

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
Escola de Engenharia  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais  
(PPGE3M)

**MÉTODO DE MONTE CARLO APLICADO AO PROCESSO DE  
LINGOTAMENTO CONTÍNUO**

SIMONE MILIOLI DA LUZ

Dissertação para obtenção do título de  
Mestre em Engenharia

Porto Alegre (RS)

2011

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
Escola de Engenharia  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais  
(PPGE3M)

**MÉTODO DE MONTE CARLO APLICADO AO PROCESSO DE  
LINGOTAMENTO CONTÍNUO**

SIMONE MILIOLI DA LUZ

Trabalho realizado no Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais – PPGE3M, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia.

Área de Concentração: Processos de Fabricação

Porto Alegre (RS)

2011

Esse trabalho foi julgado adequado como qualificação para dissertação de mestrado em Engenharia, área de concentração de Processos de Fabricação e aprovada em sua forma final, pelo Orientador e pela Banca Examinadora do Curso de Pós-Graduação.

Orientador: Prof. Dr. Jaime Alvares Spim Junior (PPGE3M - UFRGS)

Co-orientador: Prof. Dr. Daniel Adrián Stariolo (IF - UFRGS)

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Carlos Raimundo Frick Ferreira (DEMET/LAFUN)

Prof. Dr. Carlos Alexandre dos Santos (PUCRS/PGETEMA)

Prof. Dr. Lírio Schaeffer (PPGE3M/DEMET)

Prof. Dr. Telmo Roberto Strohaecker  
Coordenador do PPGE3M

Dedico este trabalho aos meus pais  
Orides (*in memoriam*) e Zélia.

## AGRADECIMENTOS

À Deus.

Ao professor Dr. Jaime Alvares Spim Junior, pela orientação e atenção para elaboração deste trabalho.

Ao professor Dr. Daniel Adrián Stariolo, pelo apoio, dedicação e paciência.

Ao meu pai Orides (*in memoriam*), por ser meu grande incentivador e a minha mãe Zélia, pelo amor, carinho e dedicação em todos os momentos da minha vida.

Aos meus irmãos Amarildo, Sandra e Silvia, pelas incansáveis palavras de apoio e incentivo.

Ao meu cunhado Giovani Volpato, pelo auxílio e colaboração no decorrer deste trabalho.

À minha sobrinha Julia e ao meu filho Pedro, pelos momentos alegres.

Ao meu esposo Vilmar, pelo constante incentivo e confiança para realização este trabalho.

À UFRGS, ao PPGE3M e ao LAFUN, pelo apoio na realização deste trabalho.

A todos que colaboraram de forma direta ou indireta na elaboração deste trabalho, o meu reconhecimento.

## SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS .....	VIII
LISTA DE TABELAS .....	X
LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS.....	XI
RESUMO .....	XIV
ABSTRACT .....	XV
1.0 INTRODUÇÃO .....	16
2.0 OBJETIVOS.....	17
2.1 Objetivos Gerais.....	17
2.2 Objetivos Específicos .....	17
3.0 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....	18
3.1 Processo de Lingotamento Contínuo .....	18
3.2 Solidificação dos Metais.....	22
3.2.1 Macroestrutura da Solidificação.....	24
3.2.2 Transição Colunar-Equiaxial (TCE).....	27
3.3 Modelagem Matemática do Processo de Solidificação no Lingotamento Contínuo.....	31
3.3.1 Equação Geral da Condução do Calor.....	31
3.3.2 Condutividade Térmica, Calor Específico e Densidade.....	34
3.3.3 Determinação da Fração Sólida.....	34
3.3.4 Método Numérico das Diferenças Finitas (MDF).....	35
3.3.4.1 Formação da Malha do M .D.F.....	35
3.3.4.2 A Expansão de Taylor para o Método de Diferenças Finitas.....	36
3.3.4.3 O Método das Diferenças Finitas no Modo Explícito.....	40
3.3.4.4 Formulação do Modelo Numérico para a Solidificação Bidimensional no Lingotamento Contínuo.....	41
3.4 Método de Monte Carlo.....	48
3.4.1 História do Método de Monte Carlo.....	48
3.4.2 Método de Monte Carlo e o Crescimento dos Grãos.....	49
3.4.3 Física Estatística, Termodinâmica e Simulações de Monte Carlo...	50

3.4.4	Algoritmo de Metrópolis.....	53
3.4.5	Modelo de Ising.....	55
3.4.6	Modelo de Potts.....	57
4.0	METODOLOGIA E PROCEDIMENTOS EXPERIMENTAIS.....	59
4.1	Desenvolvimento do Algoritmo Modificado.....	59
4.1.1	Formação da Malha.....	59
4.1.2	Descrição do Método de Monte Carlo.....	62
4.1.3	Desenvolvimento do Código para o Cálculo das Temperaturas utilizando o Método das Diferenças Finitas.....	63
4.1.4	Seleção dos Aços.....	66
4.2	Procedimentos Experimentais.....	67
5.0	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	69
6.0	CONCLUSÃO.. ..	77
7.0	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	78
8.0	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	79

## LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1	Principais componentes de um equipamento de Lingotamento Contínuo (Santos, 2001) .....	18
Figura 3.2	Representação esquemática da microestrutura de solidificação (Garcia, 2001)..	23
Figura 3.3	Representação esquemática da macroestrutura da solidificação.....	24
Figura 3.4	Influência das variáveis de solidificação sobre o comprimento da zona colunar (Garcia, 2001) .....	26
Figura 3.5	Estrutura de um lingote mostrando a zona coquilhada, zona colunar e zona equiaxial (Flemings, 1974).....	27
Figura 3.6	Ilustração esquemática da transição colunar-equiaxial em ligas metálicas (Garcia, 2005).....	28
Figura 3.7	Representação de uma malha bidimensional.....	36
Figura 3.8	Representação geométrica da Diferença Finita de avanço e de retorno...38	
Figura 3.9	Representação geométrica da Diferença Finita Central .....	38
Figura 3.10	Malha do lingote mostrando as condições de contorno.....	42
Figura 3.11	Representação dos elementos vizinhos para o sistema bidimensional....	42
Figura 3.12	Representação esquemática do fluxo de calor para os elementos situados em $i = 1$ e $2 \leq j \leq N - 1$ .....	43
Figura 3.13	Representação esquemática do fluxo de calor para os elementos situados em $i = L$ e $2 \leq j \leq N - 1$ .....	43
Figura 3.14	Representação esquemática do fluxo de calor para os elementos situados em $2 \leq i \leq L - 1$ e $j = 1$ .....	44
Figura 3.15	Representação esquemática do fluxo de calor para os elementos situados em $2 \leq i \leq L - 1$ e $j = N$ .....	45
Figura 3.16	Representação esquemática do fluxo de calor para os elementos situados em $i = 1$ e $j = 1$ .....	45
Figura 3.17	Representação esquemática do fluxo de calor para os elementos situados em $i = 1$ e $j = N$ .....	46

Figura 3.18	Representação esquemática do fluxo de calor para os elementos situados em $i = L$ e $j = 1$ .....	47
Figura 3.19	Representação esquemática do fluxo de calor para os elementos situados em $i = L$ e $j = N$ .....	47
Figura 3.20	Fluxograma do algoritmo de Metrópolis.....	55
Figura 4.1	Comportamento do crescimento do grão para diferentes valores de $Q$ (Blinkstein,1999).....	60
Figura 4.2	Representação do grão por uma matriz bidimensional quadrada (Blikstein, 1999).....	61
Figura 4.3	Matriz triangular com os contornos de grão imaginários.....	61
Figura 4.4	Fluxograma do modelo modificado.....	64
Figura 5.1	Evolução para o modelo de Potts para $T_{MonteCarlo}=1,17$ .....	69
Figura 5.2	Evolução para o modelo de Potts para $T_{MonteCarlo}=0,3$ .....	70
Figura 5.3	Evolução do mapa térmico para o aço SAE 1015 .....	72
Figura 5.4	Evolução da macroestrutura para o modelo modificado do aço SAE 1015 .....	73
Figura 5.5	Evolução do mapa térmico para o aço SAE 1020.....	74
Figura 5.6	Evolução da macroestrutura para o modelo modificado do aço SAE 1020. ....	75
Figura 5.7	Comparação entre a macroestrutura simulada e a macroestrutura do aço SAE1015.....	76
Figura 5.8	Comparação entre a macroestrutura simulada e a macroestrutura do aço SAE1020.....	76

## LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1	Composição química dos aços.....	65
Tabela 4.2	Temperaturas de solidificação.....	67
Tabela 4.3	Parâmetros operacionais do Lingotamento Contínuo.....	67

## LISTA DE ABREVIACOES E SMBOLOS

$a$ = difusividade trmica do material	[m <sup>2</sup> /s]
$c$ = calor especfico do material	[J/kg.K]
$C_L$ = concentrao de soluto no lquido	[% em massa]
$C_S$ = concentrao de soluto no slido	[% em massa]
$\rho$ = densidade	[kg/m <sup>3</sup> ]
$f_L$ = frao de lquido	[adimensional]
$f_S$ = frao de slido	[adimensional]
$h$ = coeficiente de transferncia de calor	[W/m <sup>2</sup> .K]
$H$ = entalpia	[J/m <sup>3</sup> ]
$k'$ = coeficiente de redistribuio do soluto	[adimensional]
$k$ = condutividade trmica do material	[W/m.K]
$K_{ef}$ = condutividade trmica efetiva.	[W/m.K]
$K_{eq}$ = condutividade trmica equivalente	[W/m.K]
$L$ = calor latente de fuso	[J / kg]
$\dot{q}$ = termo de gerao de calor	[J / kg]
$T$ = temperatura	[°C]
$T_a, T_{amb}$ = temperatura ambiente	[°C]
$T_f$ = temperatura de fuso do solvente.	[°C]
$T_{Liq}$ = temperatura liquidus	[°C]
$T_{Sol}$ = temperatura solidus	[°C]
$T_{vaz}$ = temperatura de vazamento	[°C]
$t$ = tempo relativo a solidificao	[s]
$x, y, z$ = coordenadas cartesianas	[m]
$\delta$ = constante da cintica da solidificao da isotermas solidus	[s]
$\Delta$ = variao	

$\langle A \rangle$  = média aritmética dos valores de  $A$

$E$  = energia

$F$  = energia livre de Helmholtz

$k$  = constante de Boltzmann

$L$  = número de filas

$N$  = número de colunas

$M$  = magnetização

$P$  = probabilidade de transição

$P_i$  = probabilidade de encontrar um sistema no microestado  $i$

$Q$  = número de orientações cristalográficas

$T_c$  = temperatura crítica para o modelo de Ising

$T_{Potts}$  = temperatura crítica para o modelo de Potts

$T_{MonteCarlo}$  = temperatura empregada no método de Monte Carlo em cada ponto da malha

$T_{MDF}$  = temperatura calculada pelo Método das Diferenças Finitas

$Z$  = função partição

$W$  = probabilidade de transição

$s_i$  = variável de estado do sistema (orientação cristalográfica)

### **Subscritos**

S = sólido

L = líquido

p = pastoso

$i, j$  = índices da malha em relação os eixos  $x$  e  $y$  respectivamente

$\mu, \nu$  = microestados do sistema

### **Sobrescritos**

$n$  = tempo

$n + 1$  = incremento de tempo

## **Abreviações**

EDP – Equação Diferencial Parcial

LC – Lingotamento Contínuo

MEF – Método dos Elementos Finitos

MDF – Método das Diferenças Finitas

MSC – Passo de Monte Carlo

TCE – Transição colunar-equiaxial

## RESUMO

A aplicação de modelos matemáticos baseados em técnicas numéricas aumentou com o avanço da informática através da criação de microprocessadores mais velozes e periféricos de armazenamento de dados com grande capacidade. Buscando uma maior produtividade e a melhoria da qualidade final do produto solidificado, propõe-se neste trabalho, desenvolver um modelo computacional de origem físico para o crescimento de grão no Lingotamento Contínuo. O modelo é simulado utilizando o Método de Monte Carlo juntamente com o Método das Diferenças Finitas, com o objetivo de obter e caracterizar a transição colunar-equiaxial através desse método. As simulações foram realizadas utilizando a programação Fortran 90/95 no ambiente Linux através do software Developer Studio e aplicados nos aços SAE 1015 e 1020. A seguir, foram realizadas comparações entre as macroestruturas simuladas e as macroestruturas das amostras dos aços obtidas pelo Laboratório de Fundição (LAFUN) da UFRGS. Destas simulações observou-se que o modelo oferece a possibilidade da simulação de diferentes condições operacionais para prever a evolução macroestrutural de lingotes.

Palavras-chave: Lingotamento Contínuo, Crescimento dos Grãos e Método de Monte Carlo.

## **ABSTRACT**

The application of mathematical models based on numerical techniques increased with the advancement of information technology by creating faster microprocessors and peripherals with high data storage capacity. Seeking for a major productivity and the improvement of the final quality of the solidified product. In this assignment, the development of a computational model with a physical origin for the growth of the continuous casting, is proposed. The model is simulated by using the Monte Carlo Method with the Finite Differences Method, the goal is to obtain and characterize the columnar-equiaxed transition through this method. The simulations were performed using the Fortran 90/95 programming in Linux environment using the Developer Studio software and applied to the steel SAE 1015 and 1020. Following it, comparisons were made between the macro and simulated macrostructures of the samples obtained by the Laboratory of Steel Casting - Laboratório de Fundição (LAFUN) at UFRGS. From these simulations, it was observed that the modified model offers the possibility of simulating different operating conditions to predict the evolution of macrostructural ingots.

Key-words: Continuous Casting, Grain Growth and Monte Carlo Method.

## 1.0 INTRODUÇÃO

Dentre as tecnologias para a transformação de metal líquido em sólido, o processo de Lingotamento Contínuo tornou-se o mais utilizado, sendo responsável por grande parte do volume de aço produzido no mundo e por mais de 90% da produção nacional.

O controle do processo de solidificação nos produtos obtidos pelo processo de Lingotamento Contínuo é de fundamental importância na engenharia metalúrgica, pois a estrutura que se forma logo após a solidificação determina as propriedades finais do produto. Todos os aspectos da microestrutura dependem fortemente das condições de solidificação, desde o início do processo com o metal no estado líquido até solidificação total.

A qualidade final e as propriedades dos produtos solidificados dependem da microestrutura formada durante a solidificação (Ramirez, 2006). Muitos autores têm desenvolvido modelos matemáticos para simular o crescimento do grão buscando uma maior produtividade e a melhoria da qualidade final do produto solidificado. Dentre os modelos, destaca-se o Método de Monte Carlo, pois este descreve com boa fidelidade o crescimento dos grãos. O Método de Monte Carlo faz parte da maior e mais importante classe de métodos numéricos para solução de problemas de simulação numérica. Sua aplicação tem a finalidade de determinar propriedades termodinâmicas a partir da amostragem probabilística de um conjunto representativo de estados microscópicos do sistema (Newman, 2001).

Compreender a cinética de crescimento do grão é fundamental para os avanços no controle da evolução da estrutura. Dado que o processo de solidificação corresponde a uma situação fortemente fora do equilíbrio termodinâmico, será proposta uma adaptação do Método de Monte Carlo, através da modificação no cálculo das temperaturas locais que serão inseridas no modelo.

## **2.0 OBJETIVOS**

### **2.1 Objetivos Gerais**

O presente trabalho teve como objetivo desenvolver um modelo numérico para estudar a cinética do crescimento de grãos baseado no Método de Monte Carlo juntamente com o Método de Diferenças Finitas (MDF) para determinar a formação macroestrutural após a solidificação de lingotes produzidos pelo processo de Lingotamento Contínuo.

### **2.2 Objetivos Específicos**

- Estudar o crescimento de grãos para o Modelo de Potts;
  
- Desenvolver um modelo numérico para estudar a evolução do crescimento de grãos baseado no Método de Monte Carlo aplicado ao modelo de Potts juntamente com o Método das Diferenças Finitas;
  
- Analisar a influência da variação da temperatura na formação da macroestrutura do lingote solidificado para diferentes passos de Monte Carlo, através da comparação entre o Modelo de Potts padrão e o modelo modificado.

### 3.0 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

#### 3.1 Processo de Lingotamento Contínuo

O processo de Lingotamento Contínuo pode ser considerado como um processo de transferência de calor, através do qual o metal líquido é solidificado em um produto sólido semi-acabado com determinada forma geométrica, que pode ser um tarugo, um bloco, uma placa ou um perfil.

A solidificação no processo de Lingotamento Contínuo ocorre através da extração de calor do metal líquido por meio de três etapas distintas de resfriamento: a primeira etapa, chamada de resfriamento primário, ocorre em um molde de cobre ou liga de cobre refrigerado a água. A segunda etapa também chamada de resfriamento secundário ocorre pelo borrifamento de água ou mistura de ar e água sobre a superfície do lingote por meio de sprays. A terceira etapa, denominada resfriamento terciário, ocorre diretamente no ar através da transferência de calor por radiação livre.

A representação esquemática de um equipamento de Lingotamento Contínuo pode ser visto na figura 3.1.

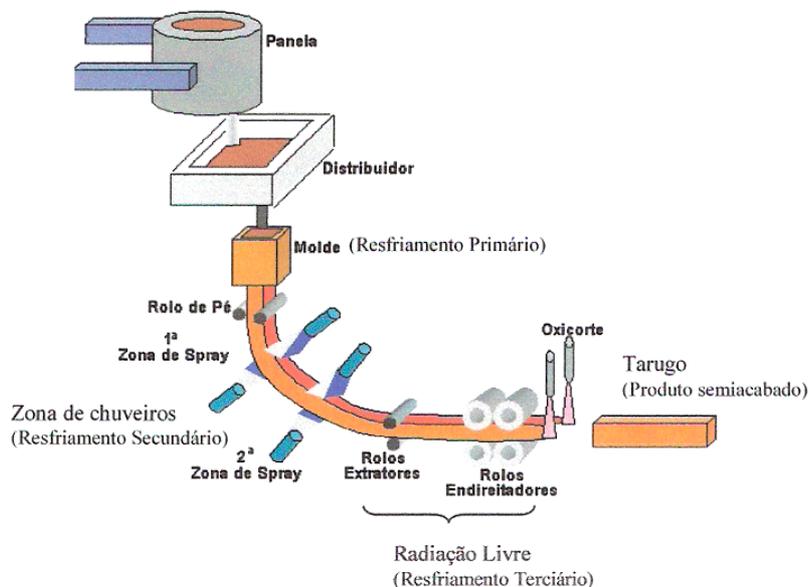


Figura 3.1 – Principais componentes de um equipamento de Lingotamento Contínuo (Santos, 2001)

A análise dos principais componentes envolvidos no processo é fundamental para o desenvolvimento e otimização do processo.

Os principais componentes de um equipamento de Lingotamento Contínuo são:

a) Painel de carregamento

A painel de distribuição primária do metal líquido recebe o material diretamente do alto forno ou forno elétrico.

O vazamento do metal líquido é feito através de válvulas tipo gaveta, onde duas tiras que deslizam uma sobre a outra, possuem furos concêntricos da ordem de 35 a 120 mm. À medida que as tiras se movimentam os furos descentralizam, reduzindo o fluxo de saída do material, até o fechamento total de vazão. As partes móveis do sistema são montadas sobre placas refratárias, acopladas a superfície da painel, resultando assim em eficiência e velocidade no deslizamento de abertura e fechamento da válvula.

Durante a operação de abertura ou fechamento, a presença de ar frio na região pode levar a solidificação de material na válvula, impedindo assim a continuidade do processo.

Um bico injetor acoplado à saída da válvula evita este tipo de problema, além de auxiliar a vazão do metal para o distribuidor (Spim, 1993).

b) Distribuidor

O distribuidor é um recipiente intermediário entre a painel e o molde que serve para distribuir o metal para o molde, tendo grande influência na qualidade do produto final. Recebe o metal líquido da painel de vazamento, alimentando o molde. Um distribuidor pode alimentar vários moldes, contudo os injetores de alimentação de molde devem ser mantidos distantes da região de turbulência provocada pela vazão a partir das painéis de carregamento, já que as bolhas geradas nesta região influenciam na qualidade final do lingote.

O distribuidor consiste numa carcaça de metal revestida com material refratário, pré-aquecida a altas temperaturas (mais de 1500°C) a fim de receber o metal líquido.

O tamanho do distribuidor é um parâmetro importante no projeto de um sistema de Lingotamento Contínuo, pois quanto maior sua área, melhor para o efeito de homogeneização da liga em seu interior, exercendo também o efeito de flotar inclusões contidas no metal, melhorando assim a qualidade final do produto.

As principais funções do distribuidor são:

- servir como reservatório durante a troca de panelas, garantindo a sequência do processo;
- distribuir o metal líquido para diversos moldes do equipamento (veios);
- controlar a velocidade de lingotamento, reduzindo os defeitos superficiais;
- separar impurezas da liga, diminuindo as inclusões e aumentando a qualidade interna,
- ajuste da composição química.

### c) Molde ou Resfriamento Primário

O molde é responsável pelo início da solidificação e sua principal função é suportar o metal líquido até que se forme uma casca sólida capaz de suportar a pressão interna do metal líquido e as tensões mecânicas de extração do lingote (Janik, 2004). Essa etapa do processo é chamada de resfriamento primário.

O resfriamento primário ocorre através da extração de calor do metal líquido para o sistema de refrigeração por meio da passagem de água por canais que envolvem o molde de cobre ao longo de seu comprimento e largura.

À medida que o molde é resfriado com água, a espessura da camada solidificada de metal aumenta até que atinja uma resistência mecânica que suporte a pressão metalostática (pressão exercida pelo metal líquido) e os esforços de extração do lingote. A transferência de calor no molde tem um papel importante, pois a eficiência de extração de calor no molde é responsável pela qualidade do produto e produtividade da máquina (Xie, 2008).

O controle da solidificação do metal no interior do molde constitui um parâmetro fundamental para garantir a qualidade do produto final, pois a espessura da casca solidificada e a qualidade superficial do lingote ao longo do processo de solidificação dependem diretamente das condições de solidificação nesta região de resfriamento. Além disso, defeitos gerados na superfície durante a solidificação podem

levar a ruptura do lingote na saída do molde, paralisando o processo e gerando custos e danos no equipamento.

Os principais parâmetros que devem ser controlados no molde são:

- O nível e a flutuação do metal líquido;
- Características do molde (composição, espessura da parede e tipos de suporte);
- Parâmetros de resfriamento do molde (jaqueta, qualidade da água, depósitos de filmes na superfície do canal, velocidade e pressão da água);
- Condições de oscilação (frequência e amplitude);
- Condições de lubrificação (lubrificação por óleo ou pó fluxante).

#### d) Região de Sprays ou Resfriamento Secundário

Ao abandonar o contato com o molde, o lingote passa para a segunda etapa do resfriamento. Esta segunda etapa de retirada de calor é composta por uma série de chuveiros que borrifam água na superfície pré-solidificada do lingote, auxiliando a retirada de calor, objetivando a solidificação final do poço líquido no interior do lingote ou placa, antes da região de desempenho.

As principais características dessa etapa são:

- extração de calor, possibilitando a completa solidificação antes da zona de desempenho;
- comportamento térmico homogêneo, diminuindo a formação de trincas e outros defeitos causados pela solidificação;
- facilidade dos ajustes dos controladores de vazão para as diferentes zonas de sprays,
- eficiência no projeto de sistemas de guias, evitando defeitos, devido ao contato com os roletes e guias;
- aplicação uniforme da água em toda a superfície do lingote;
- capacidade de extração de calor semelhante tanto para região superior, quanto inferior.

e) Região de Radiação Livre ou Resfriamento Terciário

Nessa etapa, o lingote é transportado por meio de rolos, sendo que este processo de resfriamento ocorre diretamente pelo ar numa região de radiação livre. Nessa etapa a solidificação já está completa, ocorrendo assim o corte do lingote.

O principal parâmetro que deve ser controlado nessa etapa é o reaquecimento da superfície do lingote após a saída da última zona de sprays.

f) Rolos extratores

São responsáveis diretos da velocidade de produção. Tocam a superfície do lingote puxando o mesmo na direção de extração.

O alinhamento correto dos rolos extratores ao longo do equipamento de Lingotamento Contínuo corresponde a um fator importante do projeto, pois é responsável por evitar a formação de defeitos internos e externos no lingote como, por exemplo, trincas e segregações. Em alguns casos, a não simetria na colocação dos rolos extratores, pode em alguns casos levar a ruptura do lingote ao longo do processo.

As principais funções dos rolos extratores são:

- evitar o abaulamento dos lingotes;
- suportar os esforços devido ao peso do lingote;
- auxiliar na extração do calor, evitando que o lingote chegue a região de desempenho sem estar completamente solidificado.

### **3.2 Solidificação dos Metais**

A solidificação de materiais metálicos e ligas é um processo industrial importante, pois a maioria dos materiais metálicos passa pelo menos uma vez pelo processo de solidificação. A estrutura que se forma logo após a solidificação determina as propriedades finais do produto (Garcia, 2001).

A temperatura de vazamento do metal líquido juntamente com a intensidade das correntes convectivas durante o preenchimento do molde são os principais fatores que influenciam no processo de solidificação e conseqüentemente na microestrutura final do metal.

Outro fator de influência é o molde, que atua como um absorvedor de calor através da extração de calor do metal, garantindo a transformação do metal líquido em sólido. Essa extração pode acontecer com maior ou menor rapidez, influenciando diretamente nas taxas de resfriamento da peça. A termodinâmica do processo irá impor uma rejeição do soluto ou de solvente, que dependerá da liga no respectivo diagrama de fases e que terá, como consequência, um movimento de espécies associado a transferência de calor. Essa conjunção de transferência de calor e massa irá impor condições que determinarão a morfologia de crescimento e consequentemente o arranjo microestrutural.

A figura 3.2, mostra a microestrututa de um metal solidificado. As características mecânicas e químicas dos metais solidificados dependem principalmente do tamanho de grão, espaçamentos dendríticos, lamelares ou fibrosos, das heterogeneidades de composição química, do tamanho, da forma e distribuição das inclusões, de porosidade, entre outros.

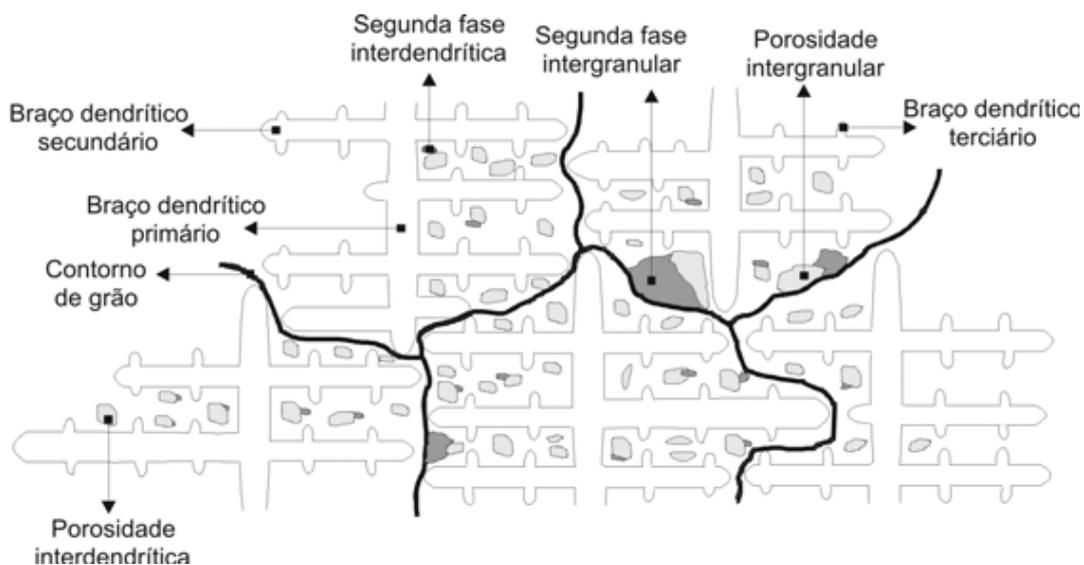


Figura 3.2 – Representação esquemática da microestrutura de solidificação (Garcia, 2001)

Outro fator importante que influencia diretamente na microestrutura resultante são as taxas de resfriamento. Estruturas com grãos mais refinados podem ser obtidos com o aumento das taxas de resfriamento, enquanto que estruturas com grãos menos refinados são obtidas com a diminuição das taxas de resfriamento.

### 3.2.1 Macroestrutura da Solidificação

A macroestrutura de solidificação de peças fundidas ou lingotes pode apresentar-se na forma de grãos totalmente colunares, totalmente equiaxiais, ou ainda apresentar as duas zonas estruturais, dependendo da composição química da liga e das condições de solidificação. Essa forma mista de solidificação ocorre quando os grãos equiaxiais encontram condições de nuclear e crescer no líquido, à frente da interface colunar de crescimento, provocando a transição colunar. (Ares, 2008; Garcia, 2005)

A macroestrutura da solidificação pode, em geral, apresentar três zonas distintas, conforme ilustrado na figura 3.3.

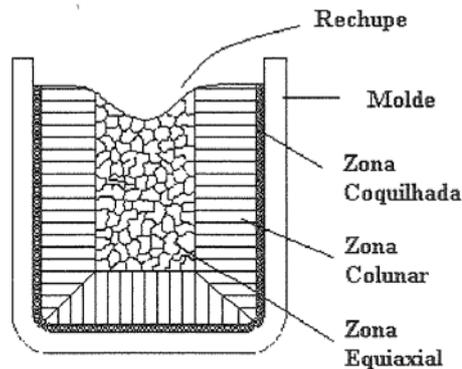


Figura 3.3 – Representação esquemática da macroestrutura da solidificação.

#### a) Zona coquilhada

Quando o metal líquido entra em contato com as paredes do molde refrigerado, uma fina camada é super-resfriada e nesta fina camada de líquido super-resfriado ocorre uma nucleação intensa de pequenos grãos equiaxiais com orientação cristalográfica aleatória. Estes grãos formam uma camada denominada zona coquilhada e estão situados na superfície do lingote.

O tamanho dessa zona é influenciado por uma série de fatores como coeficiente de transferência de calor metal/molde, temperatura de vazamento do metal líquido e as propriedades termofísicas do material do molde.

Quando o metal é vazado com alto grau de superaquecimento e as paredes do molde estão frias, somente uma camada fina de líquido consegue atingir temperaturas

abaixo da temperatura de nucleação, formando assim uma pequena zona coquilhada. Quando o metal líquido encontra-se próximo da temperatura de transformação, obtém-se uma zona coquilhada maior, no entanto, se o molde sofrer um pré-aquecimento antes do vazamento, então a zona coquilhada poderá ser imperceptível ou não existir. Se ocorrer um superaquecimento excessivo do metal líquido, poderá haver uma refusão em grande parte dos cristais nucleados de tal forma que não ocorrerá a formação da zona coquilhada (Garcia, 2001).

#### b) Zona Colunar

Formada por grãos alongados que crescem paralelamente na direção do fluxo de calor. Estes grãos se desenvolvem a partir dos grãos coquilhados.

O crescimento da zona colunar continua até que as condições de solidificação promovam o surgimento da zona equiaxial central, que bloqueia o crescimento dos grãos colunares.

A zona colunar é importante, por ser mais susceptível a trincas do que a zona equiaxial e porque uma longa zona colunar aumenta a severidade da segregação central e da porosidade.

O crescimento da zona colunar é afetado por inúmeros fatores como superaquecimento, concentração de carbono, tamanho da secção do lingote, taxa de extração do calor, entre outros.

Segundo Müller (Müller, 2002), os grãos colunares estão mais presentes em situações em que existem gradientes térmicos elevados, como, por exemplo, os existentes no Lingotamento Contínuo.

O tamanho da zona colunar aumenta com o aumento da temperatura de vazamento e diminui, em geral, com o aumento do teor de soluto da liga, como pode ser visto nas figuras 3.4(a) e 3.4(b), respectivamente. O aquecimento do molde antes do vazamento do metal líquido também influencia no comprimento da zona colunar, como mostra a figura 3.4(c).

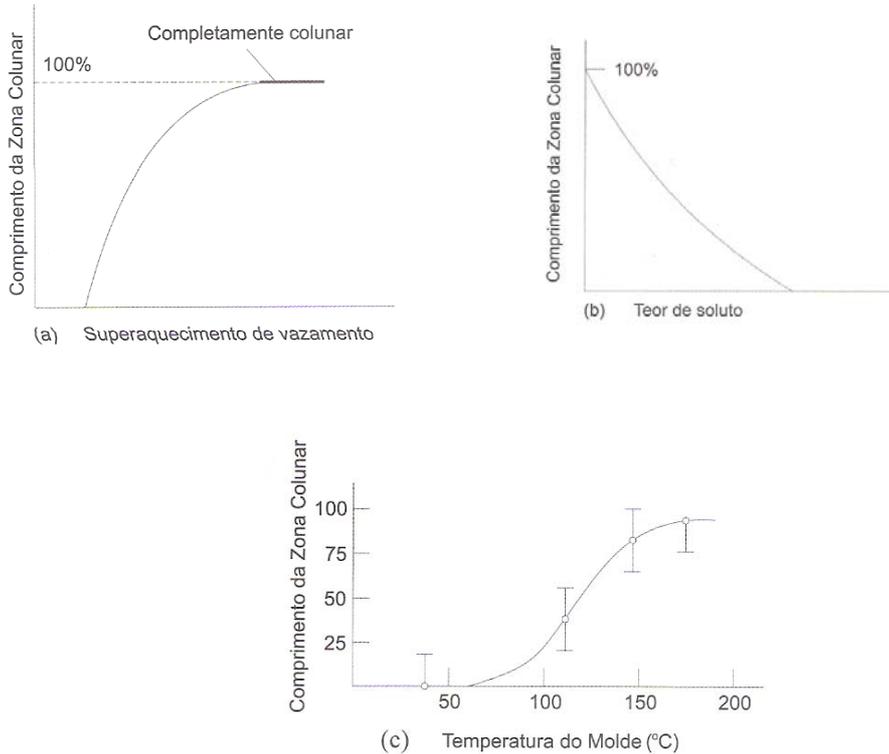


Figura 3.4 – Influência das variáveis de solidificação sobre o comprimento da zona colunar (Garcia, 2001)

### c) Zona Equiaxial Central

Esta zona é formada por grãos aleatórios que estão localizados no centro do lingote e forma-se quando o metal líquido na região central do lingote torna-se super-resfriado.

Os núcleos geradores dos grãos equiaxiais têm várias origens, mas só podem crescer após o líquido nas regiões centrais da lingoteira ter atingido temperaturas abaixo da *liquidus*. Eles podem surgir como decorência de eventos isolados de nucleação, a partir do crescimento da zona colunar ou da nucleação de cristais na superfície livre do líquido (Garcia, 2001).

A formação de grãos equiaxiais é favorecida pela existência de um choque térmico pequeno, e/ou ligas com intervalos de solidificação elevados, que permitem que muitos cristais sejam arrastados por correntes convectivas, permitindo o seu crescimento em locais afastados da interface metal/molde (Müller, 2002).

A figura 3.5 mostra a estrutura clássica de um lingote de secção quadrada solidificado que apresenta uma estrutura mista de solidificação (Flemings, 1974).

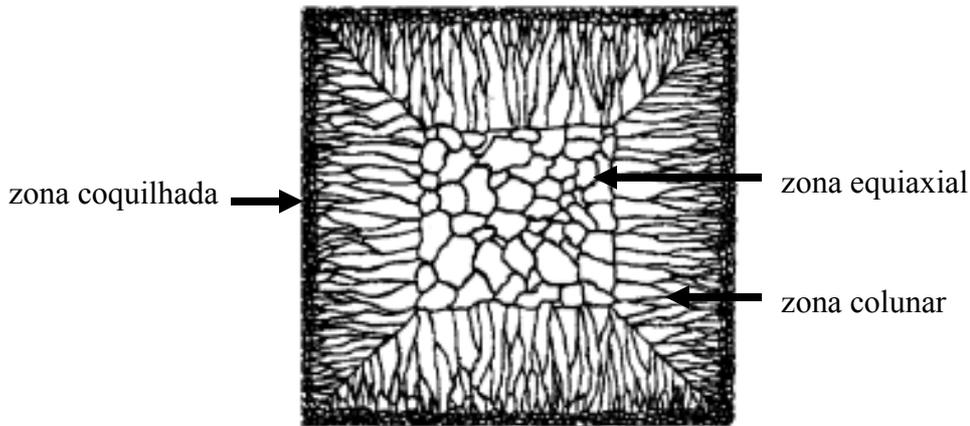


Figura 3.5 – Estrutura de um lingote mostrando a zona coquilhada, zona colunar e zona equiaxial (Flemings, 1974).

### 3.2.2 Transição Colunar-Equiaxial (TCE)

Dependendo da composição química das ligas e das condições de solidificação, os lingotes dos materiais metálicos podem apresentar estruturas completamente colunares ou totalmente equiaxiais.

Uma estrutura complexa mais comum e que geralmente ocorre na solidificação em moldes metálicos apresenta os dois tipos de estrutura e é mostrada na figura 3.6. No entanto, essa estrutura mista só ocorrerá se for possível nuclear e crescer grãos equiaxiais a frente da interface colunar de crescimento, provocando uma transição entre os modos de crescimento (Garcia, 2005).

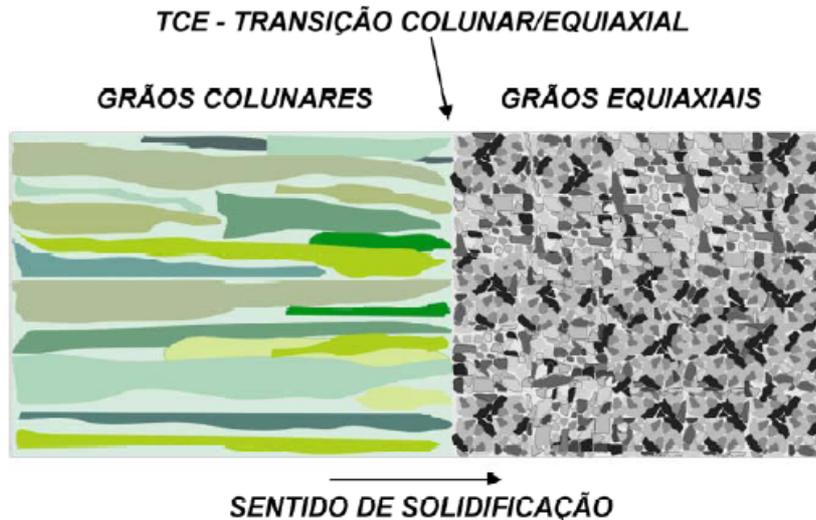


Figura 3.6 – Ilustração esquemática da transição colunar-equiaxial em ligas metálicas (Garcia, 2005).

Uma estrutura mista, ocorre quando grãos equiaxiais exercem um crescimento competitivo com a frente colunar, de tal forma que, se os cristais equiaxiais forem pequenos, eles serão adicionados a frente colunar e passam a crescer de forma colunar dendrítica, enquanto, se a zona super-resfriada à frente da interface colunar for relativamente grande e com alta densidade de cristais, esses grãos equiaxiais têm tempo suficiente para formar uma fração volumétrica suficientemente alta a ponto de bloquear o crescimento colunar.

Estas zonas podem ser vistas em peças fundidas e lingotes, no entanto, em alguns casos, uma ou outra zona pode aparecer ausente, como por exemplo, nos aços inoxidáveis onde a estrutura é muitas vezes totalmente colunar.

A zona central é mais comum em grandes lingotes, onde as perdas de calor por radiação são apreciáveis, e é típica de peças obtidas através de processos de fundição.

A transição colunar-equiaxial (TCE) é a transição de grãos colunares para grãos equiaxiais que é observada na macroestrutura de materiais solidificados (Martorano, 2009). A TCE foi examinada por muitos anos e estudada por muitos pesquisadores. Observações experimentais em sistemas de ligas diferentes mostraram que a posição da transição é dependente de parâmetros como a taxa de resfriamento, velocidade das frentes *liquidus* e *solidus*, tempo de solidificação local, gradientes de temperatura e recalescência (Ares, 2008).

As propriedades finais de uma peça solidificada estão diretamente relacionadas com a quantidade de grãos colunares e equiaxiais, que dependem da região da transição colunar-equiaxial presentes na estrutura bruta de solidificação. Sabe-se que a TCE ocorre durante a solidificação quando os grãos equiaxiais bloqueiam o crescimento dos grãos colunares (Flood, 1988).

Diversos trabalhos encontrados na literatura mostram a relação entre a transição colunar-equiaxial e as condições de solidificação de uma liga metálica. Hunt (Hunt, 1984) foi o primeiro pesquisador a propor um modelo matemático determinístico, para a previsão da TCE para condições estacionárias, assumindo que a TCE ocorreria quando a fração volumétrica de grãos equiaxiais imediatamente à frente das dendritas colunares atingisse o valor de 0,49.

Mais tarde, Wang e Beckermann, desenvolveram um modelo multifásico que considerou a transferência de calor e difusão de soluto para estudar a nucleação, crescimento e morfologia dos grãos (Wang, 1994).

Martorano (Martorano et.al, 2008), desenvolveram um modelo multifásico determinístico para simular a solidificação unidirecional com o objetivo de prever a estrutura bruta de solidificação. O modelo consiste nas equações macroscópicas de conservação da energia, massa e espécies químicas, acopladas a leis de crescimento dendrítico. O modelo adotado consistiu num modelo de nucleação dos grãos equiaxiais baseado em uma distribuição Gaussiana de super-resfriamentos e possibilitou a análise do efeito do coeficiente de transferência de calor no tamanho de grão médio e na posição da transição colunar-equiaxial.

A determinação do ponto onde ocorre a transição colunar-equiaxial é importante para o planejamento do processo e para que se possa projetar as propriedades mecânicas do produto. Assim, é necessário que se entendam os mecanismos que levam a essa transição, e principalmente, o desenvolvimento de modelos que permitam quantificar a proporção relativa de cada zona estrutural em função de seus parâmetros ou variáveis de influência. Os principais fatores de influência na transição colunar-equiaxial, segundo Doherty e Hunt (Doherty, 1977; Hunt, 1984) são:

- Superaquecimento do líquido: com o aumento do superaquecimento há um aumento na extensão da zona colunar. Em grandes fundidos, essa tendência é menos perceptível;

- Resfriamento na interface metal/molde: valores de coeficiente de transferência de calor ( $h_i$ ) mais elevados retardam a transição colunar-equiaxial;
- Resfriamento do líquido: o aumento das taxas de resfriamento favorece a extensão da zona colunar;
- Composição química: o teor de soluto favorece a transição colunar-equiaxial à medida que é aumentado, fazendo com que o tamanho da zona colunar diminua com o aumento do teor do elemento de liga;
- Ligas binárias: a estrutura colunar é favorecida por baixos valores do parâmetro de super-resfriamento, enquanto que altos valores favorecem a transição colunar-equiaxial;
- Refinadores de grão: o tamanho do grão é dependente da taxa de resfriamento. O crescimento colunar é eliminado pela adição de refinadores de grãos;
- Mecanismos de vibração: o mecanismo de vibração favorece o refino de grãos e pode aumentar a zona equiaxial;
- Tamanho do molde: o aumento da seção transversal favorece a formação da zona equiaxial, já que o efeito do superaquecimento é diminuído;
- Fluxo do fluido natural ou forçado: o tamanho da zona colunar diminui com o aumento do fluxo do fluido.

Na grande maioria das situações práticas é desejável que a estrutura bruta de solidificação se apresente na forma de grãos equiaxiais, já que esse tipo de estrutura caracteriza-se pela isotropia de suas propriedades mecânicas.

O tipo e o tamanho dos grãos formados são determinados pela composição química da liga, taxa de resfriamento e por interferências de natureza química na composição do líquido ou mecânica durante o processo de solidificação. Para desenvolver estruturas completamente equiaxiais é preciso impedir o crescimento colunar, por meio de dois procedimentos principais:

- controle da nucleação através das condições de solidificação ou pelo uso de inoculantes;
- utilização de métodos físicos para produzir movimento forçado no metal líquido (vibração, agitação mecânica, agitação eletromagnética, etc.).

### 3.3 Modelagem Matemática do Processo de Solidificação no Lingotamento Contínuo

A maioria dos fenômenos físicos que ocorrem na solidificação podem ser descritos em termos de equações diferenciais parciais (E.D.P), no entanto, nem sempre é possível resolver analiticamente tais equações. Neste caso, é necessário o emprego de técnicas numéricas.

O caso de transferência de calor durante o processo de solidificação apresenta certa complexidade do ponto de vista matemático causada pela contínua geração de calor na interface sólido/líquido e também pelo movimento dessa fronteira que torna o problema não-linear.

Várias técnicas numéricas são utilizadas na resolução desses problemas, no entanto, os métodos numéricos mais explorados no desenvolvimento de modelos matemáticos são o Método de Monte Carlo, o Método dos Elementos Finitos (MEF) e o Método das Diferenças Finitas (MDF).

#### 3.3.1 A Equação Geral da Condução de Calor

A equação que descreve o fenômeno de transferência de calor na solidificação é dada por uma E.D.P. conhecida por Equação Geral da Condução de Calor em regime Não-Estacionário ou Transitório (Tieu, 1997; Brimacombe, 1984; Santos, 1996) dada por:

$$\rho \cdot c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k(x) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k(y) \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k(z) \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{q} \quad (3.1)$$

onde:

$k$  = a condutividade térmica [W/m.K]

$c$  = calor específico [J/kg.K]

$\rho$  = densidade [kg/m<sup>3</sup>]

$\dot{q}$  = termo de geração de calor

$T$  = temperatura [K]

$t$  = tempo relativo a solidificação [s]

$x, y, z$  = coordenadas cartesianas [m]

$\frac{\partial T}{\partial t}$  = taxa de resfriamento ou aquecimento do material [K/s]

$\frac{\partial T}{\partial x}, \frac{\partial T}{\partial y}, \frac{\partial T}{\partial z}$  = gradiente térmico entre os pontos fixos da linha de condução [K/m]

Devido as altas velocidades de lingotamento e as altas taxas de retirada de calor nas faces laterais do lingote (direções  $x$  e  $y$ ) pelo molde, região de chuveiros, rolos refrigerados e região de radiação, o fluxo de calor na direção de extração (eixo  $z$ ) é pequeno em relação às direções  $x$  e  $y$ , podendo ser desprezado (Lally, 1990).

A Equação Geral da Condução de Calor na sua forma bidimensional (Tieu, 1997; Brimacombe, 1984) pode ser escrita como:

$$\rho \cdot c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k(x) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k(y) \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \dot{q} \quad (3.2)$$

O termo de geração de calor na mudança de fase ( $\dot{q}$ ) está associado à liberação de calor latente proveniente da transformação de fase e varia em função da taxa de fração líquida, conforme mostra a equação:

$$\dot{q} = -\delta H \cdot \frac{\partial f_L}{\partial t} \quad (3.3)$$

onde  $\delta H$  é a variação da entalpia e  $\frac{\partial f_L}{\partial t}$  é a variação da fração líquida ( $f_L$ ) em função do tempo.

Considerando que os valores do calor específico nos estados sólido e líquido da liga são bastante próximos, tem-se a seguinte aproximação:

$$\delta H \cong \rho \cdot L \quad (3.4)$$

onde:

$L$  = calor latente de fusão [J / kg].

A fração sólida ( $f_S$ ) é dada por:

$$f_S = 1 - f_L \quad (3.5)$$

Substituindo as equações (3.4) e (3.5) na equação (3.3) tem-se que:

$$\dot{q} = \rho \cdot L \cdot \frac{\partial f_S}{\partial t} \quad (3.6)$$

A derivada de ( $f_S$ ) em relação ao tempo pode ser decomposta em:

$$\frac{\partial f_S}{\partial t} = \frac{\partial f_S}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.7)$$

Substituindo as equações (3.6) e (3.7) em (3.2) tem-se:

$$\rho \cdot c' \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k(x) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k(y) \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (3.8)$$

o termo  $c'$  é interpretado como um pseudocalor específico e é dado por :

$$c' = c_p - L \frac{\partial f_S}{\partial t} \quad (3.9)$$

sendo:

$$c_p = (1 - f_L) \cdot c_S + f_L \cdot c_L \quad (3.10)$$

os subscritos  $S, L$  e  $P$  representam as fases sólida, líquida e pastosa, respectivamente, e ( $f_L$ ) corresponde ao volume da fração líquida local.

A equação (3.8) representa a equação geral da condução de calor considerando o efeito da taxa de variação da fração solidificada com a liberação do calor latente do material na transformação de fase líquido/sólido ao longo da solidificação de uma liga binária.

### 3.3.2 Condutividade Térmica, Calor Específico e Densidade

A condutividade térmica ( $k$ ), o calor específico ( $c$ ) e a densidade ( $\rho$ ) da fase pastosa da liga podem ser aproximados a partir da ponderação de cada propriedade nas fases líquida e sólida.

$$k_p = (1 - f_L) \cdot k_S + f_L \cdot k_L \quad (3.11)$$

$$c_p = (1 - f_L) \cdot c_S + f_L \cdot c_L \quad (3.12)$$

$$\rho_p = (1 - f_L) \cdot \rho_S + f_L \cdot \rho_L \quad (3.13)$$

Alguns autores consideram para o Lingotamento Contínuo, um valor de 420 W/m.K para a condutividade térmica do metal líquido na região do molde e nas primeiras regiões de chuveiros, com o objetivo de se levar em conta o efeito da convecção no poço líquido. Outros autores utilizam a condutividade térmica efetiva ( $k_{ef}$ ), cujo valor é sete vezes maior que a condutividade térmica do líquido ( $k_L$ ). Uma equação alternativa para o valor de ( $k_{ef}$ ) pode ainda ser obtido considerando o efeito da convecção do líquido na zona pastosa. Neste caso, ( $k_{ef}$ ) é definida em função a fração líquida (Garcia, 2006), conforme equação (3.14).

$$k_{ef} = k_L (1 + 6 \cdot f_L^2) \quad (3.14)$$

### 3.3.3 Determinação da Fração Sólida

Com o resfriamento do metal até a zona pastosa, dá-se início ao crescimento dendrítico, que é caracterizado no modelo matemático pela fração sólida. Várias formulações para o cálculo da fração sólida foram determinadas para a condição de solidificação. A fração sólida pode ser expressa por vários parâmetros como concentração e temperatura da liga.

Considerando que não há difusão no estado sólido e mistura completa no estado líquido, e que a variação da fração sólida é função apenas da temperatura, então, a fração sólida ( $f_S$ ) pode ser obtida segundo a regra da alavanca (Kurz, 1992), dada por:

$$f_S = \left( \frac{1}{1-k'} \right) \cdot \left( \frac{T_{Liq} - T}{T_f - T} \right) \quad (3.15)$$

onde:

$T_f$  = temperatura de fusão do solvente

$T_{Liq}$  = temperatura liquidus

$k'$  = coeficiente de redistribuição do soluto expresso pela relação entre a concentração de soluto no sólido ( $C_S$ ) e a concentração de soluto no líquido ( $C_L$ ), dado por:

$$k' = \frac{C_S}{C_L} \quad (3.16)$$

### 3.3.4 Método Numérico das Diferenças Finitas (MDF)

Para resolver a equação (3.8) foi utilizado o Método de Diferenças Finitas, que consiste em representar o lingote através uma malha formada por elementos discretos de lados  $\Delta x$  e  $\Delta y$  onde o tempo é dividido em intervalos  $\Delta t$ . De acordo com esse método, cada elemento possui uma temperatura em seu interior. A equação diferencial da condução de calor é substituída por outra equivalente, porém aproximada, que pode ser obtida através da série de Taylor ou do balanço de energia. O objetivo da formulação das diferenças finitas é determinar a partir do conhecimento das temperaturas de todos os elementos em determinado tempo ( $n$ ), as temperaturas no próximo intervalo de tempo ( $n + 1$ ).

#### 3.3.4.1 Formação da Malha do MDF

Para formar a malha no Método de Diferenças Finitas é necessário dividir o meio físico em regiões de diferenças finitas e atribuir a cada região um ponto de referência, denominado ponto nodal, situado no interior do elemento da malha, como

mostra a figura 3.7 para o sistema bidimensional. As localizações nas direções  $x$  e  $y$  são representadas pelos índices  $i$  e  $j$  respectivamente.

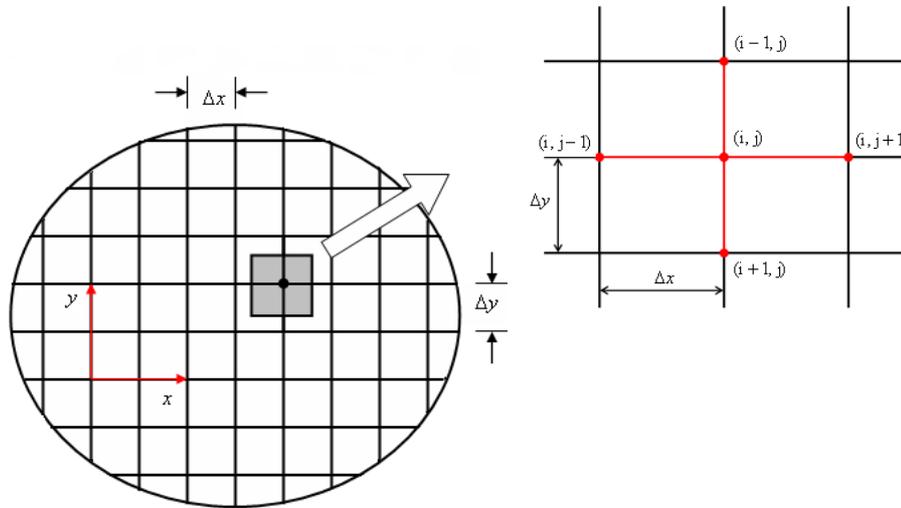


Figura 3.7 – Representação de uma malha bidimensional

### 3.3.4.2 A Expansão de Taylor para o Método de Diferenças Finitas

Seja  $(f)$  uma função que possui derivadas de ordem  $n$  ( $n \geq 1$ ), de modo que os valores de suas primeiras  $(n)$  derivadas coincidam com os valores  $(f)$  em  $(a)$  num intervalo aberto  $(I)$  onde  $(a)$  é um número fixo em  $(I)$ .

O polinômio de Taylor do  $n$ -ésimo grau da função  $(f)$  em  $(a)$  é uma função polinomial  $(P_n)$  definida por:

$$P_n(x) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \frac{f'''(a)}{3!}(x-a)^3 + \dots + \frac{f^{(m)}(a)}{m!}(x-a)^m \quad (3.17)$$

Para valores de  $(x)$  próximos de  $(a)$  e para valores de  $(m)$  suficientemente grande, os valores de  $P_n(x)$  tornam-se cada vez mais próximos de  $f(x)$ .

Neste caso, dada a função  $T(x)$ , queremos determinar  $T(i + \Delta x)$  e  $T(i - \Delta x)$ , onde  $(i)$  é um ponto genérico do eixo  $(x)$ .

Fazendo  $a = i$  tem-se:

$$T(i + \Delta x) = T(i) + \Delta x \cdot \frac{\partial T(i)}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2!} \cdot \frac{\partial^2 T(i)}{\partial x^2} + \dots + \frac{\Delta x^m}{m!} \cdot \frac{\partial^m T(i)}{\partial x^m} \quad (3.18)$$

$$T(i - \Delta x) = T(i) - \Delta x \cdot \frac{\partial T(i)}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2!} \cdot \frac{\partial^2 T(i)}{\partial x^2} + \dots + (-1)^m \frac{\Delta x^m}{m!} \cdot \frac{\partial^m T(i)}{\partial x^m} \quad (3.19)$$

Truncando a série dada na equação (3.18) no termo de segunda ordem, tem-se:

$$T(i + \Delta x) = T(i) + \Delta x \cdot \frac{\partial T(i)}{\partial x} + E(\Delta^2) \quad (3.20)$$

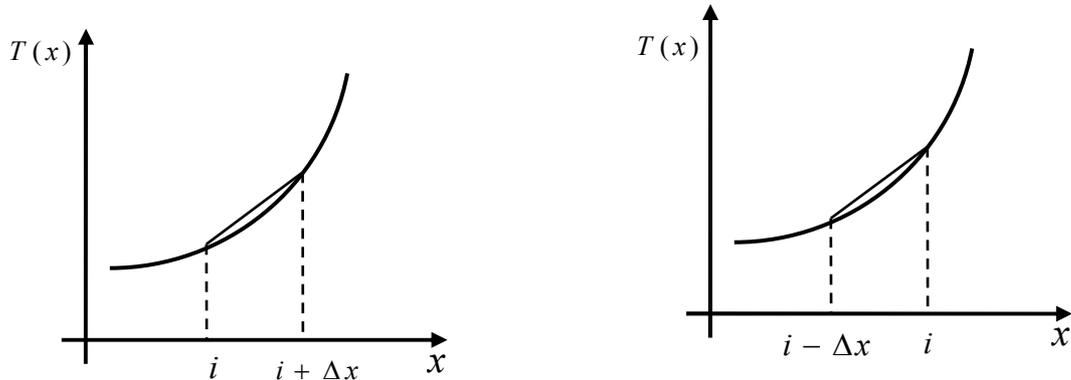
onde  $E(\Delta^2)$  corresponde ao erro devido ao truncamento no termo de segunda ordem.

O erro de truncamento pode ser minimizado fazendo  $\Delta \rightarrow 0$ . Neste caso, considerando  $E(\Delta^2) = 0$  podemos reescrever as equações (3.18) e (3.19) como:

$$\frac{\partial T(i)}{\partial x} \approx \frac{T(i + \Delta x) - T(i)}{\Delta x} \quad \text{Diferença Finita de Avanço} \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial T(i)}{\partial x} \approx \frac{T(i) - T(i - \Delta x)}{\Delta x} \quad \text{Diferença Finita de Retorno} \quad (3.22)$$

A Diferença Finita de Avanço e de Retorno podem ser vistas nas figuras 3.8a e 3.8b.



(a) Diferença Finita de Avanço

(b) Diferença Finita de Retorno

Figura 3.8 – Representação geométrica da Diferença Finita de avanço e de retorno

De maneira análoga, subtraindo a equação (3.21) de (3.22) e considerando  $E(\Delta^3) = 0$ , obtém-se a Diferença Finita Central:

$$\frac{\partial T(i)}{\partial x} \approx \frac{T(i + \Delta x) - T(i - \Delta x)}{2 \cdot \Delta x} \tag{3.23}$$

A representação geométrica da Diferença Finita Central pode ser vista na figura 3.9:

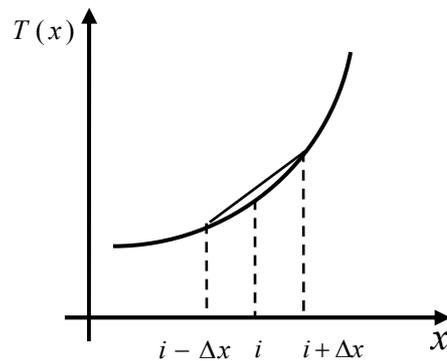


Figura 3.9 – Representação geométrica da Diferença Finita Central

Para um sistema bidimensional, as equações (3.21) e (3.22) são escritas inserindo a coordenada  $y$ , representada pela letra  $j$ .

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{i,j} \approx \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{\Delta x} \quad (3.24)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{i,j} \approx \frac{T_{i,j} - T_{i-1,j}}{\Delta x} \quad (3.25)$$

Somando as equações (3.18) e (3.19) e considerando  $E(\Delta^3) = 0$ , tem-se:

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{i,j} \approx \frac{T_{i+1,j} - 2.T_{i,j} + T_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} \quad (3.26)$$

De forma semelhante as derivadas em relação a  $y$ , são escritas como:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{i,j} \approx \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j}}{\Delta y} \quad (3.27)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{i,j} \approx \frac{T_{i,j} - T_{i,j-1}}{\Delta y} \quad (3.28)$$

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right|_{i,j} \approx \frac{T_{i,j+1} - 2.T_{i,j} + T_{i,j-1}}{(\Delta y)^2} \quad (3.29)$$

onde:

$$T_{i+1,j} = T(i + \Delta x, j) \quad (3.30)$$

$$T_{i-1,j} = T(i - \Delta x, j) \quad (3.31)$$

$$T_{i,j+1} = T(i, j + \Delta y) \quad (3.32)$$

$$T_{i,j-1} = T(i, j - \Delta y) \quad (3.33)$$

$$T_{i,j} = T(i, j) \quad (3.34)$$

Aproximando  $\frac{\partial T}{\partial t}$  pela diferença finita de avanço para um ponto genérico (i,j) tem-se:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{i,j} \approx \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} \quad (3.35)$$

Os índices (n) e (n+1) são usados para mostrar a dependência da temperatura em função do tempo ( $t = n \cdot \Delta t$ ). A temperatura no tempo (n+1) é obtida a partir das temperaturas no tempo anterior (n), neste caso, a temperatura em cada nó deve ser conhecida no tempo ( $t = 0$ ) pelas condições iniciais e as demais temperaturas são obtidas iniciando os cálculos em ( $t = \Delta t$ ), ou seja, (n = 1) e continuam para os demais valores de (n).

### 3.3.4.3 O Método das Diferenças Finitas no Modo Explícito

Para um material isotrópico, considera-se  $K(x) = K(y) = K$ , assim podemos reescrever a equação bidimensional do Lingotamento Contínuo dada em (3.8) como:

$$\frac{1}{a} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (3.36)$$

Substituindo as equações (3.26), (3.29) e (3.35) na equação (3.36), podemos escrever a equação do calor na forma de diferenças finitas para um nó (i, j):

$$\frac{1}{a} \cdot \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} = \frac{T_{i+1,j}^n - 2 \cdot T_{i,j}^n + T_{i-1,j}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{T_{i,j+1}^n - 2 \cdot T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n}{(\Delta y)^2} \quad (3.37)$$

onde (a) é a difusividade térmica do material [ $m^2/s$ ], que para a solidificação de ligas, é dado por:

$$a = \frac{k}{\rho \cdot c'} \quad (3.38)$$

O valor de  $(\Delta t)$  não deve ser escolhido arbitrariamente, pois é preciso verificar o critério de estabilidade do sistema. Para se alcançar a estabilidade no programa numérico, deve-se considerar para o caso bidimensional um intervalo de interação  $(\Delta t)$  que satisfaça a seguinte condição:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{4 \cdot a} \quad (3.39)$$

#### 3.3.4.4 Formulação do Modelo Numérico para a Solidificação Bidimensional no Lingotamento Contínuo

A equação de condução de calor obtida pelo balanço térmico na sua forma discretizada pelo M.D.F., é dada por:

$$T_{i,j}^{n+1} = \frac{\Delta t}{(\rho \cdot c') \cdot \Delta x^2} \cdot [k_{eq_{i+1,j}}^n \cdot (T_{i+1,j}^n - T_{i,j}^n) + k_{eq_{i-1,j}}^n \cdot (T_{i-1,j}^n - T_{i,j}^n) + k_{eq_{i,j+1}}^n \cdot (T_{i,j+1}^n - T_{i,j}^n) + k_{eq_{i,j-1}}^n \cdot (T_{i,j-1}^n - T_{i,j}^n)] + T_{i,j}^n \quad (3.40)$$

onde os valores das condutividades equivalentes para o elemento  $(i+1, j)$ , sendo este um dos quatro vizinhos do elemento  $(i, j)$  são encontrados da seguinte forma.

$$\text{Se } T_{i+1,j}^n \geq T_L \text{ e } T_{i,j}^n \geq T_L \Rightarrow k_{eq_{i+1,j}}^n = k_L \quad (3.41)$$

$$\text{Se } T_{i+1,j}^n \leq T_S \text{ e } T_{i,j}^n \leq T_S \Rightarrow k_{eq_{i+1,j}}^n = k_S \quad (3.42)$$

$$\text{Se } T_{i+1,j}^n > T_L \text{ e } T_S < T_{i,j}^n < T_L \Rightarrow k_{eq_{i+1,j}}^n = \frac{2 \cdot k_L \cdot k_P}{k_L + k_P} \quad (3.43)$$

$$\text{Se } T_{i+1,j}^n < T_S \text{ e } T_S < T_{i,j}^n < T_L \Rightarrow k_{eq_{i+1,j}}^n = \frac{2 \cdot k_S \cdot k_P}{k_S + k_P} \quad (3.44)$$

Os valores das condutividades equivalentes para os demais elementos vizinhos do elemento  $(i, j)$  são encontrados de maneira equivalente.

### Condições de Contorno

A malha do lingote e a representação dos elementos vizinhos para o sistema bidimensional são mostradas nas figuras 3.10 e 3.11 respectivamente:

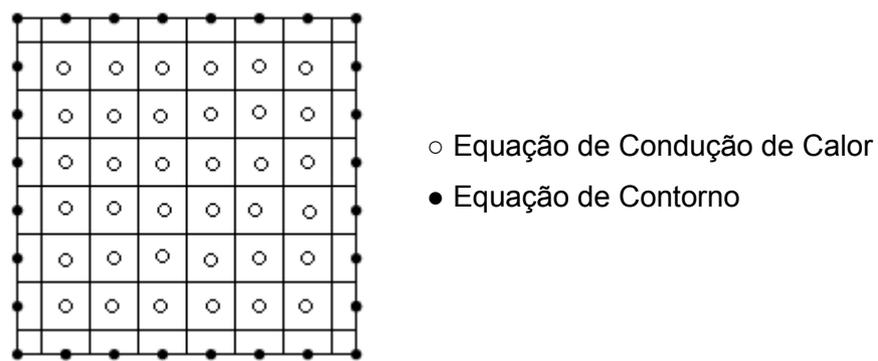


Figura 3.10 – Malha do lingote mostrando as condições de contorno

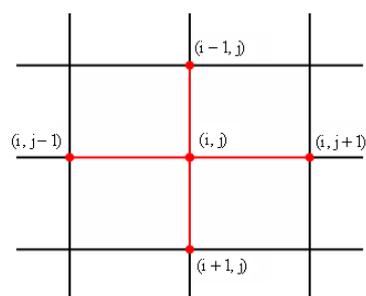


Figura 3.11 – Representação dos elementos vizinhos para o sistema bidimensional

Para os elementos em  $i=1$  e  $2 \leq j \leq N-1$ , o balanço térmico é ilustrado na figura 3.12 e dado pela equação (3.45):

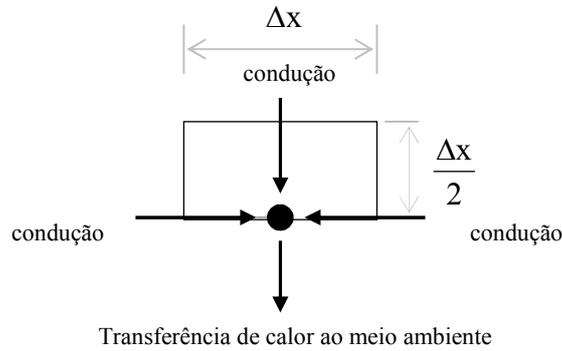


Figura 3.12 – Representação esquemática do fluxo de calor para os elementos situados em  $i=1$  e  $2 \leq j \leq N-1$

$$T_{i,j}^{n+1} = \frac{\Delta t}{(\rho \cdot c') \cdot \Delta x} \cdot \left[ k_{eq_{i,j-1}}^n \cdot \left( \frac{T_{i,j-1}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + k_{eq_{i,j+1}}^n \cdot \left( \frac{T_{i,j+1}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + 2 \cdot k_{eq_{i-1,j}}^n \cdot \left( \frac{T_{i-1,j}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + 2 \cdot h_2 \cdot (T_{amb} - T_{i,j}^n) \right] + T_{i,j}^n \quad (3.45)$$

Para os elementos em  $i=L$  e  $2 \leq j \leq N-1$ , o balanço térmico é ilustrado na figura 3.13 e dado pela equação (3.46):

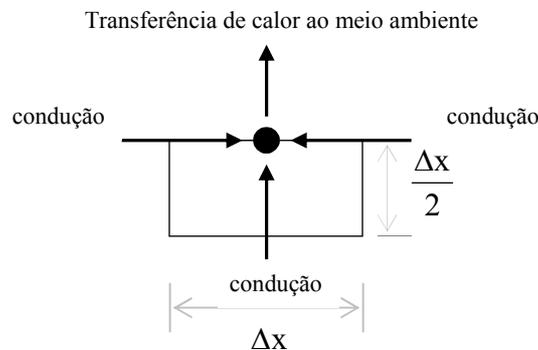


Figura 3.13 – Representação esquemática do fluxo de calor para os elementos situados em  $i=L$  e  $2 \leq j \leq N-1$

$$T_{i,j}^{n+1} = \frac{\Delta t}{(\rho \cdot c') \Delta x} \cdot \left[ k_{eq_{i,j-1}}^n \cdot \left( \frac{T_{i,j-1}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + k_{eq_{i,j+1}}^n \cdot \left( \frac{T_{i,j+1}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + 2 \cdot k_{eq_{i+1,j}}^n \cdot \left( \frac{T_{i+1,j}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + 2 \cdot h_2 \cdot (T_{amb} - T_{i,j}^n) \right] + T_{i,j}^n \quad (3.46)$$

Para os elementos em  $2 \leq i \leq L-1$  e  $j=1$ , o balanço térmico é ilustrado na figura 3.14 e dado pela equação (3.47).

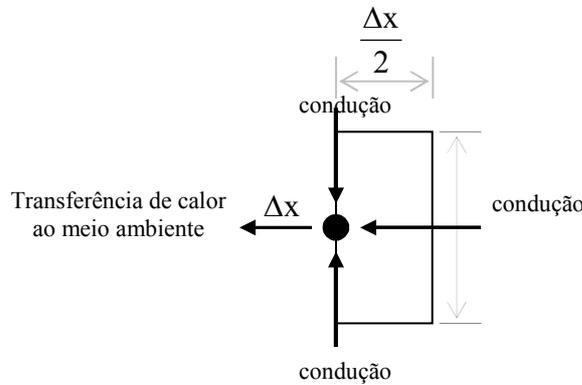


Figura 3.14 – Representação esquemática do fluxo de calor para os elementos situados em  $2 \leq i \leq L-1$  e  $j=1$

$$T_{i,j}^{n+1} = \frac{\Delta t}{(\rho \cdot c') \Delta x} \cdot \left[ k_{eq_{i-1,j}}^n \cdot \left( \frac{T_{i-1,j}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + k_{eq_{i+1,j}}^n \cdot \left( \frac{T_{i+1,j}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + 2 \cdot k_{eq_{i,j+1}}^n \cdot \left( \frac{T_{i,j+1}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + 2 \cdot h_1 \cdot (T_{amb} - T_{i,j}^n) \right] + T_{i,j}^n \quad (3.47)$$

Para os elementos em  $2 \leq i \leq L-1$  e  $j=N$ , o balanço térmico é ilustrado na figura 3.15 e dado pela equação (3.48).

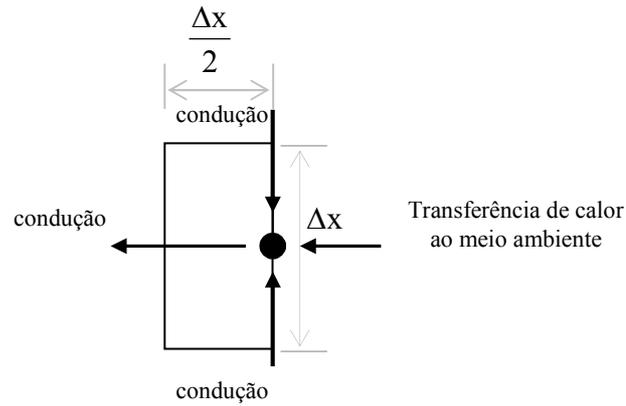


Figura 3.15 – Representação esquemática do fluxo de calor para os elementos situados em  $2 \leq i \leq L-1$  e  $j = N$

$$T_{i,j}^{n+1} = \frac{\Delta t}{(\rho \cdot c') \cdot \Delta x} \cdot \left[ k_{eq_{i-1,j}}^n \cdot \left( \frac{T_{i-1,j}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + k_{eq_{i+1,j}}^n \cdot \left( \frac{T_{i+1,j}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + 2k_{eq_{i,j-1}}^n \cdot \left( \frac{T_{i,j-1}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + 2 \cdot h_1 \cdot (T_{amb} - T_{i,j}^n) \right] + T_{i,j}^n \quad (3.48)$$

Para o elemento em  $i = 1$  e  $j = 1$ , o balanço térmico é ilustrado na figura 3.16 e dado pela equação (3.49).

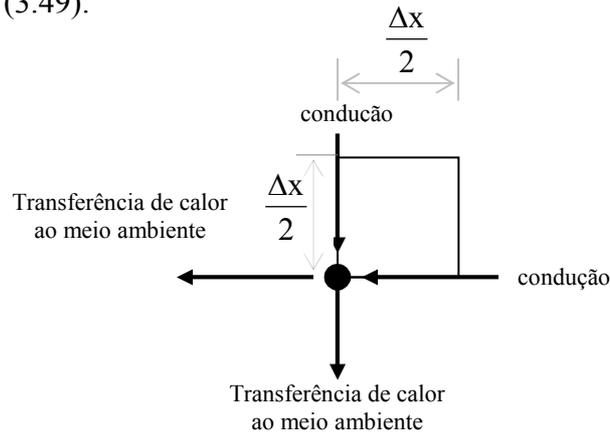


Figura 3.16 – Representação esquemática do fluxo de calor para os elementos situados em  $i = 1$  e  $j = 1$ .

$$T_{i,j}^{n+1} = \frac{\Delta t}{(\rho \cdot c') \cdot \Delta x} \cdot \left[ k_{eq_{i,j+1}}^n \cdot \left( \frac{T_{i,j+1}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + k_{eq_{i-1,j}}^n \cdot \left( \frac{T_{i-1,j}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + h_1 \cdot (T_{amb} - T_{i,j}^n) + h_2 \cdot (T_{amb} - T_{i,j}^n) \right] + T_{i,j}^n \quad (3.49)$$

Para o elemento em  $i = 1$  e  $j = N$ , o balanço térmico é ilustrado na figura 3.17 e dado pela equação (3.50)

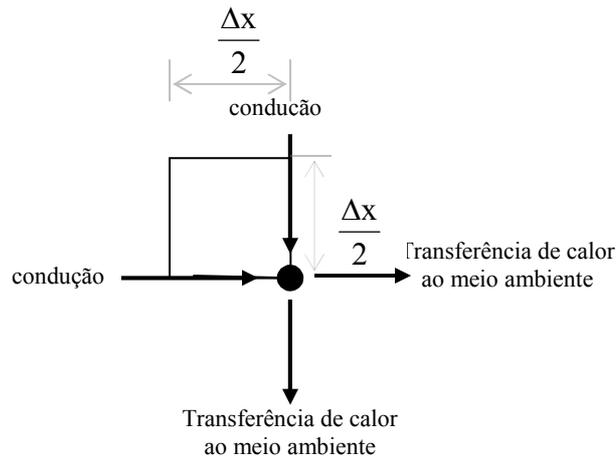


Figura 3.17 – Representação esquemática do fluxo de calor para os elementos situados em  $i = 1$  e  $j = N$ .

$$T_{i,j}^{n+1} = \frac{\Delta t}{(\rho \cdot c') \cdot \Delta x} \cdot \left[ k_{eq_{i,j-1}}^n \cdot \left( \frac{T_{i,j-1}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + k_{eq_{i-1,j}}^n \cdot \left( \frac{T_{i-1,j}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + h_1 \cdot (T_{amb} - T_{i,j}^n) + h_2 \cdot (T_{amb} - T_{i,j}^n) \right] + T_{i,j}^n \quad (3.50)$$

Para o elemento em  $i = L$  e  $j = 1$ , o balanço térmico é ilustrado na figura 3.18 e dado pela equação (3.51)

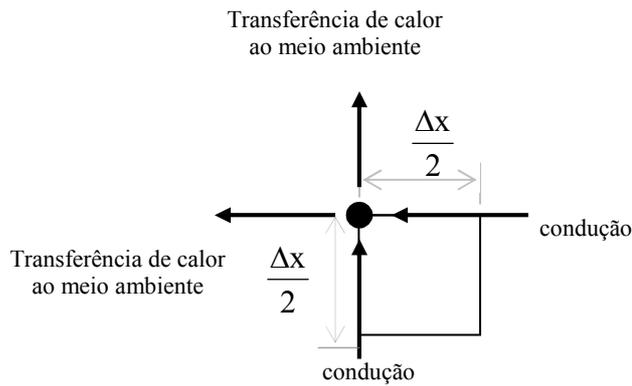


Figura 3.18 – Representação esquemática do fluxo de calor para os elementos situados em  $i = L$  e  $j = 1$ .

$$T_{i,j}^{n+1} = \frac{\Delta t}{(\rho \cdot c') \cdot \Delta x} \cdot \left[ k_{eq_{i,j+1}}^n \cdot \left( \frac{T_{i,j+1}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + k_{eq_{i+1,j}}^n \cdot \left( \frac{T_{i+1,j}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + h_1 \cdot (T_{amb} - T_{i,j}^n) + h_2 \cdot (T_{amb} - T_{i,j}^n) \right] + T_{i,j}^n \quad (3.51)$$

Para o elemento em  $i = L$  e  $j = N$ , o balanço térmico é ilustrado na figura 3.19 e dado pela equação (3.52)

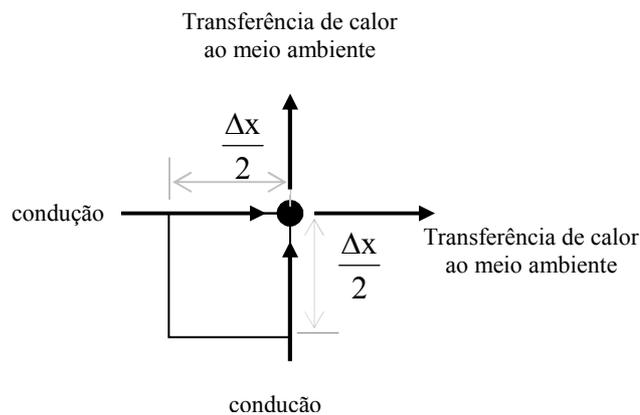


Figura 3.19 – Representação esquemática do fluxo de calor para os elementos situados em  $i = L$  e  $j = N$ .

$$T_{i,j}^{n+1} = \frac{\Delta t}{(\rho \cdot c') \cdot \Delta x} \cdot \left[ k_{eq_{i,j-1}}^n \cdot \left( \frac{T_{i,j-1}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + k_{eq_{i+1,j}}^n \cdot \left( \frac{T_{i+1,j}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + h_1 \cdot (T_{amb} - T_{i,j}^n) + h_2 \cdot (T_{amb} - T_{i,j}^n) \right] + T_{i,j}^n \quad (3.52)$$

### 3.4 Método de Monte Carlo

#### 3.4.1 História do Método de Monte Carlo

O Método de Monte Carlo é um método estatístico utilizado em simulações estocásticas para resolver problemas em diversas áreas como matemática, física e engenharia (Newman, 1999).

Foi Metrópolis em 1947, o primeiro a pensar nele, mas só em 1949 é que o nome Monte Carlo apareceu pela primeira vez num artigo de Metrópolis e Ulan (Metrópolis, 1949).

O algoritmo de Metrópolis, introduzido por Nicolas Metrópolis em 1953, é o mais utilizado nas simulações aplicando o Método de Monte Carlo. Pode-se considerar o algoritmo de Metrópolis um caso especial de amostragem de importância que gera estados com a probabilidade de Boltzmann, responsável pela dinâmica da simulação, determinando as taxas de transição entre os níveis de energia em sistemas naturais.

Pela simplicidade das idéias envolvidas neste método e do grande avanço dos computadores, o Método de Monte Carlo tornou-se uma poderosa ferramenta para resolver problemas com aplicações em diversas áreas como a física, matemática, biologia, química, astronomia entre outras.

A distribuição dos valores calculados deve refletir a probabilidade de ocorrência dos mesmos.

A simulação de Monte Carlo oferece muitas vantagens<sup>1</sup>. Entre elas, podemos citar:

- As distribuições das variáveis do modelo não precisam ser aproximadas;
- Correlações e outras interdependências podem ser modeladas;

<sup>1</sup>Disponível em: <[http://www2.dbd.puc-rio.br/pergamum/tesesabertas/0212629\\_06\\_cap\\_06.pdf](http://www2.dbd.puc-rio.br/pergamum/tesesabertas/0212629_06_cap_06.pdf)>

- O computador realiza todo trabalho de geração dos valores aleatórios;
- O nível de precisão da simulação pode ser melhorado através de um simples aumento do número de interações calculadas;
- A validade da teoria da simulação de Monte Carlo é amplamente reconhecida, o que permite que seus resultados sejam facilmente aceitos;
- Alterações no modelo podem ser feitas rapidamente e os novos resultados podem ser comparados com os anteriores.
- As técnicas de simulação de Monte Carlo são muito flexíveis, permitindo a apresentação de inúmeros aspectos do funcionamento dos sistemas que às vezes os modelos analíticos têm dificuldade em realizar.

### **3.4.2 O Método de Monte Carlo e o Crescimento dos Grãos**

A estrutura de um material solidificado é subdividida em um grande número de zonas, cada uma delas com uma orientação cristalográfica diferente, ou seja, cada uma das zonas forma um cristal independente. Estes cristais que possuem uma orientação particular são chamados de grãos. Todos os grãos de um material possuem a mesma estrutura cristalina, no entanto, diferem quanto a sua orientação cristalográfica. Nas fronteiras dos grãos com orientações diferentes, existe uma transição entre duas orientações diferentes e, por isso, os átomos que fazem parte desta fronteira estão mal organizados e com um nível de energia mais alto. Esta região é chamada de “contorno de grão”.

O crescimento de grão baseia-se num princípio natural de evolução de estruturas onde há minimização de área interfacial por unidade de volume, que encontra-se também em organismos biológicos e divisões ecológicas.

Tradicionalmente o estudo do crescimento de grão tem sido feito pela análise e comparação quantitativa de micrografias, muitas vezes com o auxílio de computadores e softwares de análise de imagem. Mais recentemente, entretanto, com o desenvolvimento do poder de processamento dos computadores, surgiu uma nova possibilidade, estender o uso da computação para simular o crescimento de grão.

O uso do Método de Monte Carlo se mostra particularmente interessante para a simulação de um processo que envolve interações atômicas, já que se trata de um fenômeno físico habitualmente estudado com o auxílio da estatística. Com uma

conceituação igualmente estatística, o método apresenta uma compatibilidade expressiva com o fenômeno.

A idéia básica do Método de Monte Carlo consiste em simular um sistema físico para determinar suas propriedades termodinâmicas a partir de suas propriedades estatísticas.

### 3.4.3 Física Estatística, Termodinâmica e Simulações de Monte Carlo

#### a) Média de Ensemble

A média de ensemble de uma variável  $A$  é denotada por  $\langle A \rangle$  e representa a média aritmética dos valores de  $A$  sobre as configurações do ensemble, ou seja, se  $P_i$  é a probabilidade de encontrar o sistema no micro-estado  $i$  e  $A_i$  é o valor de  $A$  nesse microestado então:

$$\langle A \rangle = \sum A_i P_i \quad (3.53)$$

O Algoritmo de Metrópolis é uma maneira de se obter essa amostragem segundo a distribuição de Boltzmann.

#### b) Distribuição de Boltzmann

A distribuição de Boltzmann é a distribuição de probabilidade para os microestados no caso de um sistema termodinâmico em equilíbrio (Salinas, 2005). A distribuição de probabilidade se chama Distribuição de Boltzmann ou Distribuição Canônica (Scherer, 2005) e é dada por:

$$P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \quad (3.54)$$

onde  $E_i$  é a energia do microestado  $i$ ,  $\beta = \frac{1}{kT}$ ,  $T$  é a temperatura do sistema,  $k$  é a constante de Boltzmann e  $Z$  é a função partição do sistema (Jensen, 2003).

A função partição para o ensemble canônico é escrita como:

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (3.55)$$

e está relacionada com a energia livre de Helmholtz dada por:

$$F = -kT \ln Z \quad (3.56)$$

### c) Cadeias de Markov

Grande parte das simulações de Monte Carlo utiliza processos markovianos como geradores de conjuntos de estados de um sistema. Para o nosso estudo vamos considerar que um processo de Markov é um mecanismo que, dado um sistema em um estado inicial  $S_i$  gera um novo estado do sistema  $S_j$ . A probabilidade de gerar o estado  $S_j$  dado  $S_i$  é chamada de probabilidade de transição  $P(S_i \rightarrow S_j)$  para a transição de  $S_i$  para  $S_j$ . Para o processo de Markov as taxas de transição devem satisfazer duas condições: não podem variar ao longo do tempo e dependem apenas das propriedades atuais dos estados e não dos outros estados que já passou.

As probabilidades de transição também devem satisfazer as condições:

$$\sum_v P(\mu \rightarrow v) = 1 \quad (3.57)$$

$$P(\mu \rightarrow v) \geq 0 \quad (3.58)$$

onde  $\mu$  e  $v$  são dois microestados do sistema (Newman, 1999).

Em simulações de Monte Carlo, o processo de Markov é escolhido com o objetivo de gerar estados cujas probabilidades assintóticas satisfaçam a distribuição de Boltzmann. Para isso duas condições são necessárias: a condição de ergodicidade e o princípio do balanço detalhado (Stariolo, 2001).

A condição de ergodicidade garante que é possível para o processo markroviano gerar qualquer estado do sistema a partir de qualquer outro, para uma sequência suficientemente grande de transições.

Essa condição é necessária porque cada estado tem uma probabilidade diferente de zero de acordo com a distribuição de Boltzmann.

#### d) A equação mestra e o Princípio do Balanço detalhado

A equação mestra (Newman, 1999) que governa a evolução temporal dos processos estocásticos é dada por:

$$\frac{dP_{\mu}(t)}{dt} = \sum_{\nu} [P(\nu \rightarrow \mu)P_{\nu}(t) - P(\mu \rightarrow \nu)P_{\mu}(t)] \quad (3.59)$$

onde  $P(\nu \rightarrow \mu)$  indica a probabilidade, na unidade de tempo, de que o sistema mude do estado  $\nu$  para o estado  $\mu$  e  $P(\mu \rightarrow \nu)$  indica a probabilidade, na unidade de tempo, de que o sistema mude do estado  $\mu$  para o estado  $\nu$ .

Nos estados estacionários,  $\frac{dP_{\mu}(t)}{dt} = 0$ :

$$\sum_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu)P_{\nu}(t) - \sum_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu)P_{\mu}(t) = 0 \quad (3.60)$$

Uma condição suficiente para atingir uma distribuição de equilíbrio é dada pelo princípio do balanço detalhado:

$$P(\mu \rightarrow \nu)P_{\mu} = P(\nu \rightarrow \mu)P_{\nu} \quad (3.61)$$

para quaisquer estados  $\mu$  e  $\nu$ .

Dado que a distribuição de equilíbrio é a Distribuição de Boltzmann, as taxas de transição devem satisfazer a seguinte equação:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{P_\nu}{P_\mu} = e^{-(E_\nu - E_\mu)/kT} \quad (3.62)$$

Esta condição é suficiente para garantir a convergência para o equilíbrio.

#### 3.4.4 Algoritmo de Metrópolis

Existem vários algoritmos que implementam a dinâmica de transição entre as configurações. Para o enfoque do estudo utiliza-se o algoritmo de Métropolis aplicado ao modelo de Potts que será descrito mais a frente.

A distribuição de probabilidade para os microestados é a distribuição de Boltzmann. Neste caso, os valores de equilíbrio das variáveis macroscópicas podem ser calculados como as médias de seus valores em todos os microestados, tendo a distribuição de Boltzmann como peso.

A idéia básica do método consiste em realizar uma sequência muito grande de transições aleatórias a partir de um microestado inicial arbitrário até atingir um macroestado de equilíbrio, ou seja, até que as variáveis macroscópicas adquiram valores constantes.

Para se determinar a probabilidade de uma dada configuração, seria necessário conhecer a chance de ocorrência de todas as outras configurações. No caso de variáveis contínuas, seria necessária uma integração da densidade de probabilidade sobre todo o espaço de configurações, mas esse procedimento é inviável quando se utiliza um número de variáveis da ordem de centenas.

A eficiência do algoritmo de Metrópolis está diretamente ligada ao fato de não levar em conta a probabilidade das configurações em si, mas sim a razão entre elas, pois a razão entre as probabilidades de duas dadas configurações pode ser determinada independentemente das outras.

De acordo com o algoritmo as probabilidades de transição devem satisfazer:

$$P(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-(E_\nu - E_\mu)/kT} & \text{se } \Delta E > 0 \\ 1 & \text{se } \Delta E < 0 \end{cases} \quad (3.63)$$

onde:

$$\Delta E = E_\nu - E_\mu \quad (3.64)$$

Consideremos um estado do sistema, definido através de M variáveis  $S_i$ , que representam as orientações cristalográficas no sítio  $i$  em uma malha que representa o sistema. Suponhamos que as variáveis  $S_i$  do sistema possam assumir apenas dois valores  $S_i = \pm 1$ .

Em seguida inicia-se o processo de Monte Carlo realizando os seguintes passos:

1. Uma configuração inicial para as variáveis do sistema é especificada. As duas configurações iniciais mais comuns são aquelas com as variáveis completamente ordenadas ou completamente desordenadas,  $S_i = \pm 1$ ;

2. Um sítio  $i$  da malha é escolhido (aleatoriamente ou sequencialmente) e se propõe a mudança de sinal da variável  $S_i \rightarrow -S_i$ ;

3. Calcula-se a variação de energia  $\Delta E$  resultante da mudança do sinal da variável no item 2;

4. Se a energia diminui ( $\Delta E < 0$ ), aceita-se a transição com probabilidade 1 alterando a variável  $S_i \rightarrow -S_i$  e atualizando a energia  $E = E + \Delta E$ ;

5. Se  $\Delta E > 0$ , sorteia-se um número aleatório  $r$  com distribuição uniforme entre zero e um. Se  $r \leq e^{-\beta\Delta E}$ , aceita-se a transição e a variável é alterada para o novo valor. Se  $r > 0$ , rejeita-se a transição e retorna-se ao item 1;

6. Escolhe-se outra variável e repetem-se os passos (2) a (5) um grande número de vezes a fim de obter um resultado o mais próximo possível de um resultado observável.

Pela dinâmica pré-estabelecida, cada célula é visitada em média uma vez a cada passo de Monte Carlo, aceitando-se ou não essa mudança de acordo com a

diminuição da energia do sistema ou com uma probabilidade proporcional a exponencial  $e^{-\beta\Delta E}$ .

A figura 3.20, mostra um fluxograma do algoritmo de Metrópolis.

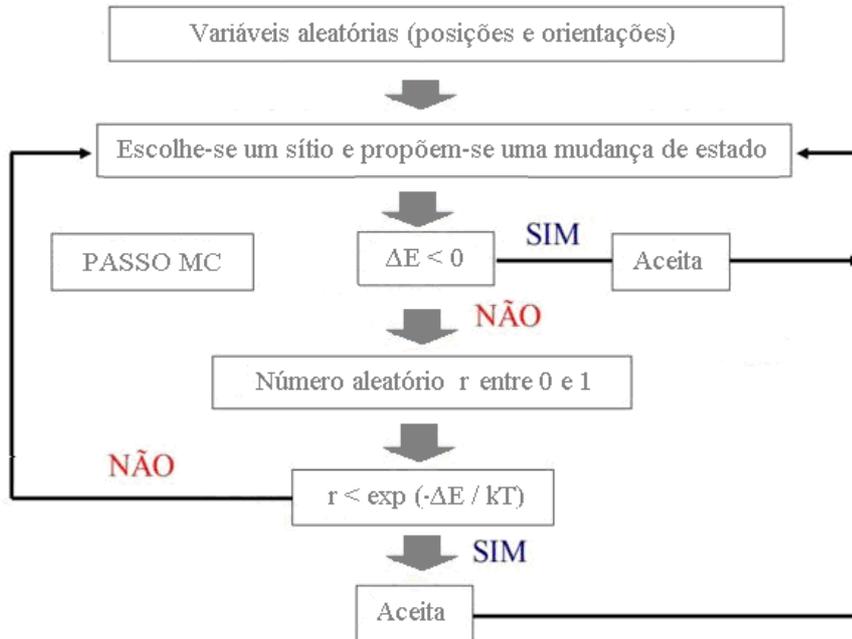


Figura 3.20 – Fluxograma do algoritmo de Metrópolis.

O intervalo entre duas configurações sucessivas geradas pelo algoritmo é denominado de um Passo de Monte Carlo (1MCS), definido como o tempo necessário para se percorrer a malha inteira (Srolovitz, 1984).

### 3.4.5 Modelo de Ising

O modelo de Ising é um modelo que descreve o comportamento de sistemas de elementos individuais chamados spins, que alteram o seu estado de acordo com o estado dos vizinhos mais próximos. O modelo de Ising foi proposto em 1920 pelo físico Wilhelm Lenz ao seu aluno Ernest Ising com objetivo estudar um dos fenômenos mais importantes em matéria condensada, o ferromagnetismo de momentos localizados.

As variáveis de spin podem ser pensadas de diversas maneiras: (i) como componentes do spin dos átomos, que podem “apontar para cima ou para baixo”, (ii) como uma indicação de que um sítio  $i$  pode estar ocupado por um átomo do tipo A, ou por um átomo do tipo B, etc. Para o enfoque do nosso trabalho vamos interpretar o spin como uma orientação cristalográfica.

O modelo de Ising é definido pelo Hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i \quad (3.65)$$

Onde  $s_i$  é uma variável aleatória que pode assumir apenas dois valores  $s_i = \pm 1$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), dependendo se o spin do átomo apontar "para cima" ou "para baixo",  $J$  é uma constante de interação e  $B$  é um campo magnético externo.

No primeiro termo, o símbolo  $\langle i, j \rangle$  indica que a soma é realizada sobre os pares de sítios vizinhos mais próximos, ou seja, para um átomo na posição  $(i, j)$  devemos contabilizar apenas as contribuições associadas à interação entre esse átomo e seus vizinhos imediatos  $(i+1, j)$   $(i-1, j)$   $(i, j+1)$   $(i, j-1)$  em uma rede quadrada.

No primeiro somatório, quando  $J > 0$  os spins tendem a se alinharem paralelamente, diminuindo a energia e assim favorecendo uma fase ferromagnética. No caso de  $J < 0$ , a tendência é formar um alinhamento antiparalelo e, portanto tendem a formar uma fase antiferromagnética. O segundo termo do Hamiltoniano representa as interações entre um campo externo aplicado  $B$  e o sistema de spins.

No sistema ferromagnético a interação de troca  $J$  é a mesma para todos os pares de spins. Para altas temperaturas, o sistema encontra-se desordenado e abaixo de certa temperatura chamada de “Temperatura Crítica” o sistema apresenta-se ordenado. O grau de ordenamento do sistema é medido pela magnetização e é dado por.

$$M = \sum_i s_i \quad (3.66)$$

O modelo foi estudado em uma dimensão por Ernest Ising em 1925. Em 1944, Lars Onsager encontrou a solução para o modelo numa malha quadrada na ausência de campo magnético, encontrando que a temperatura para transição de fase paramagneto-ferromagneto (temperatura crítica), em unidades de  $J/k_B$  (Scherer, 2005) é dada por:

$$T_C = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 2,27 \quad (3.67)$$

Embora seja um sistema de simples implementação, o modelo de Ising apresenta algumas limitações para o enfoque do trabalho, pois as variáveis podem assumir apenas dois valores, o que não nos permite descrever a macroestrutura de um metal solidificado. Por essa razão vamos estudar um outro modelo que é a generalização do modelo de Ising e é chamado de modelo de Potts.

### 3.4.6 Modelo de Potts

O modelo de Potts é um modelo computacional estocástico similar ao modelo de Ising, exceto pelo fato, que os spins podem assumir mais de dois valores.

Num modelo de Potts para  $Q$ -estados, a microestrutura é mapeada numa malha discreta e os spins podem assumir os valores  $s_i = 1, \dots, Q$  (total de orientações cristalográficas) para cada sítio da malha. Para  $Q = 2$  o modelo de Potts é equivalente ao modelo de Ising.

O nome do modelo foi dado por Renfrey B. Potts em sua tese de doutorado em 1952 e está relacionado com vários outros modelos. Generalizações do modelo de Potts são também utilizadas para simular o crescimento de partículas em metais e a interação entre espumas de sabão. James Glazier e François Graner desenvolveram uma generalização do modelo, conhecida como modelo de Potts Celular, que vem sendo utilizada para simular fenômenos estáticos e cinéticos em estruturas celulares (Graner, 1992).

No modelo de Potts, o Hamiltoniano que descreve a interação entre os vizinhos mais próximos, que representa a energia do contorno de grão é dada por:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\delta_{s_i s_j} - 1) \quad (3.68)$$

onde  $s_i$  é uma das  $Q$  orientações possíveis no elemento  $i$  da malha e  $\delta_{s_i s_j}$  é a função delta de Kronecker, que vale 1 para vizinhos com mesma orientação e zero para vizinhos com orientações diferentes.

A soma é feita para todos os vizinhos próximos do sítio, sendo assim, cada par de vizinhos próximos contribui com  $J$  para a energia do sistema quando possuem orientações diferentes e com zero para orientações iguais.

A probabilidade de transição  $W$  é dada por:

$$W = \begin{cases} e^{-\Delta E / kT} & \text{se } \Delta E > 0 \\ 1 & \text{se } \Delta E < 0 \end{cases} \quad (3.69)$$

onde:

$\Delta E$  é a alteração de energia ocasionada pela mudança de orientação,  $k$  é a constante de Boltzman e  $T$  é a temperatura.

A temperatura de transição de fase na rede quadrada para o modelo de Potts é dada por (Loureiro, 2010):

$$T_{\text{Potts}} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{Q})} \quad (3.70)$$

#### **4.0 METODOLOGIA E PROCEDIMENTOS EXPERIMENTAIS**

A metodologia utilizada para o desenvolvimento deste trabalho divide-se nas seguintes etapas:

- a) Estudo do método de Monte Carlo para simular o crescimento do grão;
- b) Desenvolvimento de um modelo numérico para o crescimento do grão no Lingotamento Contínuo que utiliza o Método de Monte Carlo juntamente com o Método das Diferenças Finitas;
- c) Simulação de dados através do software para obter a macroestrutura do aço obtida pelo modelo modificado;
- d) Comparação entre as macroestruturas dos aços estudados e as macroestruturas obtidas através do software desenvolvido.

#### **4.1 Desenvolvimento do Algoritmo Modificado**

O algoritmo modificado para simular o crescimento do grão, consiste em realizar simulações utilizando o modelo de Potts juntamente com o algoritmo de Metrópolis, sendo que no modelo modificado, as temperaturas são atualizadas a cada ponto da malha e para um determinado número de passos de Monte Carlo. A atualização destas temperaturas é realizada através da implementação do Método das Diferenças Finitas.

##### **4.1.1 Formação da Malha**

Para simular o crescimento do grão é necessário primeiramente a formação de uma malha discreta, onde para cada elemento da malha é atribuído um número compreendido entre 1 e  $Q$  (total de orientações cristalográficas) a cada sítio da malha.

Um fator importante a ser considerado é o número máximo de possíveis orientações  $Q$ . As primeiras experiências de Srolovitz et al. (Srolovitz,1984)

empregaram valores de 4 até 64, enquanto Radhakrishnan (Radhakrishnan, 1995), propôs  $N^2$ , onde  $N$  é a dimensão da matriz.

A figura 4.1 mostra a cinética do crescimento de grão para diferentes valores de  $Q$ . Podemos perceber que o valor de  $Q$  modifica a cinética do crescimento de grãos, no entanto valores mais elevados de  $Q$  não apresentam significativa melhora nos resultados. Portanto, o valor de  $Q$  deveria ser tão alto quanto possível, entretanto um valor elevado de  $Q$  pode prejudicar a velocidade do programa. Sendo assim escolheu-se para as simulações o valor de  $Q = 20$ , pois este valor além de satisfazer as condições ideais para o crescimento do grão também minimiza o tempo de simulação, agilizando o processo.

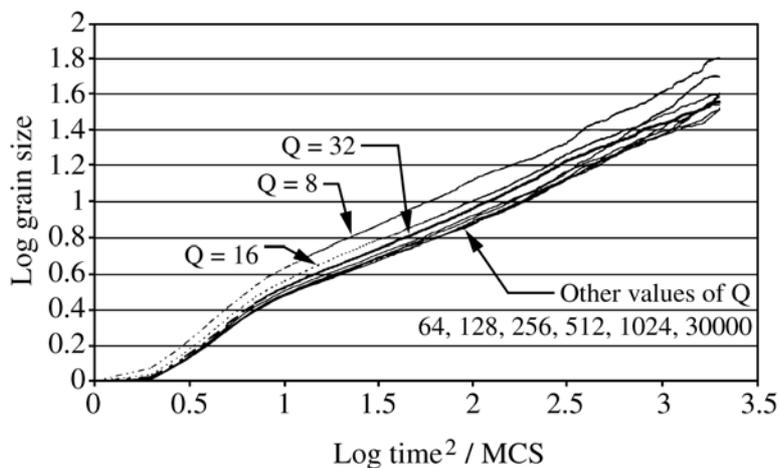


Figura 4.1 – Comportamento do crescimento do grão para diferentes valores de  $Q$  (Blinkstein,1999).

O primeiro passo é representar a amostra como uma matriz bidimensional. Como pode ser visto na figura 4.2, regiões contíguas da matriz com um mesmo valor constituem os grãos (Blinkstein, 1999). Os "contornos de grãos", portanto, são superfícies imaginárias que separam volumes com orientações diferentes, como mostra a figura 4.3.

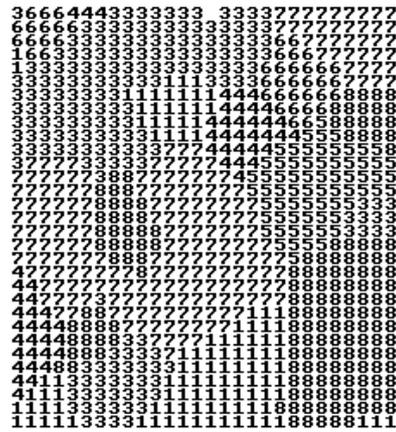


Figura 4.2 – Representação do grão por uma matriz bidimensional quadrada (Blikstein, 1999)

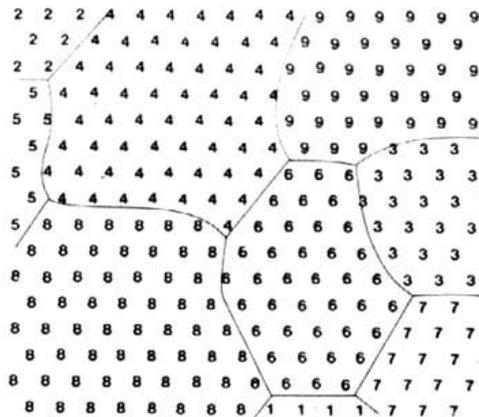


Figura 4.3 – Matriz triangular com os contornos de grão imaginários<sup>2</sup>

Um outro fator importante para a implementação do sistema é a condição no tempo inicial, ou seja, para zero passos de Monte Carlo (MCS). Dependendo da condição inicial, diferentes evoluções podem ocorrer, por exemplo, padrões que permanecem constantes indeterminadamente, que se anulam ou que permanecem num estado aleatório.

<sup>2</sup>Disponível em <<http://www.pmt.usp.br/paulob/montecarlo/modelar/default.hm>>

#### 4.1.2 Descrição do Método de Monte Carlo

O modelo utilizado para a simulação do crescimento do grão é o modelo de Potts que é particularmente apropriado para aplicação do algoritmo de Metrópolis. Num modelo de Potts, a microestrutura é mapeada numa malha discreta onde cada elemento da malha pode assumir os valores  $s_i = 1, \dots, Q$  (total de orientações cristalográficas). O Hamiltoniano que descreve a interação entre os vizinhos mais próximos, que representa a energia do contorno de grão é dado pela equação 4.1:

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\delta_{s_i s_j} - 1) \quad (4.1)$$

O algoritmo foi implementado considerando inicialmente uma matriz de tamanho  $L \times N$ , onde  $L$  representa o número de filas e  $N$  representa o número de colunas da malha. Cada elemento da malha será identificado pelo par  $(i, j)$  que representa as coordenadas onde o ponto se encontra. Em seguida uma malha inicial é gerada aleatoriamente e as seguintes etapas são implementadas:

1. Um sítio  $i$  da malha é escolhido (aleatoriamente ou seqüencialmente) e se propõe uma mudança no estado do elemento escolhido para qualquer outro dentre os  $Q - 1$  estados possíveis;
2. Calcula-se a variação de energia ( $\Delta E$ ) resultante da escolha do novo elemento da malha e do elemento antigo;
3. Se a energia diminui ( $\Delta E < 0$ ), aceita-se a transição com probabilidade 1 atualizando a energia  $E = E + \Delta E$ ;
4. Se  $\Delta E > 0$  sorteia-se um número aleatório  $r$  com distribuição uniforme entre zero e um. Se  $r \leq e^{-\beta \Delta E}$ , aceita-se a transição e o elemento é alterado para o novo valor. Se  $r > 0$ , rejeita-se a transição, sorteia-se outro sítio e repetem-se os passos  $n$  vezes a fim de obter um resultado o mais próximo possível de um resultado observável.

### 4.1.3 Desenvolvimento do Código para o Cálculo das Temperaturas utilizando o Método das Diferenças Finitas

Para o cálculo das temperaturas que foram inseridas no programa desenvolveu-se um algoritmo usando o Método das Diferenças Finitas.

Para a solução das equações inseridas no programa foram consideradas as seguintes condições:

- Desprezou-se o fluxo de calor na direção de extração do lingote (eixo z);
- Temperatura da água de refrigeração ( $T_a$ ) constante e igual a  $25^\circ\text{C}$ ;
- Temperaturas de transformação (Temperaturas *Solidus e Liquidus*) dependentes da composição química da liga;
- Propriedades termofísicas do material (densidade, calor específico e condutividade térmica) constantes nas fases líquida e sólida e dependentes da temperatura na região pastosa;
- Temperatura de vazamento ( $T_{vaz}$ ) igual a temperatura do metal no distribuidor;
- Coeficiente de transferência de calor ( $h$ ) constante e igual a  $800\text{ W/m}^2\cdot\text{K}$ ;
- Um lingote de dimensões  $150\times 150\text{ mm}$ .
- Uma malha de  $200\times 200$ , tomando assim um valor de  $\Delta x = 0,00075\text{ m}$ .

O fluxograma representado na figura 4.4 representa as etapas do algoritmo modificado com a inserção do cálculo das temperaturas pelo Método das Diferenças Finitas.

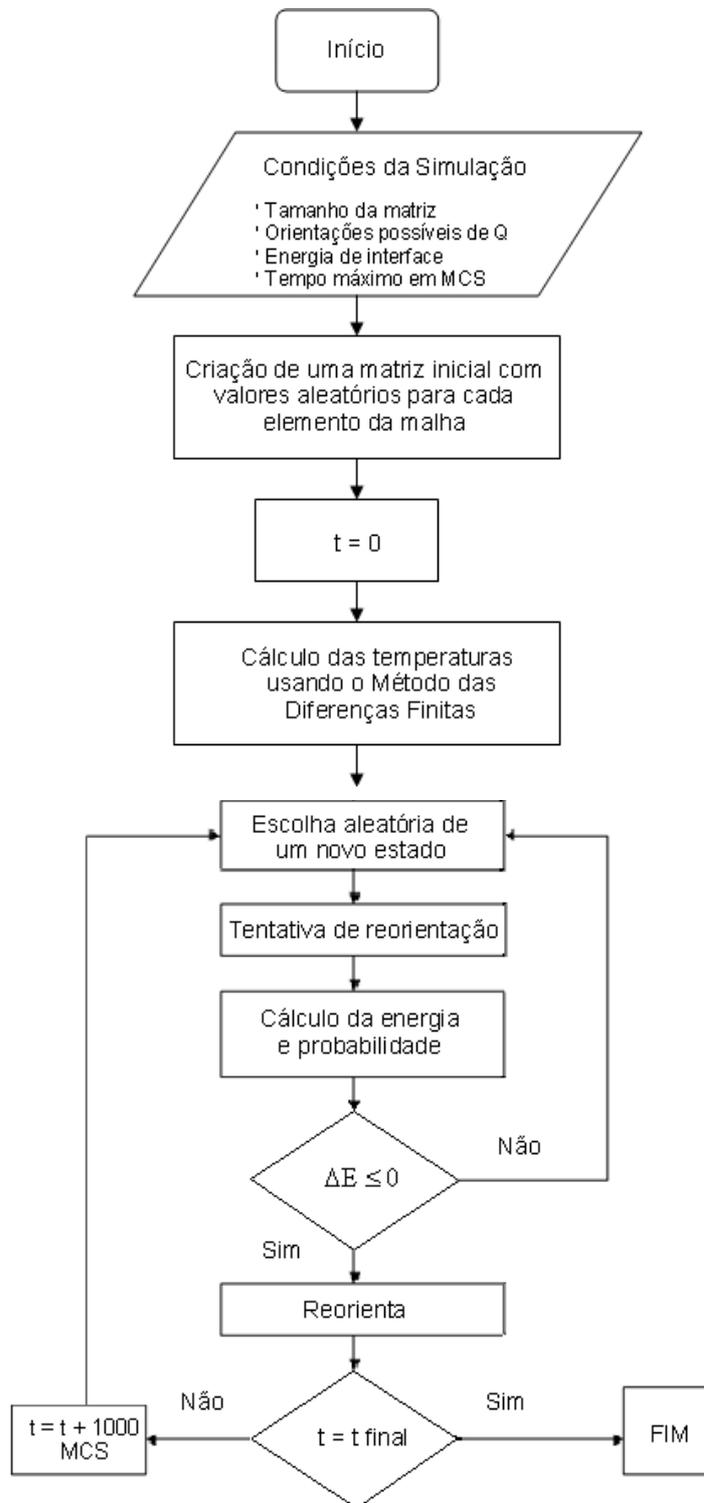


Figura 4.4 – Fluxograma do modelo modificado

Nas simulações utilizando o Método de Monte Carlo, as temperaturas não estão diretamente relacionadas com as temperaturas "reais", pois estas referem-se às temperaturas obtidas através do Método das Diferenças Finitas para a equação da condução do calor. Sendo assim para o modelo modificado necessitasse ajustar as temperaturas obtidas pelo Método das Diferenças Finitas.

A temperatura crítica para o modelo de Potts ( $T_{Potts}$ ), que representa a temperatura onde ocorre uma transição de fase, deve ser equivalente à temperatura de fusão ( $T_f$ ) no sistema real. Então, como o modelo de Potts não está formulado na escala de temperaturas reais, é necessário reescalar essas temperaturas, de forma que temperaturas reais ( $T_{MDF}$ ) acima da temperatura de fusão ( $T_f$ ) correspondam a temperaturas na simulação ( $T_{MonteCarlo}$ ) acima da temperatura de Potts ( $T_{Potts}$ ), e temperaturas reais ( $T_{MDF}$ ) abaixo da temperatura de fusão ( $T_f$ ) correspondam a temperaturas na simulação ( $T_{MonteCarlo}$ ) abaixo da temperatura de Potts ( $T_{Potts}$ ). A equação (4.2) representa a mudança de escala entre temperaturas reais ( $T_{MDF}$ ) e temperaturas da simulação de Monte Carlo ( $T_{MonteCarlo}$ ).

$$T_{MonteCarlo} = \frac{T_{MDF} \cdot T_{Potts}}{T_f} \quad (4.2)$$

onde:

$T_{MonteCarlo}$  = temperatura empregada no método de Monte Carlo em cada ponto da malha

$T_{MDF}$  = temperatura calculada pelo Método das Diferenças Finitas

$T_{Potts}$  = temperatura crítica para o modelo de Potts

$T_f$  = temperatura de fusão do ferro

$$T_{MonteCarlo} = \frac{T_{MDF} \cdot T_{Potts}}{T_f} \quad (4.2)$$

#### 4.1.4 Seleção dos Aços

Para a realização dos experimentos foram consideradas duas amostras de aço com composições químicas diferentes, de acordo com a Tabela 4.1.

Tabela 4.1 – Composição química dos aços

SAE	Composição Química (%massa)										
	C	Cr	Cu	Mn	Mo	Ni	P	Si	S	Ti	V
1015	0,16	1,1	0,16	0,65	0,21	0,09	0,019	0,22	0,024	0,001	0,004
1020	0,21	0,47	0,17	0,77	0,16	0,45	0,018	0,23	0,028	0,001	0,003

As Temperaturas *Liquidus* e Temperaturas *Solidus* são parâmetros dependentes da composição química.

A temperatura *Liquidus* e *Solidus* foram calculadas por equações empíricas utilizadas por (Thomas, 1987), respectivamente mostradas nas equações (4.3) e (4.4).

Temperatura *Liquidus* ( $T_L$ )

$$T_L(^{\circ}\text{C}) = 1537 - 88 \times (\%C) - 25 \times (\%S) - 5 \times (\%Cu) - 8 \times (\%Si) - 5 \times (\%Mn) - 2 \times (\%Mo) - 4 \times (\%Ni) - 1,5 \times (\%Cr) - 18 \times (\%Ti) - 30 \times (\%P) - 2 \times (\%V) \quad (4.3)$$

Temperatura *Solidus* ( $T_S$ )

$$T_S(^{\circ}\text{C}) = 1535 - 200 \times (\%C) - 1839 \times (\%S) - 123 \times (\%Si) - 6,8 \times (\%Mn) - 4,3 \times (\%Ni) - 1,4 \times (\%Cr) - 4,1 \times (\%Al) - 1245 \times (\%P) \quad (4.4)$$

A tabela 4.2 apresenta as características referentes às temperaturas de solidificação e a tabela 4.3 apresenta os principais parâmetros operacionais empregados para a simulação.

Tabela 4.2 – Temperaturas de solidificação

Seções(mm)	SAE	$T_L$	$T_S$	$T_{vaz}$
150 x 150	1015	1513	1487	1547,2
150 x150	1020	1508	1475	1542,3

Tabela 4.3 – Parâmetros operacionais do lingotamento contínuo

Propriedades Físicas do Metal	
Calor latente de fusão	240 J/kg
Densidade no sólido	7300 kg/m <sup>3</sup>
Densidade no líquido	7000 kg/m <sup>3</sup>
Calor específico no sólido	700 J/kg.K
Calor específico no líquido	800 J/kg.K
Condutividade térmica no sólido	31 W/m.K
Condutividade térmica no líquido	34 W/m.K
Temperatura de fusão do ferro	1538 °C

## 4.2 Procedimentos Experimentais

Primeiramente as temperaturas foram calculadas usando o MDF. Para o cálculo destas temperaturas considerou-se a produção de um lingote de secção 150 mm do aço SAE 1015 e SAE 1020.

Em seguida, o crescimento do grão foi simulado utilizando o modelo de Potts padrão que considera a mesma temperatura em todas as etapas do processo.

Por último, o crescimento do grão foi simulado para o modelo modificado, que consiste em realizar simulações utilizando o modelo de Potts juntamente com o algoritmo de Metrópolis, sendo que neste modelo as temperaturas são atualizadas a cada ponto da malha e para um determinado número de passos de Monte Carlo.

Desenvolveu-se o algoritmo modificado na linguagem de programação Fortran90/95 utilizando-se do ambiente Linux através do software Developer Studio. Para a visualização do crescimento de grão e do mapa térmico foi utilizado o editor gráfico Dinamic Lattice considerando uma malha de tamanho 200 x 200

As amostras para comparação foram obtidas pelo Laboratório de Fundição (LAFUN) da UFRGS.

## 5.0 RESULTADOS E DISCUSSÕES

A seguir serão apresentados os principais resultados obtidos na simulação do crescimento do grão para o algoritmo padrão e para o algoritmo modificado, onde analisou-se a variação da temperatura nas várias etapas do Método de Monte Carlo e sua influencia na transição colunar-equiaxial.

Primeiramente realizaram-se simulações do modelo de Potts, considerando as seguintes temperaturas  $T_{\text{MonteCarlo}}=1,17$  e  $T_{\text{MonteCarlo}}=0,3$  conforme figuras 5.1 e 5.2 respectivamente. Para as simulações foi considerado um valor de  $Q = 20$  para diferentes passos de Monte Carlo e as temperaturas foram consideradas constantes em todas as etapas do processo.

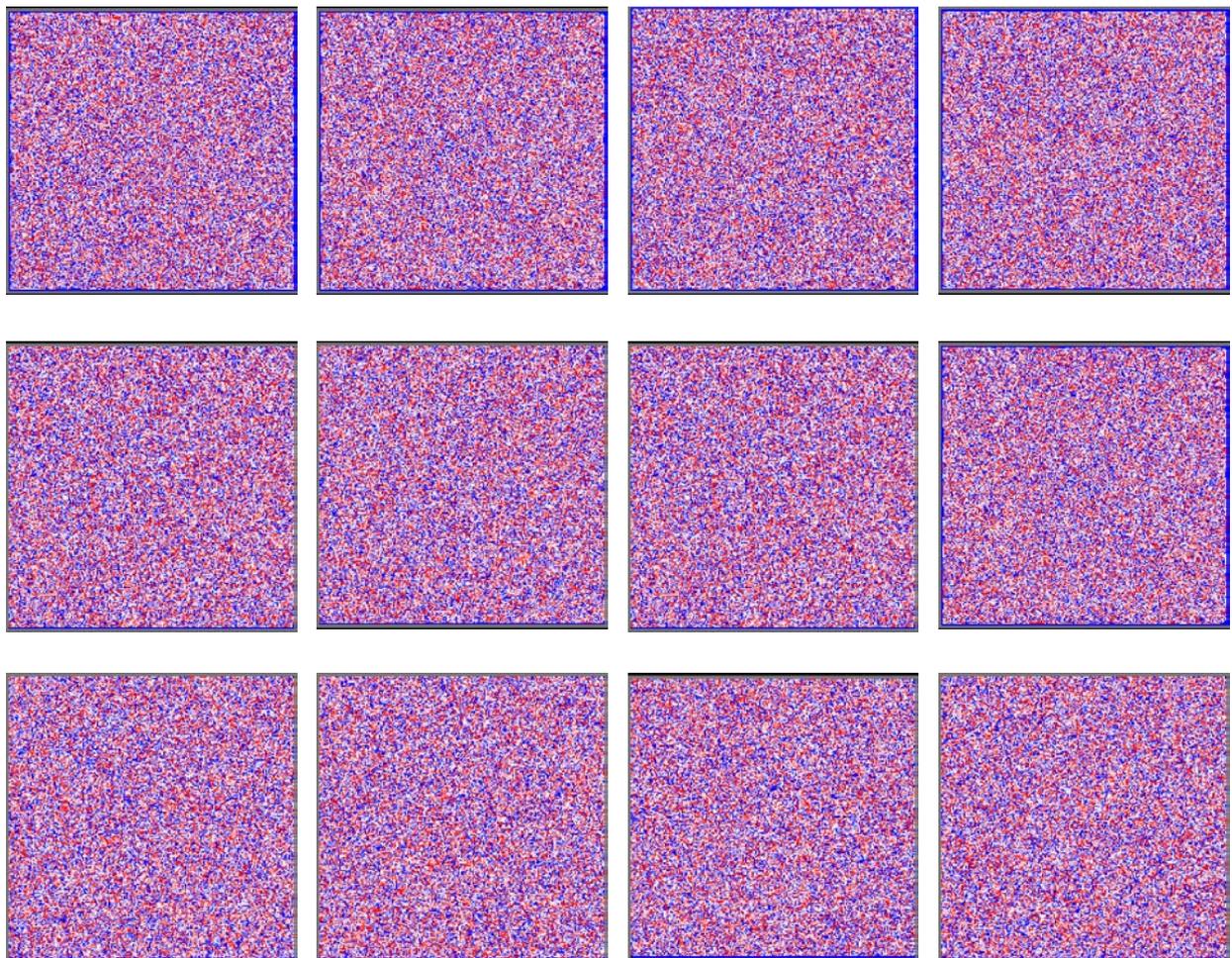


Figura 5.1 – Evolução para o modelo de Potts para  $T_{\text{MonteCarlo}} = 1,17$

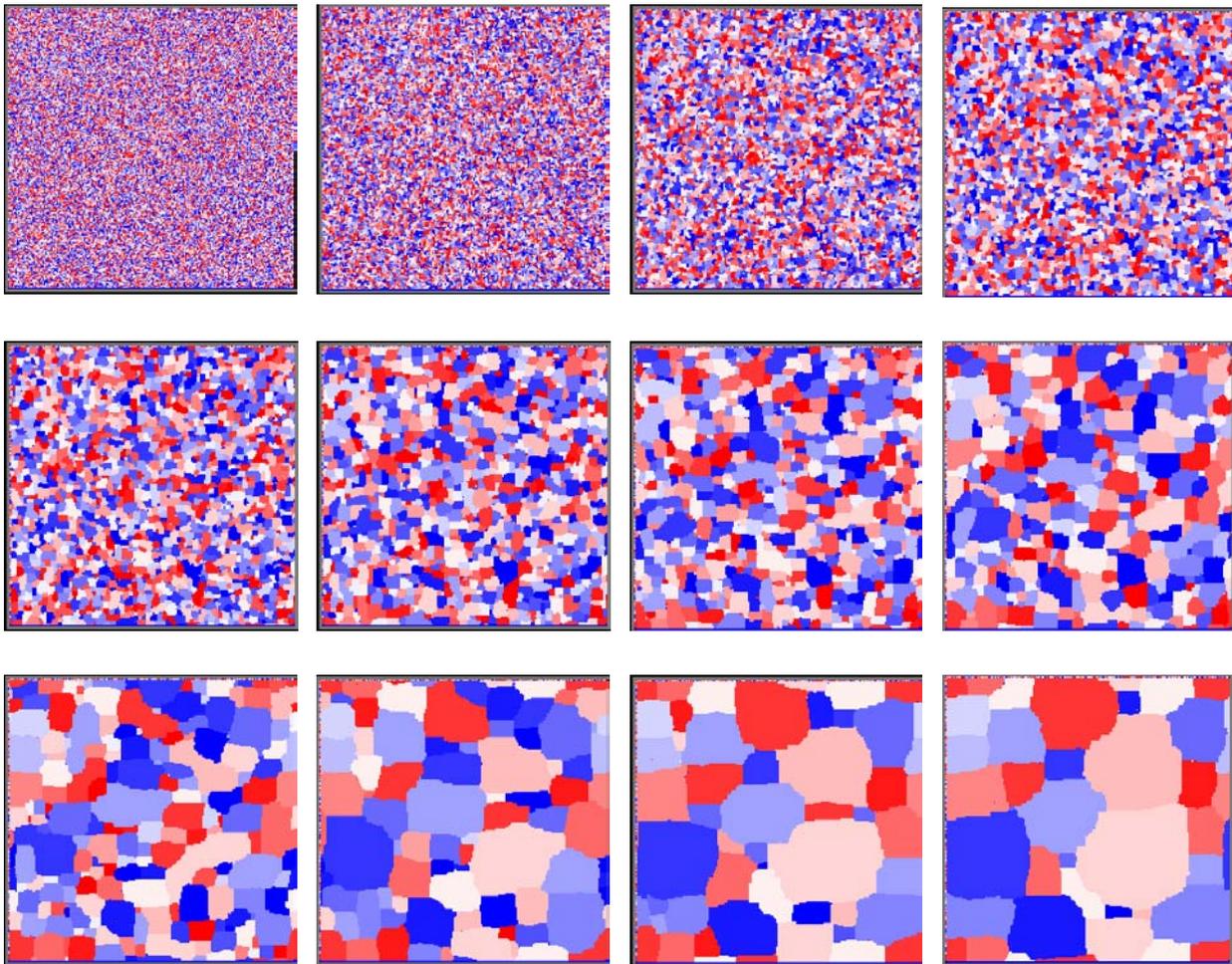


Figura 5.2– Evolução para o modelo de Potts para  $T_{\text{MonteCarlo}} = 0,3$

Observou-se nos resultados obtidos na figura 5.1 uma mínima variação do tamanho do grão quando se considerou a temperatura  $T_{\text{MonteCarlo}} = 1,17$  em todos os pontos da malha. Isso ocorre porque essa simulação corresponde a uma temperatura igual a temperatura de transição de fase ( $T_{\text{MonteCarlo}} = 1,17 = T_{\text{Potts}}$ ).

Na figura 5.2, onde foi considerada uma temperatura  $T_{\text{MonteCarlo}} = 0,3 < T_{\text{Potts}}$ , pode-se perceber uma estrutura formada com uma série de grãos que crescem ao longo do processo, no entanto, os grãos formados não apresentam uma estrutura colunar, ou seja, não apresentam as características da macroestrutura formada durante o processo de solidificação por Lingotamento Contínuo.

Com a finalidade de representar a transição colunar-equiaxial que se observa nas macroestruturas dos lingotes solidificados pelo processo de Lingotamento Contínuo

foram realizadas novas simulações, considerando agora a variação da temperatura em cada ponto da malha e para os diferentes passos de Monte Carlo.

Para isso, primeiramente, foram realizadas simulações do mapa térmico para os aços SAE 1015 e SAE 1020. Para o cálculo destas temperaturas um algoritmo foi desenvolvido usando o Método das Diferenças Finitas e a atualização destas temperaturas foi inserida junto ao Método de Monte Carlo.

Nos resultados obtidos no mapa térmico foi considerado um coeficiente de transferência de calor ( $h$ ) constante e igual ao coeficiente de transferência de calor do molde, no entanto, essas simulações também podem ser obtidas através do software InALC+ (Inteligência Artificial no Lingotamento Contínuo), que é um programa de solidificação de aços no Lingotamento Contínuo desenvolvido pelo Laboratório de Fundição (LAFUN) da UFRGS em conjunto com a empresa Aços Especiais Piratini – GERDAU que leva em consideração as diferentes taxas de resfriamento ao longo do processo de Lingotamento Contínuo (Fortaleza, 2005; Cheung, 2005; Barcelos, 2007b; Barcelos, 2006).

A simulação do mapa térmico para o aço SAE 1015 para ilustrar a evolução das temperaturas que foram inseridas no programa, pode ser observada na figura 5.3.

Por fim, foram realizadas simulações do crescimento de grão para cada fase do mapa térmico representado de acordo com a figura 5.4.

O mesmo procedimento foi realizado para o aço SAE 1020, como pode ser visto nas figuras 5.5 e 5.6.

Para as simulações do mapa térmico foram considerados os seguintes valores de tempo ( $t = 0, 400, 800, 1200, 2200, 6200, 10200, 15200, 20200, 30200, 40200$  e  $50200$ ).

SAE 1015

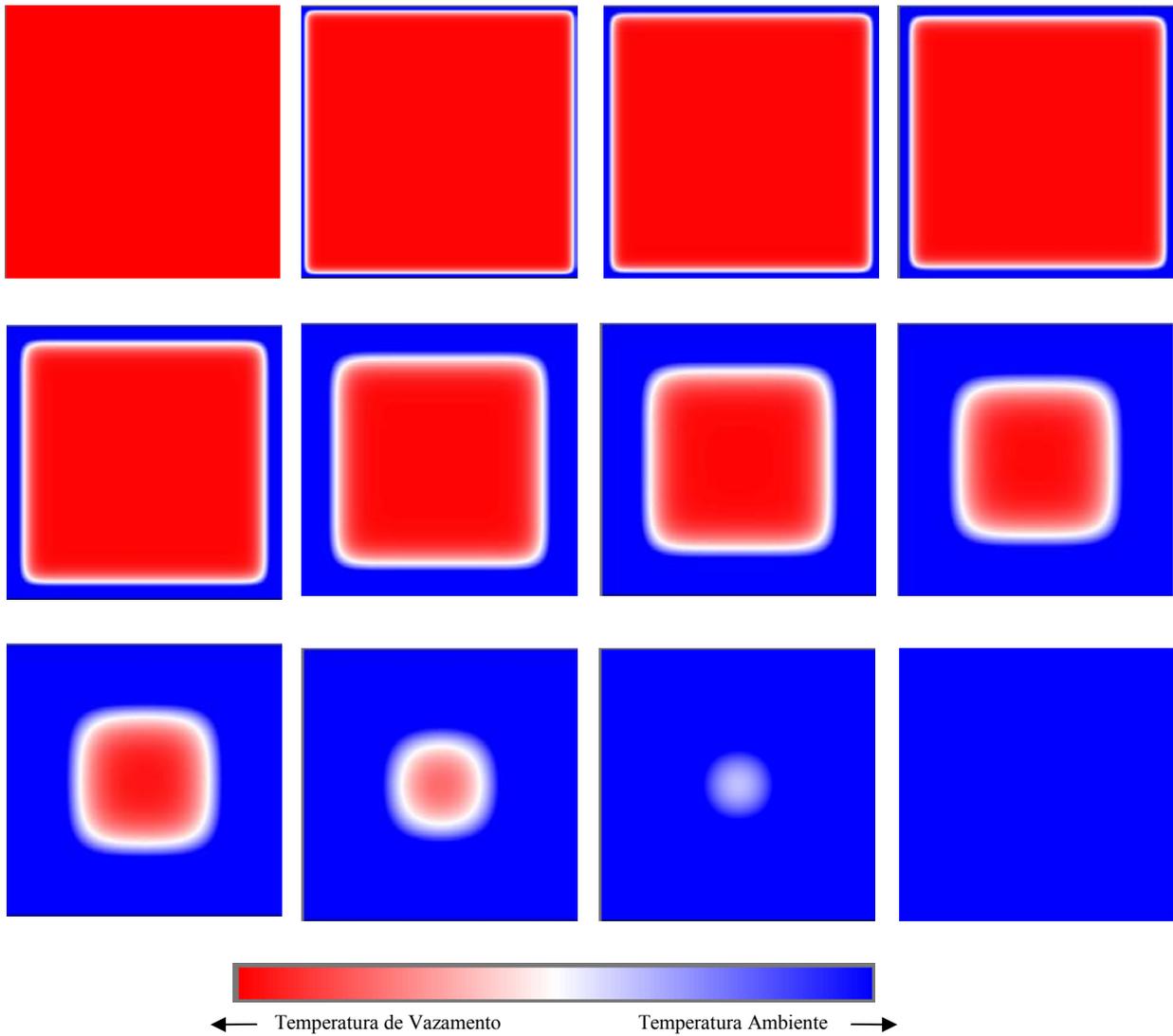


Figura. 5.3 – Evolução do mapa térmico para o aço SAE 1015

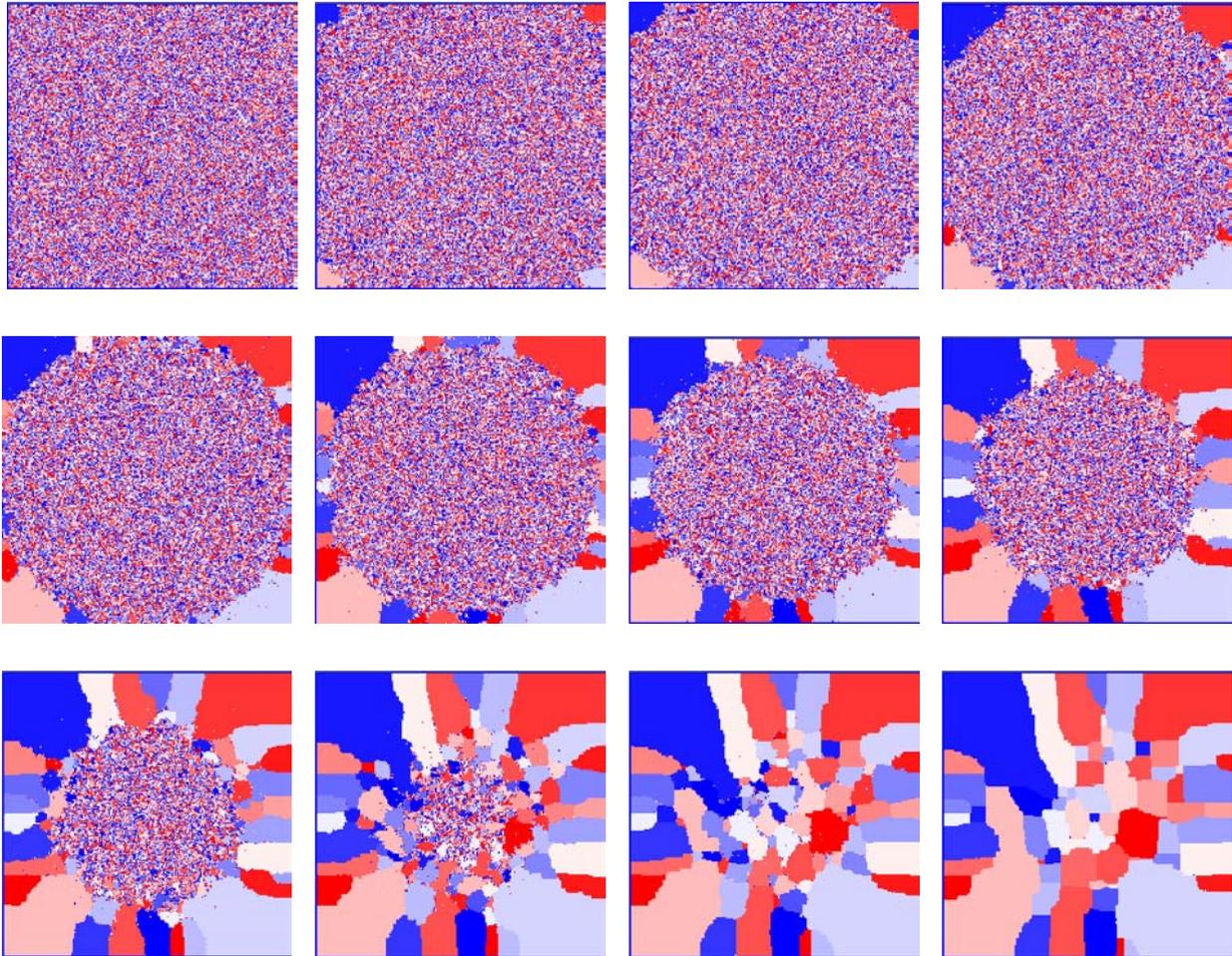


Figura 5.4 – Evolução da macroestrutura para modelo modificado do aço SAE 1015

SAE 1020

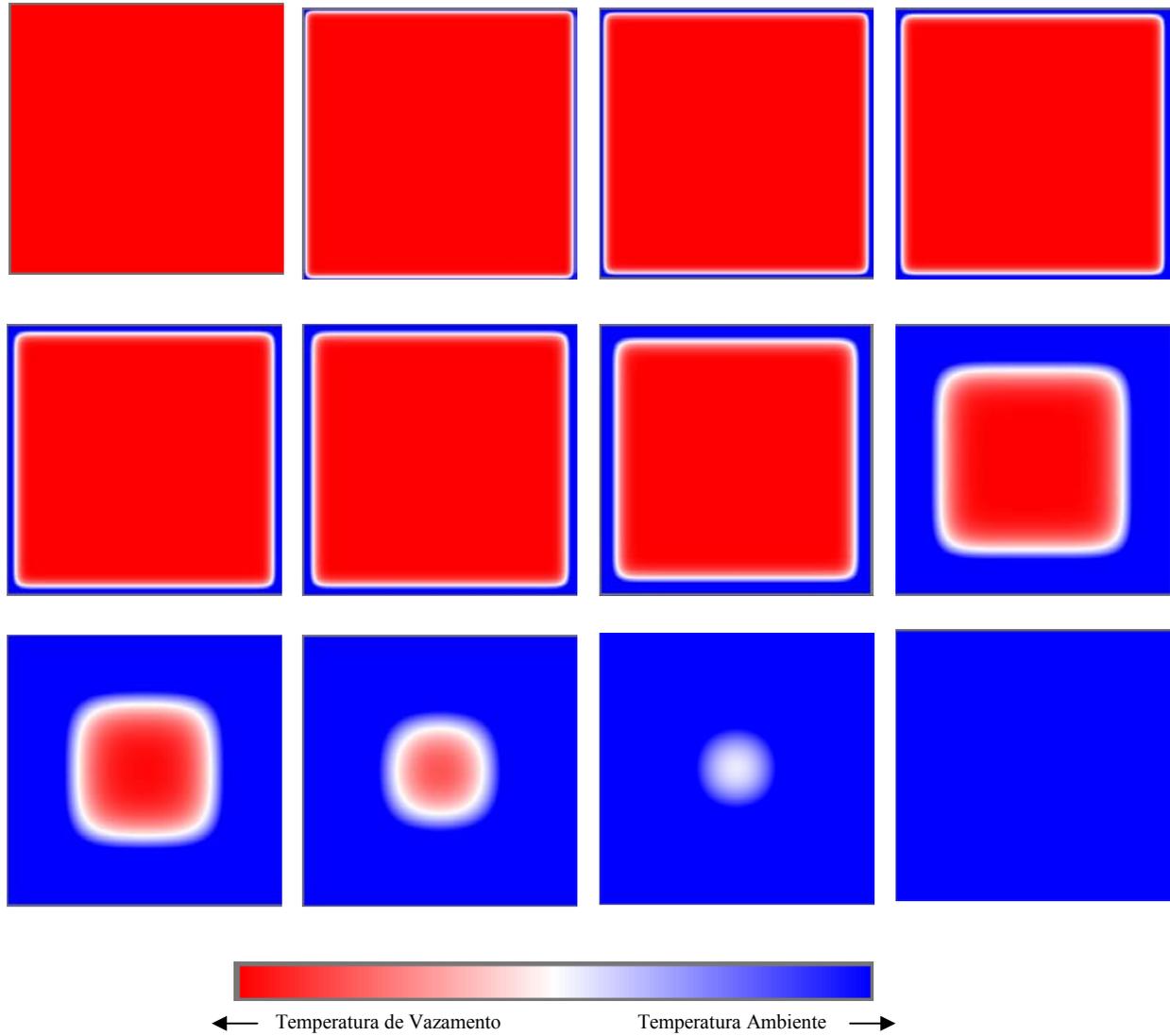


Figura 5.5 – Evolução do mapa térmico para o aço SAE 1020

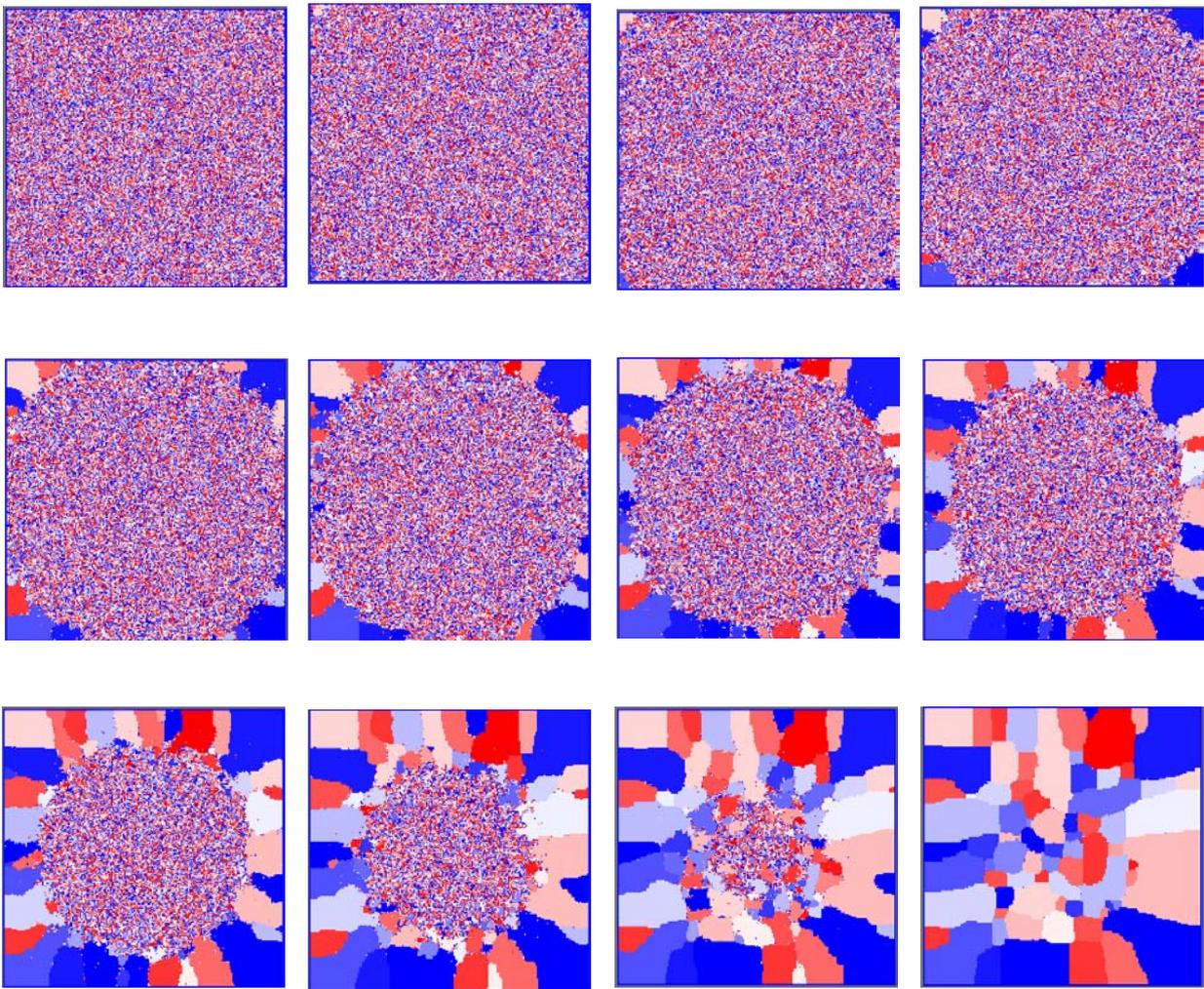


Figura 5.6 – Evolução da macroestrutura para modelo modificado do aço SAE 1020

Observou-se que os resultados obtidos no mapa térmico em comparação com os resultados obtidos no crescimento dos grãos se comportam qualitativamente da mesma forma, ou seja, a medida que as temperaturas evoluem aumentando da borda para o centro da malha, também se verifica o crescimento do grão nessa direção.

Comparando as macroestruturas simuladas pelo algoritmo modificado (figuras 5.4 e 5.6) com a macroestrutura do algoritmo padrão (figura 5.2) pode-se observar a influencia da variação da temperatura na formação de grãos colunares, ou seja, o modelo modificado quando comparado ao modelo padrão, representa melhor a estrutura do lingote solidificado.

Por fim, comparando as estruturas formadas no modelo modificado com as estruturas dos aços solidificados visto nas figuras 5.7 e 5.8, pode-se verificar que o

modelo modificado reproduz melhor a transição colunar-equiaxial, no entanto, ainda apresenta algumas limitações que podem ser percebidas pela ausência dos grãos coquilhados que se formam junto às paredes do molde.

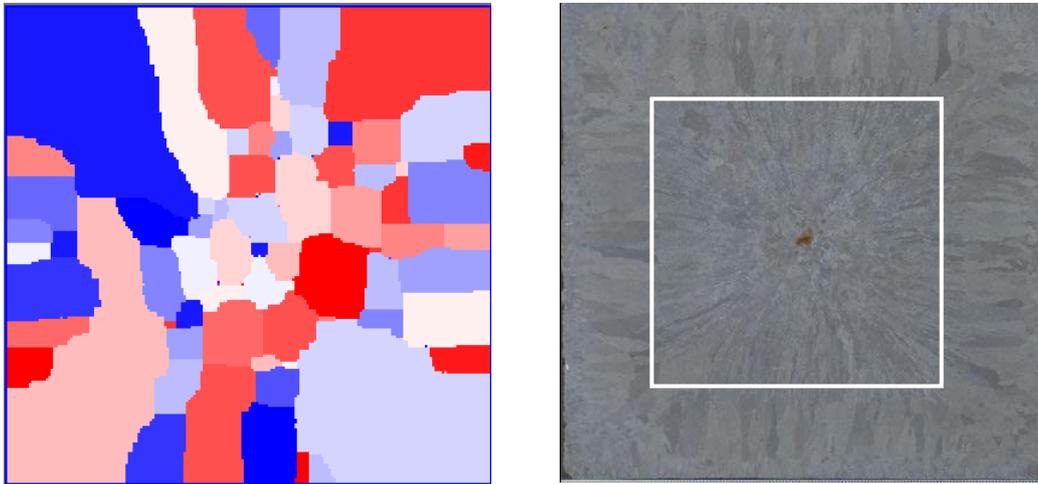


Figura 5.7 – Comparação entre a macroestrutura simulada e a macroestrutura do aço SAE1015

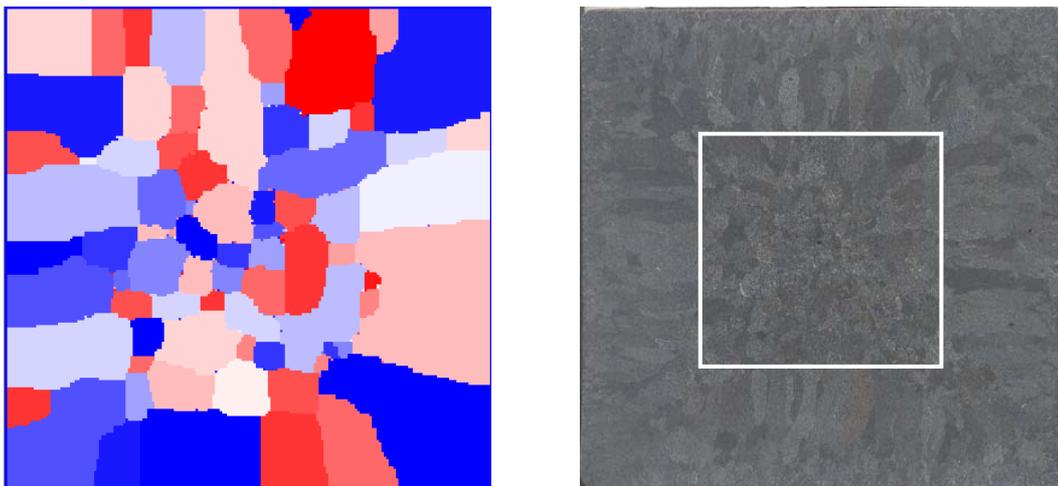


Figura 5.8 – Comparação entre a macroestrutura simulada e a macroestrutura do aço SAE1020

## 6.0 CONCLUSÃO

Na primeira parte do trabalho, considerando o modelo de Potts padrão, observou-se a formação de grãos que não apresentaram uma transição colunar-equiaxial. Isto ocorre devido às condições isotérmicas do sistema que leva em consideração a mesma temperatura em todos os pontos da malha.

Em seguida, através do desenvolvimento de um modelo híbrido entre a equação de condução do calor e o método de Monte Carlo simulou-se o processo de solidificação no Lingotamento Contínuo para os aços SAE 1015 e 1020. Com este modelo, conseguiu-se adaptar o método de Monte Carlo, tradicionalmente aplicado a processos isotérmicos, em equilíbrio termodinâmico, a um processo fora do equilíbrio, como é o processo de solidificação no lingotamento contínuo. Neste modelo é levado em consideração os gradientes de temperatura ao longo do processo que influenciam diretamente na diminuição das temperaturas na região próxima a superfície e por consequência na transição colunar-equiaxial.

Por fim, os resultados obtidos através das simulações do modelo modificado apresentaram uma compatibilidade expressiva com fenômeno de crescimento de grãos, conseguindo reproduzir qualitativamente a transição colunar-equiaxial, em comparação com amostras experimentais.

## 7.0 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como sugestão para futuras linhas de pesquisa pode-se citar:

- Estudar o modelo para investigar a formação da zona coquilhada;
- Verificar a influência do tamanho da malha para o crescimento do grão;
- Verificar a influência da variação do coeficiente de transferência de calor no crescimento do grão para as diferentes etapas de resfriamento ao longo do processo de Lingotamento Contínuo;
- Verificar a influência dos valores de  $Q$  (número de orientações cristalográficas) na evolução da microestrutura;
- Integrar o código de Monte Carlo com o InALC+, ou com o Phase Field, com o objetivo de simular a estrutura real do lingote solidificado.

## 8.0 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ARES, A.E; Gassa L.M; Gueijman S.F, Schvezov C.E. *Correlation between thermal parameters, structures, dendritic spacing and corrosion behavior of Zn-Al alloys with columnar to equiaxed transition*. **Journal of Crystal Growth**, pp. 1355-1361, (2008).

BARCELOS, V. K.; Fernandes, P. C., Fogazzi, W., Klujszo, L. A. C., Cocian, L. F. E., Santos, C., Ferreira, C. R. F.; Spim, J. A. *Aferição do Software InALC+ com dados experimentais de lingotamento contínuo (LC) da Aços Especiais Piratini (AEP - GERDAU)*. In: XXXVII Seminário de Aciaria - Internacional, Porto Alegre. **XXXVII Seminário de Aciaria - Internacional**. São Paulo: Associação Brasileira de Metalurgia e Materiais, pp. 338 – 346, (2006).

BARCELOS, V. K.; Ferreira, C. R. F.; Santos, C. A.; Spim, J. A. *Influência dos parâmetros operacionais nas condições de transferência de calor ao longo de um molde industrial de lingotamento contínuo*. In: 62º CONGRESSO ANUAL DA ABM/ 62nd ABM INTERNATIONAL ANNUAL CONGRESS, Vitória. **Anais do 62º Congresso Anual da ABM / 62nd ABM International Annual Congress**. São Paulo: Editora da ABM, pp.1266 – 1277, (2007a).

BARCELLOS, V.K. *Análise da transferência de calor durante a solidificação de aços no lingotamento contínuo*. **Dissertação de Mestrado** - UFRGS, Porto Alegre, RS, (2007b).

BLIKSTEIN, P.;Tschiptshin A.P. *Monte Carlo Simulation of Grain Growth*. **Materials Research**, V. 2. N° 3, pp. 133-137, (1999).

BRIMACOMBE J.K.; Samarasekera I.V; Lait J.E. *Continuous Casting, Heat Flow, Solidification and Crack Formation*, **Iron and Steel Society**,(1984).

CHEUNG, N.; Santos, C. A.; Spim, J. A.; Garcia A. *Application of Heuristic Search technique for the improvement of sprays zones cooling conditions in continuously cast steel billet*. **Applied Mathematical Modelling**. V.30, pp.104 -115, (2005).

FLEMINGS, M. C. *Solidification Processing*. New York: **McGraw Hill Book Co.**, (1974).

FLOOD, S. C., HUNT, J. D. *Columnar to equiaxed transition*. **Metal Handbook, Warrendale, ASM International**, Ed. 9, V. 15, pp. 130-136, (1988).

FORTALEZA, E. A.; Ferreira, C. R. F.; Santo, C. A.; Garcia, A.; Spim, J. A. Solidification Heat Transfer Model and a Neural Network Based Algorithm Applied to the Continuous Casting of Steel Billets and Blooms. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. , V.13, pp. 1 - 17, (2005).

GARCIA, A.; Spim, J. A.; Santos, C. A.; Cheung, N. *Lingotamento Contínuo dos Aços*. **Associação Brasileira de Metalurgia**, São Paulo, SP. (2006).

GARCIA, A. *Solidificação: Fundamentos e Aplicações*. Campinas, SP: **Editora da Unicamp**, (2001).

GARCIA, A. *Influência das Variáveis Térmicas de Solidificação na Formação da Macroestrutura e da Microestrutura e Correlação com Propriedades Decorrentes*, **Revista Projeções**, V. 23, pp. 13-32, (2005).

GRANER, F.; Glazier J. A. *Simulation of biological cell sorting using a twodimensional extended potts model*. **Physical Review Letters**. V. 1, N° 3, pp. 2013-2016, (1992)

HUNT, J.D. *Steady State Columnar and Equiaxed Growth of Dendrites and Eutetic*. **Materials Science and Engineering**, V. 65, pp. 75- 83, (1984).

JANIK, M.; Dyja, H. *Modelling of three-dimensional temperature field inside the mould during continuous casting of steel*. **Journal of Materials Processing Technoogy**, V. 157-158, pp.177–182, (2004).

JENSEN, M. H. *Computation Physics*. **Department of Physics**, University of Oslo, (2003).

KURZ, W.; Fisher, D. *Fundamentals of Solidification*. **Trans Tech Publications**, Switzerland, 1984/86/89/92.

LALLY B.; Biegler L.; Henein H. *Finite Difference Heat Transfer Modeling for Continuous Casting*. **Metallurgical Transactions B**. V.21, pp. 761-770, (1990).

LOUREIRO M. P. O. *Evolução de Domínios no Modelo de Potts Bidimensional*. **Tese de Doutorado**. Instituto de Física da UFRGS, Porto Alegre, RS, (2010)

MARTORANO M.A.; Aguiar D. T. *Modelo matemático determinístico para revisão da macroestrutura bruta de Solidificação*, **Revista Escola de Minas**. pp. 485-490, (2008).

MARTORANO, M.A., Biscuola, V.B. *Predicting the columnar-to-equiaxed transition for a distribution of nucleation undercoolings*. **Acta Materialia**, V. 57, pp. 607–615, (2009).

METROPOLIS, N.; Ulan, S. *The Monte Carlo Method*. **Journal of the American Statistical Association**, V. 44, pp.335-341, (1949).

MÜLLER, A. *Solidificação e análise térmica dos metais*. **Editora da UFRGS**, Porto Alegre, RS, (2002).

NEWMAN, M.E.J.; Barkema, G.T. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. **Oxford University Press Inc**, New York, (2001).

RADHKRISHNAN, B.; Zacharia, T. *Simulation of curvature-driven grain growth by using a modified Monte Carlo algorithm*. **Metall. And Mater. Trans. A**, n.26A, pp. 167, (1995).

RAMIREZ A.; Carrillo F.; Gonzalez J.L; Lopez S. *Stochastic Simulation of Grain Growth During Continuous Casting*. **Materials Science and Engineering**, pp. 208-216, (2006).

SALINAS, S. R. A. *Introdução à Física Estatística*. **Editora da Universidade de São Paulo**, Ed. 2<sup>a</sup> , São Paulo, (2005).

SANTOS, C.A.; Cheung, N.; Spim, J.A.; Garcia, A. *Análise tridimensional da solidificação de ligas através de uma abordagem numérica baseada na analogia entre sistemas térmicos e circuitos elétrico.*, **Proceeding of VI Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences ENCIT**, Santa Catarina, (1996).

SANTOS C. A.; *A Inserção de Técnicas de Inteligência Artificial na Modelagem Matemática do Lingotamento Contínuo dos Aços*. **Tese de Doutorado – UNICAMP**, Campinas, SP, (2001)

SCHERER, C. *Métodos Computacionais da Física*. **Editora Livraria da Física**, Ed. 1<sup>a</sup>, São Paulo, (2005).

SPIM, J.A. *Aplicação da Modelagem Matemática da Solidificação no Controle Ótimo do Lingotamento Contínuo de Aços*. **Dissertação de Mestrado**. Campinas: UNICAMP, (1993).

SROLOVITZ, D. J. ; Anderson, M.P. ; Grest, G. S.; Sahni, P. S. Computer Simulation of Grain Growth – I Kinetics. **Acta Metall.** Vol. 32, n<sup>o</sup> 5, pp 783-791, (1984).

STARIOLO D. A. *Static and Dynamic Properties of Disordered Systems*. **Facultad de Matemáticas, Astronomía y Física Universidad Nacional de Córdoba**. (2001).

Disponível em: <http://www.if.ufrgs.br/~stariolo/ensino.html>. Acessado em: 29 set de 2008

TIEU, A.K.; Langer, I.S.; Simulations of the Continuous Casting Process by a Mathematical Model. **International Journal Of Mechanical Sciences**, V. 39, n°. 2, pp. 185-192, (1997).

THOMAS, B.G.; Samarasekera, I.V.; Brimacombe, J.K. *Mathematical model of the thermal processing of steel ingots: Part 1. Heat flow model.* **Metallurgical Transactions B**, V. 18B, pp. 119-130, (1987).

WANG, C. Y., Beckermann, C. *Prediction of columnar to equiaxed transition during diffusion-controlled dendritic alloy solidification,* **Metallurgical and Materials Transactions A**, V. 25A, pp. 1081-1093, (1994).

XIE, Y.; Yu H.; Ruan X., Wang B., Ma Y. *Mathematical modeling of mould temperature field during continuous casting of steel.* **Journal of materials processing technology.** (2008).