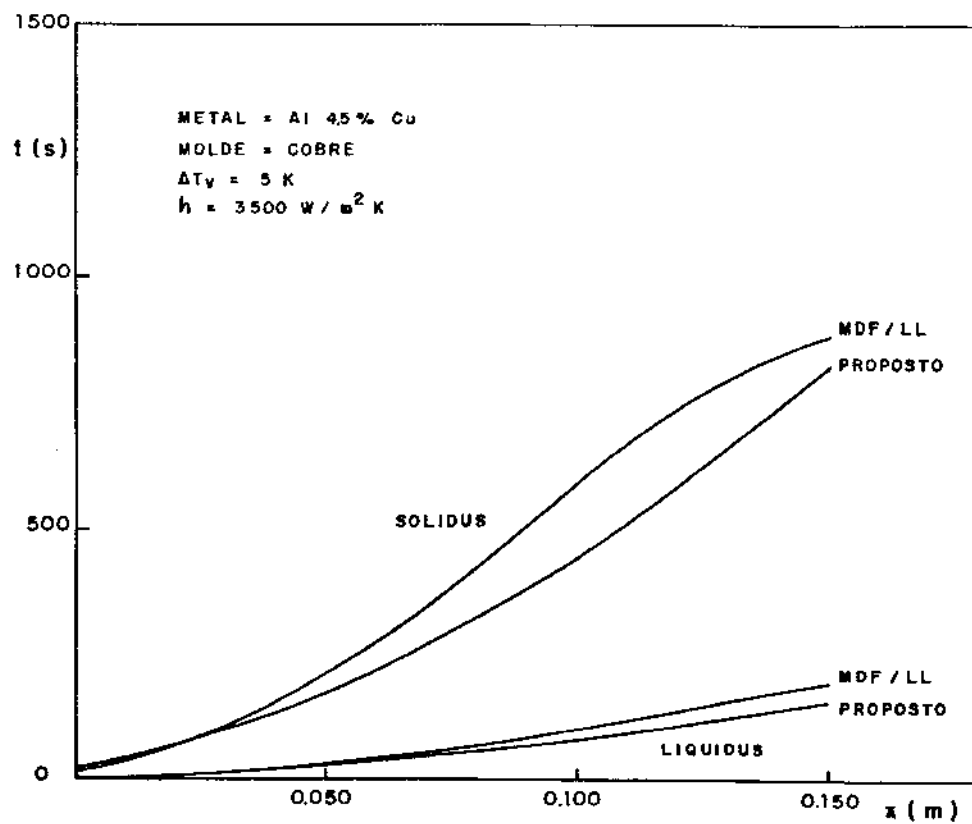


Figura 5.7 - Evolução das isothermas *solidus* e *liquidus* na solidificação de Al-4,5%Cu em moldes de cobre pelo modelo proposto e pelo MDF.

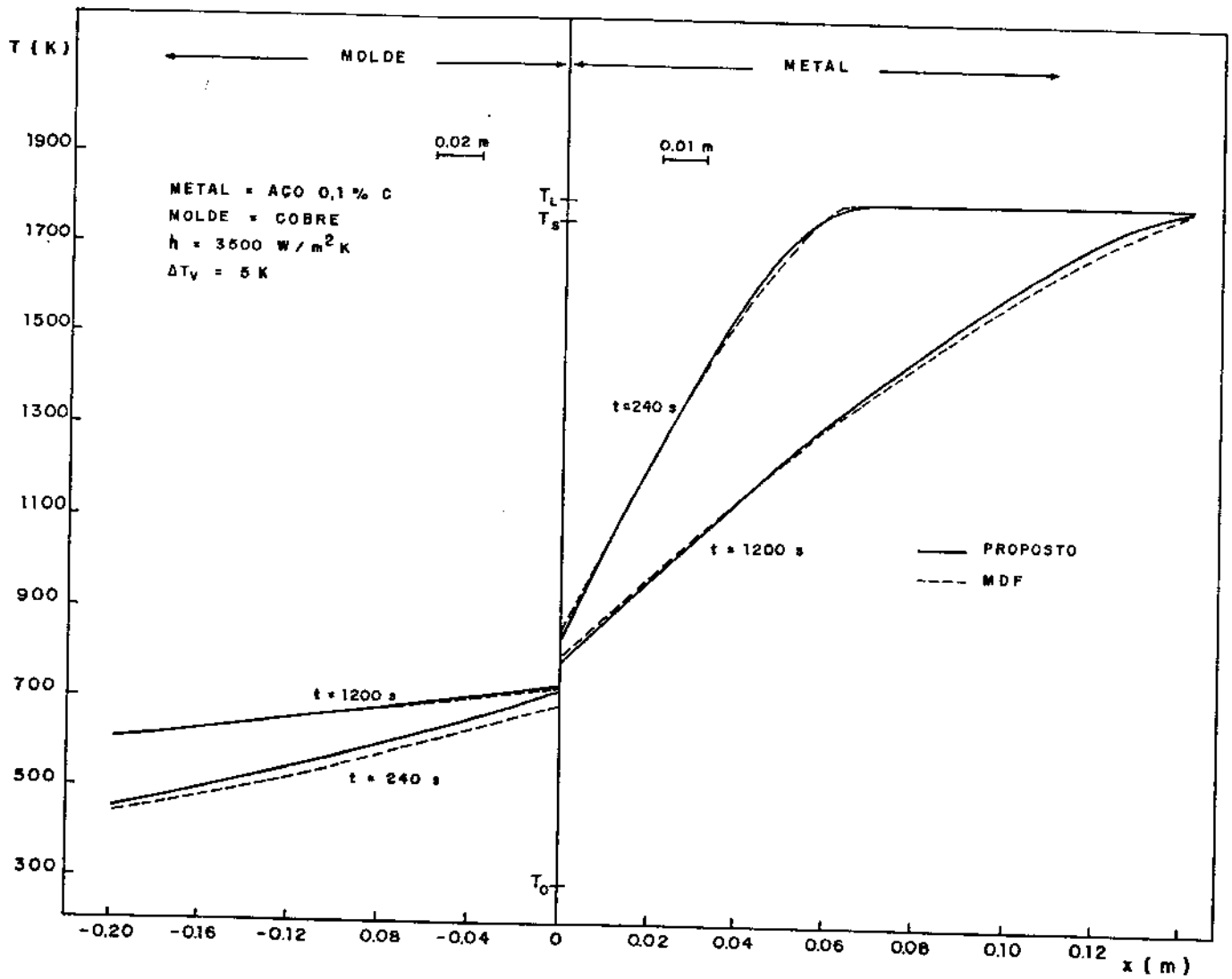


Figura 5.8 - Distribuição de temperaturas no metal e no molde na solidificação de aço 0,1%C em molde de cobre pelo modelo proposto e pelo MDF.

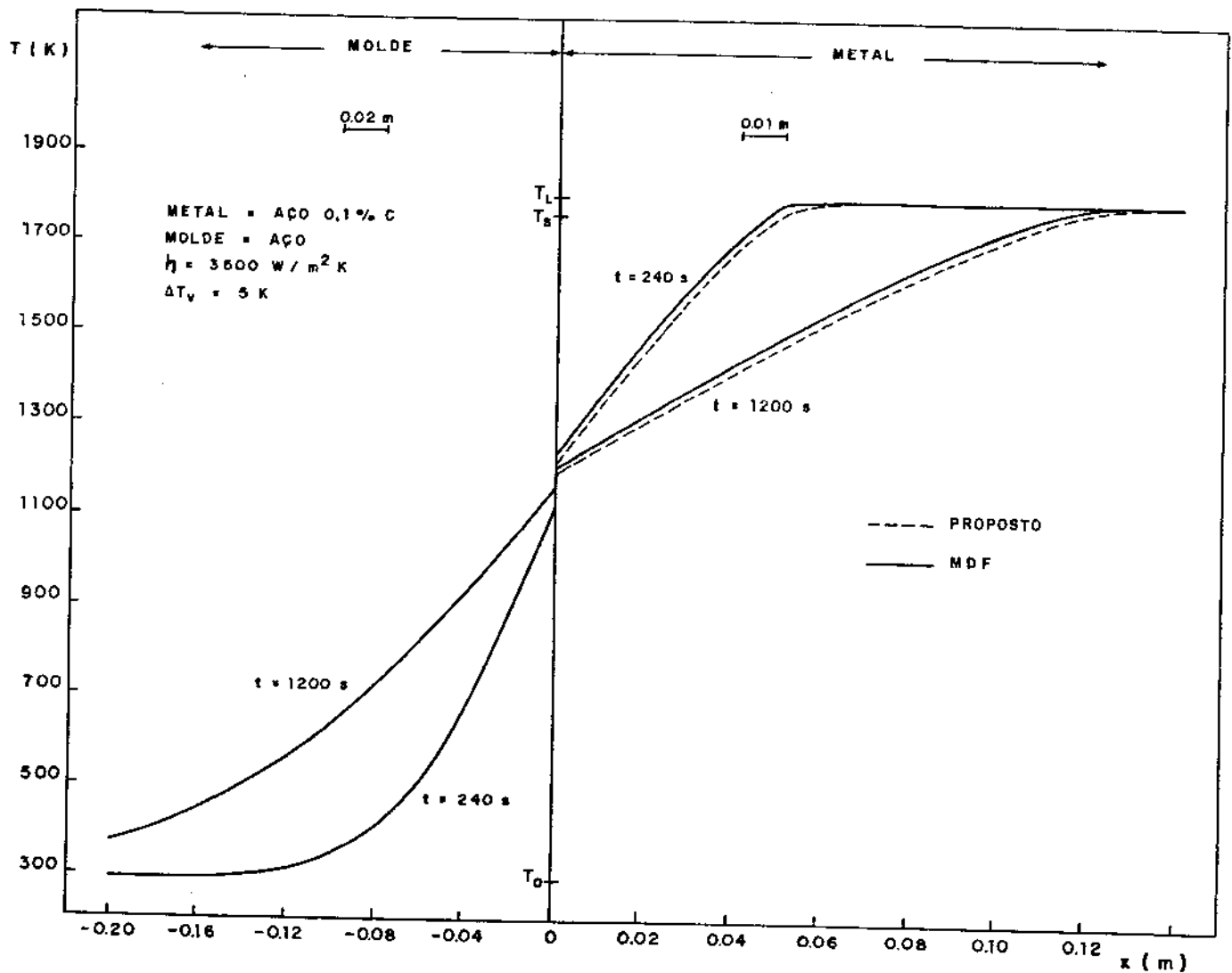


Figura 5.9 - Distribuição de temperaturas no metal e no molde na solidificação de aço 0,1%C em molde de aço pelo modelo proposto e pelo MDF.

térmicos no sistema metal-molde para a liga Al-15%Cu nas figuras 5.10 e 5.11, e para a liga Al-4,5%Cu nas figuras 5.12 e 5.13.

5.1.4.1 - PERFIL TÉRMICO NO METAL

Da mesma forma que discutido no item anterior, os perfis térmicos no metal em solidificação apresentam boa concordância com aqueles previstos pelo método de diferenças finitas, principalmente para o aço, aumentando-se as diferenças para a liga Al-15%Cu e um pouco mais para a liga Al-4,5%Cu.

As figuras mostram que as distribuições de temperatura no metal apresentam, durante a maior parte da solidificação, as regiões sólida, pastosa e líquida, características da solidificação de ligas.

5.1.4.2 - PERFIL TÉRMICO NO MOLDE

Deve ser lembrado que a obtenção das previsões utilizando o método de diferenças finitas deu-se, pela simulação da solidificação de um lingote de comprimento finito em um molde de espessura também finita. Para as comparações dos resultados obtidos pelos dois métodos serem pertinentes, utilizaram-se espessuras de molde compatíveis com a condição semi-infinita existente na concepção do modelo analítico.

Portanto, comparações de distribuição de temperaturas no molde, obtidas pelo modelo proposto, são razoáveis somente quando o molde apresenta comportamento que satisfaz à condição semi-infinita. Assim, muito cuidado deve ser tomado ao se utilizar estes perfis térmicos. Entretanto, para os instantes iniciais do processo, os resultados podem ser sempre utilizados, perdendo sua validade quando ocorrer significativo aquecimento da superfície externa do molde. Quanto à precisão dos resultados, o perfil térmico no molde é mais confiável para moldes que apresentam menor difusividade térmica. Portanto, haverá menores diferenças entre as

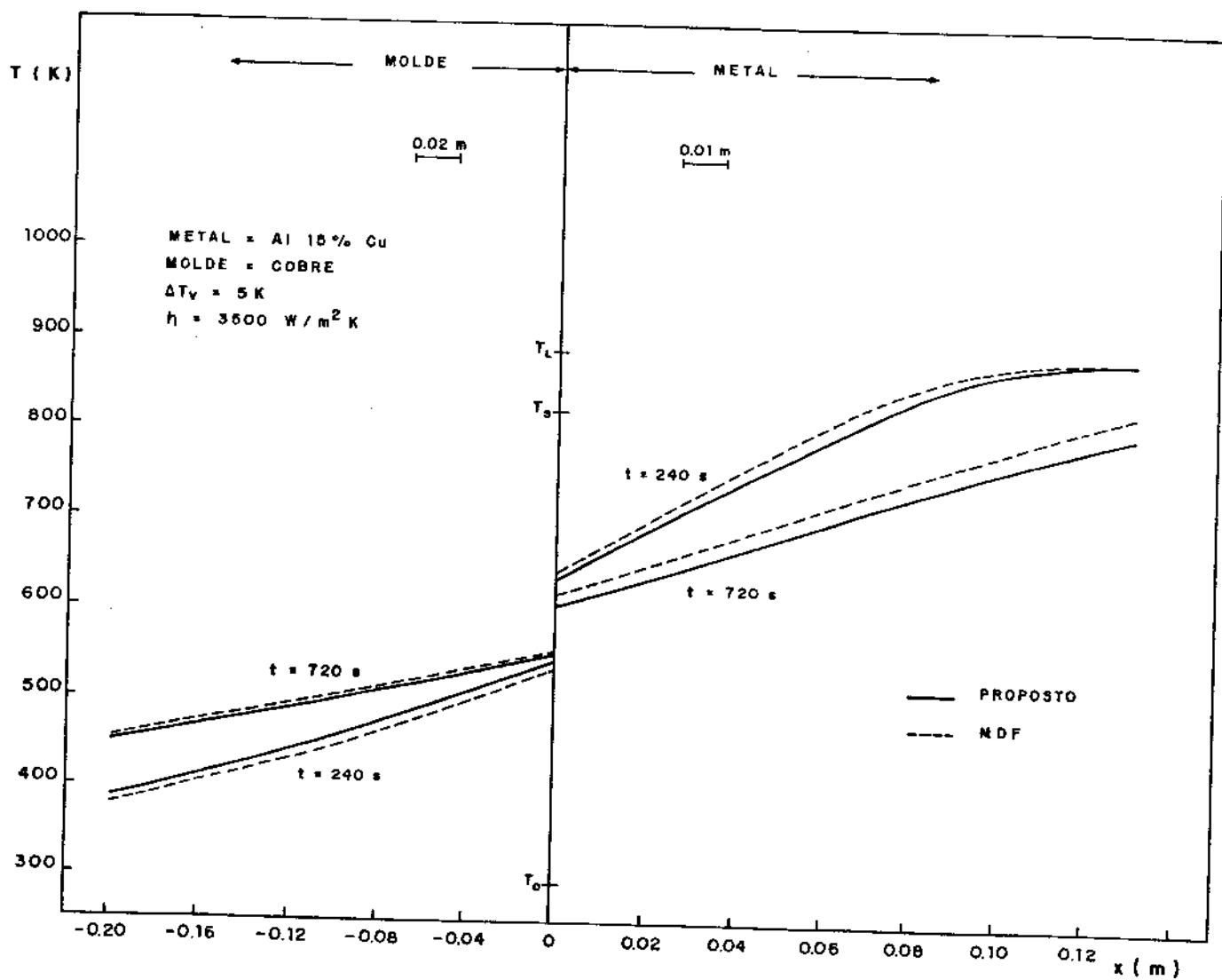


Figura 5.10 - Distribuição de temperaturas no metal e no molde na solidificação de Al-15%Cu em molde de cobre pelo modelo proposto e pelo MDF.

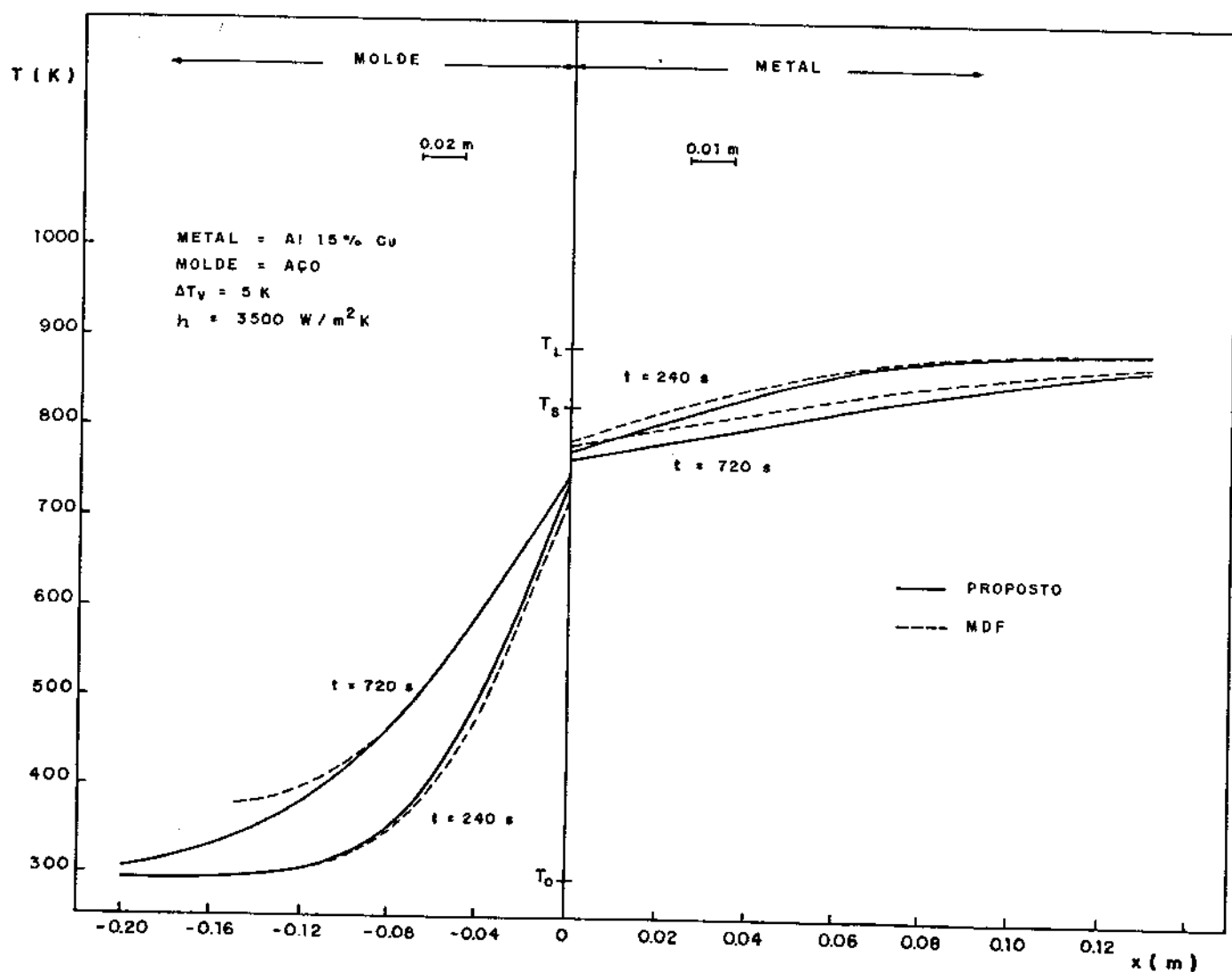


Figura 5.11 - Distribuição de temperaturas no metal e no molde na solidificação de Al-15%Cu em molde de aço pelo modelo proposto e pelo MDF.

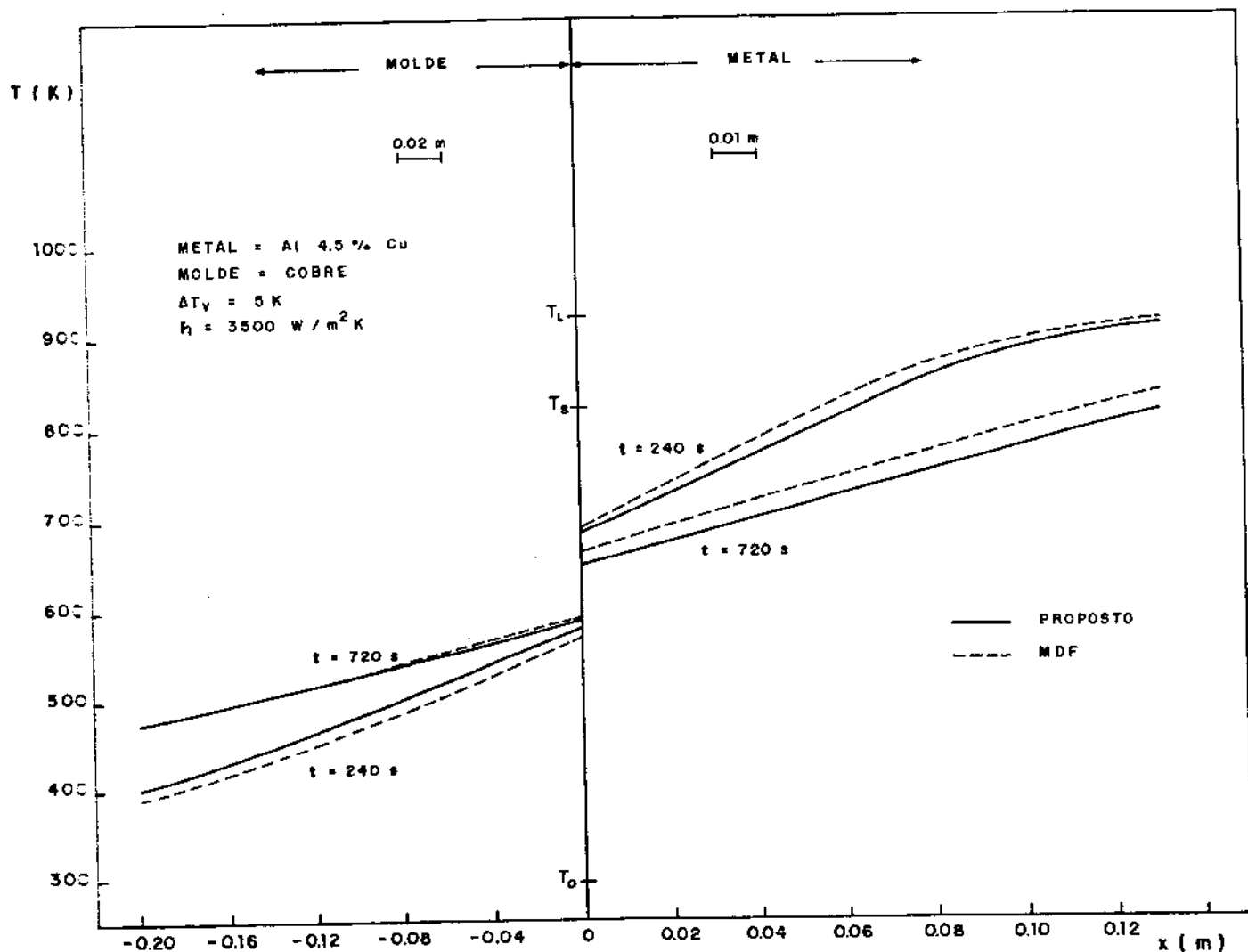


Figura 5.12 - Distribuição de temperaturas no metal e no molde na solidificação de Al-4,5%Cu em molde de cobre pelo modelo proposto e pelo MDF.

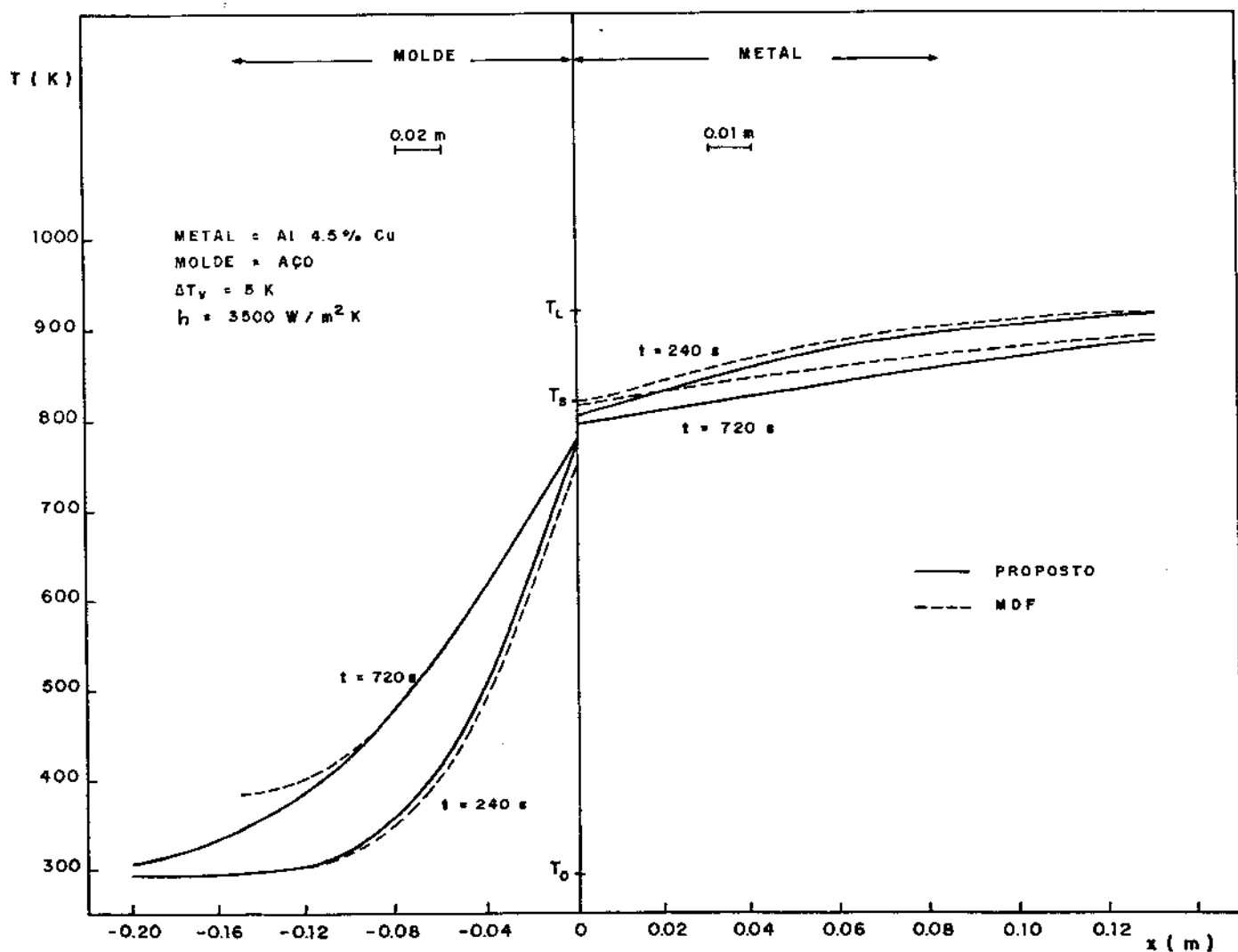


Figura 5.13 - Distribuição de temperaturas no metal e no molde na solidificação de Al-4,5%Cu em molde de aço pelo modelo proposto e pelo MDF.

previsões dadas pelo modelo proposto e o MDF para o molde de aço e maiores diferenças para o molde de cobre. Consequentemente, é de se esperar pequena diferença quando se tratar, por exemplo, de moldes de areia.

As figuras apresentadas neste trabalho mostram resultados de simulações com espessuras de 0,150 m no caso de moldes de aço e espessura de 0,600 m no caso de moldes de cobre. Estes valores foram usados após a verificação de que a condição semi-infinita estava satisfeita. Para se ter uma ligeira idéia de ordem de grandeza, ao utilizar espessura de 0,150 m para moldes de cobre, as previsões de temperatura na superfície externa (em contato com o meio ambiente), obtidas pelo MDF, subiram rapidamente, o que desfaz a condição semi-infinita. Quanto ao comprimento do lingote solidificado, o valor utilizado em todas as situações simuladas é de 0,200 m.

5.1.5 - VARIÁVEIS INFLUENTES

5.1.5.1 - INFLUÊNCIA DO MOLDE

Quanto à influência do molde, nota-se que para avaliação da cinética de solidificação e distribuição de temperaturas no metal, os resultados são melhores para moldes que têm maior difusividade de calor. Assim, aumenta-se a confiabilidade dos resultados obtidos pelo modelo proposto à medida que aumenta a capacidade de absorção de calor do molde, de tal modo que, no limite (moldes refrigerados), quase não há diferença, a menos do efeito terminal.

Portanto, a aplicação terá maior precisão para moldes refrigerados, seguida de moldes de cobre e, por último, para moldes de aço.

Isto se verifica facilmente quando se analisa a solidificação do aço, como pode ser visto comparando-se as figuras 5.4 com 5.5. Quando da aplicação em ligas Al-Cu, mesmo em moldes refrigerados, verificou-se menor precisão, porém ainda confiável.

5.1.5.2 - INFLUÊNCIA DA LIGA SOLIDIFICADA

Outro fator influente é a liga solidificada. Dois parâmetros muito importantes devem ser levados em consideração: a capacidade da liga de transferir calor e sua forma de liberar o calor latente.

A) DIFUSIVIDADE TÉRMICA DA LIGA SOLIDIFICADA

Pode-se notar que, comparativamente ao modelo numérico, o modelo proposto é tanto mais preciso quanto mais lenta for a resposta térmica (no caso de ligas, a associação da forma de liberação do calor latente e sua difusividade térmica), ou seja, quanto mais resistente à transferência de calor for a liga solidificada. Desta forma, o modelo apresenta melhor precisão quando aplicado a aços baixo-carbono, seguida pela liga Al-15%Cu e, finalmente, pela liga Al-4,5%Cu, como pode ser verificado observando-se as figuras 5.5, 5.6 e 5.7.

B) MODO DE LIBERAÇÃO DO CALOR LATENTE

Também o modo de liberação do calor latente tem forte influência sobre a precisão dos resultados obtidos, visto que, ao passar de uma liga com liberação de calor latente de forma menos complexa (regra da alavanca) para outra de forma mais complexa (Scheil), comparando-se com a forma de liberação linear como foi concebido o modelo, é de se esperar um afastamento gradativo das curvas obtidas. Esta diferença pode ser vista facilmente através da figura 5.14, de curvas de temperatura versus fração sólida, para aços 1,0%C, onde se nota, com relação à curva para liberação linear do calor latente, um distanciamento exagerado da curva segundo Scheil, devido à formação de um eutético prevista por esta equação, enquanto o distanciamento da curva da regra da alavanca é sempre de melhor aceitação.

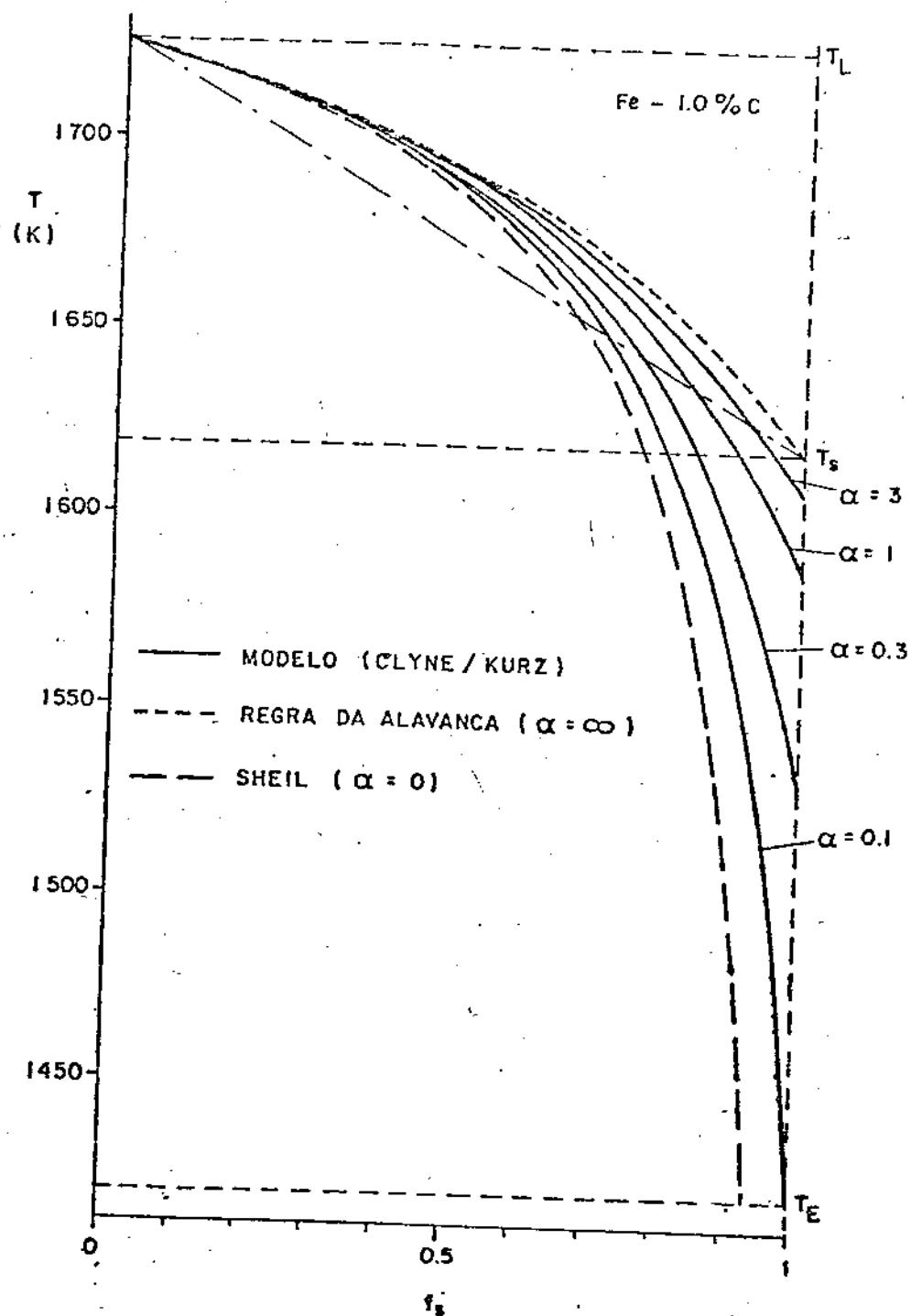


Figura 5.14 - Curvas de temperatura versus fração sólida, segundo Scheil, Regra da Alavanca, Clyne-Kurz, comparadas à Aproximação Linear, para um aço 1,0%C.

A fim de separar os efeitos simultâneos da resposta térmica e do modo de liberação do calor latente da liga solidificada, foram feitas simulações no modelo de diferenças finitas, utilizando-se a forma linear de liberação, além daquela mais representativa para a liga considerada, ou seja, a regra da alavanca no caso dos aços baixo-carbono, e Scheil no caso das ligas Al-Cu.

A figura 5.4 mostra, para a solidificação de aço, os resultados obtidos nas três situações, isto é, pelo modelo proposto e pelo método de diferenças finitas utilizando as formas linear de liberação e regra da alavanca. Estes resultados estão indicados na figura , respectivamente, por MDF-LL e MDF-RA. Nota-se claramente a aproximação das curvas do modelo proposto com as do modelo numérico quando este utiliza a forma linear de liberação do calor latente, como esperado.

Para as ligas Al-Cu, utilizando-se liberação de calor latente segundo Scheil, os resultados obtidos são ainda mais divergentes daqueles mostrados nas figuras 5.7 e 5.8 para liberação linear.

Deve-se salientar que a maior ou menor precisão dos resultados obtidos pelo modelo não está relacionada aos aspectos fundamentais de sua concepção, mas sim à capacidade de se assumir expressões mais complexas de liberação do calor latente, o que dificulta a obtenção de uma solução analítica.

5.1.6 - CONDIÇÃO SEMI-INFINITA

Pode-se notar da figura 5.9, para a solidificação de aço baixo-carbono, que a condição semi-infinita do molde, assumida na concepção do modelo analítico, é satisfeita com moldes de aço de espessura da ordem de 0,140 m e 0,300 m para os instantes mostrados de 240 e 1.200 segundos, respectivamente. Já para a solidificação da mesma liga, sob as mesmas condições, exceto o material do molde, o comportamento semi-infinito se dá, somente com espessuras muito maiores e apenas nos instantes iniciais, como

pode ser visto na figura 5.10, para molde de cobre. Nota-se que também a liga solidificada exerce influência sobre a espessura-limite em que o comportamento semi-infinito é atendido, como pode ser visto comparando-se as figuras 5.9, 5.11 e 5.13.

Portanto, a primeira impressão de que a condição semi-infinita seja uma situação ideal e meramente didática não é verdadeira, uma vez que esta condição é satisfeita, em muitos casos, com espessuras de molde da ordem de grandeza daquelas normalmente utilizadas na prática.

5.1.7 - FATORES GEOMÉTRICOS

A exemplo do que foi realizado para solidificação de peças cilíndricas e esféricas em moldes refrigerados^[119] também aqui podem-se incorporar os mesmos fatores geométricos a fim de se obter a correção da curva, incorporando-se, assim, o efeito terminal da solidificação.

5.1.8 - OUTRAS SIMULAÇÕES

As observações feitas até aqui visavam a avaliar a precisão do modelo e os fatores que nela influem, que foi efetuado pela comparação com modelo de diferenças finitas. Complementando essas observações, seguem as figuras 5.15, 5.16, 5.17, 5.18, 5.19 e 5.20 que mostram simulações a fim de se verificar o grau de influência que os parâmetros de processo exercem sobre a cinética de solidificação, bem como nas distribuições de temperatura no molde e no metal, durante o processo de solidificação.

Pode-se observar a forte influência de uma variação de 5 para 50 K de superaquecimento sobre a cinética de solidificação e também sobre a distribuição de temperaturas, conforme mostram as figuras 5.15 e 5.18, respectivamente.

A influência do coeficiente de transferência de calor metal-molde pode ser vista nas figuras 5.16 e 5.19. Para as

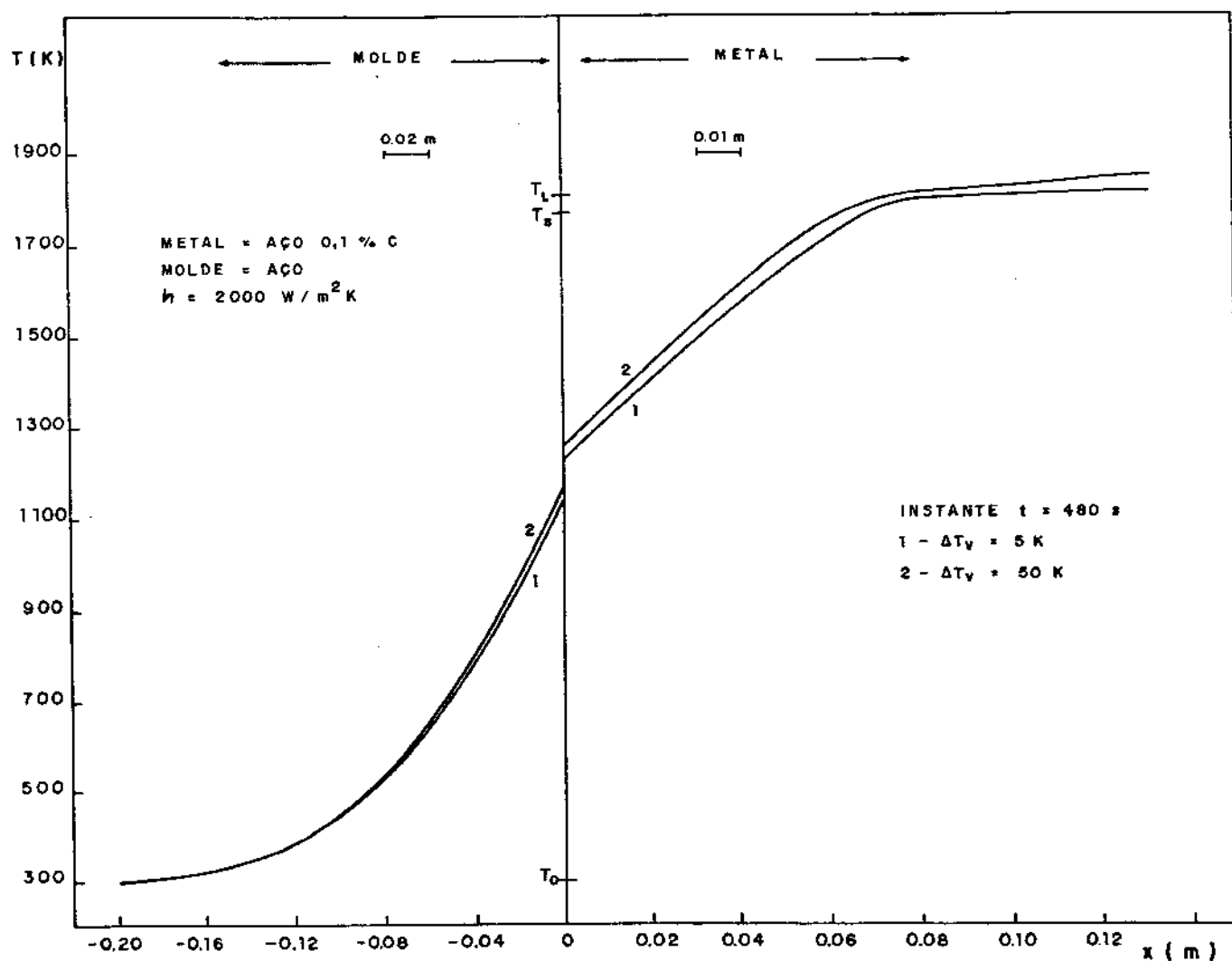


Figura 5.15 - Simulação da influência do superaquecimento na distribuição de temperaturas no molde e no metal, na solidificação de aço 0,1%C em molde de aço.

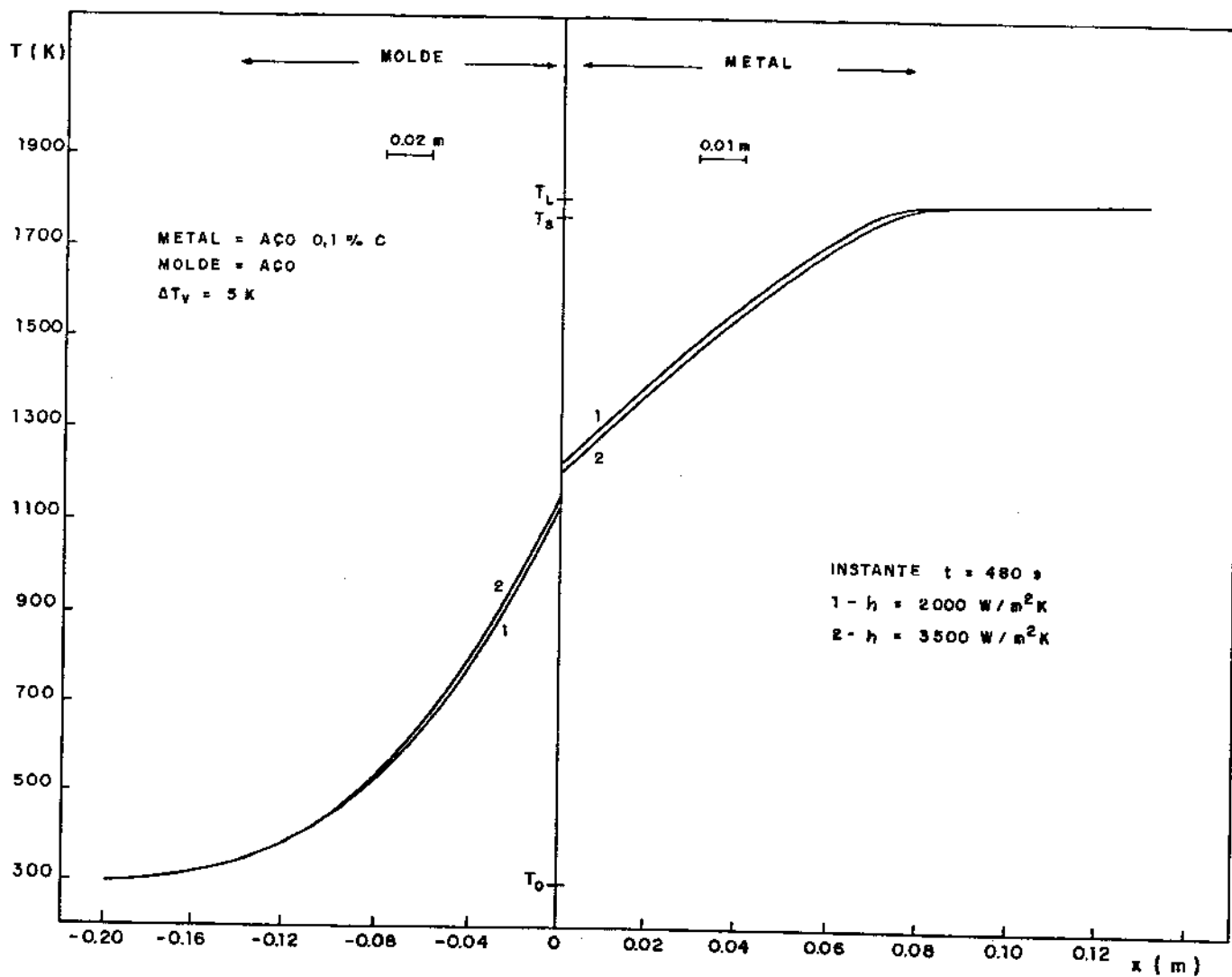


Figura 5.16 - Simulação da influência do coeficiente de transferência de calor na distribuição de temperaturas no molde e no metal, na solidificação de aço 0,1%C em molde de aço.

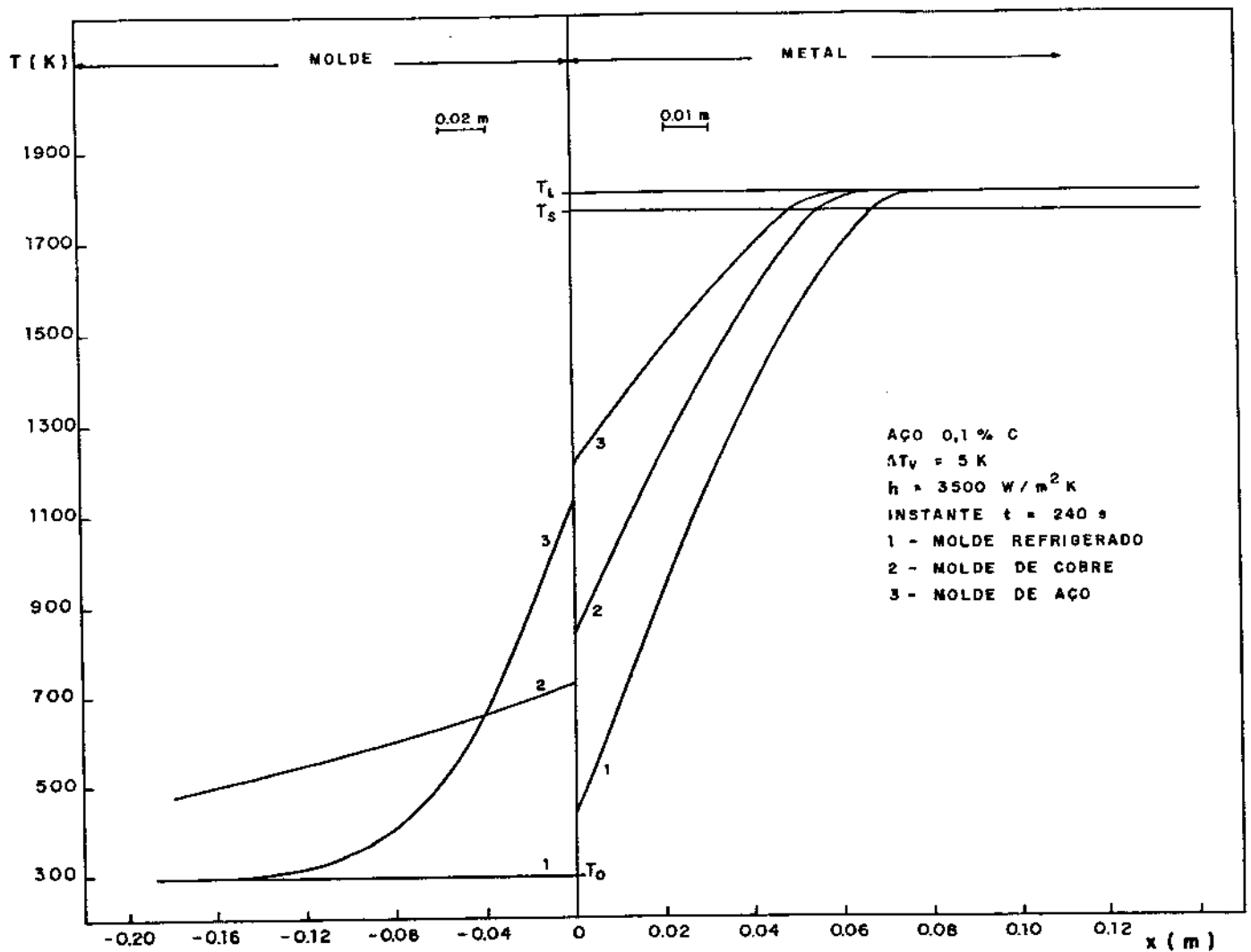


Figura 5.17 - Simulação da influência do molde na distribuição de temperaturas no molde e no metal, na solidificação de aço 0,1%C .

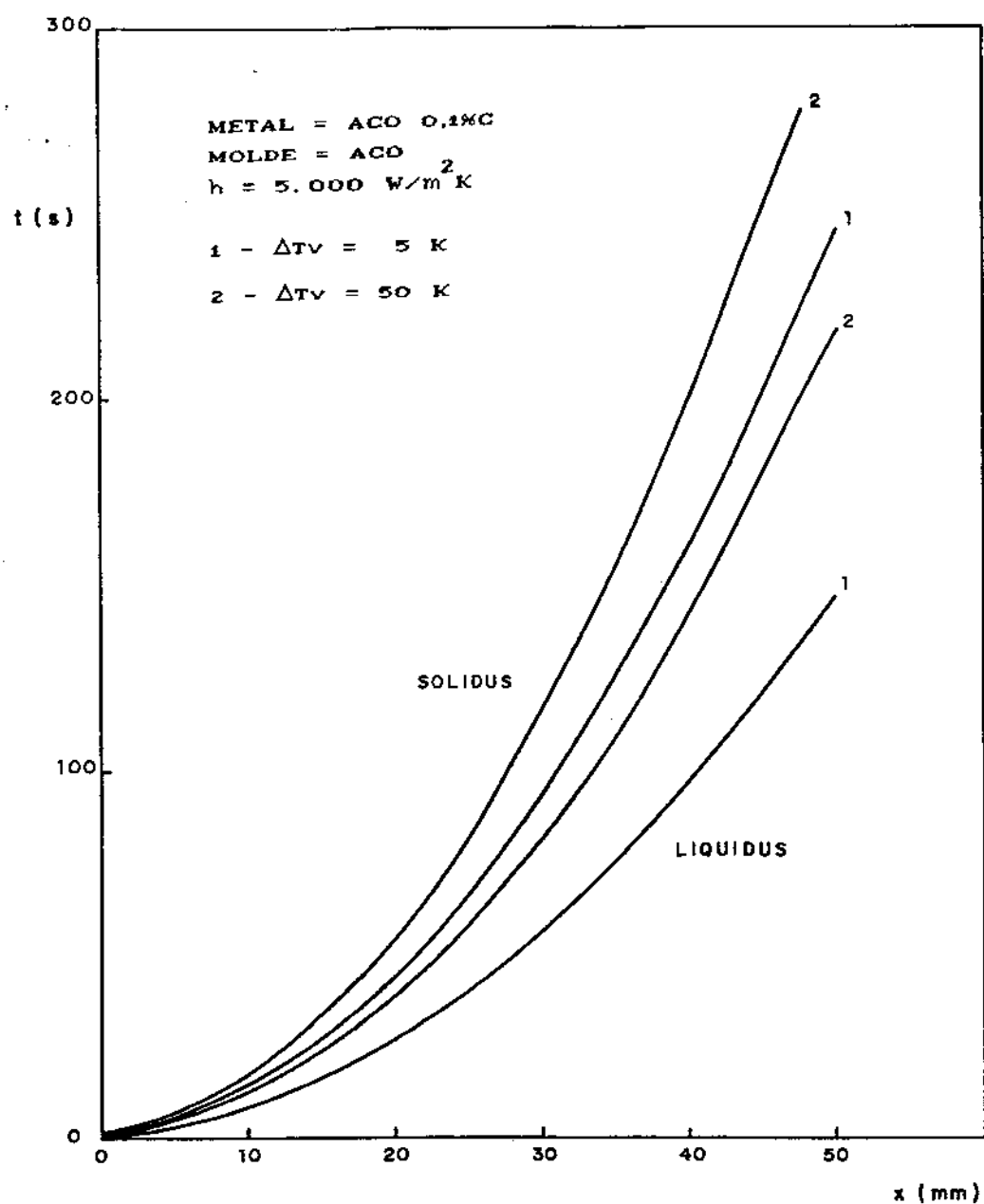


Figura 5.18 - Simulação da influência do superaquecimento na evolução da *solidus* e *liquidus* na solidificação de aço 0,1%C em molde de aço.

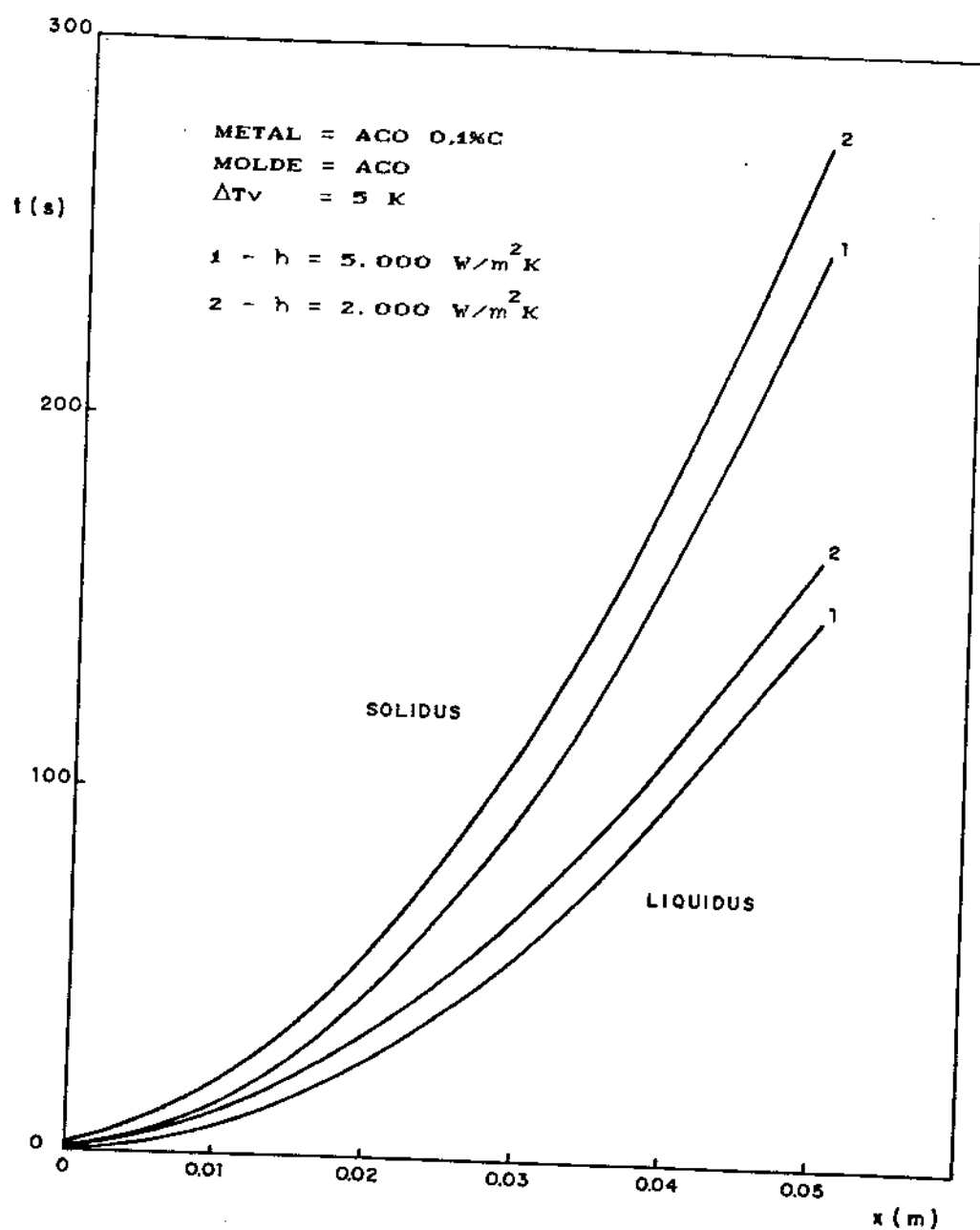


Figura 5.19 - Simulação da influência do coeficiente de transferência de calor na evolução da *solidus* e *liquidus* na solidificação de aço 0,1%C em molde de aço.

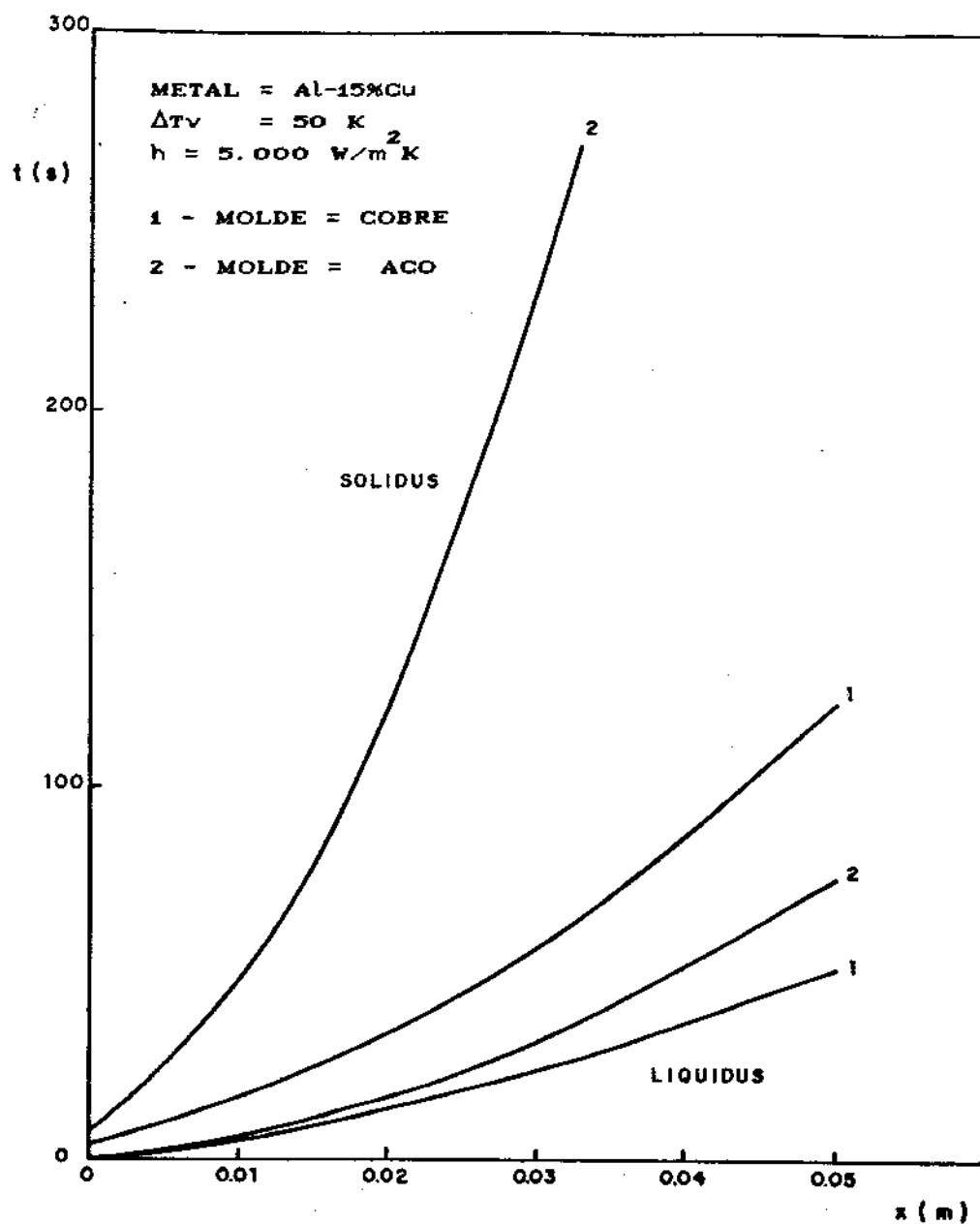


Figura 5.20 - Simulação da influência do molde na evolução da solidus e liquidus na solidificação de liga Al-15%Cu.

condições desta simulação, sua influência é menos marcante que a verificada para a variação do superaquecimento discutido acima.

As figuras 5.17 e 5.20 mostram a influência do molde. É fácil notar que, das condições apresentadas, o molde é o fator que maior influência exerce sobre a cinética de solidificação e, principalmente sobre os perfis de temperatura no molde e no metal, durante a solidificação.

A análise da condição semi-infinita do molde, existente na concepção do modelo, pode ser visualizada facilmente através da figura 5.17., podendo-se concluir que há maior confiabilidade do modelo quanto à distribuição de temperaturas no molde, para se avaliar uma situação prática, quando se está mais próximo de ser satisfeita a condição semi-infinita. O mesmo procedimento é válido para a análise da mesma condição, existente para o lado do metal em solidificação.

5.2 - MODELO DE SEGREGAÇÃO

Até o presente não se tem conhecimento de modelos que permitam, de uma maneira simples e rápida, analisar separadamente e de forma quantitativa as influências de variáveis de processo sobre o fenômeno da segregação.

Esta capacidade de análise é dada pelo modelo proposto, isto é, uma visão analítica do fenômeno da macrossegregação inversa.

Flemings-Nereo apresentaram a formulação e o desenvolvimento matemático para obtenção da chamada Equação de Redistribuição de Sóluto Local^[5-7].

Por se tratar de um modelo analítico, ao se introduzir os dados térmicos da solidificação, estes foram considerados de forma simplificada para possibilitar a resolução de modo analítico.

Por exemplo, em seu trabalho, a cinética de solidificação é considerada simplificada por expressões do tipo:

$$S_L = n_L t^b + a_L \quad (1)$$

$$S_S = n_S t^b + a_S \quad (2)$$

onde S_L e S_S são as posições das isotermas *liquidus* e *solidus* no instante t e n_L , n_S , a_L e a_S são os coeficientes das equações.

Desta forma, seu modelo é muito útil para se analisar situações limites (como solidificação em estado estacionário, resistência de interface metal-molde zero ou infinita, ligas com intervalo de solidificação muito pequenos ou muito grandes, gradientes de temperatura muito baixos no metal solidificando, etc). As situações práticas, porém, tendem a ser intermediárias, fazendo com que seu modelo seja pouco versátil para se avaliar diretamente a influência de variáveis do processo de solidificação, tais como o grau de superaquecimento do metal líquido, a resistência térmica de interface metal-molde, etc, que são mais facilmente mensuráveis. É através dos dois coeficientes, n_i e a_i , das expressões acima, que se pode incorporar todas as condições de processo desejadas. Não há uma formulação direta conhecida entre parâmetros de processo e estes dois coeficientes. Portanto, torna-se difícil sua utilização para simular situações práticas, a menos que se criem tabelas correlacionando estes parâmetros com os de processo, o que poderia ser feito através de um extenso e árduo trabalho experimental.

O modelo desenvolvido pode ser aplicado para se calcular a segregação na superfície coquilhada e ao longo do lingote e possibilita verificar facilmente a influência de várias condições de solidificação, condições estas avaliadas por variáveis de processo, como:

- a) coeficiente de transmissão de calor,
- b) temperatura de vazamento,
- c) material do molde (coquilha),
- d) liga solidificada e sua composição química.

5.2.1. SIMULAÇÕES

A fim de se verificar a possível influência de cada uma destas variáveis, foram realizadas simulações, através do modelo, calculando-se as segregações máxima e inversa sob estas condições de solidificação.

Para isso, escolheu-se, na maioria dos casos, a liga Al-4,5%Cu, de grande aplicação prática, cujos dados para introdução no modelo estão apresentados na tabela abaixo.

Liga Al-Cu

$$C_0 = 4,5\% \text{ Cu}$$

$$k = 0,172$$

$$T_L = 920 \text{ K}$$

$$K_S = 180 \text{ W/m K}$$

$$c_S = 880 \text{ J/kg K}$$

$$\rho_S = 2750 \text{ kg/m}^3$$

$$L_F = 384.000 \text{ J/kg}$$

$$m = 3 \text{ K/(}\%)$$

$$T_S = 821 \text{ K (eutético)}$$

$$K_L = 100 \text{ W/m K}$$

$$c_L = 920 \text{ J/kg K}$$

$$\rho_L = 2650 \text{ kg/m}^3$$

5.2.2 - INFLUÊNCIA DO COEFICIENTE DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR h

As figuras 5.21, 5.22 e 5.23 mostram os resultados das simulações efetuadas variando-se o coeficiente de transferência de calor, h , para solidificação com superaquecimento de 5 K, respectivamente, em molde refrigerado, molde maciço de cobre e molde maciço de aço.

Pode-se notar nas três condições a forte influência que a resistência térmica de interface metal-molde exerce sobre a extensão da segregação inversa desta liga. Observa-se que quanto maior o h , mais rapidamente decai a segregação ao longo do lingote, diminuindo, portanto, a espessura da zona de segregação inversa.

Este resultado confere com o que afirmam Flemings-Nereo^[5] de que ocorre segregação inversa num lingote quando há resistência de interface metal-molde finita e que a espessura da zona segregada aumenta com a resistência térmica crescente. Já a

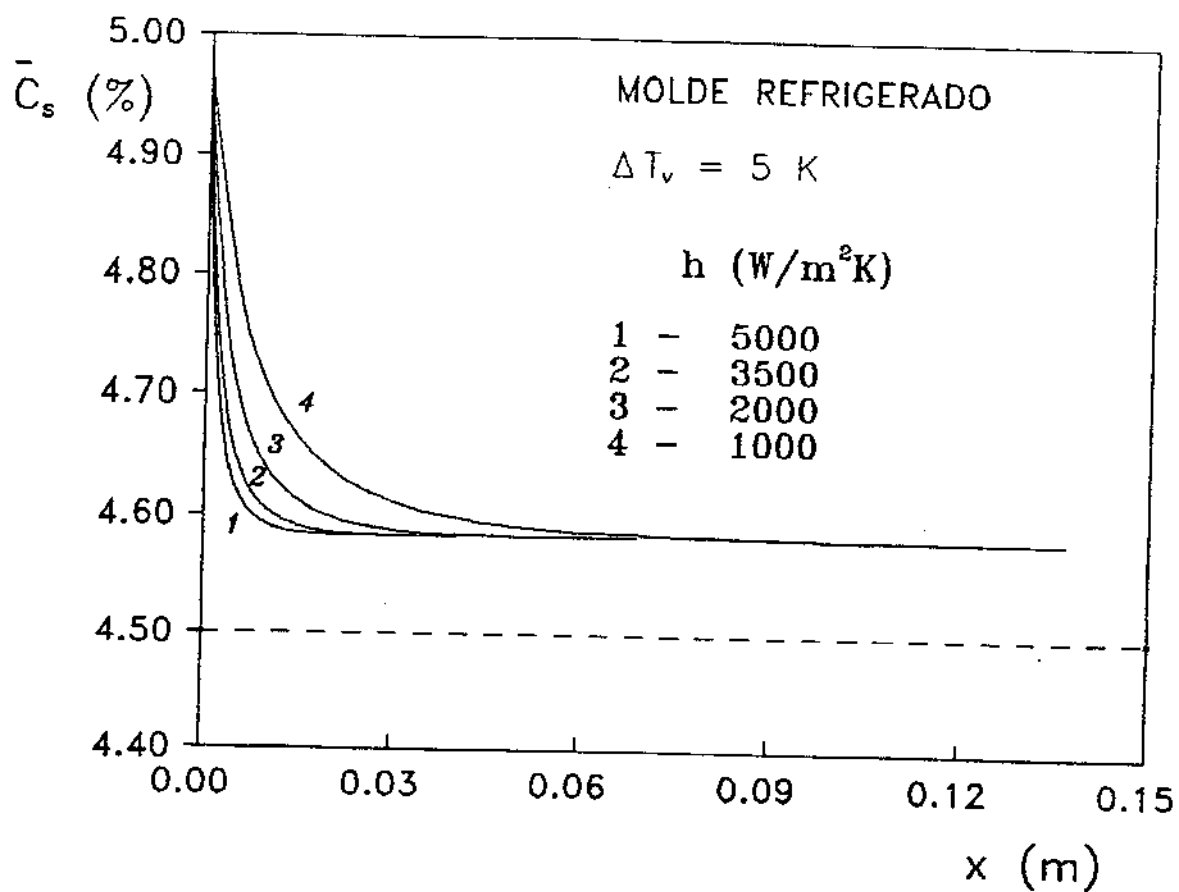


Figura 5.21 - Simulação da influência do coeficiente de transferência de calor metal-molde na segregação inversa de liga Al-4,5%Cu, na solidificação unidirecional em molde refrigerado.

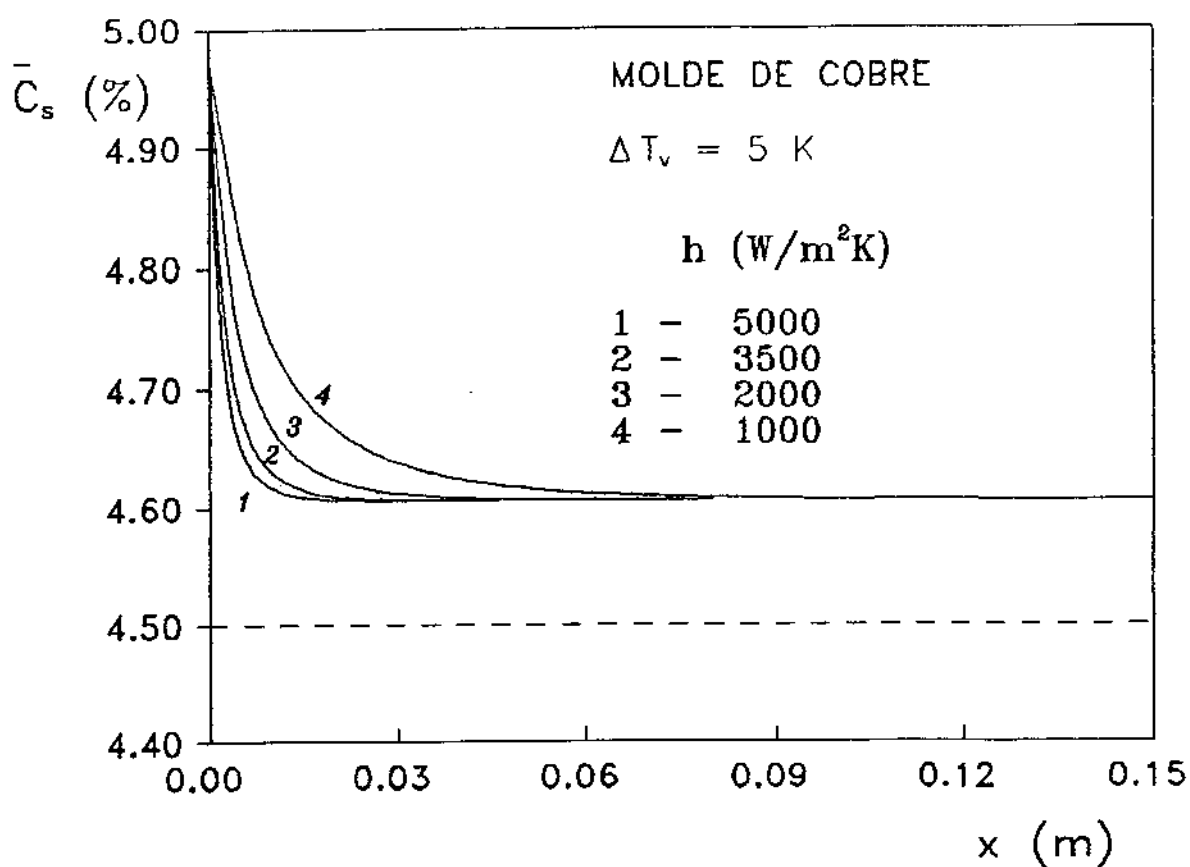


Figura 5.22 - Simulação da influência do coeficiente de transferência de calor metal-molde na segregação inversa de liga Al-4,5%Cu, na solidificação unidirecional em molde maciço de cobre.

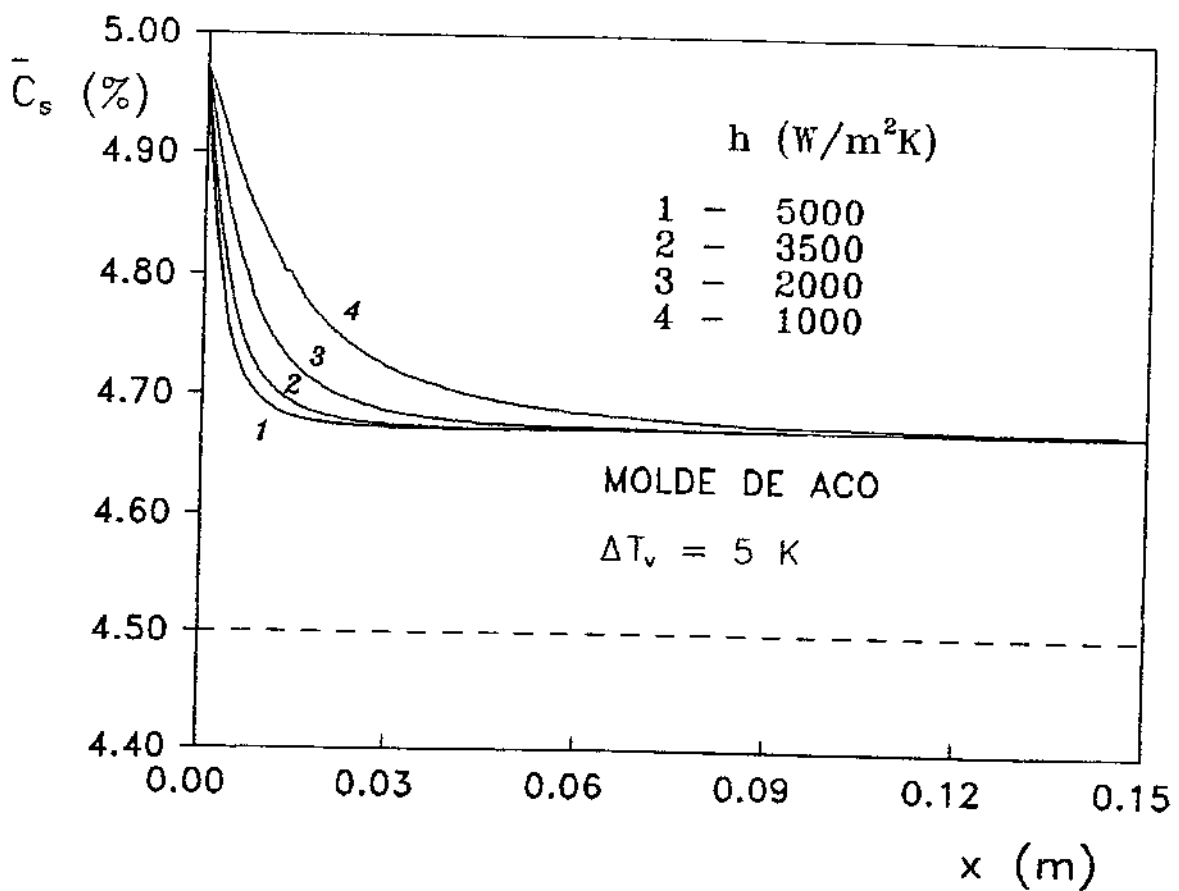


Figura 5.23 - Simulação da influência do coeficiente de transferência de calor metal-molde na segregação inversa de liga Al-4,5%Cu, na solidificação unidirecional em molde maciço de aço.

segregação máxima. Verificação da superrefino coquilhada, não sofre esta influência.

5.2.3 - INFLUENCIA DO SUPERAQUECIMENTO ΔT_v

As figuras 5.24 e 5.25 mostram a influência do superaquecimento na macrossegregação para dois valores diferentes de coeficientes de transferência de calor.

Observa-se que a influência de um maior superaquecimento é semelhante à de um coeficiente de transferência de calor maior, uma vez que quanto maior o superaquecimento, mais rápida é a queda na concentração, diminuindo a extensão da zona segregada para uma região estreita mais próxima da face coquilhada.

Resultado semelhante é apresentado por Minakawa et al.^[39] que afirmam que o comprimento da zona sólido-líquido adjacente à face coquilhada, que está relacionada à extensão da zona segregada, é dependente do superaquecimento. Eles atribuem ao fato de o superaquecimento alterar a espessura do "gap" de ar entre o metal e a coquilha, resultante da contração, que, por sua vez, altera o tamanho da zona sólido-líquido. Eles verificaram que o comprimento da zona segregada aumenta significativamente quando o "gap" de ar aumenta, sendo tanto mais marcante quanto menor o superaquecimento.

Na verdade, a variação do superaquecimento altera o valor de h , pois, o grau de superaquecimento afeta a espessura do "gap" de ar que se forma entre o metal e o molde, alterando a resistência térmica dessa interface. Provavelmente, a razão desta ocorrência deve-se ao maior molhamento entre o metal e o molde que o metal mais superaquecido provoca, melhorando o contato e aumentando o coeficiente de transferência de calor metal-molde.

Há também concordância com o resultado obtido por Prabhakar-Weinberg em ligas Al-10%Cu solidificadas em moldes de cobre e de aço inoxidável, com superaquecimentos variando de 40 a 100 K.

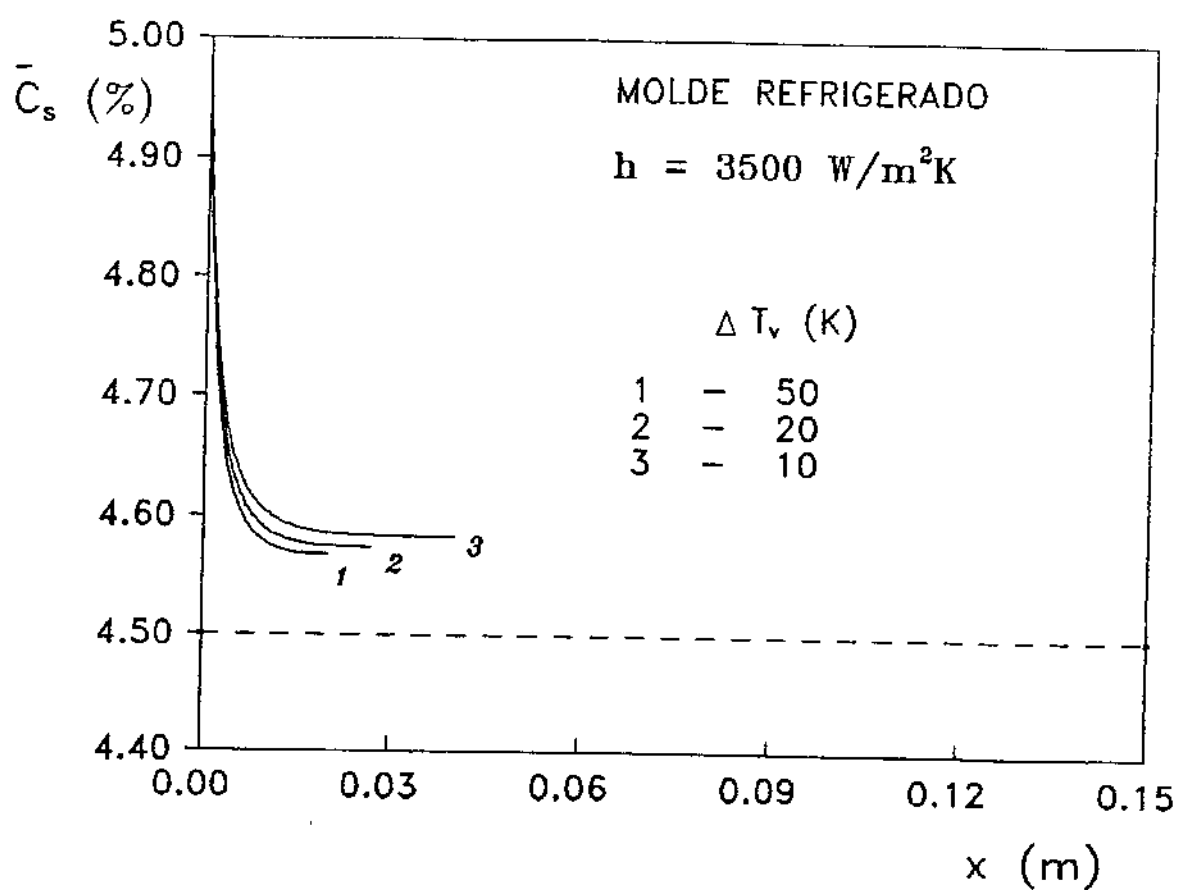


Figura 5.24 - Simulação da influência do superaquecimento na segregação inversa de liga Al-4,5%Cu, na solidificação unidirecional em molde refrigerado com coeficiente de transferência de calor metal-molde de $3500 \text{ W/m}^2\text{K}$.

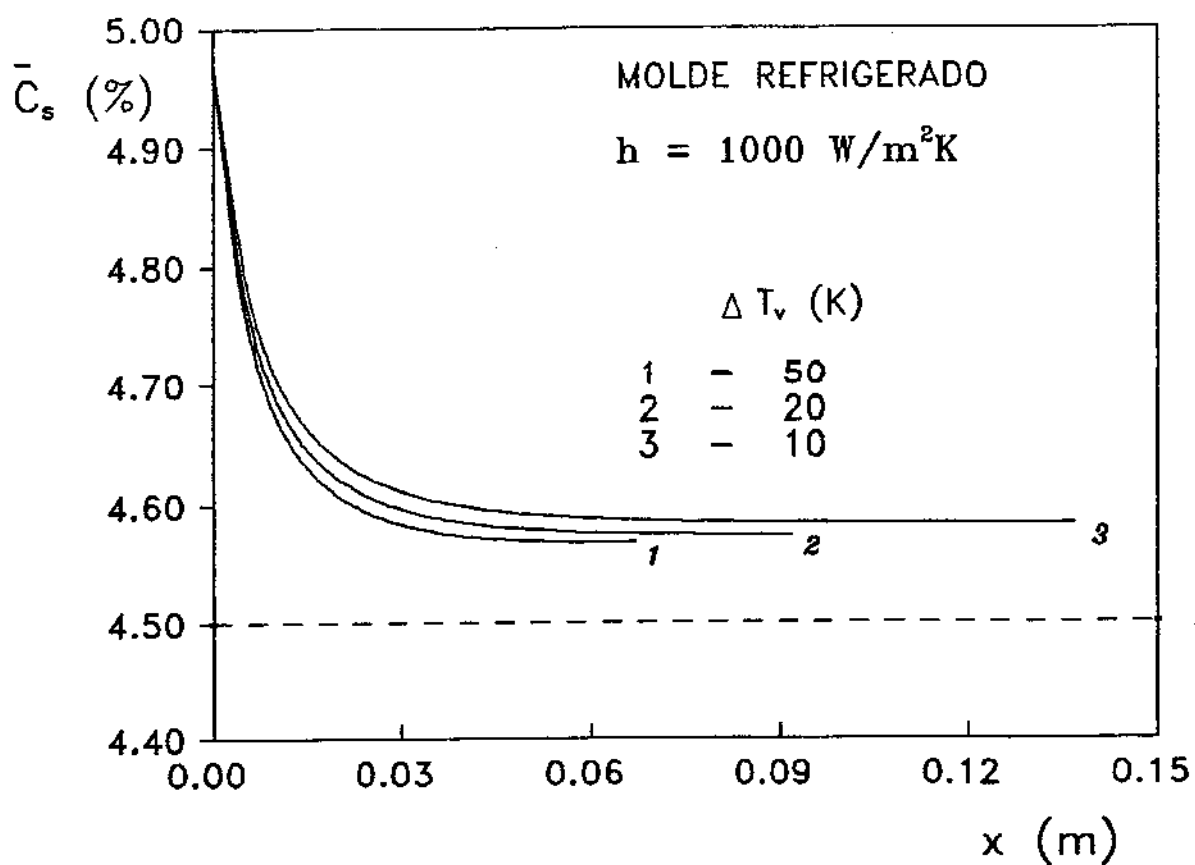


Figura 5.25 - Simulação da influência do superaquecimento na segregação inversa de liga Al-4,5%Cu, na solidificação unidirecional em molde refrigerado com coeficiente de transferência de calor metal-molde de $1000 \text{ W/m}^2\text{K}$.

Pode-se notar, ainda, das figuras 5.24 e 5.25, que a influência do superaquecimento parece ser relativamente menor que a do coeficiente de transferência de calor, h , em condições usuais de solidificação.

5.2.5 - INFLUÊNCIA DO MOLDE

As simulações para avaliar a influência do molde na segregação inversa são mostradas nas figuras 5.26 e 5.27 para dois graus de superaquecimento.

Como pode ser visto, moldes de materiais que apresentam maior difusividade de calor provocam efeito semelhante ao de maior coeficiente de transferência de calor, ou seja, tendem a diminuir a extensão da região mais segregada. A influência do material do molde, entretanto, parece ser mais pronunciada que a de h .

Portanto, é de se esperar que a solidificação em moldes de aço provoque segregação inversa mais intensa e em maior extensão que em moldes de cobre, e, analogamente, a mesma tendência deve acontecer entre os moldes de cobre e os moldes refrigerados.

Este resultado está de acordo com os resultados de Prabhakar-Weinberg⁽³⁸⁾, que verificaram menor segregação em moldes de aço inoxidável que em molde de cobre, para a liga Al-10%Cu. Está também em concordância com as afirmações de Flemings-Nereo⁽⁵⁾. Segundo eles, quando a solidificação ocorre com pequenos gradientes de temperatura (por exemplo, em moldes de areia), seria de se esperar, caso a alimentação de líquido fosse completa, que toda a peça apresentaria concentração substancialmente maior que a nominal, exceto numa pequena zona da última região a solidificar. No entanto, infelizmente, este efeito não é observado devido à alimentação incompleta quando os gradientes térmicos são pequenos.

Outra observação interessante que merece ser comentada é a de que a região segregada positivamente apresenta o patamar, quase paralelo à concentração nominal, em níveis diferentes quando se

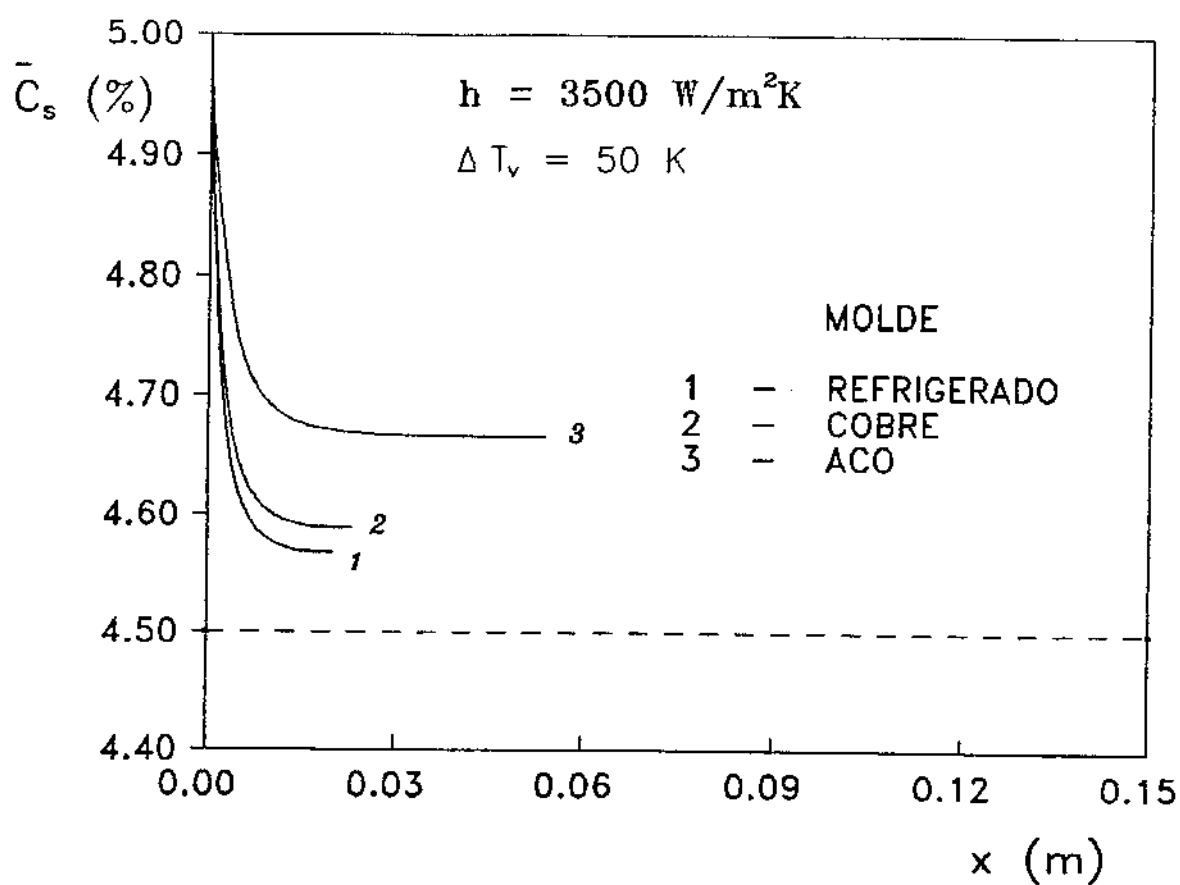


Figura 5.26 - Simulação da influência do molde na segregação inversa de liga Al-4,5%Cu, na solidificação unidirecional com coeficiente de transferência de calor metal-molde de $3500 \text{ W/m}^2\text{K}$ e superaquecimento de 50 K.

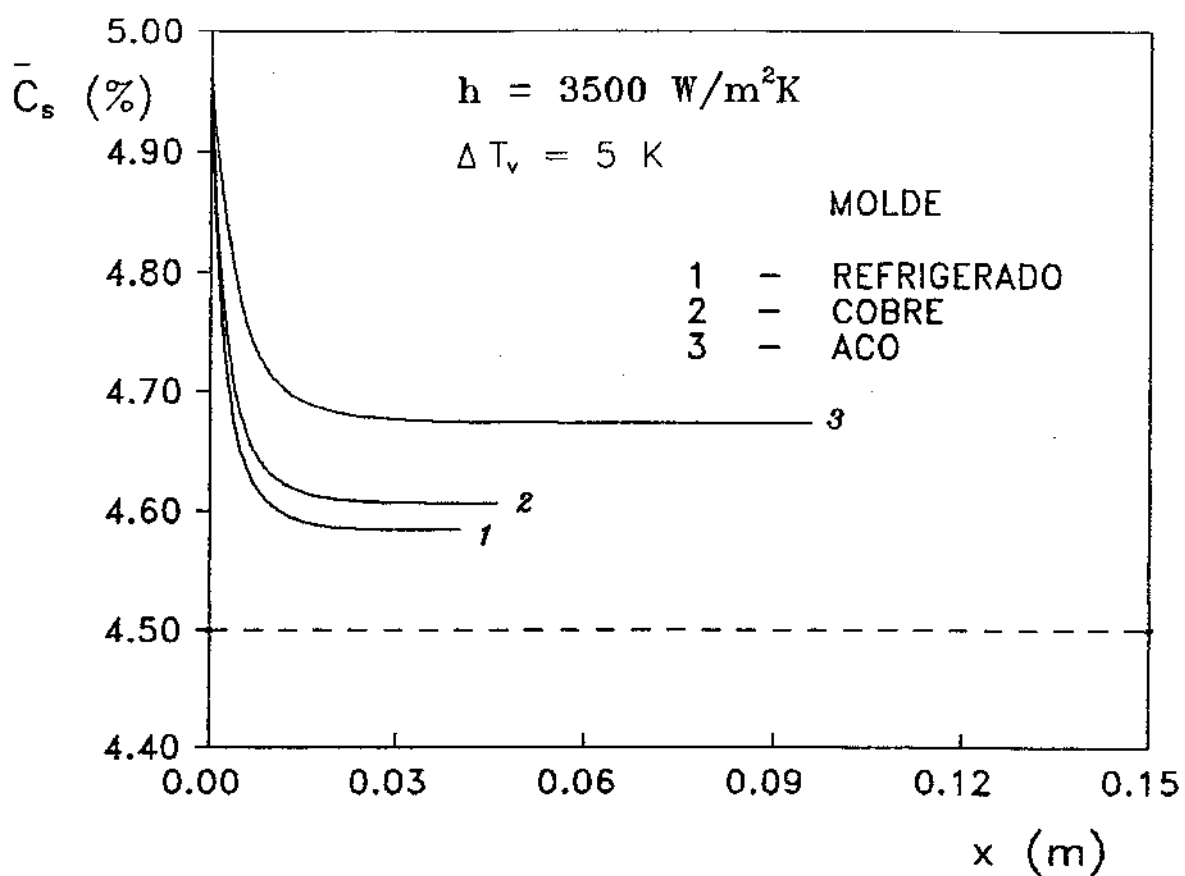


Figura 5.27 - Simulação da influência do molde na segregação inversa de liga Al-4,5%Cu, na solidificação unidirecional com coeficiente de transferência de calor metal-molde de $3500 \text{ W/m}^2\text{K}$ e superaquecimento de 5 K.

varia o superaquecimento ou o tipo de molde, mas o mesmo não ocorre quando se varia o coeficiente de transferência de calor, como pode ser visto nas figuras 5.21, 5.22, 5.23, 5.24, 5.25 e 5.26 e 5.27.

5.2.6 - CONDIÇÕES PARA SE MINIMIZAR A SEGREGAÇÃO INVERSA

Considerando-se as análises feitas nos itens anteriores, algumas previsões podem ser feitas quanto ao resultado esperado para a extensão da zona de segregação inversa, na solidificação de uma peça que se desejasse produzir.

Assim, para se minimizar a macrossegregação inversa, é importante que o molde possua elevada capacidade de extração de calor. A condição de sua superfície que ficaria em contato com a peça também exerce significativa influência, sendo que a redução de sua rugosidade, favorecendo um melhor contato, deve apresentar melhores resultados. Finalmente, a fundição com maior grau de superaquecimento deve proporcionar menor extensão da região segregada.

5.2.7. COMPARAÇÕES COM RESULTADOS DA LITERATURA

Deve ser lembrado, mais uma vez, que a literatura não dispõe de grande quantidade de trabalhos que apresentem resultados experimentais ou de modelos teóricos que permitam uma melhor avaliação, sob o ponto de vista quantitativo, das simulações e análises feitas no presente trabalho. No entanto, como primeira avaliação, podemos nos basear nos escassos resultados experimentais e de modelos até o presente disponíveis e comparar com o modelo proposto.

A fim de verificar a validade e precisão do modelo desenvolvido, fez-se a simulação sob uma condição de solidificação

apresentada na literatura em alguns trabalhos, que contém tanto resultados experimentais como resultados calculados através de outros modelos de três autores diferentes, o que possibilita uma comparação.

Os dados experimentais foram retirados de uma publicação recente efetuada por Kato-Cahoon^[35], cuja condição térmica de solidificação é mostrada na figura 5.28.

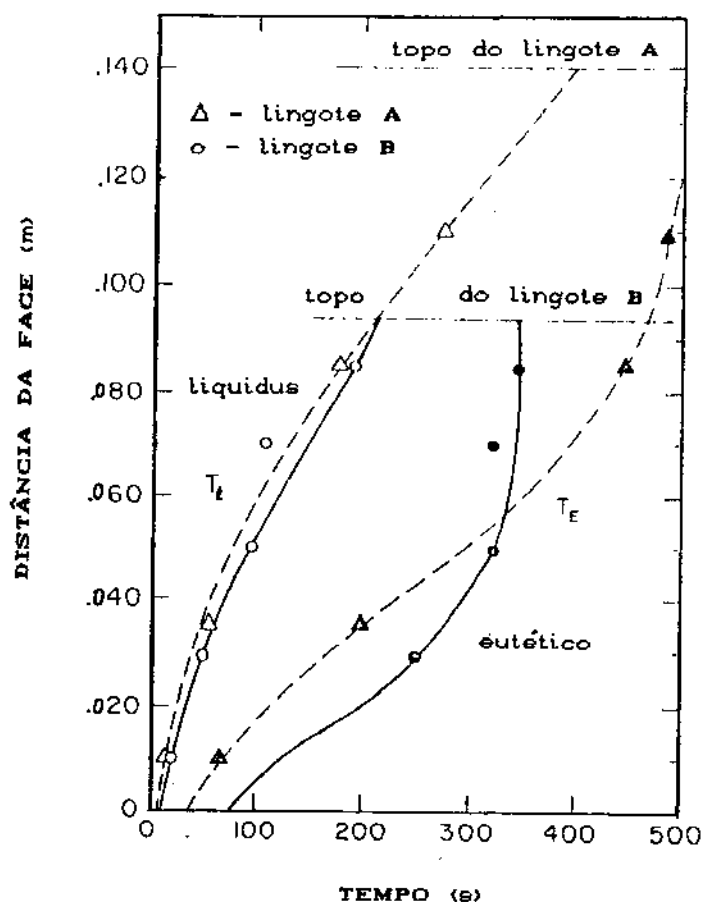


Figura 5.28 - Curvas de evolução das isothermas *solidus* (eutético) e *liquidus* de dois lingotes de liga Al-4,1%Cu, solidificada em molde refrigerado, obtidas por Kato-Cahoon^[35].

Ohnaka-Matsumoto⁽⁴⁰⁾ trabalharam esses dados e calcularam o coeficiente de transferência de calor correspondente, encontrando o valor de $837 \text{ W/m}^2\text{K}$. Este dado mais aqueles apresentados no trabalho de Kato-Cahoon foram introduzidos em seu modelo para o cálculo da segregação. A solidificação da liga, neste caso, deu-se em molde refrigerado.

Utilizando este mesmo procedimento, fez-se a simulação com o modelo proposto, a fim de possibilitar a comparação.

O resultado da simulação está mostrado na figura 5.29, juntamente com os valores medidos e calculados dos trabalhos anteriores.

Nota-se boa concordância dos resultados obtidos através do modelo proposto com os valores obtidos por Ohnaka-Matsumoto^(40,41) e os resultados de medidas experimentais e calculados por Kato-Cahoon⁽³⁵⁾. Os valores calculados por Kato-Cahoon foram obtidos pela utilização do modelo de Kirkaldy-Youdelis⁽³²⁾.

Deve ser lembrado que estes resultados animadores deram-se para uma condição de solidificação que, sabidamente é a que propicia melhor precisão para o modelo proposto, como já analisado nos itens anteriores.

Portanto, para uma melhor conclusão de sua precisão e do alcance de sua utilização, há ainda a necessidade de maior número de trabalhos com resultados quantitativos confiáveis, experimentais ou de modelos. Além da análise, este maior número de dados permitirá ajustes ou possíveis correções no modelo desenvolvido.

Entretanto, o modelo apresentado sempre poderá ser utilizado para se avaliar, ao menos qualitativamente, como os parâmetros de processo influem na solidificação e, conseqüentemente, seu comportamento no fenômeno da macrossegregação inversa.

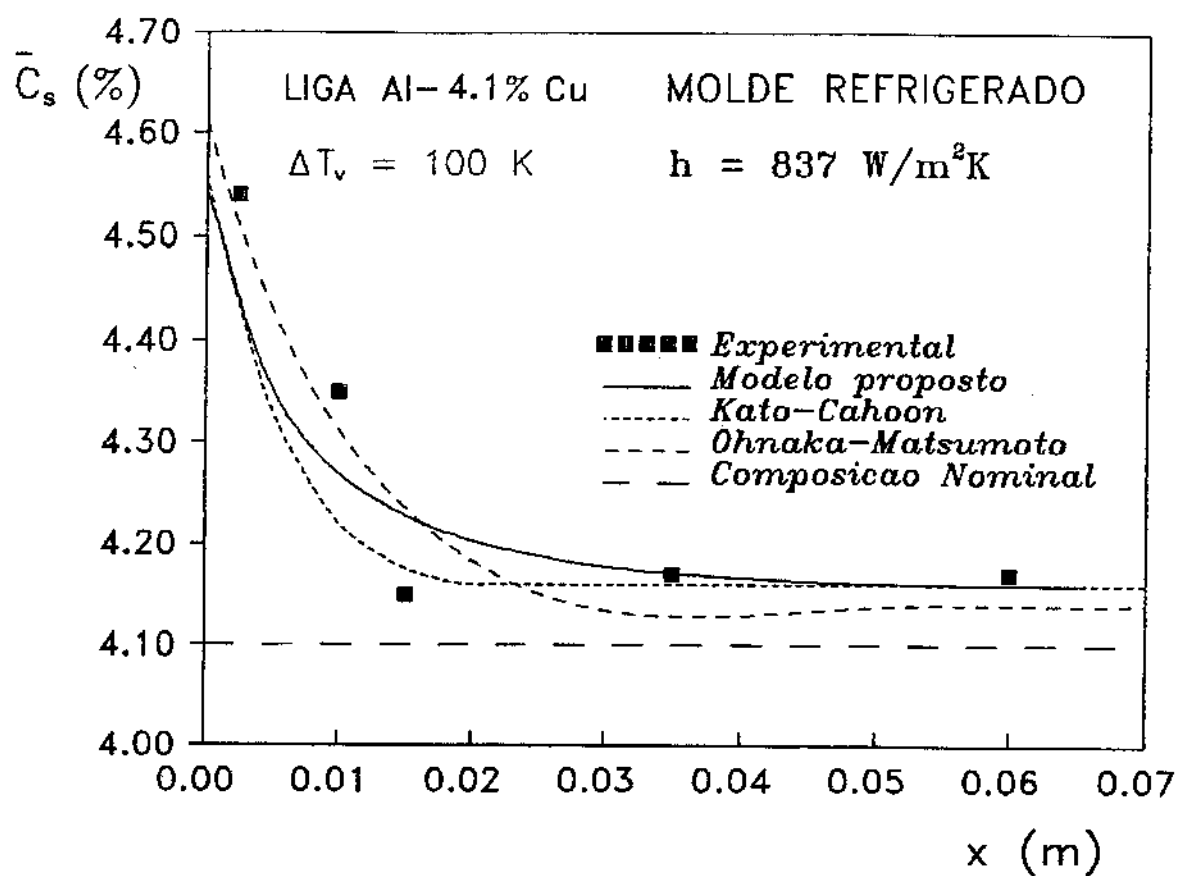


Figura 5.29 - Comparação dos resultados do modelo proposto com outros resultados teóricos e experimentais da literatura.

6.- CONCLUSÕES

Os resultados obtidos, decorrentes do desenvolvimento de um modelo analítico de solidificação e sua inserção na modificação de um modelo de segregação, permitem que sejam extraídas as seguintes conclusões:

- 6.1 - O modelo de solidificação desenvolvido permite analisar o comportamento térmico de ligas durante a solidificação em moldes maciços, sendo o molde refrigerado uma mera condição particular do modelo.
- 6.2 - O confronto das expectativas teóricas do modelo de solidificação com os resultados obtidos através de um modelo numérico de diferenças finitas mostra que a precisão do modelo é dependente da natureza térmica da liga (modo de liberação do calor latente e difusividade térmica) e da difusividade de calor do molde.
- 6.3 - Para as ligas analisadas no presente trabalho, o modelo revelou-se confiável para todas as condições de solidificação de aço verificadas, enquanto para as ligas do sistema alumínio-cobre a análise teórica do modelo perde precisão à medida que se diminui a difusividade de calor do molde.
- 6.4 - A modificação do modelo de macrossegregação inversa, conforme introduzida neste trabalho, permite a análise simples e rápida e de forma quantitativa da influência de cada variável do processo de solidificação sobre o perfil de segregação.
- 6.5 - As simulações realizadas com o modelo de segregação mostram que a extensão da zona de segregação inversa diminui à medida que se aumentam os valores do

coeficiente de transferência de calor metal-molde, do superaquecimento e da difusividade de calor do molde, sugerindo caminhos para sua minimização.

6.6 - A comparação da previsão teórica do perfil de macrossegregação inversa de acordo com o modelo proposto com resultados experimentais e de outros modelos da literatura mostra uma concordância muito boa para a situação analisada.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. MATSUMIYA, T. et al - Mathematical analysis of segregations in CC slabs. TRANS.ISIJ, V.24, 873-882, 1984.
2. ROOZ, A. et al. - Numerical analysis of solid and liquid diffusion in microsegregation of binary alloys. MATER.SCI.TECH., V.1, dec 1985, 1057-1062.
3. ROOZ, A. et al - Numerical calculation of microsegregation in coarsened dendritic microstructures. MATER.SCI.TECH., V.2, nov 1986, 1149-1155.
4. HALDER, E. et al - Numerical calculation of the concentration distribution of binary alloys allowing for dendrite arm coarsening. IN: STATE OF THE ART OF COMPUTER SIMULATION OF CASTING AND SOLIDIFICATION PROCESSES, june 17-20th 1986, Strasbourg, France, European Materials Research Society, 109-118.
5. FLEMINGS, M.C.-NERED, G.E. - Macrosegregation: Part I. TRANS.AIME, V.239, Sep 1967, 1447-1461.
6. FLEMINGS, M.C. et al - Macrosegregation: Part II. TRANS.AIME, V.242, Jan 1968, 41-49.
7. FLEMINGS, M.C.-NERED, G.E. - Macrosegregation: Part III. TRANS.AIME, V.242, Jan 1968, 50-55.
8. SCHEIL, E. - Z.METALLKD, V.34, p.70, 1942.
9. BRODY, H.D.-FLEMINGS, M.C. - Solute redistribution in dendritic solidification. TRANS.AIME, V.236, may 1966, 615-624.
10. BOWER, T.F. et al - Measurements of solute redistribution in dendritic solidification. TRANS.AIME, V.236, 624-634, MAY 1966.
11. CLYNE, T.W.-KURZ, W. - Solute redistribution during solidification with rapid solid state diffusion. METALL.TRANS., 12A, 965-971, jun 1981.
12. OHNAKA, I. - Mathematical analysis of solute redistribution during solidification with diffusion in solid phase. TRANS.ISIJ, 26, 1045-1051, 1986.
13. KOBAYASHI, S. - Solute redistribution during solidification with diffusion in solid phase: A theoretical analysis. J.CRYSTAL GROWTH, 88 (1), 87-96, apr 1988
14. KOBAYASHI, S. - Mathematical analysis of solute redistribution during dendritic solidification. TRANS.ISIJ, V.28, jul 1988, 535-542.

15. KOBAYASHI, S. - Mathematical analysis of solute redistribution during solidification based on a columnar dendrite model. TRANS.ISIJ, V.28, sep 1988, 728-735.
16. KOBAYASHI, S. et al - Mathematical analysis of solidification process with consideration on solute redistribution. TRANS.ISIJ, V.28, mar 1988, 214-217.
17. KOBAYASHI, S. et al - Numerical analysis of solute redistribution during solidification accompanying δ/γ transformation. TRANS.ISIJ, V.28, jul 1988, 543-552.
18. CORNELISSEN, M.C.M. - Mathematical model for solidification of multicomponent alloys. IRONMAKING AND STEELMAKING, V.13, N.4, 204-212.
19. FUJIMURA, T.-BRIMACOMBE, J.K. - Mathematical analysis of solidification behaviour of multicomponent alloys. TRANS.ISIJ, v.26, 1986, 532-539.
20. LEE, C.F. - On the solution of concentration distributions in some binary alloy systems. ACTA METAL., V.19, 1971, 415-420.
21. KANETIKAR, C.S. et al - A latent heat method for macro-micro modeling of eutectic solidification. TRANS.ISIJ, V.28, 1988, p.860-868.
22. KATTAMIS, T.Z.-FLEMINGS, M.C. - Dendrite morphology, micro-segregation and homogenization of low alloy steel. TRANS.AIME, V.233, may 1965, 992-999.
23. KIRKWOOD, D.H.-EVANS, D.J. - Calculations on microsegregation in binary alloys. 108-111.
24. MELFORD, D.A.-GRANGER, D.A. - Relationship between microsegregation and macrostructures in killed steel ingots. 289-294.
25. ASAI, S.-MUCHI, I. - Analytic expression of effective distribution coefficient in dendritic solidification. TRANS.ISIJ, V.19, 1979, 529-536.
26. FLEMINGS, M.C. - Principles of control of soundness and homogeneity of large ingots. SCAND.J.METAL., V.5, 1976, 1-15.
27. OLSSON, A. et al - Macrosegregation in ingots. SCAND.J.METAL., V.15, 1986, 104-112.
28. PESCH, R.-ETIENNE, A. - Structures and defects in rolling ingots. In: CASTING AND SOLIDIFICATION OF STEEL, Commission of European Communities, Luxembourg, 29nov-01dec 1977, V.1, p.169.
29. NOMURA, H. et al - Macrosegregation caused by interdendritic liquid flow during solidification of iron alloys. TRANS.ISIJ, V.22, 1982, 269-276.

30. HASHIZUME, B.R. - Macrosegregação em lingotes de aço acalmado. TESE DE MESTRADO, Belo Horizonte, UFHB, 1980. 230p.
31. ADAMS, D.E. - J. INST. METALS, V.75, p.809, 1948.
32. KIRKALDY, J.S. - YOUDELIS, W.V. - Contribution to the theory of inverse segregation. TRANS. AIME, V.212, dec 1958, 833-840.
33. YOUDELIS, W.V. - COLTON, D.R. - Inverse segregation in Al-Zn alloys. TRANS. AIME, V.218, aug 1960, 628-631.
34. CAHOON, J.R. - YOUDELIS, W.V. - A computer analysis of inverse segregation. TRANS. AIME, V.230, dec 1964, 1734.
35. KATO, H. - CAHOON, J.R. - Inverse segregation in directionally solidified Al-Cu-Ti alloys with equiaxed grains. METAL. TRANS., V.16A, apr 1985, 579-587.
36. NAKANAO, K et al - IMONO (J. JAPAN FOUNDRYMEN'S SOCIETY), V.45, p.954-961, 1973. Apud KATO, H. - CAHOON, J.R. - ibid.
37. MOTEKI, T. - OHNO, A - TRANS. JAP. INST. METALS, V.25, p.122-132. Apud KATO, H. - CAHOON, J.R. - ibid. 37. MOTEKI, T. - OHNO, A.
38. PRABHAKAR, B. - WEINBERG, F. - Inverse segregation in Al-10pctCu. MET. TRANS., V.9B, p.150-151, mar 1978.
39. MINAKAWA, S. et al - Inverse segregation. METAL. TRANS., V.16B, sep 1985, 595-603.
40. OHNAKA, I. - MATSUMOTO, M. - Computer simulation of macrosegregation in ingots. TETSU TO HAGANE, V.14, p.1698-1705, 1987.
41. OHNAKA, I. - Microsegregation and macrosegregation. In: METALS HANDBOOK, V.15, 9ed., 1987, p.136-141.
42. SUZUKI, K. - MIYAMOTO, T. - On the formation of the V segregation in steel ingot. TRANS. ISIJ, V.14, 1974, 296-305.
43. SUZUKI, K. - MIYAMOTO, T. - Study on the formation of A segregation in steel ingot. TRANS. ISIJ, V.18, 1978, 80-89.
44. SUZUKI, K. - MIYAMOTO, T. - Influence of alloying elements on the formation of the A segregates in steel ingot. TRANS. ISIJ, V.20, 1980, 375-383.
45. SUZUKI, K. - TANIGUCHI, K. - The mechanism of reducing A segregates in steel ingots. TRANS. ISIJ, V.21, 1981, 235-242.
46. TAKAHASHI, T. et al - The effect of fluid flow on the macrosegregation in steel ingot. TRANS. ISIJ, V.16, 1976, 283-291.
47. ASAI, S. et al - Theoretical analysis and model study on the structure of A-type segregation. TRANS. ISIJ, V.22, 1982, 190-197.

48. TAKAHASHI et al - Significance of the solidifying zone on the ingot solidification. TRANS.ISIJ, V.12, 1977, 412-421.
49. ASAI,S.-MUCHI,I. - Theoretical analysis and model experiments on the formation mechanism of channel type segregation. TRANS.ISIJ, V.18, 1978, 90-98.
50. OHNAKA,I.-FUKUSAKO,T. - Solidification analysis of steel ingots with consideration on fluid flow. TRANS.ISIJ, V.21, 1981, 485-494.
51. VOLLER,V.R. et al - Modification of mathematical analysis and related physical descriptions used to describe channel segregation. METAL TECHNOLOGY, V.10, Mar 1983, 81-84.
52. MOORE,J.J. et al - The control of channel segregation in cast steel: a review. AFS TRANS., 1983, 297-302.
53. MOORE,J.J.-SHAH,N.A. - Mechanism of formation of A and V segregation in cast steel. INT.MET.REVIEWS, V.28, N.6, 1983, 338-356.
54. ZENGYONG,Z.-OETERS,F. - Macrosegregation in ternary systems. STEEL RESEARCH, V.56, N.7, 1985, 359-364.
55. MEHRABIAN,R. et al - Interdendritic fluid flow and macrosegregation: influence of gravity. METAL.TRANS., V. 1, May 1970, 1209-1220.
56. MEHRABIAN,R.-FLEMINGS,M.C. - Macrosegregation in ternary alloys. METAL.TRANS.,V.1, Feb 1970, 455-464.
57. FUJII,T.-POIRIER,D.R.-FLEMINGS,M.C. - Macrosegregation in a multicomponent low alloy steel. MET.TRANS., V.10B, sep 1979, p.331-339.
58. ENGSTROM,G. et al - On the mechanism of macrosegregation formation in continuously cast steels. SCAND.J.METAL., V.12, 1983, 3-12.
59. IRVING,W.R. et al - Effect of chemical, operational and engineering factors on segregation in continuously cast slabs. IRONMAKING & STEELMAKING, V.11, N.3, 1984, 152-162.
60. SCHMIDT,L.-FREDRIKSSON,H. - Formation of macrosegregation and centreline cracks in continuously cast steel. IRONMAKING & STEELMAKING, N.1, 1975, 61-67.
61. HASHIO,M. et al - Improvement of centerline segregation in continuously cast slabs. In: Kashima Steel Works, Sumitomo Metal Industries, Apr. 1987, 1-19.
62. TSUCHIDA,Y. et al - Behaviour of semi-macroscopic segregation in continuously cast slabs and technique for reducing the segregation. TRANS.ISIJ, V.24, 1984, 899-906.

63. HAIDA, D. et al - Macro and semi-macroscopic features of the centerline segregation in CC slabs and their effect on product quality. TRANS.ISIJ, V.24, 1984, 891-898.
64. MORI, H. et al - Macrostructure of and segregation in continuously cast carbon steel billets. TRANS.ISIJ, V.12, 1972, 102-111.
65. OHASHI, T. et al - A study on solidification, segregation and fluid flow of molten steel in continuously cast slabs. TRANS.ISIJ, V.15, 1975, 571-579.
66. TOMONO, M. et al. Mechanism of formation of V-shaped segregation in the large section continuous cast bloom. TRANS.ISIJ, V.24, 1984, 917-922.
67. WEINBERG, F. et al - Segregation at halfway cracks in continuously cast steel. METAL.TRANS., V.10A, dec 1979, 1923-1928.
68. FUJII, H. et al - On the formation of internal cracks in CC slabs. TRANS.ISIJ, V.18, 1978, 510-518.
69. KAWAKAMI et al - Fundamental research on solidification involved in CC of steel. NIPPON KOKAN TECH. REPORT, N.36, 1982, p.26-41.
70. FUJII, H. et al. - Fundamental phenomena of continuous casting. NIPPON STEEL TECH.REPORT, N.13, jun 1979, p.48-61.
71. ASAI, S.-SZEKELY, J. - Turbulent flow and its effects in continuous casting. IRONMAKING & STEELMAKING, N.3, 1975, 205-213.
72. RUER, J. et al - A numerical approach of the segregation phenomena and electromagnetic stirring in continuous casting. p.875-882.
73. SHAH, N.A.-MOORE, J.J. - Factors influencing macrosegregation in continuously cast 0.8 C low alloy steel: effect of thermal conditions. p.791-810.
74. SUZUKI, K. et al - Hot model experiments on electromagnetic stirring at about crater end of CC bloom. TRANS>ISIJ, V.24, 1984, p.946-949.
75. AYATA, K. et al - Improvement of macrosegregation in continuously cast bloom and billet by electromagnetic stirring. TRANS.ISIJ, V.24, 1984, 931-939.
76. BIRAT, J.P.-CHONE, J. - Electromagnetic stirring on billet, bloom and slab continuous casters: state of the art in 1982. IRONMAKING & STEELMAKING, V.10, N.6, 1983, 269-281.
77. BRIDGE, M.R.-ROGERS, G.D. - Structural effects and band segregate formation during the electromagnetic stirring of strand cast steel. METAL.TRANS., V.15B, sep 1984, 581-589.

78. MIZUKAMI, H. et al - Effect of electromagnetic stirring at the final stage of solidification of continuously cast strand. TRANS.ISIJ, V.24, 1984, 923-930.
79. NURI, Y. et al - Solidification microstructure of ingots and continuously cast slabs treated with rare earth metal. TRANS.ISIJ, V.22, 1982, 399-407.
80. NURI, Y. et al - Solidification macrostructure of ingots and continuously cast slabs treated with rare earth metal. TRANS.ISIJ, V.22, 1982, 408-416.
81. FREDRIKSSON, H.-OLSSON, A. - Mechanism of transition from columnar to equiaxed zone in ingots. MAT.SCI.TECHN., V.2, may 1986, 508-516.
82. WITZKE, S.-RIQUET, P. - Columnar-equiaxed transition in Al-Cu alloy ingots. ACTA METAL., V.30, 1982, 1717-1722.
83. FLOOD, S.C.-HUNT, J.D. - Columnar to equiaxed transition. In: METALS HANDBOOK, V.15, 9ed., 1987, p.130-135.
84. SAEKI, T. et al - Effect of bulging and solidification structure on segregation in CC slab. TRANS.ISIJ, V.24, 1984, 907-916.
85. TACKE, K. et al - Macrosegregation in strand cast steel: computation profiles with a diffusion model. ARCH.EISENHUT., V.52, N.1, Jan 1981, 15-20.
86. MIYAZAWA, K.-SCHWERDTFEGGER, K. - Macrosegregation in continuously cast steel slabs: preliminary theoretical investigation on the effect of steady state bulging. ARCH.EISENHUT., V.52, N.11, Nov 1981, 415-422.
87. GARCIA, A.-PRATES, M. - Mathematical model for the unidirectional solidification of metals: cooled molds. METAL.TRANS., V.9B, sep 1978, 449-453.
88. GARCIA, A. et al - Mathematic analysis of thermal behaviour of metal/mold systems during unidirectional solidification. In: SOLIDIFICATION TECHNOLOGY IN THE FOUNDRY AND CASTHOUSE, London, 1983, 27-32.
89. GARCIA et al - Mathematical model for the unidirectional solidification of metals II: massive molds. MET.TRANS., V.10B, mar 1979, p.85-92.
90. GARCIA, A.-PRATES, M. - The application of a mathematical model to analyze ingot thermal behaviour during continuous casting. In: AUTOMATION IN MINING, MINERAL AND METAL PROCESSING. Proceedings of the 4th IFAC Symposium. Helsinki Finland, 22-25 aug 1983, 273-279.
91. GARCIA, A. - Desenvolvimento e verificação experimental de um modelo matemático para análise da solidificação unidirecional de metais. TESE DE DOUTORADO, Unicamp, 1978.

92. GARCIA, A. - Mathematical heat transfer model for the analysis of solidification of binary alloys. In: Multi-phase flow AND HEAT TRANSFER III - PART B: APPLICATIONS. Amsterdam, 1984, 591-603.
93. CLYNE, T.W.-GARCIA, A. - Application of a new mathematical heat transfer model in static and continuous casting of steels. In: CONTINUOUS CASTING OF SMALL CROSS SECTIONS. Pittsburgh, 8th oct 1980, 17-32.
94. GARCIA, A. - Transferência de calor e solidificação no processo de lingotamento contínuo. TESE DE LIVRE DOCÊNCIA, Unicamp, 1981.
95. CLYNE, T.W.-GARCIA, A. - Assessment of a new model for heat flow during unidirectional solidification of metals. INT.J.HEAT MASS TRANSFER, V.23, 1980, 773-782.
96. LIPTON, J.-GARCIA, A.-HEINEMANN, W. - An analytical solution of directional solidification with mushy zone. ARCH.EISENHUT., V.53, N.12, dec 1982, 469-473.
97. CLYNE, T.W. - Numerical modelling of directional solidification of metallic alloys. METAL SCIENCE, V.16, sep 1982, 441-450.
98. CLYNE, T.W. - The use of heat flow modelling to explore solidification phenomena. METAL.TRANS., V.13B, sep 1982, 471-478.
99. BRIMACOMBE, J.K. - Design of continuous casting machines based on a heat flow analysis: state of the art review. CANADIAN METALLURGICAL QUARTERLY, V.15, N.2, 1976, 163-175.
100. SARJANT, R.J.-SLACK, M.R. - Internal temperature distribution in the cooling and reheating of steel ingots. JISI, aug 1984, 428-444.
101. DAVIES, G.J. et al - Heat transfer models and their application to continuous casting.
102. ROGBERG, B. - Testing and application of a computer program for simulating the solidification process of a continuously cast strand. SCAND.J.METAL., V.12, 1983, 13-21.
103. MIZIKAR, E.A. - Mathematical heat transfer model for solidification of continuously cast steel slabs. TRANS.AIME, V.239, nov 1967, 1747-1753.
104. IERARDI, M.C. et al - Modelamento matemático da solidificação no processo de lingotamento contínuo. METALURGIA-ABM, V.42, N.345, ago 1986, 521-524.
105. SAMARASEKERA, I.V.-BRIMACOMBE, J.K. - The thermal field in continuous casting molds. CAN.METAL.QUART., V.18, 1979, 251-266.
106. WOLF, M.M. - Investigation into the relationship between heat flux and shell growth in continuous casting moulds. TRAANS.ISIJ, V.20, 1980, 710-717.

107. WOLF, M.M. - A review of published work on the solidification control of steel in continuous casting moulds by heat flux measurements. TRANS. ISIJ, V.20, 1980, 718-724.
108. RUDDLE, R.W. - THE SOLIDIFICATION OF CASTINGS, 2ed, 1957, The Institute of Metals, London, 72-120.
109. PHAM, Q.T. - A fast unconditionally stable finite difference scheme for heat conduction with phase change. INT. J. HEAT MASS TRANSFER, V.28, N.11, 1985, 2079-2084.
109. VOLLER, V.-CROSS, M. - An explicit numerical method to track a moving phase change front. INT. J. HEAT MASS TRANSFER, V.26, N.1, 1983, 147-150.
110. PHAM, Q.T. - A note on some finite-difference methods for heat conduction with phase change. NUM. HEAT TRANSFER, V.11, 1987, 353-359.
111. SPARROW, E.M.-CHUCK, W. - An implicit/explicit numerical solution scheme for phase change problems. NUM. HEAT TRANSFER, V.7, 1984, 1-15.
112. CROWLEY, A.B.-OCKENDON, J.R. - On the numerical solution of an alloy solidification problem. INT. J. HEAT MASS TRANSFER, V.22, 1979, 941-947.
113. CHAN, S.H. et al - Melting and solidification with internal radiative transfer: a generalized phase change model. INT. JOURNAL HEAT MASS TRANSFER, V.26, N.4, 1983, 621-633.
114. THIBAUT, J. - Comparison of nine three-dimensional numerical methods for the solution of the heat diffusion equation. NUM. HEAT TRANSFER, V.8, 1985, 281-298.
115. RAMACHANDRAN, N. et al - Two-dimensional solidification with natural convection in the melt and convective and radiative boundary conditions. NUM. HEAT MASS TRANSFER, V.4, 1981, 469-484.
116. HANSEN, P.N. - Modelling of solidification processes in casting using FDM-techniques. In: STATE OF THE ART OF COMPUTER SIMULATION OF CASTING AND SOLIDIFICATION PROCESS, Strasbourg, 17-20th June 1986, European Materials Research Society, 27-38.
117. BENNON, W.D.-INCROPERA, F.P. - A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems I: model formulation, INT. J. HEAT MASS TRANSFER, V.30, N.10, 1987, 2161-2170.
118. BENNON, W.D.-INCROPERA, F.P. - A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems II: application to solidification in rectangular cavity, INT. J. HEAT MASS TRANSFER, V.30, N.10, 1987, 2171-2187.

119. SANTOS, R.G. - Desenvolvimento de um método para análise da solidificação de metais em geometrias cilíndricas. TESE DE DOUTORADO, Unicamp, 1980.
120. IERARDI, M.C. - Modelagem matemática e simulação do processo de lingotamento contínuo de aços. TESE DE DOUTORADO. Unicamp/FEC/DEMA, 1989.
121. RUGGIERO, M.A.G. et al - Cálculo numérico: aspectos teóricos e computacionais. 1988, McGraw Hill, São Paulo, 32-33, 208-222.
122. ALBRECHT, P. - Análise numérica: um curso moderno. 1973, Livros Técnicos e Científicos, Rio de Janeiro, p.23-25, 156-197.
123. FERZIGER, J.H. - Numerical methods for engineering application 1981, John Wiley&Sons, New York, 24-37.
124. CONTE, S.D. - Elementos de análise numérica, 3ed., 1977, Ed.Globo, Porto Alegre, 36-41, 142-160.
125. HOLMAN, J.P. - Transferência de calor. 1981, McGraw Hill, São Paulo.
126. WELTY, J.R. - Engineering heat transfer. John Wiley&Sons, 1978.
127. GEIGER, G.H.-POIRIER, D.R. - Transport phenomena in metallurgy. Addison-Wesley, 1973.
128. PATANKAR, S.V. - Numerical heat transfer and fluid flow. McGraw Hill, 1979.
129. GAUTSCHI, W. - Error function and Fresnel integrals. In: ABRAMOWITZ, M. - HANDBOOK OF MATHEMATICAL FUNCTIONS, WITH FORMULAS, GRAPHS AND MATHEMATICAL TABLES. 1965.
130. VEINIK, A.I. - Thermodynamics for the foundryman. 1968, London, MacLaren&Sons.
131. FLEMINGS, M.C. - Solidification Processing. New York, McGraw-Hill, 1974.

APÊNDICE 1

1. - SIMBOLOGIA UTILIZADA

PARAMETROS - descrição (unidade)

1. LETRAS ROMANAS

- A - primeira constante de integração do perfil térmico (K)
- a - difusividade térmica $= k/cd$ (m^2/s)
- B - segunda constante de integração do perfil térmico (K)
- b - difusividade de calor $= \sqrt{k c d}$ ($J/m^2 s^{1/2} K$)
- C - concentração (%)
- c - calor específico (J/kg K)
- D - constante de difusão (m^2/s)
- d - densidade (kg/m^3)
- indicativo de diferencial
- E - parcela virtual de espessura do molde (m)
- e - constante $\approx 2,71828$
- F - função (matemática)
- f - fração mássica (adimensional)
- função (matemática)
- G - gradiente térmico (K/m)
- g - fração volumétrica (adimensional)
- H - calor latente de fusão (J/kg)
- h - coeficiente de transferência de calor ($W/m^2 K$)
- K - constante de velocidade ($m/s^{1/2}$)
- k - coeficiente de distribuição do soluto (adimensional)
- condutibilidade térmica (J/msK)
- L - comprimento
- M - constante metal/molde $= \sqrt{b_1/b_m}$ (adimensional)
- m - constante do metal $= \sqrt{a_2/a_3}$
- N - constante metal/molde $= \sqrt{a_1/a_m}$
- n - constante do metal $= \sqrt{a_1/a_2}$

PARAMETROS - descrição (unidade) (continuação)

q -	fluxo de calor (W/m^2)
R -	resistência térmica ($\text{m}^2\text{K/W}$)
S -	espessura solidificada (m)
T -	temperatura (K)
t -	tempo (s)
V -	velocidade de solidificação (m/s)
v -	velocidade do líquido interdendrítico (m/s)
x -	coordenada (posição)
y -	coordenada (posição)
z -	coordenada (posição)

2. - LETRAS GREGAS

α -	constante das equações de cinética (s/m^2)
β -	constante das equações de cinética (s/m) contração de solidificação (adimensional)
γ -	coeficiente da expressão de Brody-Flemings = $2D/K^2$
Δ -	diferença
δ -	constante da cinética de deslocamento da <i>solidus</i> (s)
ϵ -	taxa de variação de temperatura
Φ -	constante de solidificação (adimensional)
ρ -	densidade no modelo de segregação (kg/m^3)
Σ -	indicador de somatório
Ω -	parâmetro de ajuste de Clyne-Kurz = $\gamma / (1 + \gamma)$
ζ -	parâmetro da equação de Kobayashi

3. - SINAIS

∂	diferencial parcial
∇	gradiente

4. - SUBSCRITOS E SUPERCRITOS

4.1. - SINAIS

- - - - - referente ao sistema virtual
- * - - - - referente à forma adimensional
- - - - - referente à média

4.2. - NUMEROS

- 0 - inicial, nominal
- 1 - referente à região sólida
- 2 - referente à região pastosa
- 3 - refernte à região líquida

4.3. - LETRAS ROMANAS

- E referente a eutético
- L referente à *liquidus*
- l líquida
- S referente à *solidus*
- s referente a sólido

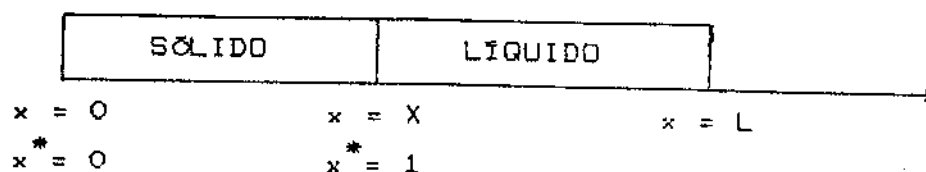
APÊNDICE 2

SOLUÇÃO EXATA DE KOBAYASHI PARA A ANÁLISE DE BRODY-FLEMINGS

Por se tratar da dedução de uma solução exata do modelo de solidificação de Brody-Flemings, é apresentado, primeiramente, o desenvolvimento desta equação, uma vez que é mantida a maioria das hipóteses feitas para a formulação da teoria de Brody-Flemings e porque são referidas várias expressões de seu modelo no desenvolvimento da solução exata.

1. - MODELO DE BRODY-FLEMINGS

Brody-Flemings consideraram um pequeno elemento de volume na zona pastosa e aproximaram a solidificação dendrítica por uma geometria plana (dendrita "platelike"), como mostrada na figura 1.



A solidificação processa-se na direção x e termina quando a interface sólido-líquido atinge a posição $x = L$. Considera-se que o comprimento do elemento de volume, L , corresponde à metade do espaçamento dendrítico, λ . As suposições deste modelo são as seguintes:

1. O transporte de soluto dentro da fase sólida é por difusão de volume e o coeficiente de difusão, D , é constante.

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_s}{\partial x^2} \quad (1)$$

2. A difusão no líquido é completa, isto é, a composição no líquido é uniforme.

3. As densidades do sólido e do líquido são iguais e constantes. Assim, a fração líquida em peso, f_L , e a fração sólida em peso, f_S , são dadas por :

$$f_S = \frac{x}{L} \quad \text{e} \quad f_L = 1 - f_S \quad (2)$$

4. O coeficiente de partição de equilíbrio, k , pode ser aplicado na interface e é constante durante a solidificação. Portanto,

$$C_S^i = k C_L \quad (3)$$

5. Não há fluxo de massa entrando ou saindo do elemento de volume considerado. Então,

$$D \frac{\partial C_S}{\partial x} = 0, \quad \text{para } x = 0, \quad (4)$$

$$\frac{f_S}{x_i} \int_0^x C_S dx + f_L C_L = C_0 \quad (5)$$

6. É assumida solidificação parabólica. Deste modo,

$$x_i = K \sqrt{t}, \quad f_S = \sqrt{t/t_f} \quad (6)$$

onde K é a constante de solidificação e t_f é chamado tempo de solidificação local, dado por:

$$t_f = \left(\frac{L}{K} \right)^2 \quad (7)$$

1.1. - SOLUÇÃO ANALÍTICA

A conservação de soluto dentro do elemento de volume de fração sólida em peso constante é:

$$d(f_L C_L) + d(f_S \bar{C}_S) = 0 \quad (8)$$

$$d(f_S \bar{C}_S) = C_S^* df_S + D_S A \rho_S \left[\frac{\partial C_S}{\partial x} \right]_{x=x_i} dt \quad (9)$$

onde \bar{C}_s é a composição média do sólido, D_s é o coeficiente de difusão do soluto no sólido, A é a área da interface sólido-líquido e x_i é a posição da interface sólido-líquido. O subscrito i relaciona-se à interface.

Uma análise aproximada, com um limite superior para a difusão no sólido, é obtida assumindo-se que a difusão não altera, significativamente, o gradiente de composição no sólido, isto é,

$$\left[\frac{\partial C_s}{\partial x} \right]_{x=x_i} = \frac{d C_s^*}{d x_i} \quad (10)$$

Fazendo, agora,

$$A = \frac{1}{\rho_s L} \quad (11)$$

$$f_L = 1 - f_s \quad (12)$$

onde L é a metade do espaçamento dendrítico, e substituindo as equações (9) e (10) na equação (8), tem-se:

$$\left[C_L - C_s^* \right] d f_s = (1 - f_s) d C_L + \frac{D_s}{L} \frac{d t}{d x_i} d C_s^* \quad (13)$$

Integrando de $C_s^* = k C_0$ para $f_s = 0$, resulta:

$$C_s^* = k C_0 \left[1 - (1 - \gamma k) f_s \right]^{\frac{k-1}{1-\gamma k}} \quad (14)$$

onde

$$\gamma = \frac{D_s t_f}{2 L^2} \quad (15)$$

A equação (14) é a chamada equação de redistribuição de soluto de Brody-Flemings, que considera a difusão de retorno de soluto para dentro da fase sólida em solidificação com crescimento parabólico.

2. - SOLUÇÃO EXATA DE KOBAYASHI

Vamos introduzir uma distância normalizada,

$$x^* = \frac{x}{x_i} \quad (16)$$

e supor a seguinte relação:

$$C_s(t, x) = C_s^*(t, x^*) \quad (17)$$

Diferenciando em relação ao tempo, obtém-se, pela regra da diferenciação parcial:

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = \frac{\partial C_s^*}{\partial t} + \frac{\partial x^*}{\partial t} \frac{\partial C_s^*}{\partial x^*} = \frac{\partial C_s^*}{\partial t} - \frac{df_s}{dt} \frac{\partial C_s^*}{\partial x^*} \quad (18)$$

Por outro lado, a diferenciação com relação a x dá:

$$\frac{\partial C_s}{\partial x} = \frac{\partial x^*}{\partial x} \frac{\partial C_s^*}{\partial x^*} = \frac{1}{x_i} \frac{\partial C_s^*}{\partial x^*} \quad (19)$$

Portanto, a equação de difusão (1) pode ser rearranjada da seguinte forma:

$$\frac{\partial C_s^*}{\partial x} = \frac{x^*}{f_s} \frac{df_s}{dt} \frac{\partial C_s^*}{\partial x^*} + \frac{D}{x_i^2} \frac{\partial^2 C_s^*}{\partial x^{*2}} \quad (20)$$

Além disso, a equação de conservação de massa (5) torna-se:

$$f_s \int_0^1 C_s^* dx^* + (1 - f_s) \frac{C_s^i}{k} = C_0 \quad (21)$$

Diferenciando, em relação a t , tem-se:

$$\frac{df_s}{dt} \int_0^1 C_s^* dx^* + f_s \frac{d}{dt} \int_0^1 C_s^* dx^* -$$

$$- \frac{d f_s}{d t} \frac{C_s^*}{f_s} \bigg|_{x^*=1} + \frac{(1 - f_s)}{k} \frac{d C_s^*}{d t} \bigg|_{x^*=1} = 0 \quad (22)$$

Por outro lado, usando-se as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \int_0^1 x^* \frac{\partial C_s^*}{\partial x^*} d x^* &= x^* C_s^* \bigg|_{x^*=0}^{x^*=1} - \int_0^1 C_s^* d x^* = \\ &= C_s^* \bigg|_{x^*=1} - \int_0^1 C_s^* d x^* \end{aligned} \quad (23)$$

$$\int_0^1 \frac{\partial^2 C_s^*}{\partial x^{*2}} d x^* = \frac{\partial C_s^*}{\partial x^*} \bigg|_{x^*=1} \quad (24)$$

e aplicando a integração $\int_0^1 (\dots) d x^*$ na equação (20), obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d t} \int_0^1 C_s^* d x^* &= \frac{1}{f_s} \frac{d f_s}{d t} C_s^* \bigg|_{x^*=1} - \\ &- \frac{1}{f_s} \frac{d f_s}{d t} \int_0^1 C_s^* d x^* + \frac{D}{x_i^2} \frac{\partial C_s^*}{\partial x^*} \bigg|_{x^*=1} \end{aligned} \quad (25)$$

Eliminando-se os termos de $\int_0^1 C_s^* d x^*$ na equação (20) pela equação (25), obtém-se:

$$\begin{aligned} (1 - f_s) \frac{\partial C_s^*}{\partial t} + (k - 1) \frac{d f_s}{d t} C_s^* + \\ + \frac{k f_s D}{x_i^2} \frac{\partial C_s^*}{\partial x^*} = 0, \quad \text{para } x^* = 1 \end{aligned} \quad (26)$$

que é uma forma diferente de conservação de massa. Para a forma

diferencial de conservação de massa, a seguinte condição inicial é necessária:

$$C_S^* = k C_O, \quad \text{para } t = 0 \quad (27)$$

Como é assumida solidificação parabólica (equação (6)) na presente análise, o tempo t pode ser substituído pela fração sólida f_s :

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{d f_s}{d t} \frac{\partial}{\partial f_s} = \frac{k^2}{2 f_s L^2} \frac{\partial}{\partial f_s}$$

e o seguinte conjunto de equações, que descrevem o modelo de solidificação de Brody-Flemings, pode ser obtido:

$$f_s \frac{\partial C_S}{\partial f_s} = x^* \frac{\partial C_S}{\partial x^*} + \frac{\partial^2 C_S}{\partial x^{*2}} \quad (28)$$

$$C_S = k C_O, \quad \text{para } f_s = 0 \quad (29)$$

$$\gamma \frac{\partial C_S}{\partial x^*} = 0, \quad \text{para } x^* = 0 \quad (30)$$

$$(1 - f_s) \frac{\partial C_S}{\partial f_s} + (k - 1) C_S + \gamma k \frac{\partial C_S}{\partial x^*} = 0, \quad \text{para } x^* = 1 \quad (31)$$

Aqui, o asterisco de C_S^* nas equações (17)-(27) é omitido por conveniência e vamos considerar C_S como função de t e x^* , daqui por diante. Além disso, introduzindo-se a variável

$$z = \frac{x^{*2}}{2 \gamma} \quad (32)$$

as equações (28)-(31) são reescritas e apresentadas a seguir, e são as equações finais que devem ser resolvidas.

$$f_s \frac{\partial C_s}{\partial f_s} = (1 + 2z) \frac{\partial C_s}{\partial z} + 2z \frac{\partial^2 C_s}{\partial z^2} \quad (33)$$

$$C_s = k C_0, \quad \text{para} \quad f_s = 0 \quad (34)$$

$$\sqrt{z} \frac{\partial C_s}{\partial z} = 0, \quad \text{para} \quad z = 0 \quad (35)$$

$$(1 - f_s) \frac{\partial C_s}{\partial f_s} + (k - 1) C_s + k \frac{\partial C_s}{\partial z} = 0, \\ \text{para} \quad z = \frac{1}{2\gamma} \quad (36)$$

2.1. - RESOLUÇÃO

Introduzindo-se uma expansão em série para C_s em relação a f_s e considerando a condição de contorno em $z = 0$ (equação (35)), a solução geral da equação (33) pode ser obtida de forma direta:

$$C_s = \sum_{n=0}^{\infty} a_n F \left[-\frac{n}{2}, \frac{1}{2}, -z \right] f_s^n \quad (37)$$

onde a_n ($n = 0, 1, \dots$) são parâmetros a serem determinados a partir das condições inicial e de contorno e $F(p, q; z)$ denotam a função hipergeométrica confluyente, definida por:

$$F(p, q; z) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(p)_r}{(q)_r} \frac{z^r}{r!} \quad (38)$$

onde $(p)_r$ e $(q)_r$ são os símbolos de Pochhammer, que são definidos como:

$$\begin{aligned}
 (p)_r &= p(p+1) \dots (p+r-1) \\
 (p)_0 &= 1, \quad (p)_1 = p, \quad \text{etc.}
 \end{aligned}
 \tag{39}$$

Da condição inicial (equação (34)),

$$a_0 = k C_0 \tag{40}$$

porque $F(0, q; z)$ é sempre 1. Substituindo a equação (37) na equação (36) e pondo cada coeficiente de f_s^n ($n = 1, 2, \dots$) iguais a zero, a_n ($n = 1, 2, \dots$) podem ser determinados como segue:

$$\begin{aligned}
 a_n &= \frac{k C_0}{F \left[-\frac{n}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2\gamma} \right]} \times \\
 &\times \prod_{m=0}^{n-1} \left[1 - k \frac{F \left[-\frac{m}{2}, \frac{3}{2}; -\frac{1}{2\gamma} \right]}{F \left[-\frac{m}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2\gamma} \right]} \right]
 \end{aligned}
 \tag{41}$$

Finalmente, a solução exata do modelo de solidificação de Brody-Flemings é dada da seguinte forma:

$$C_s(f_s, x^*) = k C_0 \sum_{n=0}^{\infty} \zeta_n \frac{F \left[-\frac{n}{2}, \frac{1}{2}; -z \right]}{F \left[-\frac{n}{2}, \frac{1}{2}; -z_0 \right]} f_s^n \tag{42}$$

onde:

$$\zeta_n = \prod_{m=0}^{n-1} \left[1 - k \frac{F\left(-\frac{m}{2}, \frac{3}{2}; -z_0\right)}{F\left(-\frac{m}{2}, \frac{1}{2}; -z_0\right)} \right] \quad (43)$$

$$\text{e} \quad z_0 = \frac{1}{2\gamma} \quad (44)$$

Em particular, na interface, a expressão toma a forma:

$$C_S^i = k C_0 \sum_{n=0}^{\infty} \zeta_n f_S^n \quad (45)$$

As expansões em série nas equações (42) e (45) convergem absolutamente para $0 \leq f_S \leq 1$, quando $0 < \gamma < \infty$ e $0 < k < 2$. Isto pode ser facilmente examinado pelo teste da relação de D'Alembert para convergência absoluta, usando-se as seguintes características das funções hipergeométricas confluentes:

- 1) $F(-n/2, 1/2; -z)$ aumenta monotonicamente com z não negativo e
- 2) $0 < F(-n/2, 3/2; -z) / F(-n/2, 1/2; -z) \leq 1$, para $z \geq 0$.

APÊNDICE 3

EXPRESSÕES DO MODELO DE SOLIDIFICAÇÃO PARA MOLDE REFRIGERADO

1. - CINÉTICA DE SOLIDIFICAÇÃO

1.1. - EVOLUÇÃO DA ISOTERMA SOLIDUS

$$t = \frac{S_s^2}{4 a_1 \phi_1^2} + \frac{L_o S_s}{2 a_1 \phi_1^2} + \frac{L_o^2 - S_o^2}{4 a_1 \phi_1^2} \quad (1)$$

ou, de forma simplificada:

$$t = \alpha_s S_s^2 + \beta_s S_s + \delta \quad (1a)$$

Esta última equação descreve o deslocamento da isoterma solidus em função do tempo, durante o processo de solidificação.

1.2. - EVOLUÇÃO DA ISOTERMA LIQUIDUS

$$t = \frac{S_L^2}{4 a_2 \phi_2^2} + \frac{L_o S_L}{2 a_2 \phi_2^2} \quad (2)$$

ou, de forma simplificada:

$$t = \alpha_L S_L^2 + \beta_L S_L \quad (2a)$$

Esta última equação descreve o deslocamento da isoterma liquidus durante a solidificação.

2. - PERFIS TÉRMICOS DURANTE A SOLIDIFICAÇÃO

2.1. - PERFIL TÉRMICO NO METAL SÓLIDO

$$T_1 = T_0 + \frac{T_s - T_0}{\operatorname{erf}(\phi_1)} \operatorname{erf} \left[\phi_1 \frac{x + L_0}{S_s + L_0} \right] \quad (3)$$

2.2. - PERFIL TÉRMICO NA REGIÃO PASTOSA

$$T_2 = T_L - \frac{T_L - T_s}{\operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf}(n\phi_1)} \left[\operatorname{erf}(\phi_2) - \operatorname{erf} \left(\phi_2 \frac{x + L_0}{S_s + L_0} \right) \right] \quad (4)$$

2.3. - PERFIL TÉRMICO NO METAL LÍQUIDO

$$T_3 = T_v - \frac{T_v - T_L}{1 - \operatorname{erf}(m\phi_2)} \left[1 - \operatorname{erf} \left(m \phi_2 \frac{x + L_0}{S_L + L_0} \right) \right] \quad (5)$$

Através das equações (3), (4), e (5) pode-se calcular as distribuições de temperaturas em qualquer ponto do sólido, da zona pastosa e do líquido e em qualquer instante do processo de solidificação.

2.4 - DETERMINAÇÃO DE S_0 E L_0

$$S_0 = \frac{2 K_1 \phi_1 (T_s - T_0)}{\sqrt{\pi} \exp(\phi_1^2) h_g (T_L - T_0) [\operatorname{erf}(\phi_1) + M]} \quad (6)$$

$$L_o = \frac{\phi_2}{n \phi_1} S_o \quad (7)$$

2.5 - DETERMINAÇÃO DAS CONSTANTES ϕ_1 e ϕ_2

$$\frac{T_L - T_S}{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)} = \frac{K_1 \exp \left[(n^2 - 1) \phi_1^2 \right]}{K_2 n \text{erf}(\phi_1)} (T_S - T_o) \quad (8)$$

$$\frac{T_L - T_S}{\text{erf}(\phi_2) - \text{erf}(n\phi_1)} = \frac{K_3 m \exp \left[(1 - m^2) \phi_2^2 \right]}{K_2 \left[1 - \text{erf}(m\phi_2) \right]} (T_v - T_L) \quad (9)$$

As equações (8) e (9) devem ser resolvidas simultaneamente por iteração para permitir a determinação das constantes ϕ_1 e ϕ_2 .

APÊNDICE 4

PROPRIEDADES FÍSICAS DOS MATERIAIS CONSIDERADOS

	M A T E R I A L		
	Al-4,5%Cu	Cu	AÇO-0,1%C
H (J/kg)	384×10^3	205×10^3	260×10^3
k (W/m.K)	$k_1 = 29,3$ $k_3 = 25,4$	$k_1 = 400$	$k_1 = 29,3$ $k_3 = 25,4$
c (J/kg.K)	$c_1 = 670$ $c_3 = 679$	$c_1 = 390$	$c_1 = 670$ $c_3 = 679$
d (kg/m ³)	$d_1 = 2,75 \times 10^3$ $d_3 = 2,65 \times 10^3$	$d_1 = 9 \times 10^3$	$d_1 = 7,8 \times 10^3$ $d_3 = 7,0 \times 10^3$
T _f (K)		1356	
T _s (K)	821	-	1768
T _L (K)	920	-	1803