



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

CÁSSIA KARINA TEIXEIRA GIRARD

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA SOLIDIFICAÇÃO
DIRECIONAL VERTICAL ASCENDENTE DE LIGAS
BINÁRIAS: SOLUÇÃO VIA MÉTODO DAS LINHAS**

BELEM

2015

CÁSSIA KARINA TEIXEIRA GIRARD

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA SOLIDIFICAÇÃO
DIRECIONAL VERTICAL ASCENDENTE DE LIGAS
BINÁRIAS: SOLUÇÃO VIA MÉTODO DAS LINHAS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química (PPGEQ) da Universidade Federal do Pará como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Emanuel Negrão Macêdo

BELEM
2015

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFPA

Girard, Cássia Karina Teixeira, 1986-
Modelagem e simulação da solidificação direcional
vertical ascendente de ligas binárias: solução via
método das linhas / Cássia Karina Teixeira Girard. -
2015.

Orientador: Emanuel Negrão Macêdo.
Dissertação (Mestrado) - Universidade
Federal do Pará, Instituto de Tecnologia,
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química,
Belém, 2015.

1. Solidificação. 2. Modelos matemáticos. 3.
Calor- transmissão. I. Título.

CDD 22. ed. 669.94

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA SOLIDIFICAÇÃO
DIRECIONAL VERTICAL ASCENDENTE DE LIGAS
BINÁRIAS: SOLUÇÃO VIA MÉTODO DAS LINHAS**

CÁSSIA KARINA TEIXEIRA GIRARD

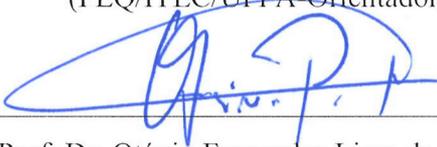
DISSERTAÇÃO APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA QUÍMICA (PPGEQ), DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ,
COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO
GRAU DE MESTRE EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Aprovada por:



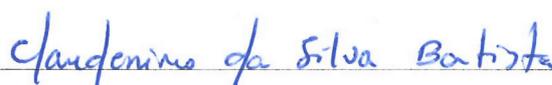
Prof. Dr. Emanuel Negrão Macêdo

(FEQ/ITEC/UFPA-Orientador)



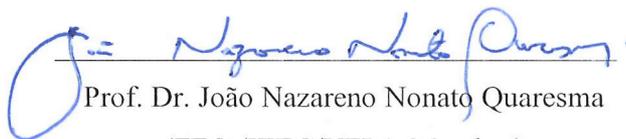
Prof. Dr. Otávio Fernandes Lima da Rocha

(IFPA-Membro)



Prof. Dr. Clauderino da Silva Batista

(FEQ /ITEC/UFPA-Membro)



Prof. Dr. João Nazareno Nonato Quaresma

(FEQ /ITEC/UFPA-Membro)

BELÉM, PA – BRASIL

2015

Dedico este trabalho, bem como todas as minhas conquistas aos meus amados pais Emílio Girard e Euzete Girard, que sempre serão os meus grandes exemplos de vida. Às minhas queridas irmãs Carla Girard e Cristiane Girard e às minhas queridas avós Célia Girard e Iliete Teixeira.

AGRADECIMENTOS

Este trabalho não poderia ser realizado sem a ajuda e apoio de algumas pessoas e instituições as quais presto aqui minha homenagem:

A Deus pelo dom da vida, saúde, força de vontade e sabedoria para levar adiante este trabalho e nunca ter pensado em desistir, por maiores que tenham sido os problemas que surgiram ao longo dessa jornada.

Aos meus pais, Euzete Girard e Emílio Girard, por serem meus exemplos de dignidade e caráter, por todo amor e carinho, bem como pelos ensinamentos e por jamais medirem esforços para me oferecerem uma educação de boa qualidade.

Aos meus familiares, em especial às minhas avós, Iliete e Célia, às minhas irmãs, Carla e Marina, e minhas tias, que sempre me incentivaram e me ajudaram a superar as dificuldades.

Ao professor Dr. Emanuel Negrão Macêdo, pela oportunidade oferecida, amizade, dedicação e orientação na elaboração deste trabalho.

Aos professores Luciano Moreira e Otávio Rocha pela disposição na retirada de dúvidas e aquisição de conhecimento relativos ao aspecto teórico do fenômeno da solidificação.

Ao colega André Barros pela disponibilidade e ajuda.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro que foi muito importante para a realização deste estudo.

À minha família, pelo apoio e incentivo em todos os momentos da minha vida.

Aos meus colegas de trabalho do Laboratório de Simulação de Processos (LSP) e do mestrado.

A todos aqueles que, de alguma forma, me apoiaram, torceram por mim e contribuíram mesmo que indiretamente, para a realização deste trabalho.

*A tarefa não é tanto ver aquilo que
ninguém viu, mas pensar o que ninguém
pensou sobre aquilo que todo mundo vê.*

Arthur Schopenhauer

Resumo da Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química (PPGEQ/UFGA) como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química.

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA SOLIDIFICAÇÃO DIRECIONAL
VERTICAL ASCENDENTE DE LIGAS BINÁRIAS: SOLUÇÃO VIA MÉTODO
DAS LINHAS**

Cássia Karina Teixeira Girard

Julho/2015

Orientador: Prof. Emanuel Negrão Macêdo, D. Sc.

Área de Concentração: Processos Inorgânicos

O Método das Linhas (MOL) foi utilizado na análise das equações que descrevem o processo de transferência de calor durante o processo de solidificação de ligas binárias. O modelo físico consistiu em simular a solidificação dessas ligas com base em resultados experimentais, existentes na literatura, obtidos em um dispositivo de solidificação direcional vertical ascendente. Um código computacional baseado em linguagem de programação FORTRAN 90/95, utilizando a sub-rotina DIVPAG da biblioteca IMSL, foi desenvolvido para resolver numericamente os sistemas de equações diferenciais ordinárias. As variáveis térmicas tais como velocidade da isoterma *liquidus* (V_L), gradiente térmico (G_L) e taxa de resfriamento (T_R) foram determinadas a partir das curvas de resfriamento para ligas de três diferentes sistemas utilizados nesse trabalho (Al-Sn, Al-Cu e Sn-Pb). Finalmente, foram realizadas comparações dos resultados numéricos obtidos nesse estudo com valores da literatura, demonstrando a potencialidade da técnica utilizada em tratar problemas dessa natureza.

Palavras-chave: Solidificação. Modelagem matemática. Transferência de calor.
Método das linhas.

Abstract of the dissertation presented to the Graduate Program in Chemical Engineering (PPGEQ/UFPa) as part of the requirements for the degree of Master of Chemical Engineering.

**MODELING AND SIMULATION OF VERTICAL UPWARD DIRECTIONAL
SOLIDIFICATION ALLOYS BINARY: SOLUTION VIA METHOD OF LINES**

Cássia Karina Teixeira Girard

July/2015

Advisor: Emanuel Negrão Macêdo, D. Sc.

Research Area: Inorganic Processes

Method of Lines (MOL) was used to analyze the equations that describe the heat transfer process during solidification of binary alloys. The physical model consisted of simulating the solidification of these alloys based on experimental results available in the literature, obtained in a vertical upward directional solidification device. A computer code based on FORTRAN 90/95 programming language, using the subroutine library DIVPAG IMSL, was developed to numerically solve ordinary differential systems of equations. Thermal variables such as growth rate of liquidus isotherm (VL), thermal gradient (GL) and cooling rate (TR) were determined from the cooling curves for alloys of three different systems used in this study (Al-Sn, Al-Cu and Sn-Pb). Finally, comparisons of numerical results obtained in this study with literature values were performed, demonstrating the potential of the technique used in treating such problems.

Keywords: Solidification. Mathematical modeling. Heat transfer. Method of lines.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 2.1 – Opções de fabricação de produtos metálicos	27
Figura 2.2 – Fluxograma representativo do fenômeno da solidificação	29
Figura 2.3 – Circuito térmico de um sistema metal/molde	31
Figura 2.4 – Molde semi-infinito	35
Figura 2.5 – Mecanismos de transporte de energia que ocorrem no fenômeno da solidificação	43
Figura 2.6 – Dispositivos de solidificação direcional vertical ascendente	46
Figura 2.7 – Dispositivo de solidificação direcional vertical descendente	47
Figura 2.8 – Dispositivos de solidificação direcional horizontal	49
Figura 2.9 – Esquema representativo das estruturas macroscópicas e microscópicas de um lingote fundido com transição colunar/equiaxial.....	50
Figura 2.10- Macroestrutura de solidificação (a)Sn15%Pb; (b)Al3%Si; (c)Al7%Si	51
Figura 2.11- Microestrutura de solidificação(a)M. dendrítica-Al7%Si;(b)M.celular-Pb1,8%Sb;(c)M. dendrítica-Al1%Fe;(d)M.dendrítica-Sn3,5%Ag...	55
Figura 2.12 – Diagramas de fase dos sistemas:(a)Al-Sn(b)Al-Cu e (c)Sn-Pb	58
Figura 2.13 – Peças produzidas a partir de ligas de alumínio	60
Figura 3.1 – Estratégia geral do Método das Linhas	64

Figura 4.1 – Representação física do problema	70
Figura 4.2 – Representação da malha com pontos nodais em um sistema unidimensional.....	83
Figura 5.1 – Confronto de perfis térmicos teóricos e experimentais do sistema binário Al-Sn	91
Figura 5.2 – Confronto de perfis térmicos teóricos e experimentais do sistema binário Al-Cu	93
Figura 5.3 – Confronto de perfis térmicos teóricos e experimentais do sistema binário Sn-Pb	95
Figura 5.4 – Posição das isothermas <i>liquidus</i> a partir da interface metal/molde em função do tempo para as ligas (a) Al20%Sn (b) Al30%Sn (c) Al40%Sb (d) Al6,2%Cu e (e) Al8,1%C.....	97
Figura 5.5 – Velocidades das isothermas <i>liquidus</i> a partir da interface metal/molde em função da posição para as ligas (a) Al20%Sn (b) Al30%Sn (c) Al40%Sb (d) Al6,2%Cu e (e) Al8,1%Cu	98
Figura 5.6 – Gradientes térmicos <i>liquidus</i> a partir da interface metal/molde em função da posição para as ligas (a) Al20%Sn (a) Al30%Sn (c) Al40%Sb (d) Al6,2%Cu e (e) Al8,1%Cu	100
Figura 5.7 – Taxas de resfriamento <i>liquidus</i> a partir da interface metal/molde em função da posição para as ligas (a) Al20%Sn (b) Al30%Sn (c) Al40%Sb (d) Al6,2%Cu e (e) Al8,1%Cu	101
Figura 5.8 – Parâmetros térmicos (P), (V_L), (G_L) e (T_R) referentes as ligas Sn5%Pb.....	102

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Analogia entre grandezas térmicas e elétricas	30
Tabela 2.2 – Modelos de solidificação de caráter experimental	32
Tabela 2.3 – Valores experimentais do parâmetro P para o sistema metal/molde...	35
Tabela 2.4 – Valores das constantes y_1 e y_2	35
Tabela 2.5 – Hipóteses simplificadoras de modelos analíticos exatos e aproximados	36
Tabela 2.6 – Modelos com soluções analíticas exatas	39
Tabela 2.7 – Modelos com soluções analíticas aproximadas	40
Tabela 2.8 – Técnicas de solução do método numérico de malha móvel	42
Tabela 2.9 – Parâmetros de fundição que afetam a macroestrutura da solidificação	52
Tabela 2.10 – Principais estudos apresentados na literatura que tentam descrever a formação das zonas coquilhada, colunar e equiaxial	54
Tabela 3.1 – Trabalhos que utilizam o MOL em suas metodologias de solução.....	68
Tabela 5.1 – Propriedades termofísicas do sistema de liga Al-Sn	87
Tabela 5.2 – Propriedades termofísicas do sistema de liga Al-Cu	87
Tabela 5.3 – Propriedades termofísicas do sistema de liga Sn-Pb	88

Tabela 5.4 – Comportamento da convergência da temperatura ao longo do fenômeno da solidificação referente a liga Al40%Sn	88
Tabela 5.5 – Comportamento da convergência da temperatura ao longo do fenômeno da solidificação referente a liga Al8,1%Cu	89
Tabela 5.6 – Comportamento da convergência da temperatura ao longo do fenômeno da solidificação referente a liga Sn5%Pb	89

LISTA DE SIGLAS

BEM	Método dos Elementos de Contorno
EDOs	Equações Diferenciais Ordinárias
EDPs	Equações Diferenciais Parciais
FDM	Método de Diferenças Finitas
FEM	Método dos Elementos Finitos
FVM	Método de Volumes Finitos
GITT	Técnica da Transformada Integral Generalizada
MEV	Microscopia eletrônica de Varredura
MOL	Método das Linhas
Nint	Número de intervalos
Npi	Número de pontos internos
PVI	Problema de Valor Inicial
SRC	Superresfriamento constitucional
TEM	Microscopia de Transmissão Eletrônica

LISTA DE SÍMBOLOS

B_i	Número de Biot
C_p	Calor específico
C_{P_L}	Calor específico do líquido
C_{P_S}	Calor específico do sólido
f_L	Fração mássica de líquido
f_S	Fração mássica de sólido
G_L	Gradiente térmico
g_L	Fração volumétrica de líquido
g_S	Fração volumétrica de sólido
h_∞	Coefficiente de transferência de calor por convecção
y_1	Constante
y_2	Constante
k_0	Coefficiente de partição do soluto (adimensional)
k_L	Condutividade térmica do líquido
k_S	Condutividade térmica do sólido

L	Comprimento
Ste	Número de Stefan
t	Tempo
t_s	Tempo de solidificação
T	Temperatura
T_L	Temperatura <i>liquidus</i>
T_0	Temperatura de vazamento (inicial)
T_∞	Temperatura ambiente
T_e	Temperatura eutética
T_R	Taxa de resfriamento
T_S	Temperatura <i>solidus</i>
T_m	Temperatura de fusão
\bar{u}	Velocidade média volumétrica do fluido
\bar{u}_s	Velocidade do sólido
V_L	Velocidade da isoterma <i>liquidus</i>
Letras Gregas	
α_s	Difusividade térmica do sólido

ρ	Massa específica
ρ_L	Massa específica do líquido
ρ_S	Massa específica do sólido
ΔH_f	Calor latente de fusão
τ	Tempo adimensional
θ_L	Temperatura <i>liquidus</i> adimensional
θ_∞	Temperatura ambiente adimensional
ΔT	Varição de temperatura

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO	21
1.1 MOTIVAÇÃO	21
1.2 JUSTIFICATIVA	22
1.3 OBJETIVOS	23
1.3.1 Objetivo Geral	23
1.3.2 Objetivos específicos	24
1.4 SÍNTESE DO TRABALHO	24
CAPÍTULO 2 – REVISÃO DA LITERATURA	26
2.1 FUNDAMENTOS SOBRE SOLIDIFICAÇÃO	26
2.1.1 Solidificação	26
2.1.2 Modelagem matemática no fenômeno da solidificação	30
2.1.2.1 Modelo por analogia elétrica	30
2.1.2.2 Modelos experimentais	32
2.1.2.3 Modelos com soluções analíticas	36
2.1.2.4 Modelos com soluções numéricas	40
2.2 MECANISMOS DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR NO FENÔMENO DA SOLIDIFICAÇÃO	42
2.3 DISPOSITIVOS DE SOLIDIFICAÇÃO DIRECIONAL	45
2.3.1 Dispositivo para solidificação direcional vertical ascendente	45
2.3.2 Dispositivo para solidificação direcional vertical descendente	46
2.3.3 Dispositivo para solidificação horizontal	48
2.4 ESTRUTURAS CARACTERÍSTICAS DA SOLIDIFICAÇÃO	49
2.4.1 Macroestrutura	50

2.4.1.1 Zona coquilhada	52
2.4.1.2 Zona colunar	53
2.4.1.3 Zona equiaxial	53
2.4.2 Microestrutura	55
2.5 LIGAS METÁLICAS	56
CAPÍTULO 3 – MODELAGEM PELO MÉTODO DAS LINHAS (MOL).....	62
CAPÍTULO 4 – SOLIDIFICAÇÃO DE LIGAS BINÁRIAS: MODELO DE SEGREGAÇÃO	69
4.1 CONSIDERAÇÕES GERAIS	69
4.2 CONSIDERAÇÕES SOBRE O MODELO FÍSICO	70
4.2.1 Modelagem matemática do problema	71
4.2.2 Adimensionalização do problema	81
4.2.3 Metodologia de solução	83
CAPÍTULO 5 - RESULTADOS E DISCUSSÕES	86
5.1 CONSIDERAÇÕES INICIAIS	86
5.2 ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA	88
5.3 ANÁLISE DO CAMPO DE TEMPERATURA	90
5.3.1 Curvas de resfriamento	90
5.3.1.1 Ligas do sistema Al-Sn	90
5.3.1.2 Ligas do sistema Al-Cu	93
5.3.1.3 Ligas do sistema Sn-Pb	94
5.3.2 Parâmetros térmicos de solidificação.....	95
5.3.2.1 Sistemas Al-Sn e Al-Cu	96
5.3.2.2 Sistema Sn-Pb	102
CAPÍTULO 6 - CONCLUSÃO	103

6.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS 103

REFERÊNCIAS 104

1 INTRODUÇÃO

O presente capítulo apresenta a motivação, a justificativa e os objetivos relacionados ao estudo da solidificação vertical ascendente de ligas binárias.

1.1 MOTIVAÇÃO

A relação custo x benefício, a competitividade e a busca por novos mercados têm motivado as indústrias de diversos segmentos a concentrar seus investimentos na melhoria da qualidade de seus produtos finais. A aplicação, eficiência e qualidade do produto a ser obtido estão diretamente relacionados ao tipo de material que constitui a peça ou o equipamento bem como suas propriedades, sejam as mesmas mecânicas, elétricas, térmicas, físicas, de fabricação ou magnéticas.

Desde os primórdios da Revolução Industrial, o estudo da solidificação começou a despertar mais especificamente a atenção do homem. No entanto, foi durante a década de 60 que o seu estudo cresceu em importância, quando a tecnologia passou a exigir materiais com alto grau de pureza e estruturas cada vez mais controladas (FERREIRA, SALVINO e PEREIRA, 2011).

Segundo Santos (2006), a solidificação de metais e ligas é caracterizada por uma transformação de fase com mudança de estado, em que a fase líquida se transforma em fase sólida, quando as condições termodinâmicas são tais que o sólido apresenta menor energia livre, sendo portanto mais estável.

A solidificação de metais e ligas ocorre através da nucleação e do crescimento de partículas da fase sólida no interior da fase líquida. Normalmente, a nucleação ocorre de forma heterogênea, seja pelo contato com as paredes do molde no qual o metal é solidificado, seja pela interferência de impurezas, compostos intermetálicos ou agentes nucleantes adicionados propositalmente para promover uma nucleação extensiva e, conseqüentemente, uma estrutura final refinada (SANTOS, 2006). De acordo com Ohno (1976), a estrutura formada imediatamente após a solidificação determina as propriedades do produto final.

A mudança de fase que ocorre durante o fenômeno da solidificação, tem início com aparecimento de pequenas partículas da nova fase sólida, que crescem até que a transformação se complete. O aparecimento e o crescimento posterior dessas partículas sólidas caracterizam o modo de formação da microestrutura em metais e ligas metálicas,

de tal modo que para a indústria que busca a fabricação em larga escala de produtos com propriedades mecânicas em grau bastante elevado, o conhecimento da influência que as variáveis térmicas exercem na formação das estruturas solidificadas permite um melhor controle dos processos de fundição uma vez que as mesmas determinam a qualidade do produto obtido, ratificando a relevância científica e tecnológica do fenômeno da solidificação de materiais metálicos como um importante viés de investigação do campo industrial (COSTA, 2013). A solidificação, portanto, é a forma mais rápida de transformação da matéria-prima ao produto final. Dessa forma, o conhecimento e o controle desse fenômeno possibilita menores custos em escala industrial e devido suas características, a solidificação pode ser considerada uma das especialidades mais importante da metalurgia e da ciência dos materiais (PARIONA *et al.*, 2011).

1.2 JUSTIFICATIVA

Durante os últimos anos houve uma evolução significativa na área de simulação numérica em todas as áreas da ciência. Particularmente, o fenômeno da solidificação envolve características físicas bastante complexas, sendo por isso necessária a sua modelagem (PARIONA *et al.*, 2011).

De acordo com Cruz (2008), o estudo da solidificação direcional vertical em condições transitórias, pode ser avaliado considerando o fluxo de calor extraído na direção vertical, na qual o sentido de avanço da frente de solidificação pode ser ascendente ou descendente.

Em condições de fluxo ascendente, como é o caso abordado no presente estudo, o soluto é rejeitado na frente de solidificação, visto que dependendo do par soluto/solvente ocorre a formação de um líquido interdendrítico, geralmente, mais denso que o restante do volume global de metal líquido, favorecendo a solidificação em sua forma mais estável sob o ponto de vista de movimentação de líquido. Nessas condições o líquido mais denso tende a localizar-se junto à fronteira de transformação sólido/líquido, minimizando as correntes convectivas, tanto por diferença de temperatura quanto por diferença de concentração. Dessa forma, é possível modelar matematicamente esse fenômeno com algumas simplificações uma vez que a transferência de calor no interior do lingote, para este caso, é realizada essencialmente por condução térmica direcional (CRUZ, 2008; SILVA, 2007; PERES, SIQUEIRA e GARCIA, 2004).

Segundo Moutinho (2011), muitos trabalhos têm sido investigados em sistema de solidificação direcional com extração de calor sendo realizada, principalmente, através da base conforme podemos encontrar nos trabalhos de Ares e Schvezov (2000); Siqueira, Cheung e Garcia (2003); Peres, Siqueira e Garcia (2004); Reinhart (2005); Canté (2007); Cruz (2008); Gueijman (2010); Moutinho (2011); Moreira (2012); Bertelli (2013); Carvalho (2013); Moreira (2014); Dias Filho (2015); Rocha (2015).

Uma forma de representar o fenômeno da solidificação é a utilização da modelagem e simulação do mesmo, que consiste em uma ferramenta científica empregada para otimização de experimentos e minimização de investimentos, além da obtenção da interação dos diversos fatores intervenientes durante o processo, contribuindo dessa forma na redução do tempo gasto em laboratório e seus respectivos custos (TUCCI, 1998).

Desse modo, modelar o processo de transferência de energia térmica durante o fenômeno da solidificação tem sido um grande desafio, pois é algo complexo por estar relacionado com diversos fatores, cada um dependente de outros componentes, para então agrupá-los de modo a ser obtido um resultado equivalente ao experimental.

1.3 OBJETIVOS

Tendo em vista a importância do fenômeno da solidificação, da aplicação do modelo matemático e simulação desse fenômeno, torna-se fundamental entender um pouco melhor as variáveis térmicas as quais este fenômeno encontra-se sujeito. Sendo assim, este trabalho foi planejado no sentido de desenvolver uma análise teórica no qual foram estabelecidos alguns objetivos.

1.3.1 Objetivo geral

– Estudar o fenômeno da solidificação direcional vertical ascendente de ligas binárias através do modelo de segregação (CHANG e STEFANESCU, 1996; NI e INCROPERA, 1995) aplicando o Método das Linhas (MOL) (SCHIESSER *et al*, 2009; HAMDI, 2009).

1.3.2 Objetivos específicos

- Desenvolver uma formulação matemática a partir da equação de conservação de energia para descrever o processo de transferência de calor durante a solidificação direcional vertical ascendente de ligas binárias a partir do modelo de segregação;
- Propor um esquema de discretização a partir do Método das Linhas (MOL) com o objetivo de transformar o sistema de equações diferenciais parciais (EDPs) em um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs) na forma adimensional;
- Implementar um código computacional baseado em linguagem de programação FORTRAN 90/95, capaz de prever o perfil de temperatura em função do tempo, bem como os parâmetros térmicos da solidificação como a velocidade da isoterma *liquidus* (V_L), gradiente térmico (G_L) e taxa de resfriamento (T_R); e
- Comparar os resultados obtidos a partir da simulação numérica com resultados presentes na literatura.

1.4 SÍNTESE DO TRABALHO

O estudo da modelagem e simulação do fenômeno da solidificação vertical ascendente de ligas binárias, via método das linhas, é desenvolvido nessa dissertação, composta por cinco capítulos.

No **Capítulo 1** é feita uma abordagem sobre a importância do estudo do fenômeno da solidificação, bem como as motivações que levaram ao estudo deste tema e sua justificativa, além dos principais objetivos e a forma de organização na realização deste trabalho.

O **Capítulo 2** aborda alguns conceitos sobre o fenômeno da solidificação, ligas metálicas, além dos aspectos relativos a modelagem matemática como o processo de transferência de calor, tipos de dispositivos utilizados na solidificação e formação da macro e microestrutura.

O **Capítulo 3** aborda a modelagem pelo Método das Linhas (MOL).

No **Capítulo 4** apresenta o desenvolvimento da modelagem matemática e simulação utilizada na solução de problemas envolvendo solidificação vertical ascendente com fluxo de calor transitório para ligas metálicas, bem como suas equações matemáticas e metodologia de solução.

O **Capítulo 5** enfatiza os resultados e discussões obtidos pela simulação numérica a partir do modelo abordado no capítulo anterior, através da utilização de gráficos e Tabelas para uma melhor abordagem dos resultados, bem como comparações realizadas a partir de dados experimentais obtidas na literatura.

Finalmente, no **Capítulo 6**, são apresentadas as conclusões gerais do trabalho desenvolvido e as principais sugestões a serem realizadas em trabalhos futuros.

2 REVISÃO DE LITERATURA

Em nosso cotidiano o fenômeno da solidificação encontra-se presente em diversos processos industriais. A análise matemática do referido fenômeno voltada a processos de lingotamento estático, lingotamento contínuo e fundição tem nos dias atuais um papel de importância fundamental para a indústria, pois permite controlar ou melhorar a produção em termos de qualidade e/ou redução de custos (MEZA, 2012). Neste capítulo, serão abordados alguns tópicos relacionados ao fenômeno da solidificação bem como uma abordagem sobre a metodologia de solução MOL.

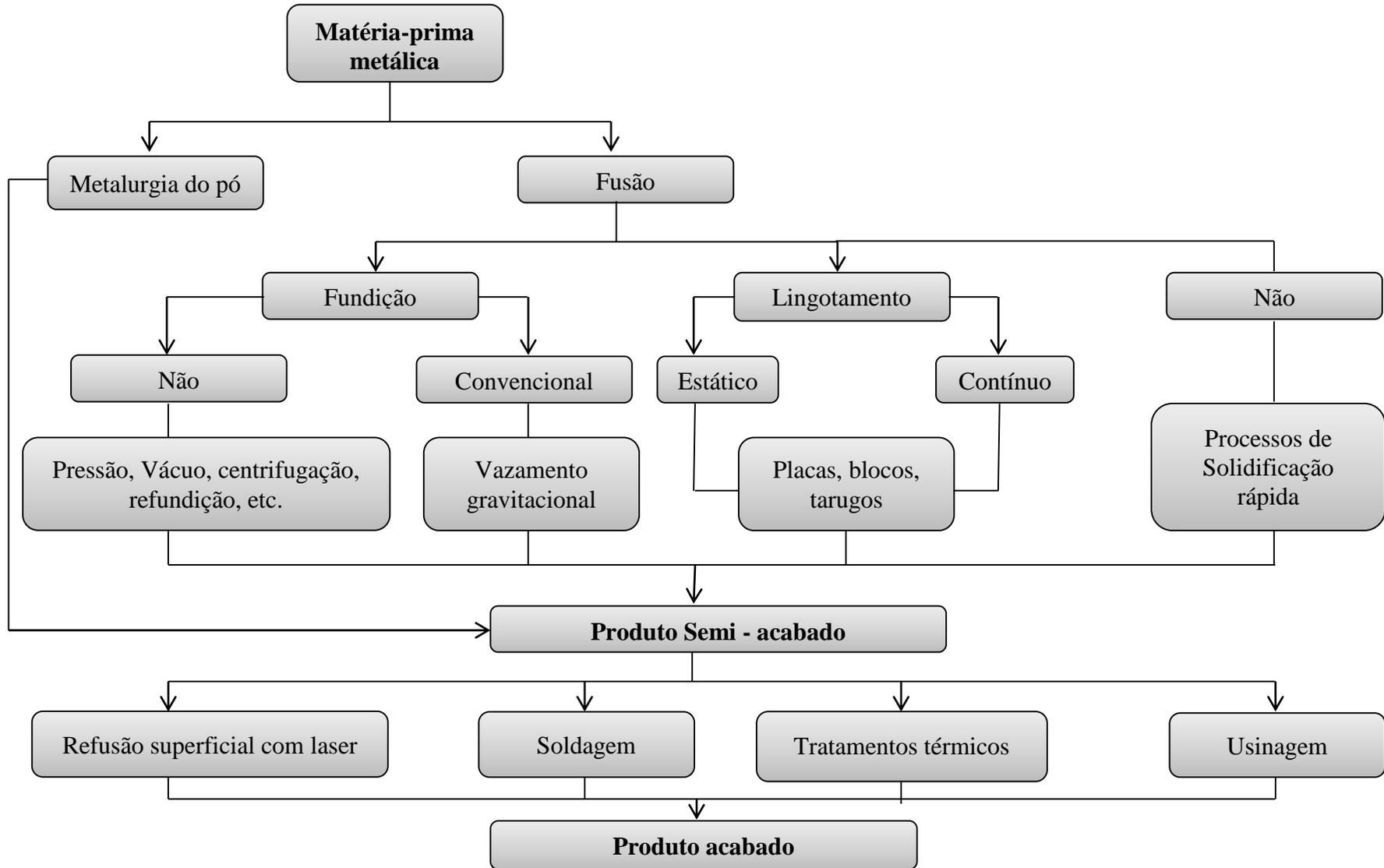
2.1 FUNDAMENTOS SOBRE SOLIDIFICAÇÃO

2.1.1 Solidificação

Diferentes materiais têm acompanhado a humanidade desde seus primórdios, sendo utilizados na produção de uma variedade de objetos tais como armas, utensílios, ferramentas, objetos decorativos, etc. A obtenção e utilização desses objetos a partir do fenômeno da solidificação foi de extrema importância, uma vez que períodos antigos foram denominados a partir do material neles predominantemente utilizados como, por exemplo, a Idade do Bronze com início em torno de 3300 a.C. A partir de então as técnicas de fundição começaram a evoluir (COSTA, 2008). A adição de estanho ao cobre formou uma nova liga conhecida como bronze, aumentando a dureza do metal e permitindo ao homem produzir armas e armaduras de alta resistência (ROSSITTI, 1993).

De acordo com Garcia (2007), a substituição de um material por outro gerava sempre novas aplicações e a transição entre os diferentes períodos da era progressiva, tendo ocorrido em diferentes épocas, em cada região do mundo. Passando pelo aparecimento do ferro fundido na China em 600 a.C. e seu surgimento na Europa no século XV, quando o homem descobriu, por experiência ou coincidência, que a combinação de certos elementos metálicos (ligas), melhorava as propriedades do material, ampliando consideravelmente as possibilidades de aplicação. Essa evolução e a transformação de fase característica do fenômeno da solidificação é de grande interesse em metalurgia, uma vez que a imensa maioria dos produtos metálicos que atendem às necessidades imediatas da sociedade moderna, utiliza, em algum momento da sua cadeia produtiva, o processo de solidificação (Figura 2.1).

Figura 2.1 – Opções de fabricação de produtos metálicos



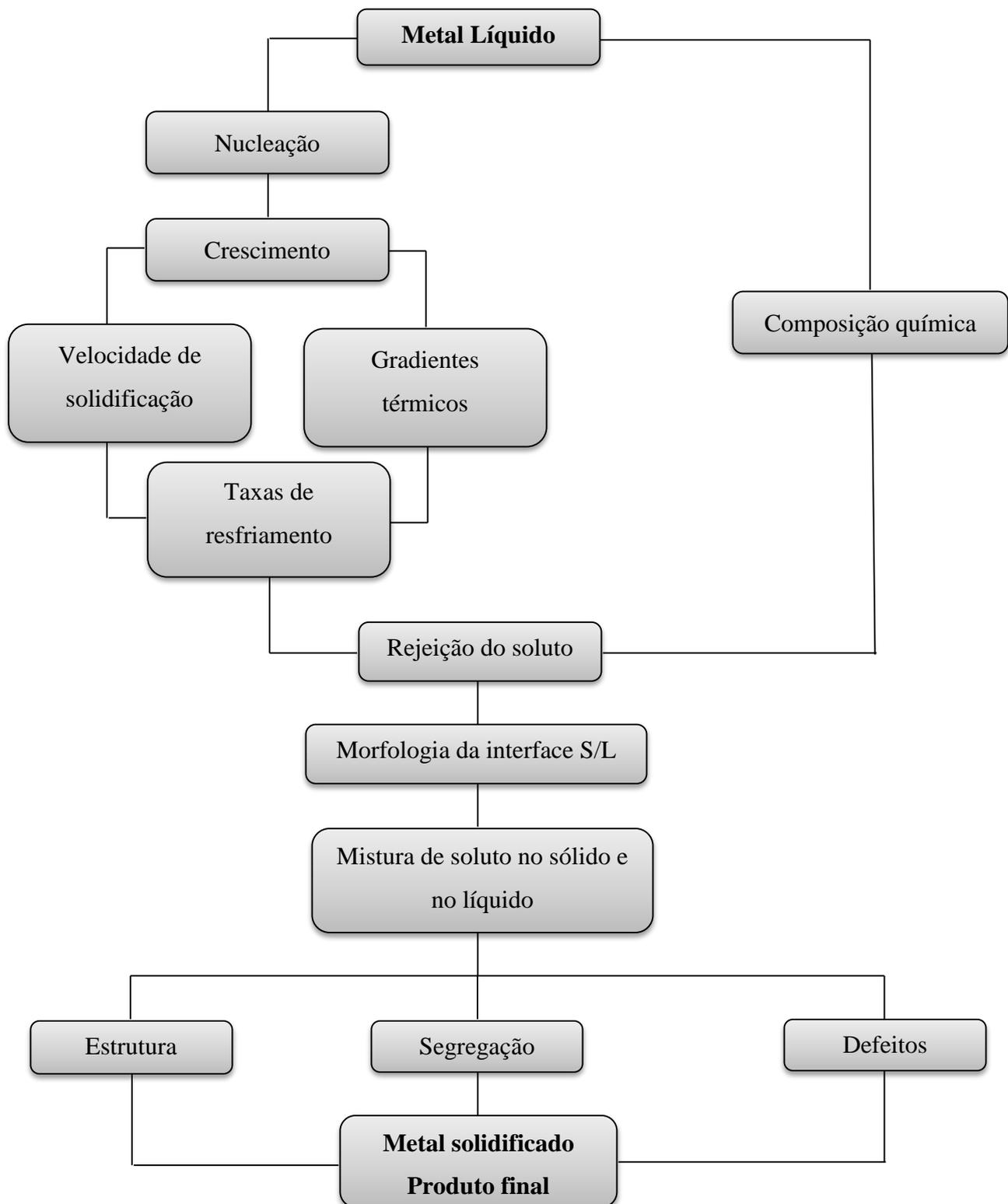
Fonte: Garcia (2007)

De acordo com Garcia (2007), a solidificação de um material é fundamentalmente um processo de transferência de calor e massa em regime transitório de extração de calor, sendo necessário que um corpo libere determinada quantidade de calor latente para que ocorra a solidificação, ocasionando dessa forma uma abrupta redução de energia, gerando a redução das oscilações térmicas das moléculas e consequentemente a formação do sólido. Dessa forma, para as indústrias que utilizam o fenômeno da solidificação em seu processo, o entendimento aprofundado deste fenômeno é de fundamental importância, pois define a qualidade do material a ser produzido e também as variáveis térmicas que o regem.

A solidificação de metais e ligas metálicas também pode ser caracterizada por uma transformação de fase com mudança de estado, em que uma fase líquida se transforma em uma fase sólida, quando as condições termodinâmicas são tais que o sólido apresenta menor energia livre sendo, portanto, mais estável (SANTOS, 2006).

Qualquer processo baseado na solidificação de um metal com o objetivo de produzir uma peça sólida, deve atender determinadas exigências, que dependem de sua aplicação futura e que decorrem de aspectos estruturais e geométricos. Sabe-se que as propriedades finais dos fundidos dependerão da estrutura solidificada, por consequência dos diversos fatores térmicos, químico, físico, operacional que as controlam, como por exemplo, o fluxo de calor do metal líquido, propriedades químicas e termofísicas do metal em estudo, condições de vazamento e propriedades do sistema de solidificação (GARCIA, 2007; PEIXOTO, 2009), conforme podemos observar no fluxograma da Figura 2.2.

Figura 2.2 – Fluxograma representativo do fenômeno da solidificação



Fonte: Garcia (2007).

2.1.2 Modelagem matemática no fenômeno da solidificação

O processo de transferência de calor envolvido nesse fenômeno ocorre em regime transiente e sua abordagem matemática portanto é bastante complexa, uma vez que tantos outros fenômenos da ciência encontram-se envolvidos, como por exemplo termodinâmica e fenômenos de transporte, que acabam exigindo a condição da estruturação de hipóteses simplificadoras das condições reais, seja de caráter físico ou matemático, a fim de que suas soluções possam ser viabilizadas (CARSLAW, 1959; RUDDLE, 1957).

Os métodos de análise da transferência de calor no fenômeno da solidificação podem ser classificados segundo as hipóteses simplificadoras empregadas e pelo tipo de abordagem ou ferramenta utilizada na tentativa de solucionar o problema. Assim, podem ser divididos em modelos como, por exemplo, modelos por analogia elétrica, experimentais, que apresentam soluções analíticas e modelos numéricos (SAMARKII *et al*, 1993; SWAMINATHAN e VOLLER, 1992).

2.1.2.1 Modelos por analogia elétrica

Segundo Ding (1996) e Laxmanan (1997), nesse tipo de modelo o manuseio de pequenas temperaturas envolvidas minimiza o risco, facilitando a análise tanto da evolução do processo de solidificação como da estrutura final, do acabamento superficial e do produto assim solidificado, além de possibilitar uma projeção para situações reais.

Este tipo de método também pode ser baseado na similaridade de forma existente entre as equações que regem a transferência de calor e as equações de circuitos elétricos tipo resistor/capacitor em regime transitório, conforme pode-se observar na Figura 2.3 (SCIAMA, 1964). A Tabela 2.1 apresenta as equivalências elétricas de algumas propriedades térmicas.

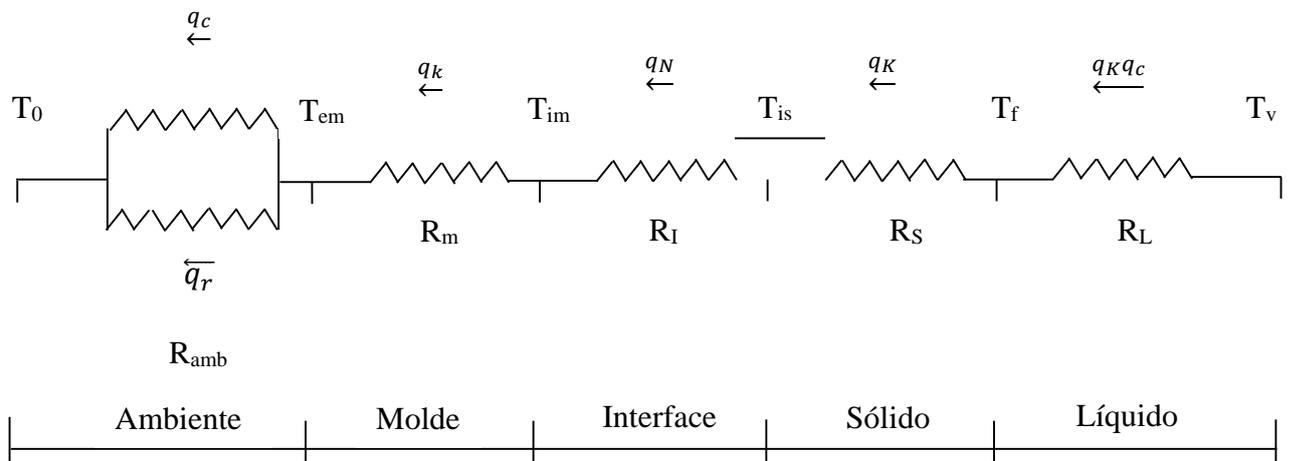
Tabela 2.1 – Analogia entre grandezas térmicas e elétricas

Propriedades térmicas	Equivalência elétrica
capacidade térmica [J/Kg.K]	capacidade elétrica [F]
resistência térmica [K/W]	resistência elétrica [V/A]
temperatura [K]	tensão [V]
fluxo térmico [W/m ²]	corrente elétrica [A]

Fonte: Santos (1980).

Os primeiros trabalhos com essa analogia ocorreram na década de 40 com os trabalhos de Paschkis (1945; 1947; 1953; 1956) nos quais podem ser analisados a temperatura de vazamento, a espessura do molde de areia, a formação de camada de ar entre o metal e o molde e, o efeito de resfriadores. Nos trabalhos de Spin (1995) outros parâmetros podem ser analisados como por exemplo o coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde (Quaresma, 1999).

Figura 2.3 – Circuito térmico de um sistema metal/molde



Fonte: Garcia (2007).

Sendo:

$R_{amb} = 1/h_{amb}$ É a resistência térmica da superfície externa do molde ao meio ambiente;

$h_{amb} = h_c + h_r$ É o coeficiente de transferência de calor molde/ambiente dado pela soma respectivamente dos coeficientes de convecção e de radiação da superfície do molde ao ambiente;

$R_m = e_m/K_m$ É a resistência térmica do molde, dada pela relação entre a espessura do molde e sua condutividade térmica;

$R_I = 1/h_i$ É a resistência térmica da interface metal/molde, dada pelo inverso do coeficiente de transferência de calor da interface metal/molde.

$R_s = S/K_s$ É a resistência térmica da camada solidificada, dada pela relação entre a espessura do sólido formado e sua condutividade térmica.

$R_L = L / (K_L + h_c \cdot L)$ É a resistência térmica do líquido, considerando-se a condução no líquido de espessura L e a convecção do líquido para a interface sólido/líquido.

2.1.2.2 Modelos experimentais

Segundo Santos (1980), nesse tipo de modelo os autores propõem uma ferramenta de análise do problema de solidificação baseada na observação e comprovações experimentais. Dentre as equações experimentais que resultam destas investigações podem-se mencionar as seguintes, conforme Tabela 2.2.

Tabela 2.2 – Modelos de solidificação de caráter experimental

			(continua)
Modelo/ano	Hipóteses	Restrições	Equação
Garcia e Gulyaev (1960)	– Propôs uma equação experimental para estimativa do tempo total de solidificação de grandes lingotes ou peças fundidas em moldes de areia ou ferro fundido com geometria plana, cilíndrica e esférica.		– Tempo total de solidificação
			$t_s = 6p \cdot f \cdot e^2 \cdot 10^3 [s]$
			Sendo: e a metade da dimensão final [m]; f o fator de forma do sistema: Retangular $f = 1$ Cilíndrica $f = 0,76$ Esférica $f = 0,47$
			Os valores para p podem ser obtidos na Tabela 2.3.

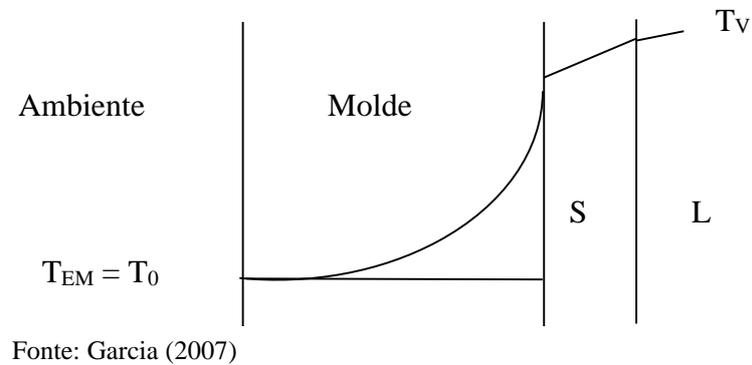
Tabela 2.2 – Modelos de solidificação de caráter experimental

			(continuação)
Modelo/ano	Hipóteses	Restrições	Equação
Pires, Prates e Biloni (1972;1974)	<ul style="list-style-type: none"> – Molde considerado semi-infinito, ou seja, a temperatura da superfície externa do mesmo não apresenta variação durante todo o processo de solidificação, mantendo-se em equilíbrio com a temperatura ambiente. Na Figura 2.4 podemos observar um desenho esquemático de um molde semi-infinito. 	<ul style="list-style-type: none"> – A grande limitação desse modelo reside no fato de não permitir a determinação da distribuição de temperatura do sistema metal/molde. 	<ul style="list-style-type: none"> – Tempo de solidificação $t_s = \alpha s^2 + \beta s$
	<ul style="list-style-type: none"> – Fluxo de calor unidimensional; – A resistência térmica da interface metal/molde é constante durante a solidificação (h_i); – A interface sólido/líquido é macroscopicamente plana; – A solidificação realiza-se sem superaquecimento no metal líquido; – As propriedades físicas do sistema metal/molde não variam durante o processo. 		<p>Sendo:</p> <p>α e β são constantes calculadas por:</p> $\alpha = \frac{1}{4\phi^2 a_s}$ $\beta = \frac{Hd_s}{h_i(T_F - T_0)}$

Tabela 2.2 – Modelos de solidificação de caráter experimental

			(conclusão)
Modelo/ano	Hipóteses	Restrições	Equação
Garcia, Santos e Prates (1977)	– Considera que o tempo de solidificação pode ser decomposto em duas parcelas, sendo uma relativa às influências da radiação e da convecção, e outra relativa às influências de condução e transferência newtoniana;		– Tempo de solidificação
	OBS: Santos também trabalhou com frente cilíndricas e esférica.		$t_s = t_\infty \operatorname{erf} \left(y_1 \frac{V_m}{V_p} \right) + t_0 \operatorname{erf} \left(y_2 \frac{V_m}{V_p} \right)$ <p>Sendo a relação entre o volume do molde e o volume da peça representada por:</p> $\left(\frac{V_m}{V_p} \right) \text{ e } t_\infty \text{ e } t_0 \text{ são}$ <p>valores ideais de tempo de solidificação. Verificar na Tabela 2.4 os valores correspondentes a y_1 e y_2</p>

Fonte: Santos (1980) [adaptado].

Figura 2.4 – Molde semi-infinito**Tabela 2.3** – Valores experimentais do parâmetro P para o sistema metal/molde.

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

Fonte: Garcia, Clyne e Prates (1978).

Tabela 2.4 – Valores das constantes y_1 e y_2

Geometria	Molde	
	Areia	Coquilha de aço
Plana	$y_1 = 1$ $y_2 = \frac{1}{4}$	$y_1 = 1$ $y_2 = \frac{1}{2}$
Cilíndrica	$y_1 = 2$ $y_2 = \frac{1}{2}$	$y_1 = 2$ $y_2 = 1$

Fonte: Quaresma (1999).

2.1.2.3 Modelos com soluções analíticas

Segundo Santos (1980), os modelos analíticos podem ser divididos em aproximados e exatos.

Os modelos analíticos exatos não admitem simplificações de caráter matemático, introduzindo hipóteses simplificadoras apenas de caráter físico, restringindo bastante a utilização práticas de tais modelos, devido ao afastamento demasiado das condições físicas reais. Diferentemente dos modelos analíticos aproximados, os quais caracterizam-se por admitir em simplificações de caráter matemático e assumir determinadas condições limites e de contorno que restringem o problema real, com a finalidade de tornar sua solução viável analiticamente (QUARESMA, 1999). As hipóteses simplificadoras tanto para o modelo analítico exato quanto do modelo analítico aproximado, podem ser observadas na Tabela 2.5.

Tabela 2.5 – Hipóteses simplificadoras de modelos analíticos exatos e aproximados

(continua)

Modelo	Hipóteses
Analítico exato	<ul style="list-style-type: none"> – O fluxo de calor é unidirecional; – Não existe resistência térmica ao fluxo de calor na interface metal/molde. Admite a existência de contato térmico perfeito metal/molde ou coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde tendendo a infinito. – O molde comporta-se como semi-infinito, não havendo perdas de calor do molde para o meio ambiente. A temperatura externa do molde deve permanecer constante durante a solidificação. Todo calor é transferido por condução e absorvido totalmente pelo molde. – A temperatura da interface metal/molde permanece constante durante a solidificação. – A interface sólido/líquido é macroscopicamente plana. – Não existe fluxo de massa. – As propriedades físicas do metal e do molde permanecem constantes durante a solidificação.

Tabela 2.5 – Hipóteses simplificadoras de modelos analíticos exatos e aproximados

(conclusão)

Modelo	Hipóteses
Analítico aproximado	– O fluxo de calor é unidimensional.
	– O molde comporta-se como semi-infinito, não havendo perdas de calor do molde para o meio ambiente.
	– O contato térmico metal/molde não é perfeito, apresentando um coeficiente de transferência de calor finito.
	– A interface sólido/líquido é macroscopicamente plana.
	– O material do molde apresenta uma difusividade de calor muito maior do que a do metal, isto é, o molde é considerado como um absorvedor perfeito de calor.
	– Não existe fluxo de massa.
	– As propriedades físicas do metal e do molde são constantes durante o fenômeno da solidificação.

Fonte: Quaresma (1999) [adaptado].

– Modelos analíticos exatos

Nos modelos analíticos exatos é considerado o elemento infinitesimal do sistema metal/molde, sendo a equação da condução de calor no sólido representada por:

$$\nabla \cdot (k \nabla T) = \frac{\partial}{\partial t} (\rho C_p T) \quad (2.1)$$

Aplicando-se as hipóteses apresentadas anteriormente na Tabela 2.5, por meio dos modelos analíticos exatos, temos:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (2.2)$$

Sendo o fluxo de calor por unidade de área dado pela Equação de Fourier:

$$q = -k \frac{\partial T}{\partial x} \quad (2.3)$$

A solução deve satisfazer à equação (2.4), desde que satisfeitas as seguintes condições:

Para $t = 0$;

$$x \leq 0 \quad T_m = T_0; \quad (2.4)$$

$$x > 0 \quad T_L = T_V; \quad (2.5)$$

Para $t = 0$;

$$x \rightarrow -\infty \quad T_m = T_0; \quad (2.6)$$

$$x \rightarrow +\infty \quad T_L = T_V; \quad (2.7)$$

$$x = 0 \quad T_m = T_S = T_i \quad (2.8)$$

$$x = S \quad T_S = T_L = T_F \quad (2.9)$$

Baseadas nas equações (2.2) e (2.3) e nas condições de contorno consideradas, foram desenvolvidos vários modelos analíticos exatos cujas soluções são apresentadas a seguir:

Tabela 2.6 – Modelos com soluções analíticas exatas

Modelo	Consideração
Modelo de Schwarz	Solução de caráter mais geral para o problema, na forma em que foi estabelecido nas equações (2.2) e (2.3), foi obtida por Schwarz (PRATES, 1971).
Modelo de Neumann	A solução encontrada por Neumann apresenta um caráter menos geral do que a solução de Schwarz, e admite difusividade de calor infinita para o molde, isto é, considera o molde um perfeito absorvedor de calor, o que torna essa solução aplicável somente moldes refrigerados (PRATES, 1971; ADAMS, 1958).
Modelo de Lightfoot	Baseia-se na hipótese de que o molde seja um perfeito absorvedor de calor a exemplo da proposta de Neumann, no entanto, adicionalmente admite que as propriedades físicas do metal solidificado sejam iguais às do metal líquido (CARSLAW, 1959; PRATES, 1971; RUDDLE, 1957).
Modelo de Lyubov	Baseia-se em uma única hipótese adicional. Considera que não existe superaquecimento no metal líquido e que o metal é vazado à temperatura de fusão (RUDDLE, 1957, PRATES, 1971).
Modelo de Stefan	Trata-se de uma particularidade da proposta de Lyubov para o caso de moldes refrigerados, uma vez que apresenta como hipótese simplificadora o molde como perfeito absorvedor de calor e ausência de superaquecimento no metal líquido (PRATES, 1971).
Modelo de Chvorinov	Considera o molde como um péssimo absorvedor de calor e o metal líquido sendo vazado na temperatura de fusão (PRATES, 1971).

Fonte: Quaresma (1999) [adaptado].

No final da década de 70, foi desenvolvido um método analítico para solidificação com interface sólido/líquido macroscopicamente plana, que incorporou a existência de uma resistência térmica metal/molde finita constante, inicialmente desenvolvida para moldes refrigerados (GARCIA, CLYNE e PRATES, 1978) e, adiante, para moldes maciços (GARCIA, CLYNE e PRATES, 1979). Posteriormente, adotou-se um artifício de cálculo que permitiu assumir a resistência variável na interface metal/molde (CLYNE *et al.*, 1982). E por último, a ampliação das hipóteses básicas permitindo a análise da solidificação de ligas binárias em moldes refrigerados (GARCIA, 1984) e em moldes maciços (YNOUE, 1992).

– Soluções analíticas aproximadas

Segundo Santos (1980), o desenvolvimento das soluções analíticas aproximadas é baseado em balanços de fluxo de calor na espessura solidificada em um instante qualquer do fenômeno da solidificação, associando-se ao sistema metal/molde um

sistema de coordenadas. As condições de contorno no início do fenômeno são iguais as consideradas no desenvolvimento dos métodos analíticos exatos. Na Tabela 2.7 são apresentadas soluções para os modelos analíticos aproximados.

Tabela 2.7 – Modelos com soluções analíticas aproximadas

Modelo	Consideração
Modelo de London/Seban	Nessa solução, os autores adotaram uma função linear para descrever o perfil térmico do metal durante o processo de solidificação, significando que, a resistência térmica da interface metal/molde é muito maior que a do metal e o efeito do calor específico é desprezível se comparado ao calor latente. A este fato foi associado a hipótese do vazamento do metal líquido sem superaquecimento (LONDON <i>et al.</i> , 1943)
Modelos de Adams e Hills	Obtiveram suas soluções adotando uma função quadrática para descrever o perfil térmico do metal sólido durante a solidificação e associaram a esta condição que o metal solidifica sem superaquecimento (ADAMS, 1958; HILLS, 1969).
Modelo de Hrycak	Admitiu duas funções auxiliares, uma que descreve o perfil térmico no metal solidificado e outra que descreve o perfil térmico no metal líquido (HRYCAK, 1963).

Fonte: Santos (1980) [adaptado].

2.1.2.4 Modelos com soluções numéricas

Segundo Spim (1996) e Santos (1980), os modelos numéricos são importantes, pois conduzem à utilização de hipóteses mais próximas das condições reais de solidificação podendo ser levados em consideração a resistência térmica na interface metal/molde, a geometria e as dimensões do sistema metal/molde, a geometria e cinética da interface sólido/líquido, a variação das propriedades termofísicas, a existência de fluxos de massa durante o processo, etc., o que não acontece nas soluções analíticas exatas e aproximadas que estão limitadas às restrições impostas para sua solução conforme apresentado no tópico anterior.

Um dos principais problemas relacionados na modelagem de solidificação de metais puros e de ligas binárias eutéticas e não eutéticas, constitui-se no tratamento do calor latente associado à mudança de fase (ÖZISIK, 1968). Tendo em vista esse problema, Dusimberre (1949) propôs um método versátil que serviu de base para o desenvolvimento de outros métodos numéricos. Sendo este problema abordado por diferentes

pesquisadores pelo balanço de energia na interface sólido/líquido, entre estes podemos citar Özisik (1968), Voller e Cross (1981), Viskanta (1988), Poirier e Salcudean (1988), Rabin e Korin (1993), etc.

Segundo Viskanta (1988), os vários métodos numéricos que foram propostos com intuito de resolver o problema de transferência de calor com mudança de fase, foram agrupados em: método de malha fixa, método de malha móvel e métodos analíticos visto no item 2.1.2.3.

No método de malhas fixas não existe necessidade de localização da interface durante os cálculos. Como principais exemplos desse grupo temos: Kumar e Namburu (1990), Voller (1990) Voller e Swaminathan (1991), Samarskii *et al.* (1993). Podendo ser dividido em: método da temperatura e método da entalpia (QUARESMA, 1999).

No método da temperatura as equações de conservação da energia são escritas separadamente para as fases líquidas e sólidas (VISKANTA, 1988) acopladas na interface sólido/líquido (SAMARSKII *et al.*, 1993). O calor latente é considerado pela sua substituição por um calor específico equivalente (PHAM, 1985) para todo o intervalo de solidificação.

O método da entalpia tem como principal vantagem o fato de não ser necessário um tratamento explícito da condição da interface sólido/líquido (VOLLER, 1990; FORTIN, LOUCHEZ e SAMUEL, 1992). Isto pode ocorrer por meio da reformulação das equações da conservação da energia, através da introdução de um termo fonte de calor, de modo que uma equação diferencial simples seja resolvida, mediante a consideração de uma malha fixa, para todo o domínio discretizado no metal (sólido e/ou líquido) (GRIFFITH e NASSERSHARIF, 1990).

No método de malha móvel, algumas técnicas são apresentadas na Tabela 2.8.

Tabela 2.8 – Técnicas de solução do método numérico de malha móvel

Método de malha móvel	Considerações
Mudança de coordenadas	A interface sólido/líquido é fixada com um sistema de transformação de coordenadas apropriado. Tais métodos de transformação introduzem complicações desde que a posição da frente não seja especificada em princípio, mas ao contrário faz parte da solução do problema. Entretanto, em problemas onde a posição da frente de solidificação é a princípio conhecida, essa técnica de solução apresenta vantagens significativas (RUAN, LIU e RICHMOND, 1993).
Malhas deformáveis	No caso de discretização por malhas deformáveis, após a resolução das equações diferenciais para um dado passo no tempo, a localização da interface sólido/líquido é computada e uma nova malha é gerada. Sendo realizados os cálculos no próximo passo de tempo já com nova distribuição de nós (SAMARSKII <i>et al</i> , 1993).
Malhas adaptativas	Segundo Jucá (1993), ocorre uma modificação dinâmica da malha com a evolução da solução das equações diferenciais, sendo que a redistribuição dos nós da malha sobre o domínio físico é direcionada pela física do problema, resultante da evolução de sua solução.

Fonte: Quaresma (1999) [adaptado].

2.2 MECANISMOS DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR NO FENÔMENO DA SOLIDIFICAÇÃO

A análise do processo de transferência de energia que ocorre durante a solidificação apresenta uma importância bastante significativa no projeto e controle dos sistemas metal/molde, visto que a taxa com que o calor latente é extraído e transferido através do sistema metal/molde possui relação direta com a velocidade de solidificação e, conseqüentemente, com os parâmetros térmicos e estruturais envolvidos na mudança de fase líquido/sólido. Estes fatores contribuem e interferem diretamente nas propriedades mecânicas do produto fundido (MOUTINHO, 2007).

O estudo da transferência de calor durante o fenômeno da solidificação é de fundamental importância haja visto que apresenta os seguintes objetivos:

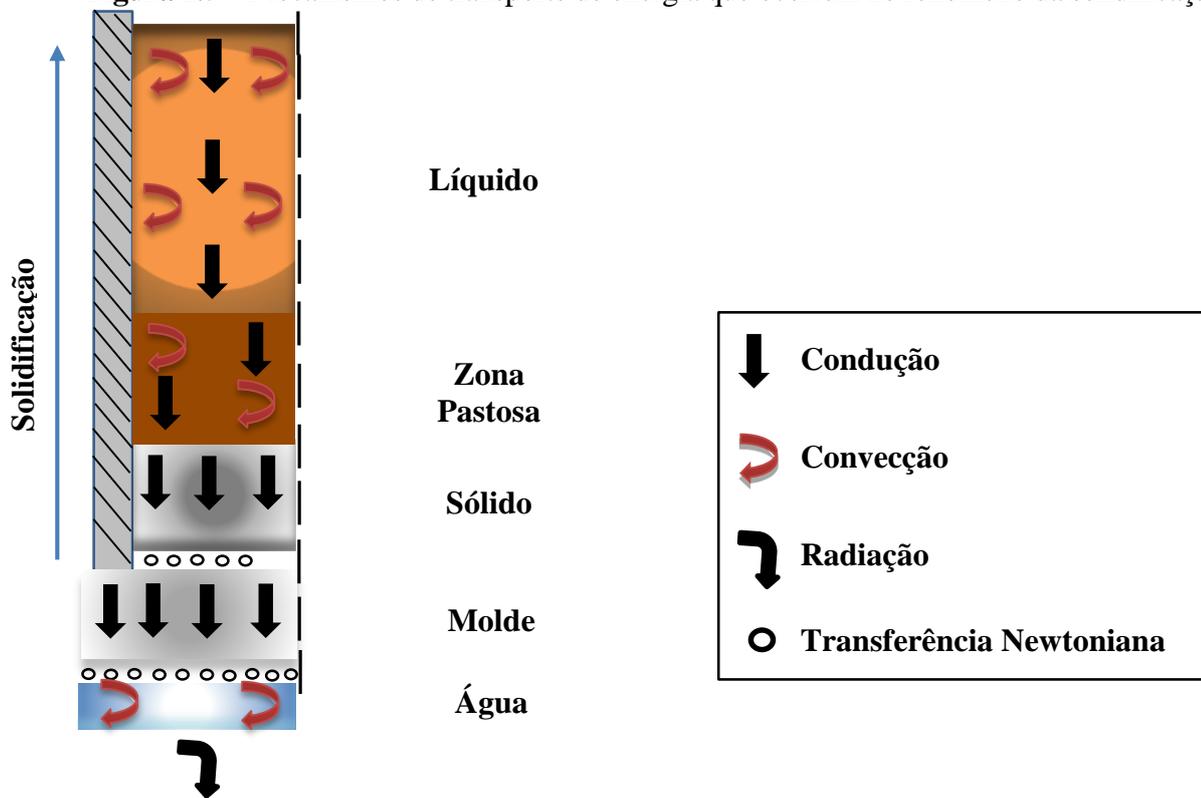
- Determinar a distribuição de temperatura em função do tempo no sistema material/molde.
- Determinar a cinética de solidificação.

Segundo Prates (1978), a transformação líquido/sólido é acompanhada pela liberação de energia térmica através de uma fronteira móvel separando as duas fases de propriedades termofísicas distintas. A compreensão dessa análise é realizada através da

seleção de um elemento de referência do sistema metal/molde a ser analisado. Este deve ser definido de forma que seu comportamento térmico seja característico para todo o sistema. A viabilidade da análise dependerá também de algumas simplificações de caráter físico e/ou matemático que minimize sua complexidade matemática sem comprometer, contudo, a confiabilidade dos resultados obtidos.

A Figura 2.5 apresenta esquematicamente os modos de transferência de calor que podem ocorrer ao longo da solidificação unidirecional ascendente com molde refrigerado a água, tais como: convecção forçada na água, transferência newtoniana na interface água/molde, condução no molde, transferência newtoniana na interface molde/metal, condução no metal, convecção e condução térmica no metal líquido.

Figura 2.5 – Mecanismos de transporte de energia que ocorrem no fenômeno da solidificação



Fonte: Silva, Bismark (2013) [adaptada].

A eficiência de extração de calor durante o fenômeno da solidificação depende, basicamente, das propriedades termofísicas do metal, das características de molde (material, espessura da parede, dimensão do molde e geometria), das condições da interface metal/ molde (contato térmico), das características do meio que vai absorver o calor (ar, água, entre outros) e da direção de crescimento do sólido (SANTOS, 2006).

No âmbito computacional, os métodos numéricos vêm adquirindo uma crescente importância na análise do fenômeno da solidificação aplicada à fundição de metais e suas ligas. As variáveis térmicas intrínsecas da solidificação, como a velocidade de deslocamento da isoterma *liquidus* (V_L), gradiente de temperatura (G_L), taxa de resfriamento (T_R) ao longo do processo, podem ser caracterizadas a partir dos perfis térmicos ao longo da solidificação. Dependendo da complexidade de cada sistema metal/molde e a precisão nos cálculos que se deseja obter, a utilização de modelos analíticos e/ou numéricos podem ser aplicados adequando a utilização do problema adotado (MOUTINHO, 2007).

No âmbito investigativo, o fenômeno da solidificação pode ser analisado adequadamente através de experimentos de solidificação unidirecional (CRUZ, 2008). Geralmente através do acoplamento de termopares com a finalidade de monitoramento do comportamento da temperatura (SANTOS, 2006). Esses estudos são divididos em duas categorias: solidificação em condições estacionárias de fluxo de calor e solidificação em regime transitório.

Segundo Cruz (2008), no primeiro caso o gradiente de temperatura, G_L , e a velocidade de crescimento, V_L , são controlados independentemente e mantidos constantes ao longo do experimento, como nos experimentos com a técnica Bridgman/Stockbarger. Esta é uma técnica extremamente útil na determinação de relações quantitativas entre aspectos da microestrutura, já que permite analisar a influência de cada variável térmica de forma independente.

Na ocorrência da solidificação em condições transitórias de fluxo de calor, caso considerado em nosso estudo, tanto o gradiente de temperatura quanto a velocidade de solidificação variam livremente com o tempo e com a posição dentro do metal. Uma vez que esta classe de fluxo de calor inclui a maioria dos processos industriais que envolvem a solidificação sendo, portanto, de fundamental importância as avaliações teórica e experimental da influência das variáveis térmicas em condições transitórias sobre os parâmetros da macroestrutura e da microestrutura para os diversos sistemas de ligas binárias. Para isso, são utilizados diferentes aparatos experimentais, de maneira que permitam mapear termicamente a solidificação, visando-se correlacionar as variáveis características da evolução do processo com os parâmetros da estrutura obtida (CRUZ, 2008).

2.3 DISPOSITIVOS DE SOLIDIFICAÇÃO DIRECIONAL

Segundo Santos (2006), o fenômeno da solidificação direcional é utilizado para a análise de parâmetros de solidificação na formação da microestrutura e de defeitos pontuais. Este tipo de solidificação, geralmente é seguido pela parte experimental através da conexão de termopares com a finalidade de monitorar o comportamento da temperatura.

Segundo Dias Filho (2013) a solidificação direcional em regime transitório de fluxo de calor tem permitido a obtenção de muitas informações relevantes a respeito da evolução cinética do processo de solidificação e sobre a redistribuição de soluto de ligas de diferentes sistemas metálicos binários e ternários (CASTANHO, 2013; GARCIA, 2012; BRITO, 2012; GOMES, 2012; MOUTINHO, 2012; MEZA, 2012; GOULART, 2005; 2010; SILVA, Maria, 2008; 2011; ROSA, 2007; SPINELLI, 2005; ROCHA, 2003).

Dessa forma, dependendo das condições por meio das quais os estudos são realizados, os tipos de dispositivos utilizados na técnica da solidificação direcional podem ser divididos em: dispositivo para solidificação direcional vertical ascendente, dispositivo para solidificação direcional vertical descendente e dispositivo para solidificação direcional horizontal.

2.3.1 Dispositivo para solidificação direcional vertical ascendente

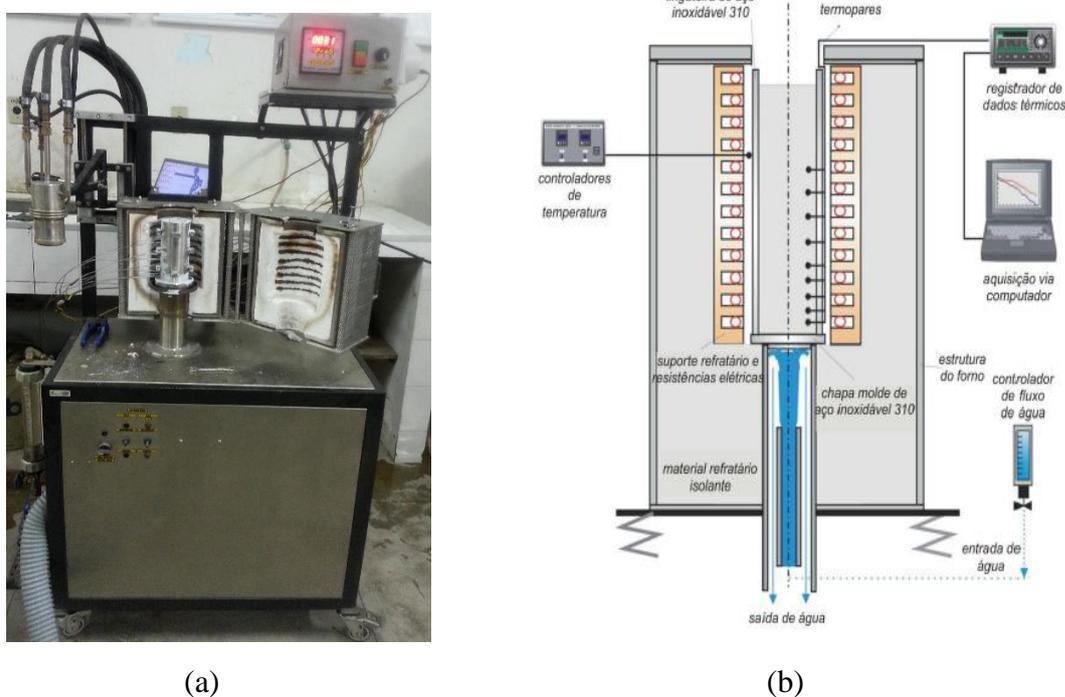
De acordo com Goulart (2010), este tipo de dispositivo é caracterizado pela ação contrária da gravidade em relação ao sentido do fenômeno da solidificação e, conseqüentemente, o próprio peso do lingote atua no sentido de favorecer um melhor contato térmico com a base refrigerada.

Segundo Osório (2003), na solidificação direcional ascendente o metal é fundido e, quando atinge uma determinada temperatura, inicia-se a solidificação através do acionamento da água de refrigeração na parte inferior do molde, conforme podemos observar na Figura 2.6.

A ação da gravidade é um dos parâmetros de fundamental importância durante a escolha do tipo de dispositivo unidirecional a ser escolhido. Visto que, neste tipo de dispositivo o fenômeno da solidificação ocorre em sentido contrário ao da ação da gravidade, favorecendo melhor contato térmico junto a base refrigerada. Dependendo do par soluto/solvente a ser utilizado, pode ocasionar geralmente a formação de um líquido

interdendrítico mais denso que o restante do volume global do metal líquido, proporcionando que a solidificação se processe em relação a movimentação do líquido de forma completamente estável. O líquido mais denso tende a localizar-se junto à fronteira de transformação sólido/líquido, devido ao perfil de temperaturas no líquido ser crescente em direção ao topo do lingote fato este que justifica a ausência de correntes convectivas tanto por diferenças de temperatura como por diferenças de concentração favorecendo a análise experimental e de cálculos teóricos isentos desse complicador, já que a transferência de calor dentro do lingote é realizada essencialmente por condução térmica unidimensional (SIQUEIRA FILHO, 2002; ROCHA, 2003a).

Figura 2.6 – Dispositivos de solidificação direcional vertical ascendente



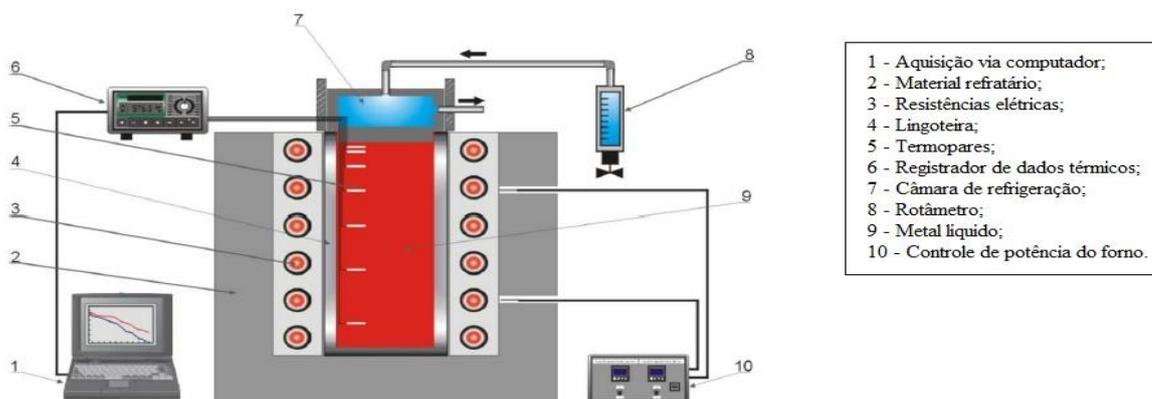
Fonte: (a) GPMET/IFPA (2015); (b) Goulart (2010).

2.3.2 Dispositivo para solidificação direcional vertical descendente

A Figura 2.7 apresenta esquematicamente um dispositivo de solidificação direcional descendente, projetado e utilizado pela primeira vez por Spinelli, Ferreira e Garcia (2004), o qual é bastante similar ao dispositivo vertical ascendente, conforme descrito anteriormente, diferindo apenas em termos da localização da câmara resfriada a água, que nesta configuração encontra-se situada no topo do lingote (GOULART, 2010).

A solidificação nessas condições ocorre no mesmo sentido da ação da força da gravidade com a força peso atuando no sentido de deslocar o lingote do contato com a base refrigerada ocasionando dessa forma, uma situação precoce no que se refere à existência de uma maior resistência térmica à passagem de calor do lingote em direção ao fluido de refrigeração, quando comparada com a solidificação vertical ascendente. Outra diferença de fundamental importância nesse tipo de dispositivo, consiste na presença de movimento convectivo visto que o perfil de temperatura do líquido é crescente em direção à base do lingote, que é isolada termicamente, o que significa que ocorrerá pelo menos convecção por diferenças de temperatura no líquido. Caso ocorra do soluto rejeitado provocar um líquido interdendrítico de maior massa específica do que o líquido nominal, também haverá movimento convectivo provocado por diferenças de concentração (CARVALHO, 2013). Este tipo de dispositivo é importante exatamente para análises comparativas com a solidificação ascendente, permitindo dessa forma a verificação da influência de correntes convectivas na estrutura de solidificação, e mostrando as diferenças entre ambas as configurações quando ligas de mesma composição são solidificadas (CARVALHO, 2013; GOULART, 2010).

Figura 2.7 – Dispositivo de solidificação direcional vertical descendente



Fonte: Spinelli, Ferreira e Garcia (2004).

2.3.3 Dispositivo para solidificação horizontal

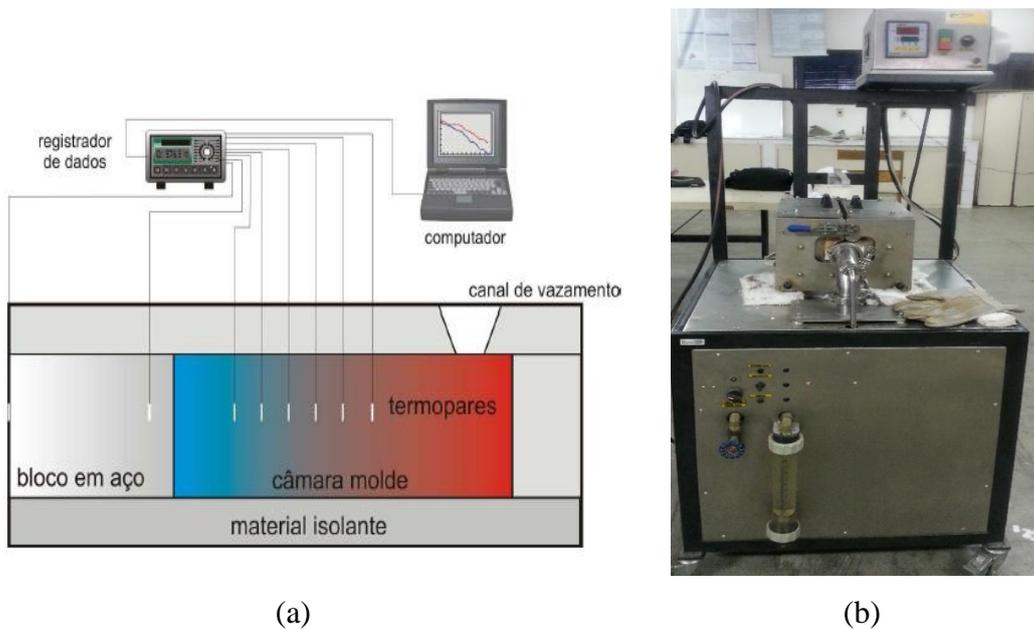
Por intermédio desse tipo de dispositivo o fenômeno da solidificação pode ser conduzido de duas formas:

- A partir do vazamento de metal líquido no interior de um molde isolado termicamente nas laterais, sendo o calor extraído somente por uma das paredes constituída de um bloco maciço metálico ou de uma câmara de refrigeração; e
- Através de um sistema semelhante que permita fundir o metal em seu interior até que uma temperatura seja alcançada, a partir da qual seja acionada a refrigeração e dessa forma ter início o fenômeno da solidificação.

No primeiro caso, conforme Quaresma, Santos e Garcia (2000), a turbulência induz correntes de convecção forçada as quais levam algum tempo para se dissipar e que agem com intensidades diferentes ao longo da secção do lingote. No segundo caso, com a fusão do metal no interior do molde, ocorre uma maior estabilidade em relação ao movimento de metal líquido. De acordo com Osório *et al.* (2003), o mapeamento térmico da evolução da solidificação deve ser levantado em uma secção horizontal o mais próximo possível da secção na qual serão analisados os aspectos da macroestrutura e da microestrutura.

Já no segundo sistema, de acordo com Nogueira (2012), há duas importantes características da configuração horizontal que são: o gradiente de concentração de soluto e a densidade na direção vertical. Isto ocorre, devido o líquido enriquecido de soluto geralmente decantar à medida que os cristais livres de solvente emergem pelas forças de flutuabilidade. Vale ressaltar, que não podem ser asseguradas as mesmas variáveis térmicas de solidificação ao longo de diferentes secções horizontais da base ao topo do lingote, uma vez que instabilidades térmicas e diferenças de densidade no líquido induzirão correntes convectivas que serão diferentes ao longo destas secções. Por este motivo, a análise deste arranjo experimental é importante, porque promove o contraponto com a solidificação nos sistemas verticais ascendente e descendente, permitindo a verificação da influência de correntes convectivas sobre o arranjo da estrutura de solidificação, evidenciando as diferenças entre as três configurações quando são solidificadas ligas de mesma composição. Na Figura 2.8 podemos observar este tipo de dispositivo.

Figura 2.8 – Dispositivos de solidificação direcional horizontal



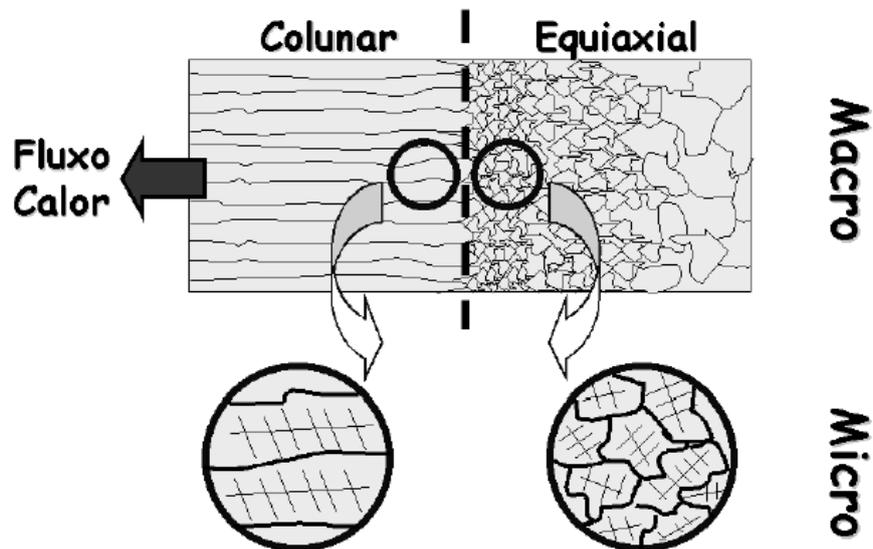
Fonte: (a) Goulart (2010); (b) GPMET/PA (2015).

2.4 ESTRUTURAS CARACTERÍSTICAS DA SOLIDIFICAÇÃO

Fundamentalmente, as propriedades e o desempenho mecânico de um produto fundido dependem das condições operacionais assumidas durante o fenômeno da solidificação. As heterogeneidades estruturais (tamanho, tipo, a orientação preferencial de crescimento e morfologia dos grãos), os espaçamentos interdendríticos, as heterogeneidades de composição química (segregação de impurezas ou de elementos de liga em escala macroscópica e microscópica), o tamanho, forma e distribuição das inclusões e a presença de porosidade entre outros fatores, são decisivos na formação da macroestrutura e da microestrutura do material, influenciando, conseqüentemente, na determinação de suas propriedades (ROCHA *et al.*, 2003).

As estruturas de solidificação podem ser divididas em macroestruturas e microestruturas. As macroestruturas são formações morfológicas estruturais que podem ser observadas e avaliadas a olho nu ou com auxílio de aumento óptico em até 10 vezes. Por outro lado, as microestruturas somente podem ser observadas por intermédio de aumentos ópticos e MEV no mínimo na ordem de 10 vezes e, avançando na observação manométrica (TEM), com o auxílio da microscopia eletrônica (PEIXOTO, 2009). Na Figura 2.9 são apresentadas de forma resumida as estruturas de solidificação.

Figura 2.9 – Esquema representativo das estruturas macroscópicas e microscópicas de um lingote fundido com transição colunar/equiaxial



Fonte: Rodrigues (2007)

2.4.1 Macroestrutura

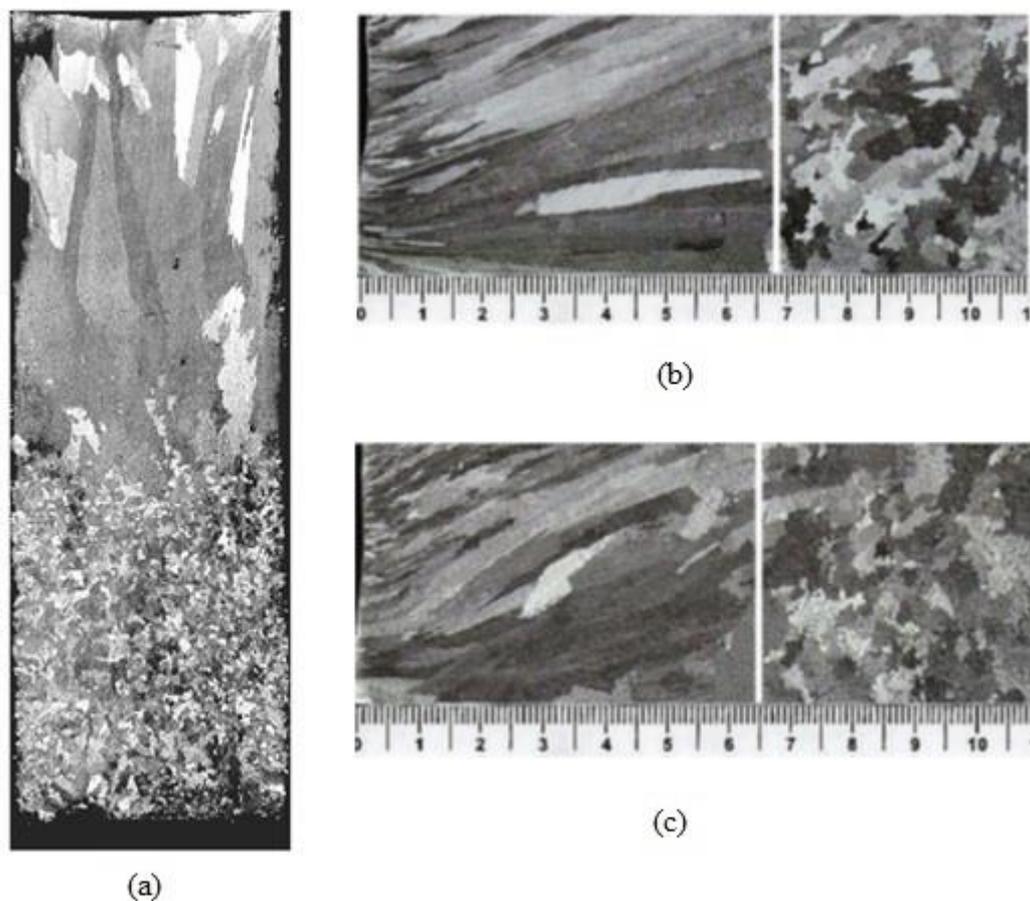
A solidificação processa-se a partir da formação de núcleos sólidos, no líquido, que em condições termodinâmicas favoráveis, crescem, dando origem aos grãos cristalinos que definirão a macroestrutura da peça. A macroestrutura de um metal solidificado será então caracterizada pelos seus grãos cristalinos, ou seja, suas dimensões, orientação, forma e distribuição (GOULART, 2010). O aspecto mais importante da formação da macroestrutura de um metal fundido está ligado à sua correlação com as propriedades mecânicas (CRUZ, 2008).

Em geral, a macroestrutura de solidificação pode apresentar três zonas distintas:

- Uma zona denominada coquilhada, caracterizada por grãos pequenos de orientações aleatórias, de dimensões muito reduzidas e localizados próximo às paredes do molde;
- Zona colunar na qual os grãos são finos cristais, alongados e direcionais, cujo crescimento ocorre na direção de extração de calor, estendendo-se à frente da zona coquilhada; e

– Uma região desordenada de crescimento aleatório, denominados equiaxiais e de dimensões relativamente grande quando comparados com os grãos coquilhados (GOMES, 2011; MOUTINHO, 2011). Na Figura 2.10 podem ser observadas imagens de macroestruturas.

Figura 2.10 – Macroestrutura de solidificação: (a) Sn15%Pb (b) Al3%Si e (c) Al7%Si



Fonte: (a) Spinelli, Ferreira e Garcis (2004); (b) e (c) Carvalho (2013).

Devido à correlação existente entre a morfologia, dimensão e distribuição dos grãos cristalinos e as correspondentes propriedades mecânicas da peça obtida, a origem de cada uma delas tem sido objeto de intensa investigação teórica e/ou experimental por parte de muitos pesquisadores uma vez que a presença dessas diferentes zonas estruturais promove um elevado grau de anisotropia no material, o que na maioria das aplicações não é desejável (SIQUEIRA FILHO, 2002). Dessa forma, na maioria das aplicações exigidas pela engenharia, são utilizadas estruturas constituídas de grãos equiaxiais de dimensões bastante reduzidas pois tais estruturas são isotrópicas e suas propriedades são, comprovadamente, superiores (MOUTINHO, 2011).

Segundo Garcia (2001), a macroestrutura de solidificação é afetada por vários fatores, tais como superaquecimento do líquido, composição química, fluxo de fluido, adição de refinadores de grãos e tamanho do fundido. Estes fatores de influência são apresentados de forma resumida na Tabela 2.9.

Tabela 2.9 – Parâmetros de fundição que afetam a macroestrutura da solidificação

Variáveis de solidificação	Efeitos
Superaquecimento	Aumentando o superaquecimento, aumenta a extensão da zona colunar. A tendência é menos notada em grandes fundidos.
Composição química	Aumentando o conteúdo da liga, tende-se a diminuir a extensão da região colunar.
Fluxo de fluido (natural ou forçado)	Aumentando o fluxo de fluido, diminui-se a extensão da região colunar.
Refinadores de grãos	Adição de refinadores de grãos pode reduzir a extensão do crescimento colunar.
Mecanismo de vibração	Este mecanismo promove o refino de grãos e pode aumentar a zona equiaxial.
Tamanho dos grãos	O superaquecimento é menos significativo na estrutura de grãos de grandes fundidos. Aumentando-se a secção transversal produz-se um aumento na proporção de grãos equiaxiais. Maior sensibilidade para variações na altura da peça.

Fonte: Garcia (2001).

2.4.1.1 Zona Coquilhada

Segundo Goulart (2010) a zona coquilhada é constituída por uma camada de grãos cristalinos de orientações aleatórias, normalmente de pequenas dimensões, localizados junto às paredes do molde, resultado do primeiro contato do metal líquido com o molde frio no vazamento. As altas taxas de resfriamento obtidas irão provocar uma rápida diminuição local da temperatura e favorecer uma nucleação intensa de grãos. Esse decréscimo de temperatura irá ocasionar um superesfriamento térmico, conseqüentemente os primeiros grãos cristalinos começam a se desenvolver de forma e tamanho pequeno, quase uniforme, constituindo uma fina camada de grãos de crescimento aleatório junto às paredes do molde. Diversos autores apresentam teorias para explicar detalhes e mecanismos de formação da zona coquilhada, entre os quais: Bower e Flemings (1967), Chalmers (1968), Biloni e Morando (1968) e Ohno (1976).

2.4.1.2 Zona Colunar

A zona colunar é composta por grãos cristalinos alongados e alinhados paralelamente à direção do fluxo de calor. A constituição da zona colunar inicia-se pelo crescimento de grãos formados a partir dos núcleos oriundos do rápido resfriamento de líquido nos instantes iniciais da solidificação, e que apresentam crescimento favorável no sentido da extração de calor. Esses núcleos tendem a crescer mais rapidamente que os outros, bloqueando dessa forma o crescimento dos demais grãos coquilhados. Os grãos assim formados possuem dimensões bem maiores que os grãos da zona coquilhada, apresentando ainda direções fortemente orientadas (GOULART, 2010). O detalhamento da teoria do mecanismo de formação da zona colunar pode ser obtido através da literatura presente em diversos trabalhos como em: Walton e Chalmers (1959), Chalmers (1968) e Biloni e Morando (1968).

2.4.1.3 Zona Equiaxial

É uma zona constituída por uma região central de grãos cristalinos sem orientações preferenciais, denominados equiaxiais, e de dimensões relativamente grandes quando comparados com os grãos da zona coquilhada. Diferente do crescimento da zona colunar, a zona equiaxial central é caracterizada por grãos que crescem em direções aleatórias (GOULART, 2010). Diversos autores desenvolvem estudos de mecanismo de formação da zona equiaxial, entre os principais podem citar: Chalmers e Winegard (1954), Chalmers (1968), Jackson e Hunt (1966), Southin (1968), Ohno (1976), Flood e Hunt (1987a; b).

Assim, o objetivo do estudo de macroestruturas de solidificação está relacionado com as melhorias das propriedades mecânicas dos materiais através do controle da forma, distribuição, dimensão e orientações dos cristais gerados no processo de formação do metal sólido (PERES, SIQUEIRA e GARCIA, 2004; WANG, 1994). Na Tabela 2.10 serão apresentados de forma resumida os principais estudos apresentados na literatura sobre a formação da macroestrutura.

Tabela 2.10 – Principais estudos apresentados na literatura que tentam descrever a formação das zonas coquilhada, colunar, equiaxial

Autor (es)	Ano	Material
Morando <i>et al.</i>	1970	Al-Cu
Burden e Hunt	1974	Al-Cu
Doherty <i>et al.</i>	1977	Al-Cu/Al-Zn/Al-Mg
Witzke e Riquet	1982	Al-Cu
Hunt	1984	Al-Cu
Fredriksson e Olsson	1986	Aços Baixa Liga
Flood e Hunt	1987	Al-Cu
Mahapatra e Weinberg	1987	Sn-Pb
Ziv e Weinberg	1989	Al-Cu
Suri, El-Kaddah e Berry	1991	Al-Cu
Kim e Grugel	1992	Pb-Cu
Wang e Beckermann	1994	Al-Cu/Sn-Pb
Hua e Grugel	1996	Sn-Pb
Ares e Schevezov	2000	Pb-Sn
Gandin	2000	Al-Si
Martorano e Capocchi	2000	Cu-Sn
Siqueira Filho	2002	Al-Cu/Sn-Pb
Siqueira, Cheung e Garcia	2002	Al-Cu/Sn-Pb
Heiberg <i>et al.</i>	2002	Al-Si
Vandyoussefi e Greer	2002	Al-Mg
Martorano, Beckermann e Gandin	2003	Al-Si
Siqueira, Cheung e Garcia	2003	Sn-Pb
Peres	2004	Al-Si
Peres, Siqueira e Garcia	2004	Al-Si
Spinelli, Ferreira e Garcia	2004	Sn-Pb
Martorano	2004	Al-Cu/Cu-Sn
Spinelli	2005	Sn-Pb
Sturz <i>et al.</i>	2005	Al-Si
Reinhart <i>et al.</i>	2005	Al-Ni
Willers <i>et al.</i>	2005	Pb-Sn
Dong e Lee	2005	Al-Cu
Liu <i>et al.</i>	2006	Ti-Al
Rebow e Browne	2007	Al-Cu/Al-Si
Canté <i>et al.</i>	2007	Al-Ni/Al-Sn
Ares <i>et al.</i>	2007	Zn-Al
Silva <i>et al.</i>	2009	Sn-Pb
Ares <i>et al.</i>	2010	Al-Cu
Moutinho	2011	Al-Si
Carvalho <i>et al.</i>	2013	Al-Si
Martorano <i>et al.</i>	2014	Al-Cu/ Al-Si
Rocha <i>et al.</i>	2015	Ligas de Al-Cu-Si

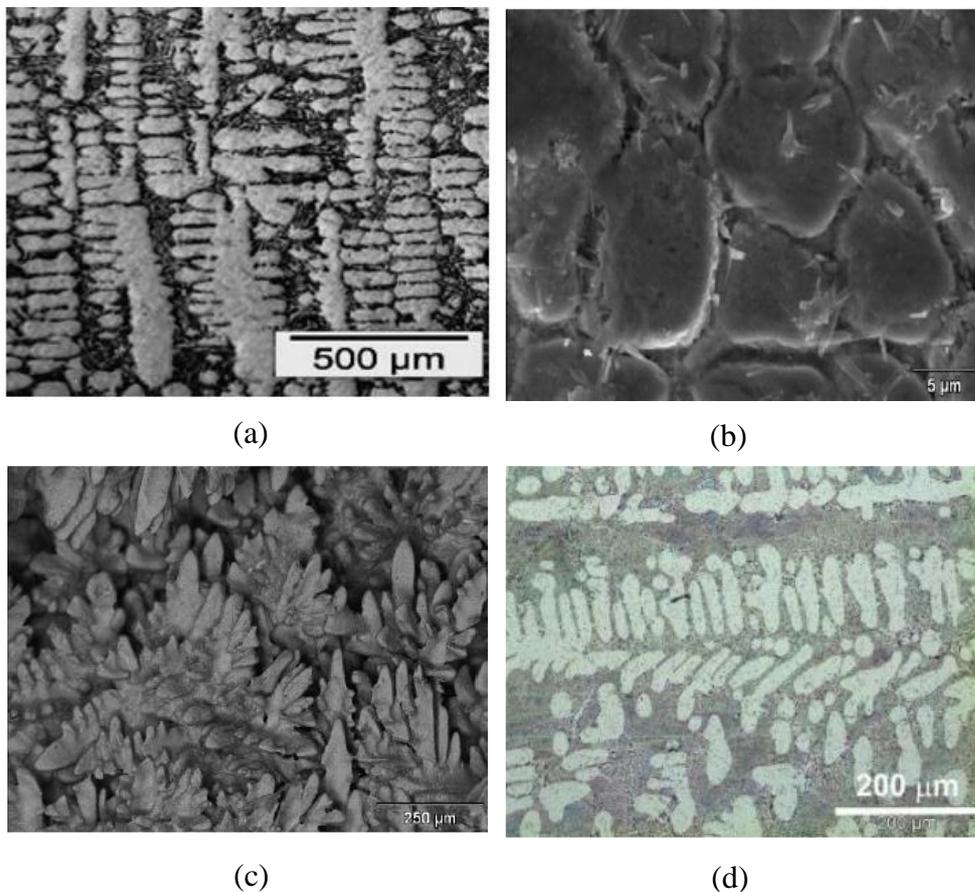
Fonte: Moutinho (2011) [adaptado].

Além destes, uma série de outros trabalhos científicos de natureza teórica e/ou experimental, também considerados importantes, têm sido publicados na literatura.

2.4.2 Microestrutura

De maneira geral, os materiais contêm em sua composição química elementos ou impurezas que, ao longo da solidificação, são distribuídos internamente a partir da superfície de resfriamento. Durante a mudança de fase líquido/sólido as condições térmicas, por meio das quais ocorre a evolução da frente de solidificação, determinam o tipo de microestrutura a ser formada no material. Estas podem se encontrar desde a forma planar, tipo mais comum em metais puros, até a forma de estruturas celulares e dendríticas, encontradas em ligas metálicas (GOULART, 2005). Conforme pode ser observado na Figura 2.11.

Figura 2.11 – Microestrutura de solidificação: (a) Microestrutura dendrítica – Al7%Si; (b) Microestrutura celular - Pb1,8%Sb; (c) Microestrutura dendrítica - Al1%Fe e (d) Microestrutura dendrítica - Sn3,5%Ag.



Fontes: (a) Carvalho (2013); (b) e (c) Goulart (2010); (d) Dias (2009).

As microestruturas resultantes do processo de solidificação estão relacionadas à morfologia da interface sólido/líquido. Em condições ideais essa interface deveria permanecer plana, como ocorre nos metais puros, porém, alterações nos parâmetros constitucionais e térmicos do sistema metal/molde que ocorrem durante a solidificação provocam a instabilidade da mesma, dando origem a microestruturas celulares e dendríticas. A instabilidade da frente de solidificação resulta da termodinâmica do processo que impõe rejeição de soluto à frente da interface sólido/líquido. Dessa maneira, o soluto rejeitado provoca uma distribuição não uniforme da concentração do metal líquido segregado nessa interface. O acúmulo de soluto ocorrido à frente da fronteira sólido/líquido origina um fenômeno que favorece a nucleação, conhecido na literatura como superresfriamento constitucional (SRC). Dependendo do valor do SRC desenvolve-se uma instabilidade na frente de solidificação, que origina diferentes morfologias conforme citadas anteriormente: planar, celular e dendrítica (COSTA, 2013).

Segundo Carvalho (2013), quando uma liga binária diluída é solidificada na presença de uma pequena quantidade de superresfriamento constitucional, a interface sólido/líquido desenvolve, usualmente, uma morfologia celular.

O aumento do grau de superresfriamento constitucional, gera instabilidades de maior ordem e a estrutura celular de forma circular passa para uma estrutura mais ramificada denominada dendrítica, na forma de cruz de malta. Com os ramos cristalográficos primários em direções cristalográficas próximas ao fluxo de calor e com a rejeição de soluto, aparecem os braços secundários em direções cristalográficas perpendiculares aos ramos primários (CHALMERS, 1968; DING e TEWARI, 2002; FLEMINGS, 1974; GARCIA, 2007; KURZ e FISHER, 1984; 1992).

2.5 LIGAS METÁLICAS

Uma liga metálica é um sistema material formado por dois ou mais componentes, no qual o componente principal é um metal (SANTOS, 2006). Pode também ser definida como uma combinação de elementos químicos, com propriedades metálicas, que contém ao menos um elemento metálico (MOORE, 1976). Uma liga metálica pode ser caracterizada pela presença de outros elementos a um metal base, com a finalidade de se obter um material com as propriedades desejadas. Se esse elemento adicional for um ametal, a liga passa a ser denominada de compósito (CHAWLA, 2005).

De acordo com Santos (2006), o componente em maior quantidade é denominado de solvente, e os elementos adicionados ao solvente afim de constituir a liga metálica, que podem ser metais ou não-metais, são denominados soluto ou elementos de liga. Como exemplo, podemos citar uma liga contendo 88% de alumínio e 12% de silício, o alumínio que é o metal, é o solvente, e o silício, que é um semicondutor, é o soluto.

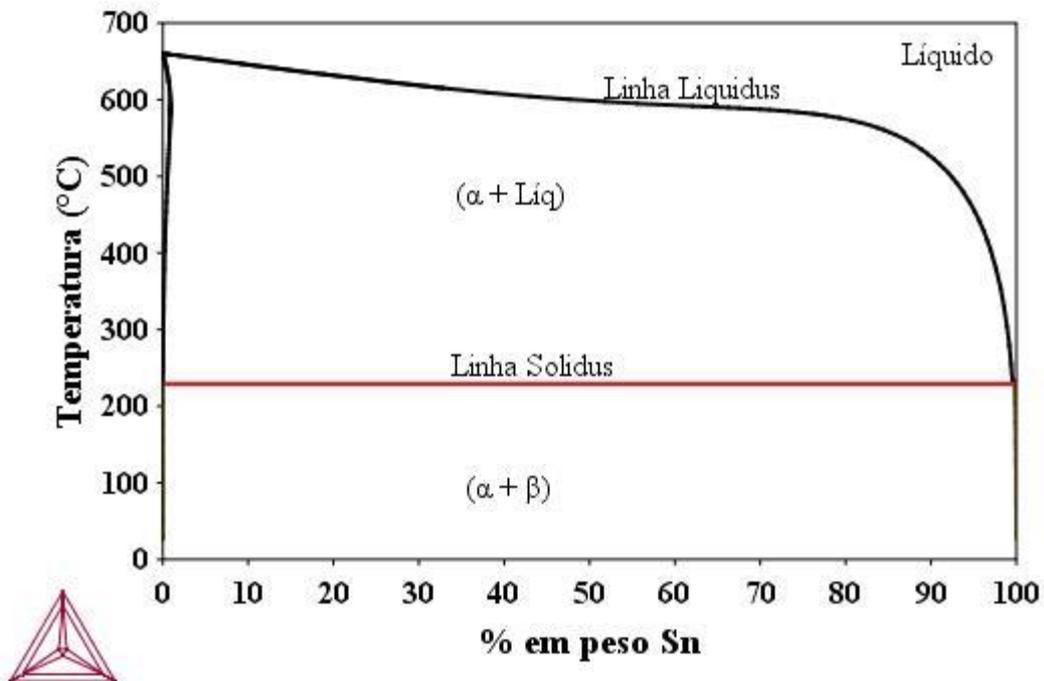
Normalmente as ligas são elaboradas para modificar ou acrescentar propriedades tais como propriedades mecânicas, elétricas, térmicas, físicas, de fabricação ou magnéticas, diferentes das propriedades dos metais que as formam. Alguns exemplos de sistemas de ligas mais utilizadas são: aço (ferro e carbono), latão (cobre e zinco), bronze (cobre e estanho) e duralumínio (alumínio e cobre) (MARTINS, 2008).

As ligas metálicas podem ser classificadas como binárias, ternárias ou complexas, se o número de componentes for respectivamente, 2, 3 e 4 ou mais constituintes. Segundo Moore (1976), sob o ponto de vista da composição química e estrutural, uma liga é formada por componentes e fases.

O número de combinações possíveis entre dois componentes de uma liga, dos quais um deve ser sempre metal, é gigantesco. Por outro lado, para cada composição específica de uma liga, busca-se determinar as modificações estruturais que podem ocorrer às diversas temperaturas. Uma forma de representar ou descrever esses fenômenos são denominados de diagramas de equilíbrio de constituição ou diagrama de fase (RHINES, 1956). Na Figura 2.12 são exemplificados os diagramas de fase para os sistemas de liga Al-Sn e Sn-Pb.

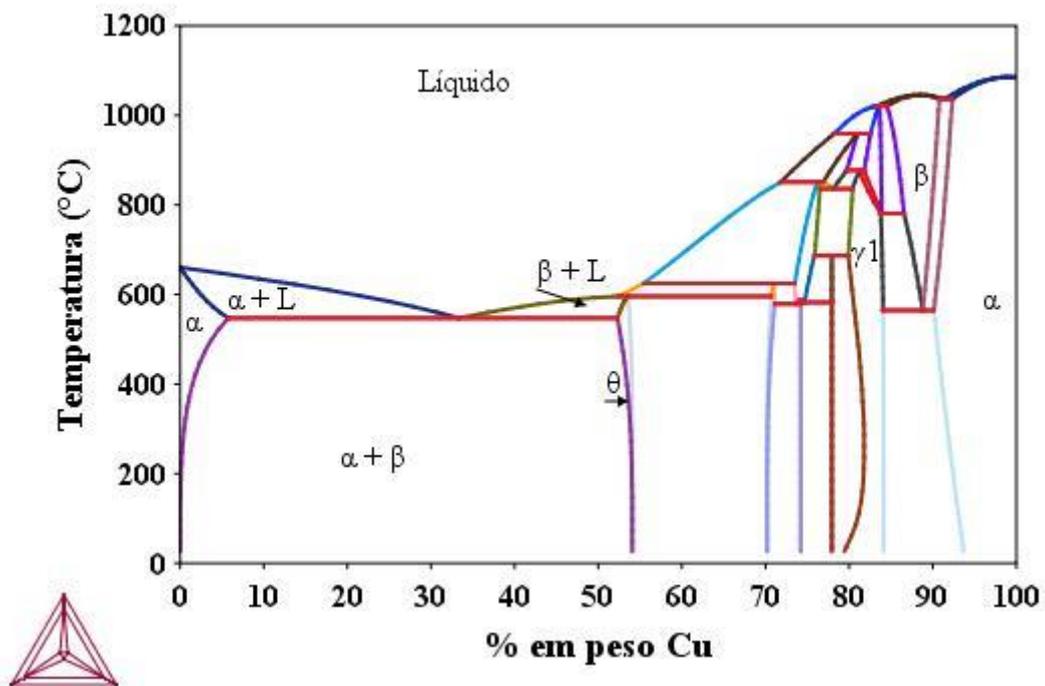
Figura 2.12 – Diagramas de fase dos sistemas: (a) Al-Sn; (b) Al-Cu e (c) Sn-Pb

Diagrama de Fases Al-Sn



(a)

Diagrama de Fases Al-Cu

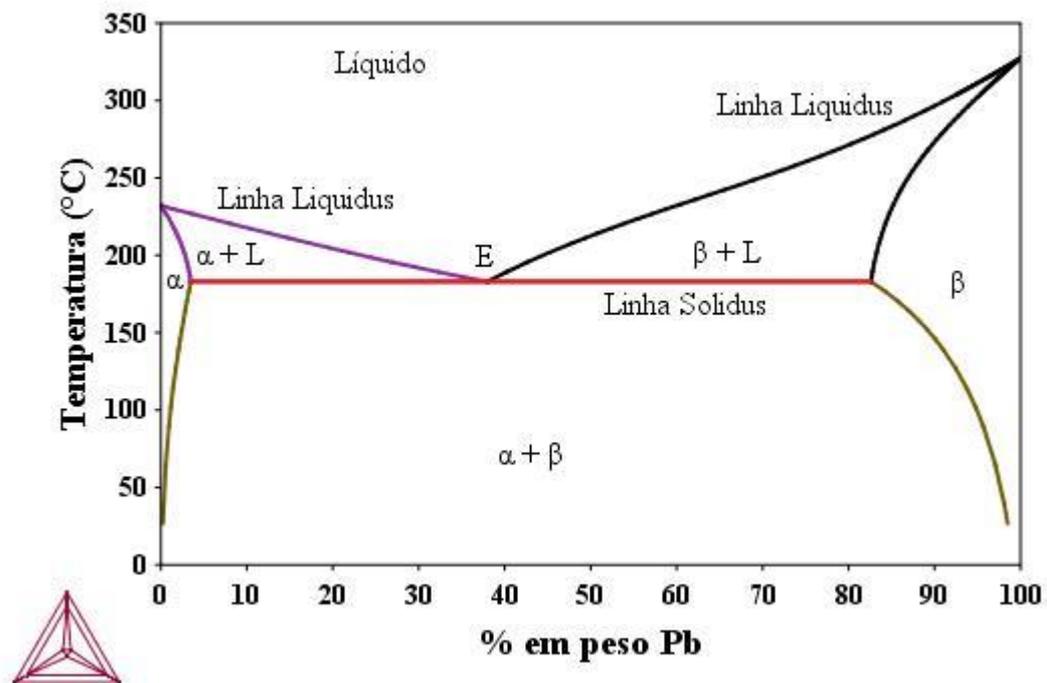


(b)

Figura 2.12 – Diagramas de fase dos sistemas: (a) Al-Sn; (b) Al-Cu e (c) Sn-Pb

(conclusão)

Diagrama de Fases Sn-Pb



(c)

Fonte: Thermocalc (2015).

Conforme Santos (2006), considerando-se as ligas binárias com as possíveis combinações entre elementos metálicos e elementos metálicos e não metálicos, o número de diagramas de fase que podem ser traçados é muito elevado. Nas ligas metálicas elementos de liga são adicionados intencionalmente ao metal com a finalidade de melhorar as propriedades usuais ou obtenção de certas propriedades específicas.

Por apresentar uma vasta variedade de combinações de propriedades, o alumínio é considerado um dos mais versáteis materiais utilizados na engenharia e em construções. A gama que compreende suas características é bastante vasta e destacável, entre elas pode-se destacar o baixo peso específico, boa fundibilidade, boa usinabilidade, bom acabamento superficial e alta condutibilidade térmica e elétrica (ABAL, 2004; ASM HANDBOOK, 1992).

Segundo Joshep, Nagarajan e Ravindran (2001), a maioria das indústrias, especialmente a automobilística e a aeroespacial, está atualmente à procura de ligas leves ou ligas cujas propriedades são favoráveis com altos valores de resistência mecânica em contrapartida com o baixo peso específico, boa ductilidade, dureza, resistência à corrosão

entre outras. Dessa forma, muitas aplicações requerem extrema versatilidade que somente o alumínio possui. Diariamente, cada combinação de suas propriedades vem sendo trabalhada de novas formas (HANDBOOK, 1992). Na Figura abaixo pode ser observado dois exemplos de peças obtidas a partir de ligas de alumínio.

Figura 2.13 – Peças produzidas a partir de ligas de alumínio.



Fonte: <http://www.manutencaoesuprimentos.com.br/conteudo/6820-usos-das-ligas-de-aluminio/>.

As ligas do sistema Al-Cu, bastante utilizadas na indústria de aviação, na construção de aeronaves, em elementos estruturais que requerem elevadas características mecânicas, ferragens e parafusos, rebites para serem aplicados em estado temperado antes da maturação, moldes para filme soprado, calçado e asa delta (INFOMET, 2015; MARTIN, 1968).

Conforme Cruz (2008), ligas do sistema Al-Sn são bastante conhecidas por apresentarem excelentes propriedades tribológicas, tornando este tipo de sistema de liga adequado para aplicações de engenharia, particularmente em pistões do motor de combustão e camisas de cilindro. Em aplicações tribológicas, as ligas do sistema Al-Sn são conhecidas por apresentarem boas propriedades tribológicas e mecânicas, fazendo com que este sistema de liga seja adequado para aplicações que exigem uma satisfatória resistência ao desgaste, como exemplo, em mancais de deslizamento (YUAN *et al.*, 2000; NEALE, 1995).

Segundo Perrone (2002), sua estrutura metalográfica heterogênea é caracterizada por uma matriz de alumínio com partículas de estanho dispersas através da matriz. Este tipo de estrutura determina o comportamento tribológico da liga, com a matriz tenaz sendo responsável pela resistência mecânica, enquanto as partículas de Sn atuam como um lubrificante sólido, apresentando boas propriedades anti-derrapamento por falta de lubrificação (seizure), devido à ação do Sn como lubrificante sólido, ação esta

que possibilita a utilização desta liga em sistemas tribológicos sujeitos a lubrificação pobre ou ausência total da mesma (YANG *et al.*, 2000). Utilizadas também em rolamentos devido à excelente lubrificação a qual o estanho é responsável, além de outras aplicações como em bielas e mancais do cárter para os motores diesel. Este tipo de sistema de liga foi desenvolvido para diversas aplicações de rolamento, em que a capacidade, resistência à fadiga e à corrosão, são critérios importantes (ASM HANDBOOK, 1992).

Segundo Prasada, Murty e Chakraborty (2004) o sistema de liga Al-Si são utilizados na forma de componentes fundidos principalmente em peças essenciais de sistemas automotivos, como pistões, válvulas, blocos de motores etc. (PERES, 2005; SAHEB, 2001; GOULART, 2006; YUAN *et al.*, 2000).

3 MODELAGEM PELO MÉTODO DAS LINHAS (MOL)

Com o aumento da popularidade e da capacidade de cálculo dos computadores, a solução numérica de modelos para problemas de engenharia desenvolveu-se enormemente, transcendendo o campo da pesquisa e ingressando de forma definitiva no campo da engenharia aplicada (PINTO e LAGE, 2001).

Demandas emergentes fez surgir problemas cada vez mais complexos na área de engenharia. Dessa forma, o aumento do interesse na utilidade da aplicabilidade dos métodos numéricos e modelagem computacional na solidificação, a fim de obter resultados mais confiáveis em tempo reduzido, proporcionando maior rapidez na obtenção de produtos acabados de forma a atender, em todos os aspectos, as necessidades do consumidor (ANDRADE, 1999).

Com o advento dos computadores de alta tecnologia e com o avanço dos métodos numéricos aplicados ao fenômeno da solidificação nos últimos anos, os problemas que na sua grande maioria não apresentam solução analítica, podem ser tratados por métodos de aproximações numéricas que são bastante úteis nas aplicações de engenharia (PINTO e LAGE, 2001).

Em muitas situações matemáticas e nas suas aplicações é natural considerar modelos que estabelecem relações envolvendo não só valores de variáveis, mas também das suas variações expressas por derivadas. As equações diferenciais têm um papel fundamental em quase todas as áreas da engenharia, química, física, biologia, economia e em algumas áreas das ciências sociais (BRONSON e COSTA, 2006).

Uma equação diferencial é uma equação que contém uma função desconhecida e algumas de suas derivadas. Através das equações diferenciais podemos determinar o comportamento futuro de problemas físicos importantes, como o fenômeno de solidificação por exemplo, com base da variação dos valores presentes (BRONSON e COSTA, 2006).

A solução de uma equação diferencial parcial (EDP) pode ser obtida pelo método de separação de variáveis. O método de separação de variáveis é o método mais antigo para a resolução desse tipo de equação, sendo utilizado no século XVI por D'Alembert, Daniel Bernolli e Euler, em problemas de ondas, vibrações e condução de calor. Apresenta como característica principal a substituição da EDP por um conjunto de equações diferenciais ordinárias (EDO), sujeitas a condições iniciais e de contorno especificadas (BOYCE e DIPRIMA, 2002).

Em geral, os problemas que envolvem EDPs mais difíceis necessitam de uma variedade de ferramentas para sua solução. Além das soluções analíticas, diversos métodos numéricos podem ser utilizados para obtenção aproximada da solução de uma equação diferencial parcial, entre eles pode-se citar o método das diferenças finitas (FDM), método dos elementos finitos (FEM), método dos elementos de contorno (BEM), método dos volumes finitos (FVM) e método das linhas (MOL), que será o método utilizado no presente trabalho. A ideia básica dos métodos numéricos é o processo da discretização, que reduz o problema contínuo, com um número infinito de variáveis, em um problema discreto com um número finito de variáveis, podendo ser resolvido computacionalmente (FRANCO, 2006).

O método das linhas é a principal ferramenta para resolver numericamente equações diferenciais parciais (EDPs) não-lineares. Ou ainda, o MOL é uma aproximação detalhada da solução da EDP não-linear dependente do tempo. Esse método procede em dois passos: primeiramente as derivadas parciais são aproximadas utilizando diferenças finitas ou elementos finitos. Segundo, o sistema resultante de EDOs é resolvido (COSTA; MENEGUETTE; SOUZA, 2009).

É um método que reduz EDPs à sistemas de equações diferenciais ordinárias (EDOs). Após a obtenção de tais sistemas pode-se utilizar métodos para a resolução numérica de EDOs, e o FORTRAN 90/95 disponibiliza vários desses (COSTA; MENEGUETTE; SOUZA, 2009). A ideia do MOL é, na equação diferencial parcial, discretizar todas as variáveis, exceto uma delas, obtendo-se um sistema de EDOs. Esta abordagem é chamada de semi-discretização, onde o tempo é deixado contínuo e as variáveis espaciais discretizadas. Embora a discretização da variável espacial possa ser feita de mais de uma maneira, diferenças finitas são utilizadas neste trabalho.

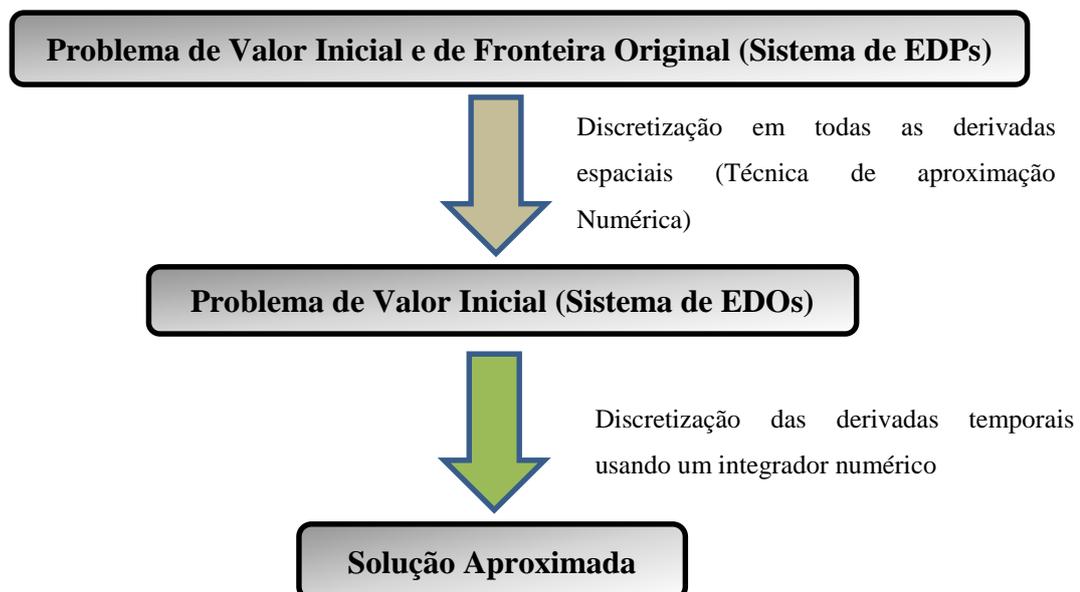
Segundo Silva (2013), o MOL é um procedimento semianalítico e bem estável, utilizado na análise de vários fenômenos envolvidos na engenharia e áreas afins. O método é bastante consolidado e encontrado na literatura, uma vez que é baseado no método de diferenças finitas (FDM) para solução de equações diferenciais parciais (EDPs) (ÖZISIK, 1993; SADIKU e OBIOZOR, 2002).

Conforme Silva (2013), o método das linhas (MOL) é um procedimento geral para soluções de equações diferenciais parciais (EDPs). De acordo com Hamdi (2009), a ideia básica do MOL consiste na substituição da derivada espacial por fórmulas de diferenças, permanecendo apenas uma variável independente, normalmente a temporal. Caracterizando-se dessa forma em um sistema de EDOs aproximado da EDP original. O

desafio, então, é formular este sistema aproximado de EDOs. A partir disso, será possível aplicar-se qualquer algoritmo de integração para o problema de valor inicial (PVI) e computar uma solução numérica aproximada para a EDP.

Na etapa de eliminação da variável espacial, pode-se utilizar vários métodos de diferenciação, tais como diferenças finitas, volumes finitos ou elementos finitos, a fim de transformar as derivadas espaciais numa equação algébrica (SCHIESSER e GRIFFITHS, 2009). Para solução do sistema de EDOs pode ser utilizado qualquer método de integração numérico (BRITO, 2010). Neste trabalho, será utilizada a rotina DIVPAG da biblioteca IMSL (2014), para solução da EDO. Na Figura 3.1 pode ser observado o esquema ilustrativo do MOL.

Figura 3.1 – Estratégia geral do Método das Linhas



Fonte: Colnato (2012).

De acordo com Pinto e Lage (2001), o método das linhas consiste na discretização parcial, na qual todas as coordenadas menos uma são discretizadas. A coordenada que não é discretizada deve aparecer apenas como uma derivada primeira, isto é, a equação diferencial parcial é de primeira ordem em relação a esta coordenada. Assim, um sistema de equações diferenciais ordinárias é o resultado da discretização parcial. A solução desse sistema de EDOs pode ser feita por qualquer um dos métodos de solução de problemas de valor inicial. Entretanto, a grande vantagem deste método está na utilização de rotinas computacionais já existentes para a integração do sistema de

EDOs, que já foram extensivamente testadas, são confiáveis e permitem a integração com controle automático do erro local.

Conforme Costa, Meneguette e Souza (2009), o método das linhas utiliza métodos de resolução de EDOs para calcular linhas de corte da superfície solução sobre o plano espaço-tempo. Cada linha é paralela ao eixo do tempo e corresponde a um ponto da malha espacial.

Para ilustrar o método das linhas (MOL), vamos considerar a equação de advecção linear dada por (COLNAGO, 2012):

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial x} \quad (3.1)$$

Aproximada numa malha espacial em x com n pontos separados uniformemente por uma distância Δx . O primeiro passo é a discretização da variável x . Para algum ponto x_i , usaremos a notação $u_i(t) = u(x_i, t)$, teremos que:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u_i}{\partial t} \quad (3.2)$$

Aproximando a derivada espacial utilizando diferenças finitas centradas em algum ponto x_i , temos:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1 \quad (3.3)$$

A substituição de (3.1) pela aproximação (3.2) nos fornece um sistema de $n-1$ EDOs da forma:

$$\frac{du_1}{dt} = -\frac{u_2 - u_0}{2\Delta x}, \quad (3.4)$$

$$\frac{du_2}{dt} = -\frac{u_3 - u_1}{2\Delta x}, \quad (3.5)$$

$$\frac{du_3}{dt} = -\frac{u_4 - u_2}{2\Delta x}, \dots \quad (3.6)$$

$$\frac{du_{n-1}}{dt} = -\frac{u_n - u_{n-2}}{2\Delta x}, \quad (3.7)$$

Então, esse sistema de equações diferenciais ordinárias podem ser resolvidas usando algum integrador já existente.

$$u_t = u_{xx} + (u_x)^2, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (3.8)$$

$$u(x,0) = x(1-x), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (3.9)$$

$$u(x,t) = 0, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (3.10)$$

$$u(1,t) = \text{sen}(t), \quad 0 \leq t \leq T \quad (3.11)$$

O domínio $[0,1]$ de x é substituído por um conjunto de pontos discretos $x_i = ih$, $i = 0,1,\dots,N$, onde $h = \left(\frac{1}{N}\right)$. Ao longo de cada uma dessas linhas (x_i, t) temos uma função $U_i(t)$.

Utilizando diferenças centradas para u_{xx} e u_x , desprezando o erro da discretização, temos:

$$U_i'(t) = \frac{U_{i+1}(t) - 2U_i(t) + U_{i-1}(t)}{h^2} + \left(\frac{U_{i+1}(t) - U_{i-1}(t)}{2h} \right)^2 \quad (3.12)$$

Tomando $N = 5$ e $h = 0,2$, podemos exemplificar e chegar ao seguinte sistema de EDOs:

$$U_0(t) = U(0,t) = 0 \quad (3.13)$$

$$U_1'(t) = \frac{U_2 - 2U_1 + U_0}{0,04} + \frac{(U_2 - U_0)^2}{0,16} \quad (3.14)$$

$$U_2'(t) = \frac{U_3 - 2U_2 + U_1}{0,04} + \frac{(U_3 - U_1)^2}{0,16} \quad (3.15)$$

$$U_3'(t) = \frac{U_4 - 2U_3 + U_2}{0,04} + \frac{(U_4 - U_2)^2}{0,16} \quad (3.16)$$

$$U_4'(t) = \frac{U_5 - 2U_4 + U_3}{0,04} + \frac{(U_5 - U_3)^2}{0,16} \quad (3.17)$$

$$U_5(t) = U(1,t) = \text{sen}(t), \quad (3.18)$$

Com condições iniciais:

$$U_0(0) = 0 \quad (3.19)$$

$$U_1(0) = u(0,2;0) = 0,2(1-0,2) = 0,16 \quad (3.20)$$

$$U_2(0) = u(0,4;0) = 0,4(1-0,4) = 0,24 \quad (3.21)$$

$$U_3(0) = u(0,6;0) = 0,6(1-0,6) = 0,24 \quad (3.22)$$

$$U_4(0) = u(0,8;0) = 0,8(1-0,8) = 0,16 \quad (3.23)$$

$$U_5(0) = 0 \quad (3.24)$$

Resolvendo esse sistema, obtemos aproximações para a solução $u(x,t)$ ao longo das linhas (x_i,t) .

Segundo Ismail *et al.* (2007), o método das linhas (MOL) tem sido bastante utilizado na solução de equações diferenciais parciais (EDPs) desde os tempos da antiga União Soviética, por volta de 1930. A partir de então, tem sido bastante utilizado em diversas aplicações, como podemos verificar na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 – Trabalhos que utilizam o MOL em suas metodologias de solução

Autor/ ano	Trabalho
Campo (1988)	Aplicação do MOL como um procedimento adequado na solução da análise da convecção mista em tubos verticais.
Oymac e Selcuk (1996)	Como método de solução para equação de Navier Stokes 2D juntamente com a equação da energia.
Taler e Duda (1999)	Solução de problemas inversos de condução de calor não-linear.
Sadiku e Garcia (2000)	Solução da equação de Laplace em coordenadas cilíndricas.
Ismail <i>et al.</i> (2007)	Solução de problemas envolvendo fenômenos da natureza.
Ferreira (2012)	Solução da análise do escoamento e adsorção de gases em uma coluna de leito fixo.
Silva (2013)	Solução da análise de difusão-convecção e reação em superfície baseado em um biossensor.
Machado <i>et al</i> (2013)	Solução do processo de extração supercrítica com um modelo de duas fases com equilíbrio não linear.

Fonte: a autora.

Portanto, o método das linhas possui as seguintes propriedades que justificam sua utilização:

- É um método eficiente para a resolução de equações não lineares;
- A estabilidade numérica: separando a discretização do espaço e do tempo, é fácil estabelecer a estabilidade e convergência para uma ampla gama de problemas;
- Redução do esforço de programação: fazendo um bom uso dos integradores para equações diferenciais ordinárias (EDOs), o esforço de programação pode ser substancialmente reduzido;
- Redução do tempo computacional para problemas unidimensionais: uma vez que apenas uma pequena quantidade de discretização de linhas são utilizadas no cálculo e portanto não há necessidade de resolver um grande sistema de equações.

4 SOLIDIFICAÇÃO DE LIGAS BINÁRIAS: MODELO DE SEGREGAÇÃO

(CHANG e STEFANESCU, 1996; NI e INCROPERA; 1995)

4.1 CONSIDERAÇÕES GERAIS

Segundo Chang e Stefanescu (1996), na maioria dos sistemas de ligas de fundição, é muito difícil alcançar a homogeneidade composicional entre as peças fundidas uma vez que a redistribuição de soluto é inevitável durante o fenômeno da solidificação. Essa falta de homogeneidade na composição resultante é conhecida como segregação.

A segregação começa no nível microscópico conforme prossegue o fenômeno da solidificação. A macrossegregação pode resultar em grandes variações das propriedades físicas e mecânicas de peças fundidas, o que limita o desempenho dessas peças ou componentes em forma de peças fundidas (CHANG e STEFANESCU, 1996).

De acordo com Spin (1996), a modelagem da transferência de calor com mudança de fase, é um dos maiores problemas no contexto da complexidade de cálculo, devido a condições de contorno não-lineares e a liberação contínua de calor latente, bem como a dependência das propriedades físicas do material como função da temperatura.

Conforme Chang e Stefanescu (1996) e Ni e Incropera (1995), diversos modelos de predição da macrossegregação durante a solidificação de ligas de fundição tem sido desenvolvido.

O modelo considera a liberação de calor na zona pastosa seguindo a teoria de Scheil, em 1947, e na temperatura eutética pelo método de Dusenberre (MEZA, 2012). O modelo numérico permite descrever a distribuição da temperatura tanto no espaço quanto no tempo, cálculo do coeficiente de transferência de calor metal/ molde, a velocidade da isoterma *liquidus*, taxa de resfriamento e gradiente térmico. É também amplamente utilizado na simulação de perfis térmicos para diferentes ligas e na determinação do coeficiente de transferência de calor metal/molde através do método do confronto teórico/experimental de perfis térmicos. Alguns trabalhos que abordam o modelo de segregação são: trabalhos realizados por Peres (2005), Rosa *et al.* (2006), Boeira (2006), Boeira, Ferreira e Garcia (2009), Spinelli (2005), Cruz *et al.* (2008), Canté (2009), Goulart (2010).

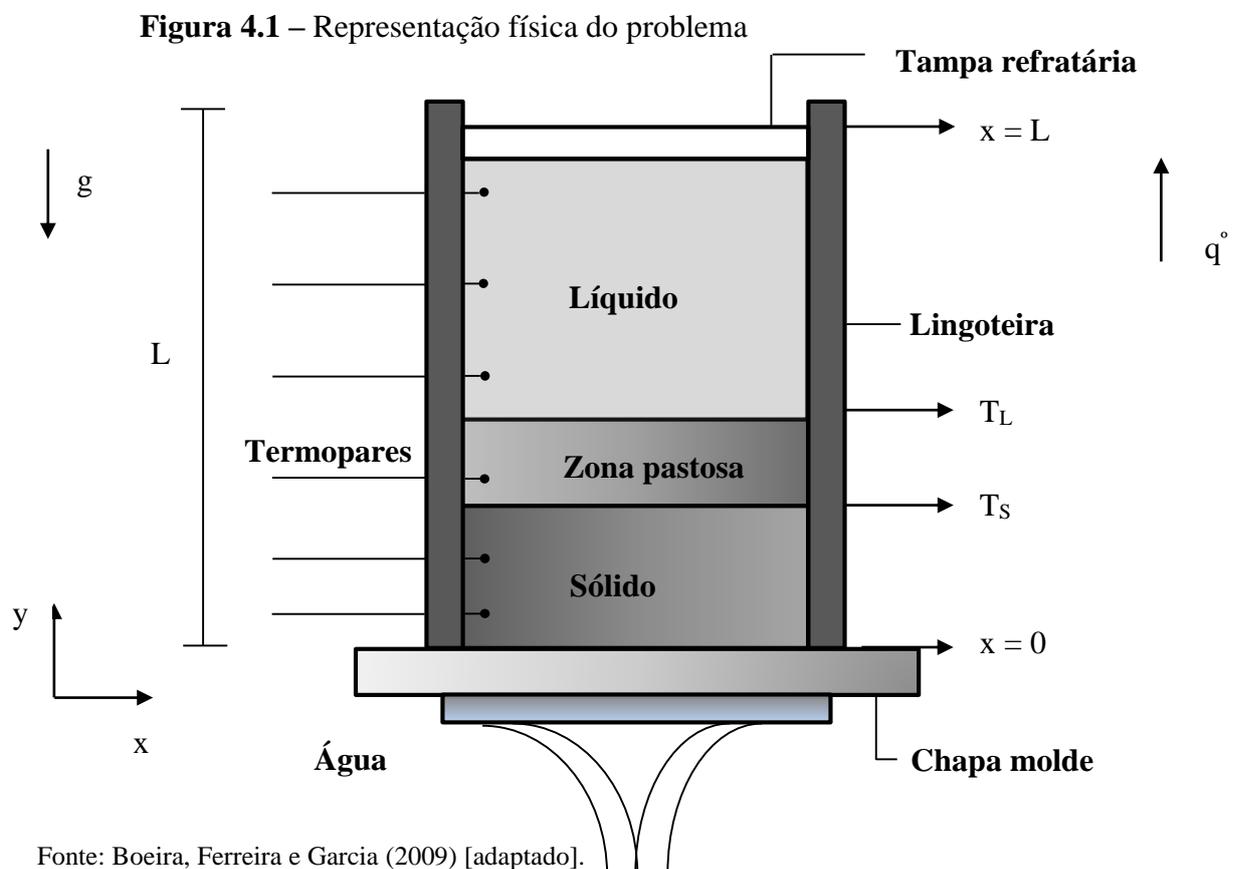
Neste capítulo iremos abordar a modelagem matemática para o problema físico descrito a seguir, bem como analisar e discutir os resultados obtidos a partir do modelo adotado e compara-lo com o resultado experimental obtido na literatura.

4.2 CONSIDERAÇÕES SOBRE O MODELO FÍSICO

O modelo físico consiste em simular a solidificação de ligas binárias em um dispositivo de solidificação unidirecional ascendente, onde no espaço interno do dispositivo é posicionado uma lingoteira, a qual servirá para comportar o metal fundido. A lateral do dispositivo é completamente isolada termicamente, favorecendo a extração de calor do sistema apenas a partir da base refrigerada do dispositivo utilizado (CRUZ *et al.*, 2008).

O sistema de refrigeração do dispositivo é formado por um duto, localizado na parte inferior do espaço onde fica a chapa molde ou trocador calor, possibilitando ao fluido de refrigeração atingir a lingoteira na parte inferior (chapa/molde), promovendo a solidificação unidirecional ascendente. A fonte extratora de calor é uma chapa circular colocada na base da lingoteira para servir de meio material para separar a liga metálica do fluido de refrigeração (CRUZ, 2008).

As medições de temperatura são realizadas através de termopares posicionados em pontos específicos ao longo da lingoteira (BOEIRA, FERREIRA e GARCIA, 2009; SIQUEIRA, CHEUNG e GARCIA; 2002; DIAS, 2009; CRUZ *et al.*, 2008). Na Figura 4.1 é apresentada a representação física do problema físico adotado.



Fonte: Boeira, Ferreira e Garcia (2009) [adaptado].

Para a construção do modelo matemático, o problema físico é formulado partindo-se das seguintes hipóteses:

1. O processo de transferência de calor é unidimensional e transiente;
2. Nas fases pastosa e líquida os efeitos convectivos são negligenciados;
3. Os calores específicos, C_{PS} e C_{PL} , as condutividades térmicas, k_s e k_L , e as massas específicas, ρ_s e ρ_L , são constantes dentro de cada fase; e
4. O calor latente de fusão, ΔH , é considerado como a diferença das entalpias das fases em relação a uma temperatura de referência.

4.2.1 Modelagem matemática do problema

Inúmeros autores têm se preocupado com a simulação do problema das transformações metalúrgicas, buscando a minimização do erro envolvido, através de simplificações compatíveis aos sistemas analisados (SPIN, 1996).

Na sequência são apresentadas as equações envolvidas, bem como suas simplificações que permitem uma modelagem do problema envolvido.

Segundo Stefanescu (2002), a equação governante para a solidificação de uma peça fundida é a equação da conservação da energia escrita em sua forma de advecção – difusão conforme podemos observar na equação (4.1):

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial t} + \nabla(\rho \tilde{u} H) = \nabla \cdot \left(\frac{k}{C_{PS}} \nabla H \right) + S \quad (4.1)$$

O termo fonte obtido por Benon e Incropera (1987) para sistemas de duas fases pode ser representado por:

$$S = \nabla \cdot \left[\frac{k}{C_{PS}} \nabla (H_s - H) \right] - \nabla \cdot [\rho f_s (\tilde{u} - \tilde{u}_s)(H_L - H_s)] \quad (4.2)$$

Sendo:

\tilde{u} o campo de velocidade [m/s]

O primeiro termo à direita na equação (4.2) conhecido como fluxo de energia e está associado à transformação de fase, enquanto que o segundo termo, é o termo de energia associado com o movimento de fase (STEFANESCU, 2002; BENNON e INCROPERA, 1987).

Assim, a equação governante do problema e sua respectiva condição inicial e de contorno são definidas a seguir:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho H)}{\partial t} + \nabla(\rho \tilde{u} H) = \nabla \cdot \left(\frac{k}{C_{PS}} \nabla H \right) + S \quad 0 < x < L \quad t > 0 \end{array} \right. \quad (4.3)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} t = 0 \quad T(x, t) = T_0 \quad 0 \leq x \leq L \quad t = 0 \end{array} \right. \quad (4.4)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} x = 0 \quad -k \frac{\partial T}{\partial x} = h(T_\infty - T) \quad x = 0 \quad t > 0 \end{array} \right. \quad (4.5)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} x = L \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad x = L \quad t > 0 \end{array} \right. \quad (4.6)$$

Sendo:

ρ a massa específica [kg.m^{-3}]

H o calor latente de fusão [J.kg^{-1}]

k a condutividade térmica [$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$]

C_{PS} o calor específico do sólido [$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$]

S o termo fonte de geração interna de calor associado a transformações de fase com a liberação de calor latente para casos particulares da solidificação e transferência de calor nos materiais.

L o comprimento do molde [m]

h_i o coeficiente global de transferência de calor [$\text{W/m}^2 .^\circ\text{C}$]

O problema de transferência de calor durante a solidificação de uma liga binária é um bom exemplo de partida para o desenvolvimento do modelo porque contém duas fases características (sólido e líquido) separadas por uma fase mista ou intermediária definida entre a “temperatura *solidus* (T_S) até a “temperatura *liquidus* (T_L) da liga. Em geral esta fase é denominada de “fase pastosa” (SPIN, 1996).

A equação da energia para um sistema de duas fases pode ser expressa em termos de temperatura, ao invés de entalpia, em função de:

$$H_S = C_{PS}T \quad (4.7)$$

$$H_L = C_{PL}T + (C_{PS} - C_{PL})T_e + \Delta H_f \quad (4.8)$$

Sendo:

T_e a temperatura eutética [K]

C_{PS} o calor específico do sólido [$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$]

C_{PL} o calor específico do líquido [$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$]

ΔH_f o calor latente de fusão [J.kg^{-1}]

O calor sensível da fase sólida é dado pela equação (4.7) e a fase líquida apresenta uma parcela de calor sensível e outra de calor latente representado na equação (4.8).

Segundo Crank (1984) na temperatura de fusão, a capacidade térmica (energia necessária para elevação da temperatura do corpo) sofre uma descontinuidade, que se traduz pelo calor latente de fusão. Nesse caso, a entalpia pode ser definida pela seguinte relação:

$$H = f_L H_L + f_S H_S \quad (4.9)$$

Com

f_S a fração mássica de sólido

f_L a fração mássica de líquido

Voller e Swaminathan (1991) apresentam em seu trabalho a variação da condutividade térmica (k) e do calor específico (C_P) da liga e massa específica (ρ), dentro da região pastosa dado por uma “mistura” ponderada das frações sólida e líquida,

conforme equações 4.10, 4.11 e 4.12 (CHANG e STEFANESCU, 1996). Os subscritos s e l representam, respectivamente, as fases sólida e líquida.

$$k = g_L k_L + g_S k_S \quad (4.10)$$

$$C_P = (1 - f_S) C_{PL} + f_S C_{PS} \quad (4.11)$$

$$\rho = \rho_S g_S + \rho_L (1 - g_S) \quad (4.12)$$

Sendo:

g frações volumétricas

f frações mássicas

As relações entre fração mássica (f) e volumétrica (g) podem ser expressas como:

$$f_S = \frac{\rho_S g_S}{\rho} \quad (4.13)$$

$$f_L = 1 - f_S \quad (4.13a)$$

ou

$$g_S = \frac{\rho f_S}{\rho_S} \quad (4.14)$$

$$g_L = 1 - g_S \quad (4.14a)$$

A derivada da fração volumétrica sólida em relação a fração mássica de sólido é fornecida por:

$$\frac{\partial g_S}{\partial t} = \frac{\rho}{[\rho_S - (\rho_S - \rho_L) f_S]} \frac{\partial f_S}{\partial t} \quad (4.15)$$

Conforme Spin (1996), a fração sólida formada pode ser função de uma série de parâmetros envolvidos no sistema de fundição. No entanto, em inúmeros casos é razoável assumir a variação da fração sólida como função apenas da temperatura, isto é:

$$f_s = F(T) \quad \text{para } T_s < T < T_L \quad (4.16)$$

A formulação correta de $F(T)$ consiste na dependência dos constituintes internos da liga e da forma com que interagem na solidificação do sistema. Entre as formulações mais importantes tem-se a regra da alavanca, modelo de Scheil, modelo de Brody e Flemings, modelo de Clyne e Kurz e modelo de Onaka conforme pode-se observar abaixo.

Na regra da alavanca considera-se que o sistema está em equilíbrio termodinâmico e portanto a composição química permanece uniforme dentro de cada fase onde há completa difusão de soluto tanto na fase sólida quanto na fase líquida. O comportamento da difusão nesse modelo é representado da seguinte forma:

$$f_s = \left(\frac{1}{1 - k_0} \right) - \left(\frac{T_L - T}{T_m - T} \right) \quad (4.17)$$

Sendo

T_L a temperatura *liquidus*.

Segundo Brody (1966), no modelo de Brody e Flemings propuseram duas soluções que levam em consideração a difusão no estado sólido representadas pelas seguintes expressões:

$$f_s = (1 + \beta k_0) \cdot \left[1 - \left(\frac{T_m - T}{T_m - T_L} \right)^{-\alpha} \right] \quad (4.18)$$

A Eq. (4.18) representa o crescimento com velocidade constante da ramificação dendrítica na direção perpendicular à direção de deslocamento da interface sólido/líquido. Enquanto que a Eq. (4.19) representa o crescimento com velocidade parabólica da

ramificação dendrítica na direção perpendicular à direção de deslocamento da interface sólido/líquido.

$$f_S = \gamma \cdot \left[1 - \left(\frac{T_m - T}{T_m - T_L} \right)^{-\alpha/\gamma} \right] \quad (4.19)$$

Sendo:

$$\beta = \frac{4 \cdot D_S \cdot t_{SL}}{\lambda^2} \quad (4.20)$$

$$\gamma = \frac{1}{1 - 2 \cdot \beta \cdot k_0} \quad (4.21)$$

Sendo:

D_S a difusividade do soluto no sólido.

t_{SL} tempo local de solidificação.

γ espaçamento dendrítico local.

De acordo com Clyne e Kurz (1981), o modelo de Clyne e Kurz é uma modificação do modelo de Brody e Flemings que se restringe apenas em uma faixa de valores de β , apresentando resultados que contrariam as condições de solidificação à medida que os valores de β tornam-se elevados. Baseado nessa restrição, foi proposta uma expressão que pudesse quantificar o efeito da difusão de retorno em toda a faixa de valores de β ($\beta \rightarrow \infty$). Conforme Eq. (4.24).

$$f_S = \gamma \cdot \left[1 - \left(\frac{T_m - T}{T_m - T_L} \right) \right]^{-\alpha/\gamma} \quad (4.22)$$

Com

$$\gamma' = \frac{1}{1 - 2\Omega.k_0} \quad (4.23)$$

$$\Omega = \beta \left(1 - e^{-1/\beta} \right) - \frac{1}{2} \cdot e^{-1/(2\beta)} \quad (4.24)$$

O modelo de Ohnaka é baseado na solução da equação de difusão através do método do perfil integral, admitindo-se que a distribuição de soluto no sólido formado seja representada por uma expressão quadrática (OHNAKA, 1986). A solução obtida difere da análise de Brody-Flemings da definição de um novo parâmetro β_c que deve substituir na expressão de Clyne-Kurz, e é fornecido na Eq. (4.25).

$$\beta_c = \frac{1}{(1 + 2\beta)} \quad (4.25)$$

Finalmente o modelo de Scheil, que será utilizado neste trabalho conforme se pode observar na Eq. (4.26).

$$f_s = 1 - \left(\frac{T_m - T}{T_m - T_L} \right)^\alpha \quad (4.26)$$

Com:

$$\alpha = \frac{1}{(k_0 - 1)} \quad (4.27)$$

Sendo:

T_m a temperatura de fusão [K]

k_0 o coeficiente de partição do soluto [adimensional]

A equação (4.26) consiste em uma das formas de apresentação da equação de Scheil. O tratamento de Scheil conduz a resultados muito próximos de situações práticas que conduzem a solidificação dendrítica, onde analisa a condição de segregação máxima (SPIN, 1996).

Aplicando-se a hipótese dois citada no tópico anterior nas equações (4.1) e (4.2) e fazendo as devidas substituições nos termos resultantes dessas equações obtém-se:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(\rho H)}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{k}{C_{PS}} \nabla H \right) + \nabla \cdot \left[\frac{k}{C_{PS}} \nabla (H_S - H) \right] \quad 0 < x < L \quad t > 0 \end{array} \right. \quad (4.28)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} t = 0 \quad T(x, t) = T_0 \quad 0 \leq x \leq L \end{array} \right. \quad (4.29)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} x = 0 \quad -k \frac{\partial T}{\partial x} = h(T_\infty - T) \quad t > 0 \end{array} \right. \quad (4.30)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} x = L \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad t > 0 \end{array} \right. \quad (4.31)$$

Calculando H substituindo (4.7) e (4.8) em (4.9) e introduzindo o resultado em

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial t}; \nabla \cdot \left(\frac{k}{C_{PS}} \nabla H \right) \text{ e } \nabla \cdot \left[\frac{k}{C_{PS}} \nabla (H_S - H) \right], \text{ resulta:}$$

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial t} = \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \phi \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (4.32)$$

Com:

$$\phi = \left\{ (\rho_S C_{PS} - \rho_L C_{PL}) T - [(C_{PS} - C_{PL}) T_e + \Delta H_f] \right\} \frac{\bar{\rho}}{[1 - (1-d) f_s]} \quad (4.33)$$

$$\nabla H = C_{PL} \nabla T + (C_{PS} - C_{PL}) \nabla (f_s T) - (C_{PS} - C_{PL}) T_e \nabla f_s - \Delta H_f \nabla f_s \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} \nabla (H_S - H) = & (C_{PS} - C_{PL}) [\nabla T - \nabla (f_s T)] + \\ & + (C_{PS} - C_{PL}) T_e \nabla f_s + \Delta H_f \nabla f_s \end{aligned} \quad (4.35)$$

Sendo,

$$\bar{\rho} = \frac{\rho}{\rho_s} \quad (4.36)$$

$$d = \frac{\rho_L}{\rho_s} \quad (4.37)$$

Aplicando a hipótese assumida anteriormente em (4.28), (4.32), (4.33), (4.34) e (4.35) obtêm-se a seguinte equação principal em função da temperatura e sua condição inicial e de contorno:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \phi \frac{\partial f_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad 0 < x < L \quad t > 0 \end{array} \right. \quad (4.38)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} t = 0 \quad T(x, t) = T_0 \quad 0 < x < L \end{array} \right. \quad (4.39)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} x = 0 \quad -k \frac{\partial T}{\partial x} = h(T_\infty - T) \quad t > 0 \end{array} \right. \quad (4.40)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} x = L \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad t > 0 \end{array} \right. \quad (4.41)$$

Com:

$$\rho = \rho_L (1 - g_s) + \rho_s g_s \quad (4.42)$$

$$C_p = (1 - f_s) C_{pL} + f_s C_{pS} \quad (4.43)$$

$$k = (1 - g_s) k_L + g_s k_s \quad (4.44)$$

Este modelo é mais geral que os modelos apresentados em: Cruz *et al.* (2008), Boeira *et al.* (2009), Siqueira, Cheung e Garcia (2003). Entretanto, vale ressaltar que este modelo se reduz ao modelo das referências acima quando $\rho_s = \rho_L = \rho$; $C_p = C_{pS} = C_{pL}$

; $g_s = f_s$ e $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$, resultando:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[k(x) \frac{\partial T}{\partial x} \right] + S \quad 0 < x < L \quad t > 0 \end{array} \right. \quad (4.45)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} t = 0 \quad T(x, t) = T_0 \quad 0 < x < L \end{array} \right. \quad (4.46)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} x = 0 \quad -k \frac{\partial T}{\partial x} = h(T_\infty - T) \quad t > 0 \end{array} \right. \quad (4.47)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} x = L \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad t > 0 \end{array} \right. \quad (4.48)$$

Sendo

$$S = \rho \Delta H_f \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (4.49)$$

$$k = (1 - f_s) k_L + f_s \cdot k_s \quad (4.50)$$

$$\rho = (1 - f_s) \rho_L + f_s \cdot \rho_s \quad (4.51)$$

Essas simplificações introduzidas por Voller e Song objetivam uma marcante flexibilidade de trabalho na equação geral da condução de calor (4.1) para a análise numérica de fenômenos que envolvem a transformação de fase (SPIN, 1996).

Portanto, pode-se observar que o modelo proposto (Eqs. 4.38-4.41) é mais completo e não-linear que os modelos utilizados em Cruz *et al.* (2008), Siqueira, Cheung e Garcia (2003) e Boeira, Ferreira e Garcia (2009).

4.2.2 Adimensionalização do problema

Como procedimento geral de modelagem, é conveniente redefinir as variáveis do problema de forma a torná-las adimensionais, evitando assim problemas de interpretação advindos do uso de sistemas diferentes de unidades e permitindo agrupar os parâmetros do problema num conjunto menor de grupamentos paramétricos (PINTO e LAGE, 2001). A finalidade da adimensionalização de um problema físico (Eqs. 4.38-4.41) consiste em reduzir o número de variáveis (SILVA, 2013).

Com o objetivo de se resolver uma classe de problemas que sejam definidos pelo modelo proposto serão utilizados os seguintes grupos e parâmetros adimensionais:

$$\theta = \frac{T - T_m}{T_0 - T_m}; \quad \theta_\infty = \frac{T_\infty - T_m}{T_0 - T_m}; \quad \theta_L = \frac{T_L - T_m}{T_0 - T_m}; \quad \theta_e = \frac{T_e}{T_0 - T_m}; \quad \theta_m = \frac{T_m}{T_0 - T_m} \quad (4.52-4.56)$$

$$a = \frac{C_{PL}}{C_{PS}}; \quad b = \frac{\rho_L C_{PL}}{\rho_S C_{PS}}; \quad d = \frac{\rho_L}{\rho_S}; \quad e = \frac{k_L}{k_S}; \quad \mathbb{C} = \frac{\rho C_P}{\rho_S C_{PS}} \quad (4.57-4.61)$$

$$\overline{\mathbb{C}}_P = \frac{\mathbb{C}_P}{C_{PS}}; \quad Ste = \frac{C_{PS}(T_0 - T_m)}{\Delta H_f}; \quad \lambda = \frac{k}{k_S}; \quad B_i = \frac{hL}{k_S}; \quad \overline{\rho} = \frac{\rho}{\rho_S} \quad (4.62-4.66)$$

$$\overline{\phi} = \frac{\phi}{[\rho_S C_{PS}(T_0 - T_m)]}; \quad \eta = \frac{x}{L}; \quad \tau = \frac{t}{t_c}; \quad \overline{\rho} = \frac{\rho}{\rho_S}; \quad \alpha_S = \frac{k_S}{\rho_S C_{PS}} \quad (4.67-4.71)$$

Com:

$$t_c = \frac{L^2}{\alpha_S} \quad (4.72)$$

Sendo

t_c é uma escala de tempo de difusão de calor na fase sólida [dimensional].

Os grupos adimensionais definidos acima foram substituídos nas equações (4.38-4.41), bem como nas equações ou relações diretamente relacionadas a estas equações, resultando no modelo matemático na forma adimensionalizada:

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{C} \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\lambda \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) \quad 0 < \eta < 1 \quad \tau > 0 \end{array} \right. \quad (4.73)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau = 0 \quad \theta = 1 \quad 0 < \eta < 1 \end{array} \right. \quad (4.74)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \eta = 0 \quad -\lambda \frac{\partial \theta}{\partial \eta} = B_i (\theta_\infty - \theta) \quad \tau > 0 \end{array} \right. \quad (4.75)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \eta = 1 \quad \frac{\partial \theta}{\partial \eta} = 0 \quad \tau > 0 \end{array} \right. \quad (4.76)$$

Sendo $\theta, \theta_\infty, \theta_L, \theta_m$ as temperaturas adimensionais, d representa a relação entre as massas específicas do sólido e do líquido respectivamente e τ o tempo adimensional.

Sendo:

$$\bar{C} = C + \bar{\phi} \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \theta} \quad (4.77)$$

$$C = \bar{\rho} \cdot \bar{C}_p \quad (4.78)$$

$$\bar{\rho} = (1 - g_s) \cdot d + g_s \quad (4.79)$$

$$\lambda = (1 - g_s) \cdot e + g_s \quad (4.80)$$

$$g_s = \bar{\rho} \cdot f_s \quad (4.81)$$

$$f_s = 1 - \left(\frac{\theta}{\theta_L} \right)^\alpha \quad (4.82)$$

$$\bar{\phi} = [1-b](\theta + \theta_m) - d \left[(1-a)\theta_e + \frac{1}{Ste} \right] \left[\frac{\bar{\rho}}{1-(1-d)f_s} \right] \quad (4.83)$$

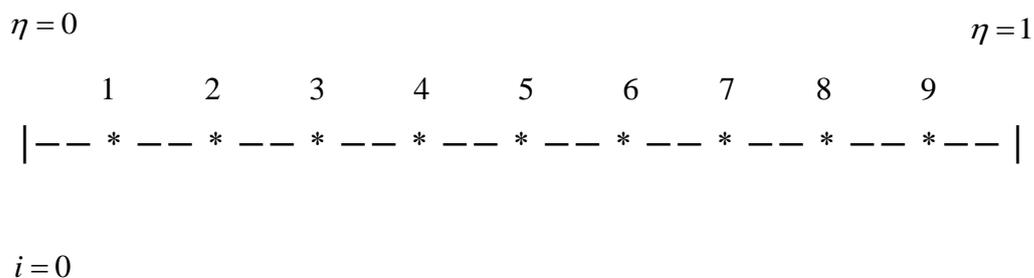
$$\mathbb{C} = g_s + a.d(1-g_s) \quad (4.84)$$

4.2.3 Metodologia de solução

Atualmente, técnicas numéricas têm sido bastante aplicadas para a solução de problemas complexos como, por exemplo, aqueles que envolvem transferência de calor na solidificação. Esta intensificação de utilização ocorre pelo fato de apresentar poucas restrições, resolver com rapidez as questões propostas e obter soluções de problemas com condições de contorno mais complexas (PERES, 2005).

Discretizar o domínio de cálculo consiste em definir, ao longo deste domínio, em quais pontos se deseja conhecer a variável dependente (θ). Para isso, é necessário construir sobre o domínio uma malha, que conterá um conjunto de nós posicionados onde se deseja determinar θ . A Figura 4.2 apresenta a discretização de um domínio unidimensional através da construção de uma malha uniforme.

Figura 4.2 – Representação da malha com pontos nodais em um sistema unidimensional



Fonte: autora.

Para cada nó da malha, existirá uma equação discretizada do modelo matemático relacionando o valor de θ armazenado em um ponto da malha com os valores de θ armazenados nos nós vizinhos. Assim, a partir da Figura 4.2 tem-se:

- Números de nós na malha: $N_{int} = 9$
- Número de elementos da malha (N_{pi} = número de pontos internos): $N_{pi} = N_{int} - 1$

O termo da equação do modelo matemático adimensionalizado (4.73) que não possui derivada é aproximado para o ponto principal e assume a forma:

$$\bar{C} = \bar{C}_i \quad (4.85)$$

A equação (4.85) é introduzida na equação (4.73). Para completar a discretização do modelo matemático proposto, são necessárias expressões algébricas para as derivadas de primeira e segunda ordens de θ . Assim, as aproximações por diferenças finitas dos termos expressos por derivadas parciais de primeira e segunda ordem na equação (4.73), para o ponto principal permite escrever:

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \right|_i = \frac{d\theta_i}{d\tau} \quad (4.86)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\lambda \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) \right|_i = \delta_{\theta i} = \lambda_{i+1/2} \cdot \frac{\theta_{i+1} - \theta_i}{\Delta \eta^2} + \lambda_{i-1/2} \cdot \frac{\theta_{i-1} - \theta_i}{\Delta \eta^2} \quad (4.87)$$

Sendo:

$$\lambda_{i\pm 1/2} = \frac{(\lambda_i + \lambda_{i\pm 1})}{2} \quad (4.88)$$

Ou

$$\lambda_{i\pm 1} = \frac{2(\lambda_{i+1} \cdot \lambda_i)}{(\lambda_{i+1} + \lambda_i)} \quad (4.89)$$

Portanto, após a discretização dos termos da equação (4.73) temos que:

Para $1 \leq i \leq N_{pi}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \overline{\mathbb{C}}_i \frac{d\theta_i}{d\tau} = \delta_{\theta_i} \\ \tau = 0 \Rightarrow \theta_i = 1 \end{array} \right. \quad (4.90)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau = 0 \Rightarrow \theta_i = 1 \end{array} \right. \quad (4.91)$$

Discretizando as condições de contorno (Equações 4.75 e 4.76), temos:

Para $\eta = 0$

$$\theta_0 = \frac{2.\Delta\eta B_i \theta_\infty + \lambda(4\theta_1 - \theta_2)}{3\lambda + 2.\Delta\eta B_i} \quad (4.92)$$

Para $\eta = 1$

$$\theta_i = \frac{(4\theta_{i-1} - \theta_{i-2})}{3} \quad (4.93)$$

As equações discretizadas (4.90-4.93) foram implementadas em código computacional desenvolvido para resolver o problema proposto. A rotina DIVPAG da biblioteca do IMSL (2014) foi utilizada para solução do sistema de equações diferenciais ordinárias.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 CONSIDERAÇÕES INICIAIS

Resultados numéricos para distribuição de temperatura, bem como dos parâmetros térmicos foram obtidos ao longo da evolução do fenômeno da solidificação considerado. Para esta finalidade, um código computacional foi desenvolvido em linguagem de programação FORTRAN 90/95 e implementado em um microcomputador pessoal com processador do tipo INTEL(R) CORE(TM) i3-3217U 1.80GHz. A rotina DIVPAG da biblioteca do IMSL (2015) foi utilizada para resolver numericamente o sistema de equações diferenciais ordinárias fornecidas pelas equações (4.90-4.91), com uma tolerância igual a 10^{-8} definida pelo usuário.

Resultados foram gerados para os sistemas binários Al-Sn (Al20%Sn; Al30%Sn e Al40%Sn), Al-Cu (Al6,2%Cu e Al8,1%Cu) e Sn-Pb (Sn5%Pb) e comparados com dados experimentais obtidos na literatura (CRUZ *et al.*, 2008; BOEIRA, FERREIRA e GARCIA, 2009; SIQUEIRA, CHEUNG e GARCIA, 2003).

A utilização dos sistemas de liga Al-Sn, Al-Cu e Sn-Pb na realização deste trabalho, pode ser justificada em função dos seguintes motivos:

a) Sistema Al-Sn

Aplicabilidade em termos industrial no âmbito da tribologia (CRUZ, 2008), conforme abordado no capítulo 2.

b) Sistema Al-Cu

Aplicabilidade principalmente em indústrias de aviação (MARTIN, 1968).

c) Sistema Sn-Pb

Segundo Rocha (2003), a escolha da liga do sistema Sn-Pb deve-se ao fato do mesmo apresentar:

- Um eutético simples;

- Apresentar temperaturas *liquidus* relativamente baixas, fato que facilita bastante as operações de fusão e posterior vazamento;
- Apresentar intervalos de solidificação bastante variáveis;
- As propriedades termofísicas das ligas hipoeutéticas são conhecidas.

Nas Tabelas 5.1, 5.2 e 5.3 são apresentados os dados de entrada utilizados na simulação.

Tabela 5.1 – Propriedades termofísicas do sistema de liga Al-Sn

Especificação	Símbolo /Unidade	Caso 1* Al20%Sn	Caso 2* Al30%Sn	Caso 3* Al40%Sn
Calor Específico do sólido	C_{PS} [J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]	998,2	906,8	815,4
Calor Específico do líquido	C_{PL} [J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]	920,2	837,3	754,4
Calor Latente de Fusão	ΔH_f [J.kg ⁻¹]	330140	296460	262780
Coefficiente de Partição	K_0	0,032	0,026	0,021
Coefficiente de Transferência Térmica	h_i [W/m ² °C]	10.500t ^{-0,1}	6.000t ^{-0,1}	12.500t ^{-0,1}
Coefficiente de Transferência de calor	h_i [W/m ² K]	a.t ^{\bar{a}}	b.t ^{$\bar{a}1$}	c.t ^{$\bar{a}2$}
Comprimento do molde	L [m]	0,11	0,11	0,11
Condutividade Térmica do sólido	K_S [W.m ⁻¹ .K ⁻¹]	183,8	169,2	154,6
Condutividade Térmica do líquido	K_L [W.m ⁻¹ .K ⁻¹]	79,4	73,6	67,8
Densidade do sólido	ρ_S [kg.m ⁻³]	3473,2	3934,8	4396,4
Densidade do líquido	ρ_L [kg.m ⁻³]	3291,6	3753,4	4215,2
Temperatura Ambiente	T [°C]	25	25	25
Temperatura Eutética	T_e [°C]	227	227	227
Temperatura de Fusão	T_m [°C]	660,37	660,37	660,37
Temperatura Inicial	T_0 [°C]	639	628	618
Temperatura Liquidus	T_L [°C]	637	626	616
Tempo Final	t [s]	400	500	400

Fonte: Cruz *et al.* (2008).

Tabela 5.2 – Propriedades termofísicas do sistema de liga Al-Cu

Especificação	Símbolo /Unidade	Caso 4* Al6,2%Cu	Caso 5* Al8,1%Cu
Calor Específico do sólido	C_{PS} [J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]	1089	1088
Calor Específico do líquido	C_{PL} [J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]	1050	1039
Calor Latente de Fusão	ΔH [J.kg ⁻¹]	380554	379264
Coefficiente de Partição	K_0	0,17	0,17
Coefficiente de Transferência Térmica	h_i [W/m ² °C]	11.200 t ^{-0,022}	10.700 t ^{-0,17}
Coefficiente de Transferência de calor	h_i [W/m ² K]	b.t ^{$\bar{a}5$}	c.t ^{$\bar{a}6$}
Comprimento do molde	L [m]	0,11	0,11
Condutividade Térmica do sólido	K_S [W.m ⁻¹ .K ⁻¹]	190,8	188,4
Condutividade Térmica do líquido	K_L [W.m ⁻¹ .K ⁻¹]	88,1	87
Densidade do sólido	ρ_S [kg.m ⁻³]	2698	2746
Densidade do líquido	ρ_L [kg.m ⁻³]	2533	2580
Temperatura Ambiente	T [°C]	25	25
Temperatura Eutética	T_e [°C]	548	548
Temperatura de Fusão	T_m [°C]	660,37	660,37
Temperatura Inicial	T_0 [°C]	644	638
Temperatura Liquidus	T_L [°C]	639	633
Tempo Final	t [s]	120	160

Fonte: Boeira, Ferreira e Garcia (2009).

Tabela 5.3 – Propriedades termofísicas do sistema de liga Sn-Pb.

Especificação	Símbolo /Unidade	Caso 6* Sn5wt%Pb
Calor Específico do sólido	C_{PS} [J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]	221
Calor Específico do líquido	C_{PL} [J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]	259
Calor Latente de Fusão	ΔH [J.kg ⁻¹]	57120
Coefficiente de Partição	K_0	0,0626
Coefficiente de Transferência Térmica	h_i [W/m ² °C]	650t ^{-0,02}
Coefficiente de Transferência de calor	h_i [W/m ² K]	a.t ^{0,7}
Comprimento do molde	L [m]	0,11
Condutividade Térmica do sólido	K_S [W.m ⁻¹ .K ⁻¹]	64
Condutividade Térmica do líquido	K_L [W.m ⁻¹ .K ⁻¹]	33
Densidade do sólido	ρ_S [kg.m ⁻³]	7720
Densidade do líquido	ρ_L [kg.m ⁻³]	7380
Temperatura Ambiente	T [°C]	25
Temperatura Eutética	T_e [°C]	183
Temperatura de Fusão	T_m [°C]	232
Temperatura Inicial	T_0 [°C]	225
Temperatura Liquidus	T_L [°C]	220
Tempo Final	t [s]	560

Fonte: Siqueira, Cheung e Garcia (2003).

5.2 ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA

Segundo Shih e Tsay (1971) o termo convergência significa que a solução por diferenças finitas aproxima-se da solução verdadeira da equação diferencial parcial, tendo as mesmas condições de contorno e iniciais, quando a malha é refinada.

Para análise de convergência foram simuladas três ligas diferentes: Al40%Sn, Al8,1%Cu e Sn5%Pb e os resultados estão apresentados nas Tabelas 5.4-6.

Tabela 5.4 – Comportamento da convergência da temperatura ao longo do fenômeno da solidificação referente à liga Al40%Sn

N	Al40%Sn					
	x = 5 mm			x = 30 mm		
	t = 15 s	t = 100 s	t = 349 s	t = 5 s	t = 100 s	t = 334 s
22	371,1591	168,6136	72,0264	625,6246	314,3741	121,2180
44	370,3272	168,4414	72,0735	626,2312	314,1132	121,3166
88	369,9132	168,3851	72,0701	626,4171	314,0220	121,3125
176	369,7393	168,3657	72,0701	626,4675	313,9886	121,3109
220	369,7100	168,3633	72,0703	626,4732	313,9842	121,2832
440	369,6608	168,3633	72,0703	626,4794	313,9848	121,1835
880	369,6622	168,3633	72,0703	626,4794	313,9848	121,1835

Fonte: a autora.

Tabela 5.5 – Comportamento da convergência da temperatura ao longo do fenômeno da solidificação referente à liga Al8,1%Cu.

Al8,1%Cu						
N	x = 29 mm			x = 65 mm		
	t = 2 s	t = 12 s	t = 100 s	t = 2 s	t = 12 s	t = 100 s
22	654,7144	619,5871	375,9837	666,7587	662,7593	515,3058
44	655,1012	615,9511	375,8424	666,7672	662,8976	515,1175
88	655,1926	614,9289	375,7835	666,7693	662,9319	515,0403
176	655,2186	614,5963	375,7744	666,7698	662,9392	515,0275
220	655,2220	614,5416	375,7712	666,7698	662,9396	515,0275
440	655,2220	614,5418	375,7711	666,7699	662,9395	515,0276
880	655,2221	614,5418	375,7715	666,7699	662,9395	514,9809

Fonte: a autora.

Tabela 5.6 – Comportamento da convergência da temperatura ao longo do fenômeno da solidificação referente à liga Sn5%Pb

Sn5%Pb						
N	x = 5 mm			x = 50 mm		
	t = 140 s	t = 210 s	t = 343 s	t = 140 s	t = 210 s	t = 343 s
22	177,2081	166,1275	151,0238	218,6432	207,8934	189,0180
44	177,0658	166,0194	150,9468	218,4680	207,7411	188,9205
88	177,0110	165,9765	150,9144	218,4123	207,6827	188,8776
176	176,9897	165,9600	150,9021	218,3943	207,6616	188,8624
220	176,9866	165,9576	150,9005	218,3916	207,6587	188,8604
440	176,9805	165,9521	150,8961	218,3856	207,6582	188,8549
880	176,9750	165,9566	150,8964	218,3854	207,6443	188,8490

Fonte: a autora.

A Tabela 5.4 apresenta os resultados da temperatura para o caso da liga Al40%Sn nas posições 5 e 30 mm referentes ao termopar presente durante o fenômeno da solidificação considerado. Observa-se que foi obtida uma taxa de convergência em quatro dígitos significativos, na pior situação $x=30\text{mm}$ e $t=100\text{s}$, com uma ordem de truncamento entre 176 e 220 intervalos em x . Analogamente, a Tabela 5.5 apresenta o comportamento da taxa de convergência da temperatura para a liga Al8,1%Cu nas posições 29 e 65 mm respectivamente, e para este caso, a ordem de truncamento da malha ficou entre 88 e 176 intervalos para o caso mais crítico, onde foi obtida uma convergência com quatro dígitos. A Tabela 5.6 também apresenta bons resultados de convergência para a liga Sn5%Pb, com ordem de truncamento de malha $N = 176-220$ no caso mais crítico, obtendo-se uma convergência com quatro dígitos significativos.

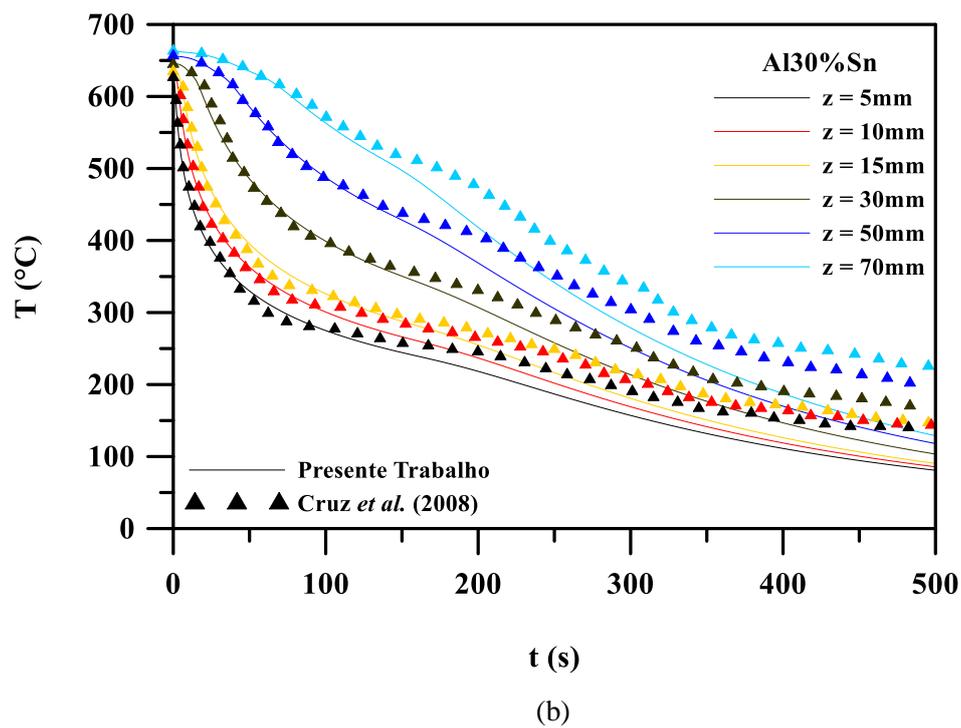
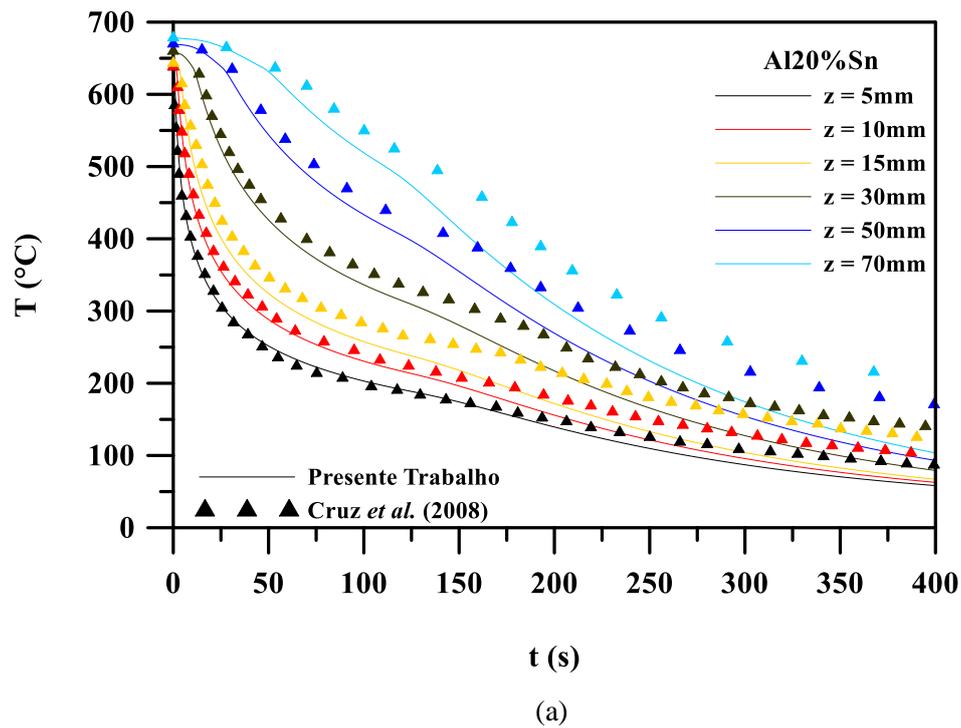
5.3 ANÁLISE DO CAMPO DE TEMPERATURA

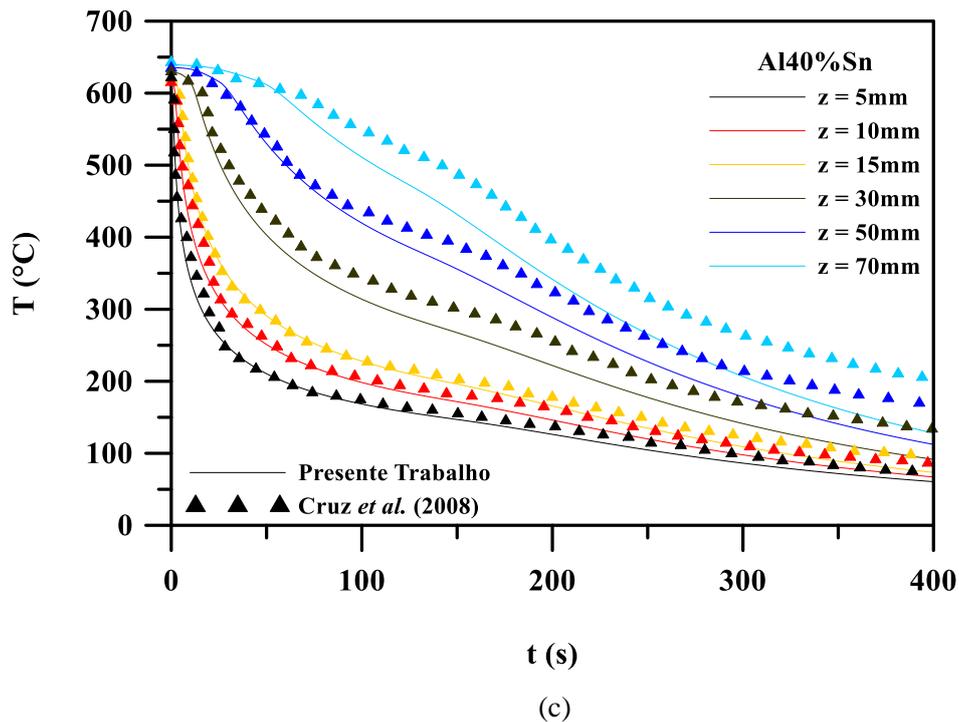
5.3.1 Curvas de resfriamento

5.3.1.1 Ligas do sistema Al-Sn

A Figura 5.1 ilustra as curvas de resfriamento teórica (obtida no presente trabalho) e experimental (disponível em CRUZ *et al.*, 2008) para o sistema binário Al-Sn, nas composições 20%, 30% e 40%Sn. A metodologia utilizada por Cruz *et al.* (2008) na obtenção dos perfis experimentais consiste no monitoramento térmico, onde foram monitoradas temperaturas em seis posições, a 5, 10, 15, 30, 50 e 70mm, respectivamente, a partir da interface metal/molde. Após o término da solidificação, os resultados térmicos obtidos são utilizados para a determinação do coeficiente global de transferência de calor metal/molde (h_i) apoiando-se no método do confronto de perfis térmicos com o modelo introduzido por Spin e Garcia (2000) que simula as condições de solidificação unidirecional (CRUZ *et al.*, 2008). O perfil simulado no trabalho de Cruz *et al.* (2008) foi confrontado com o perfil obtido experimentalmente, e a melhor concordância, permitiu a obtenção da relação $h = C.t^{-n}$ que descreve a variação do coeficiente global de transferência de calor com o tempo do fenômeno da solidificação. Os valores de h_i foram obtidos na literatura, a partir da metodologia de Cruz *et al.* (2008), e utilizados como dados de entrada para a simulação numérica.

O sistema de equações representados por (4.73-76), (4.90-91), bem como as equações auxiliares, foram utilizadas na simulação numérica desenvolvida neste trabalho, obtendo-se conseqüentemente o perfil teórico.

Figura 5.1 –Confronto de perfis térmicos teóricos e experimentais do sistema binário Al-Sn



Fonte: a autora (2015)

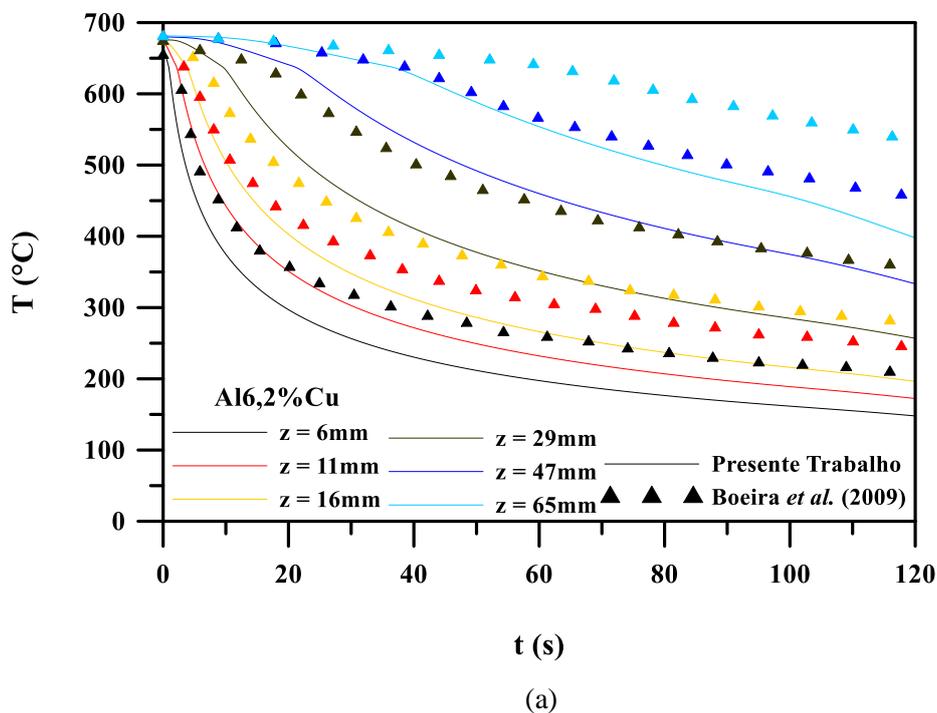
Admitiu-se na condição inicial do problema, a formação de um perfil térmico no líquido que se comporta como uma parábola $T_v(z) = -az^2 + bz + c$, tornando a comparação teórico-experimental mais precisa conforme podemos observar nos casos (a), (b) e (c) da Figura 5.1.

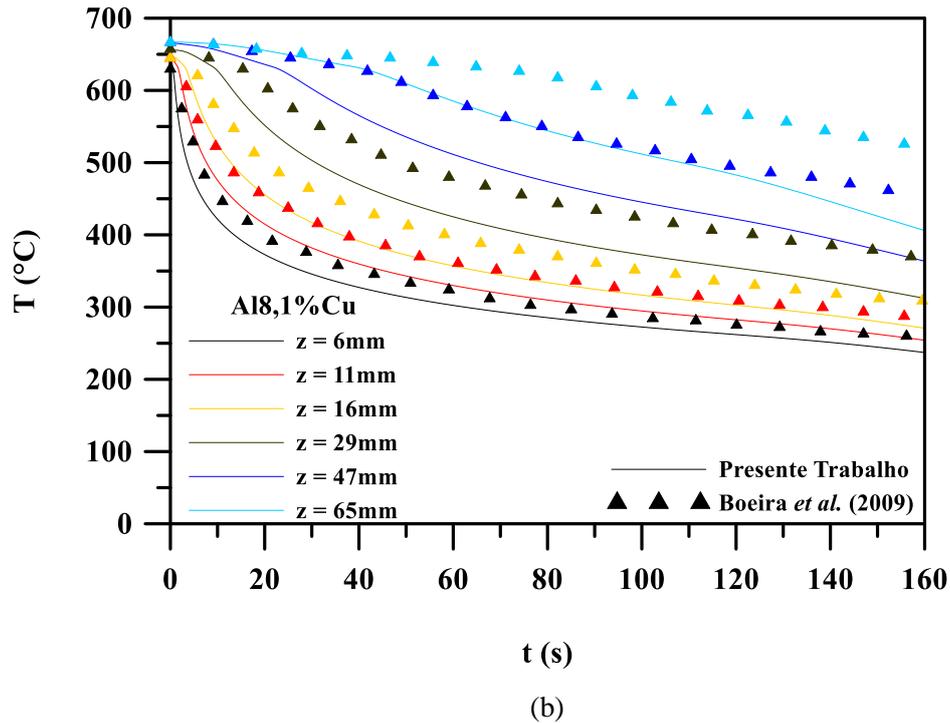
As comparações teórico-experimentais da Figura 5.1 (a), (b) e (c) apresentam de um modo geral uma boa concordância do modelo numérico em relação aos resultados experimentais, o que demonstra uma correta implementação computacional do modelo numérico. No entanto, vale ressaltar que nas posições iniciais dos termopares, essa concordância entre curvas experimentais e teóricas são mais visíveis, diferentemente das posições finais onde tendem a sofrer um maior afastamento. Fato este que ocorre em virtude das hipóteses simplificadoras do modelo, bem como por considerar o molde como um excelente extrator de calor e principalmente pela formação da camada sólida que altera a condição de extração de calor durante o fenômeno da solidificação.

5.3.1.2 Ligas do sistema Al-Cu

No sistema de liga Al-Cu foram utilizadas as seguintes ligas: Al6,2%Cu e Al8,1%Cu. A metodologia utilizada por Boeira, Ferreira e Garcia (2009) na obtenção dos perfis experimentais baseia-se na mesma metodologia utilizada por Cruz *et al.* (2008), através do monitoramento térmico e conforme citado anteriormente (Ver tópico 5.3.1.1). As posições dos termopares para as ligas Al6,2%Cu e Al8,1%Cu, foram fixados em 6, 11, 16, 29, 47 e 65mm, respectivamente, a partir da interface metal/molde. Os resultados térmicos obtidos após o término da solidificação foram utilizados para a determinação do coeficiente global de transferência de calor metal/molde (h_i) utilizando-se o método do confronto de perfis térmicos. O perfil simulado no trabalho de Boeira, Ferreira e Garcia (2009) foi confrontado com o perfil experimental obtido, e a melhor concordância permitiu a obtenção da relação $h = C \cdot t^{-n}$ sendo utilizado como dado de entrada do modelo proposto nesse trabalho (Ver Tabela 5.2).

Figura 5.2 – Confronto de perfis térmicos teóricos e experimentais do sistema binário Al-Cu





Fonte: a autora (2015)

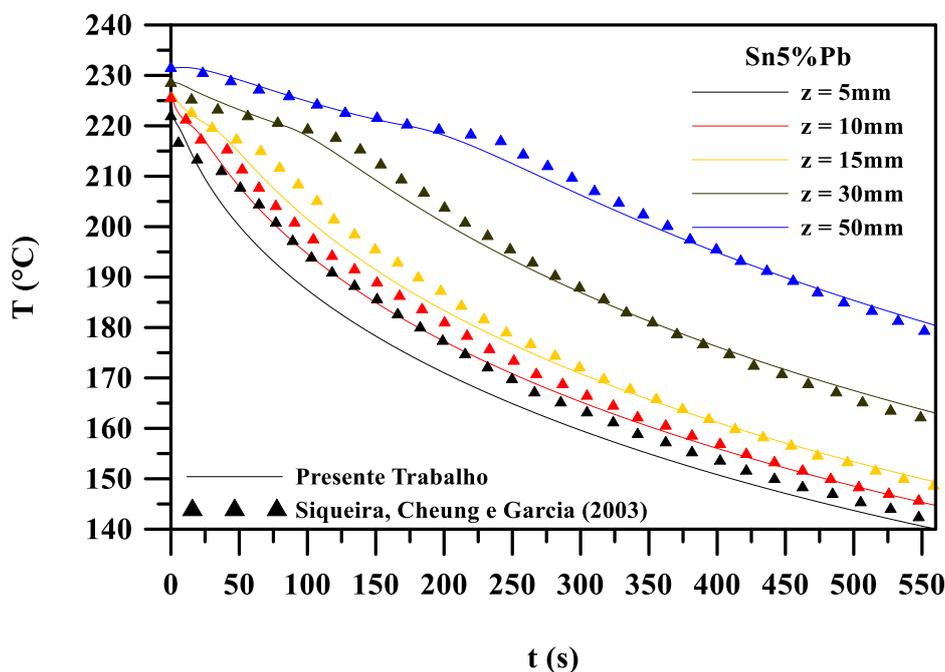
O perfil teórico do presente trabalho foi encontrado a partir do sistema de equações e equações auxiliares representadas por (4.73-76) e (4.90-91) utilizadas na simulação numérica e os resultados podem ser observados na Figura 5.2.

De um modo geral, ocorre uma boa concordância do modelo numérico em relação ao experimental, demonstrando uma correta implementação numérica computacional, pois ambas curvas apresentam comportamento semelhantes. Todavia, em relação aos termopares o afastamento tende a ser maior entre as curvas teóricas e experimentais, principalmente no caso (a) da Figura 5.2, em virtude das hipóteses simplificadoras do modelo, pelo fato de considerar o molde como um excelente extrator de calor e pela formação de uma camada sólida ao longo do fenômeno da solidificação alterando a condição de extração de calor.

5.3.1.3 Ligas do sistema Sn-Pb

Admitiu-se na condição inicial do problema, a formação de um perfil térmico no líquido que se comporta como uma parábola $T_v(z) = -az^2 + bz + c$, tornando a comparação teórico-experimental mais precisa conforme podemos observar nos casos na Figura 5.3.

Figura 5.3 – Confronto de perfis térmicos teóricos e experimentais do sistema binário Sn-Pb.



Fonte: a autora

O perfil teórico foi obtido através do presente modelo e o perfil experimental obtido na literatura no trabalho de Siqueira, Cheung e Garcia (2003). Os resultados obtidos foram confrontados demonstrando concordância qualitativa e quantitativa.

Conforme podemos observar na Figura 5.3, as curvas teóricas obtidas através da metodologia proposta, apresentam de um modo geral uma concordância satisfatória em relação ao perfil experimental obtido por Siqueira, Cheung e Garcia (2003), indicando uma correta implementação computacional do modelo numérico. Em relação as posições dos termopares os pequenos afastamentos entre curvas teóricas e experimentais estão relacionados as hipóteses adotadas na solução do modelo, bem como pela formação de uma camada sólida que altera a condição de extração de calor no decorrer do fenômeno da solidificação.

5.3.2 Parâmetros térmicos de solidificação

As variáveis térmicas do processo são determinadas experimentalmente após a obtenção dos perfis de temperatura, conforme item 5.3.1. Posteriormente, a partir dos perfis térmicos obtidos, localiza-se a temperatura *liquidus* da liga. Traça-se uma

horizontal a partir de T_L , interceptando os perfis provenientes das posições dos termopares em análise, posicionados no metal líquido. Projetando o ponto de interseção entre T_L e o perfil no eixo dos tempos, obtêm-se pares ordenados (P,t). Dessa forma, definindo o instante exato em que a isoterma *liquidus* atinge um determinado termopar (CRUZ *et al.*, 2008).

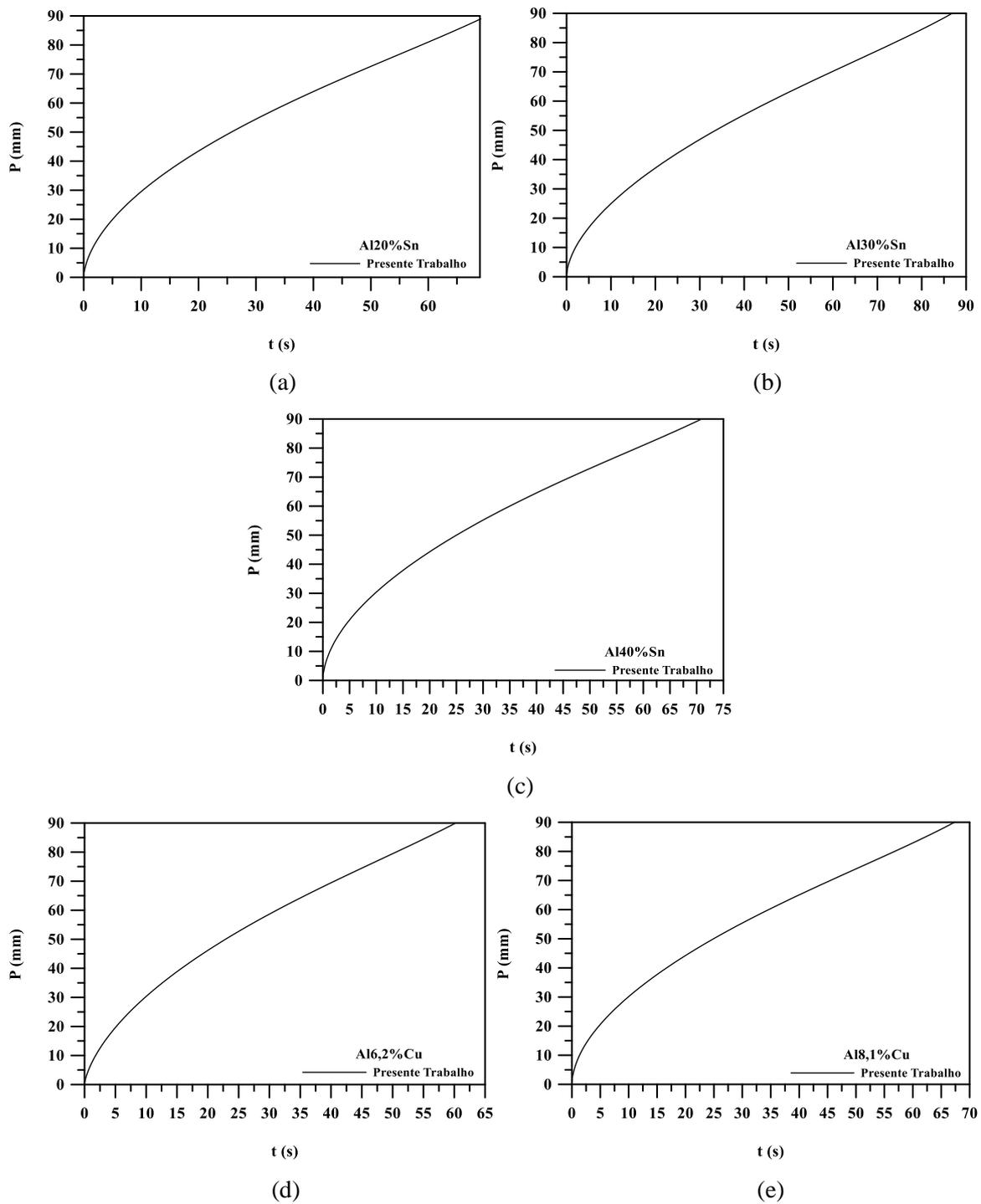
Os pares ordenados obedecem uma lei experimental do tipo potência ($P_L=C.t^n$), sendo posteriormente derivada, obtendo-se a correlação velocidade com tempo ($V_L=C.t^{-n}$). A taxa de resfriamento (T_R) para cada posição monitorada pelos termopares, são obtidas experimentalmente a partir das interseções das retas de cada temperatura *liquidus* (T_L) com os perfis térmicos obtidos de cada termopar, através da leitura direta do quociente das temperaturas, imediatamente antes e depois da T_L e dos tempos correspondentes, isto é, conforme procedimento também utilizado por Okamoto e Kishitake (1975) (CRUZ *et al.*, 2008; SIQUEIRA, CHEUNG e GARCIA, 2003; BOEIRA, FERREIRA e GARCIA., 2009).

Para obtenção dos parâmetros térmicos teóricos foi utilizado o mesmo procedimento descrito na obtenção dos parâmetros térmicos experimentais. No entanto, a metodologia foi implementada no código computacional desenvolvido para resolver o problema proposto para obtenção dos resultados teóricos simulados. Os gráficos obtidos para cada parâmetro, podem ser observados a seguir.

5.3.2.1 Sistema Al-Sn e Al-Cu

A obtenção das curvas simuladas foi obtida a partir do procedimento já mencionado no item anterior (5.3.2) e conforme podemos observar na Figura 5.4, que descreve a posição (P) em termos da isoterma *liquidus* com o tempo.

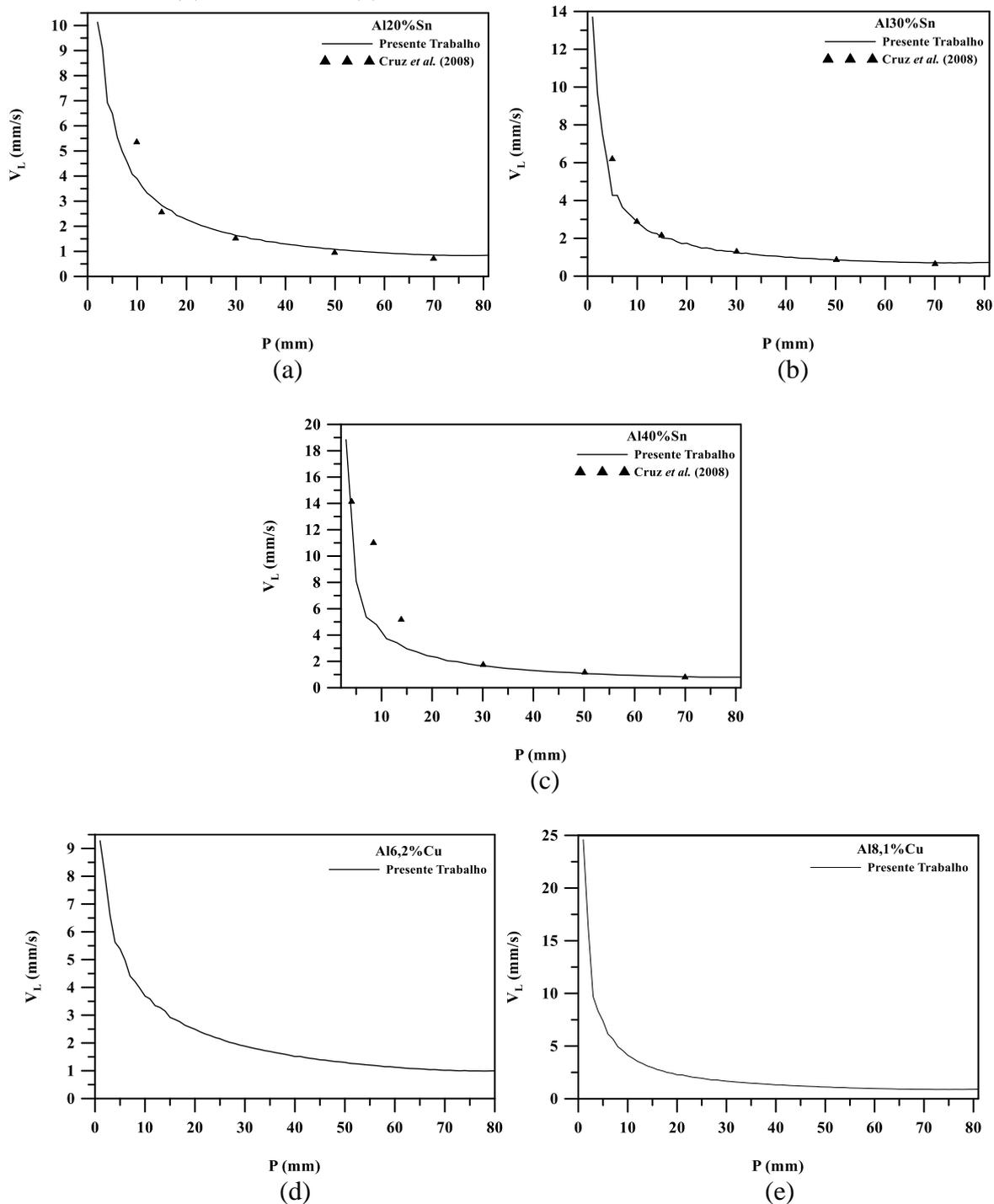
Figura 5.4 – Posição das isothermas *liquidus* a partir da interface metal/molde em função do tempo para as ligas (a) Al20%Sn, (b) Al30%Sn, (c) Al40%Sn, (d) Al6,2%Cu e (e) Al8,1%Cu



Fonte: a autora

Na Figura 5.5, pode-se observar as curvas da evolução da velocidade de deslocamento da isoterma *liquidus* (V_L), obtidas através da simulação numérica para o sistema de liga Al-Sn e Al-Cu.

Figura 5.5 – Velocidades das isotermas *liquidus* a partir da interface metal/molde em função da posição para as ligas (a) Al20%Sn, (b) Al30%Sn, (c) Al40%Sn, (d) Al6,2%Cu e (e) Al8,1%Cu

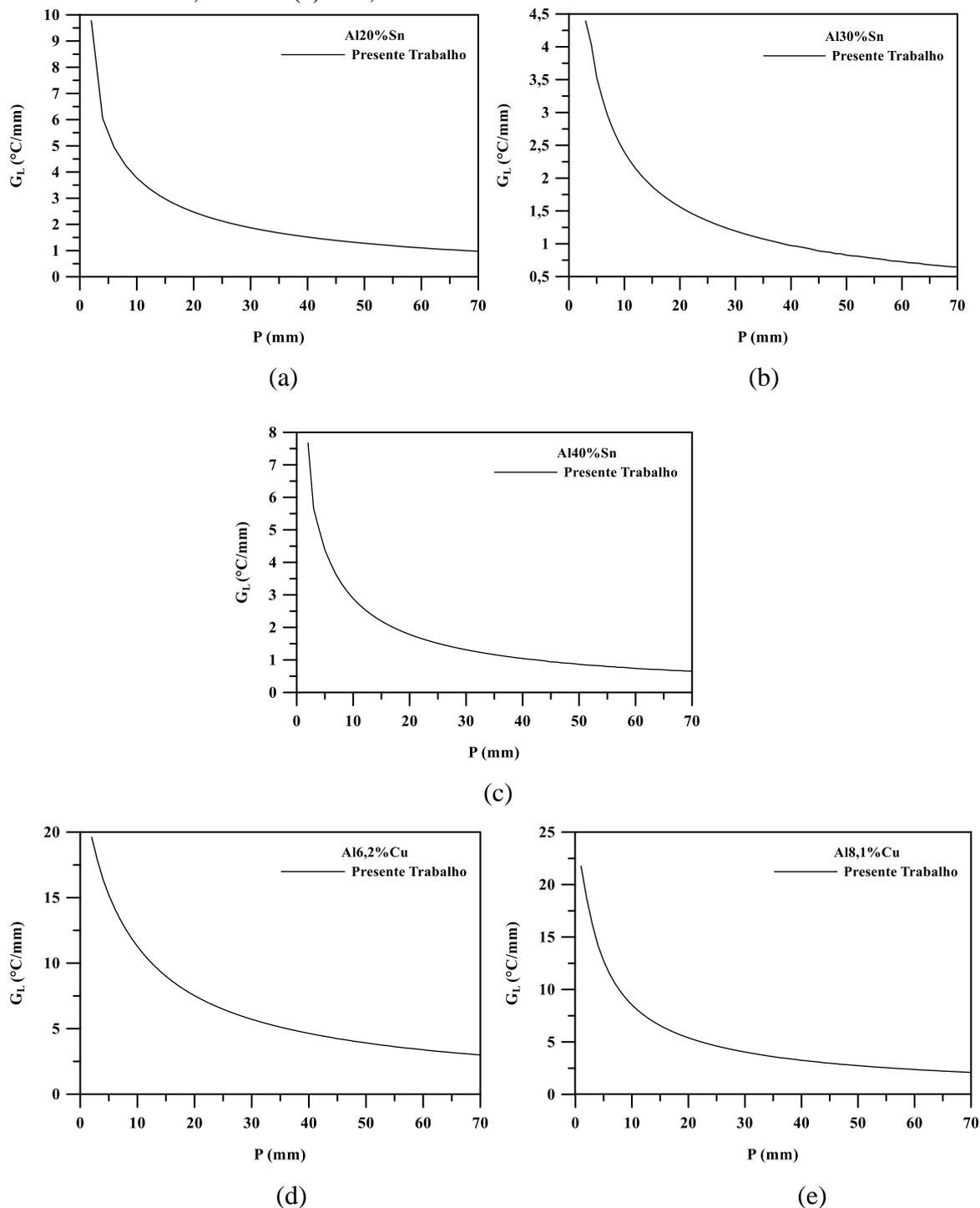


Fonte: a autora

Como pode-se observar, com o avanço da solidificação a velocidade da isoterma *liquidus* tende a diminuir, ou seja, quanto mais afastados da base refrigerada menores os valores de V_L .

A Figura 5.6 apresenta valores simulados numericamente do gradiente térmico no líquido, podendo-se observar que os valores diminuem ao longo da posição da isoterma de solidificação, sendo que, para posições mais distantes da interface metal/molde, estes valores tendem a decrescer mais rapidamente até próximo de zero.

Figura 5.6 – Gradientes térmicos *liquidus* a partir da interface metal/molde em função da posição para as ligas (a) Al20%Sn, (b) Al30%Sn, (c) Al40%Sn, (d) Al6,2%Cu e (e) Al8,1%Cu

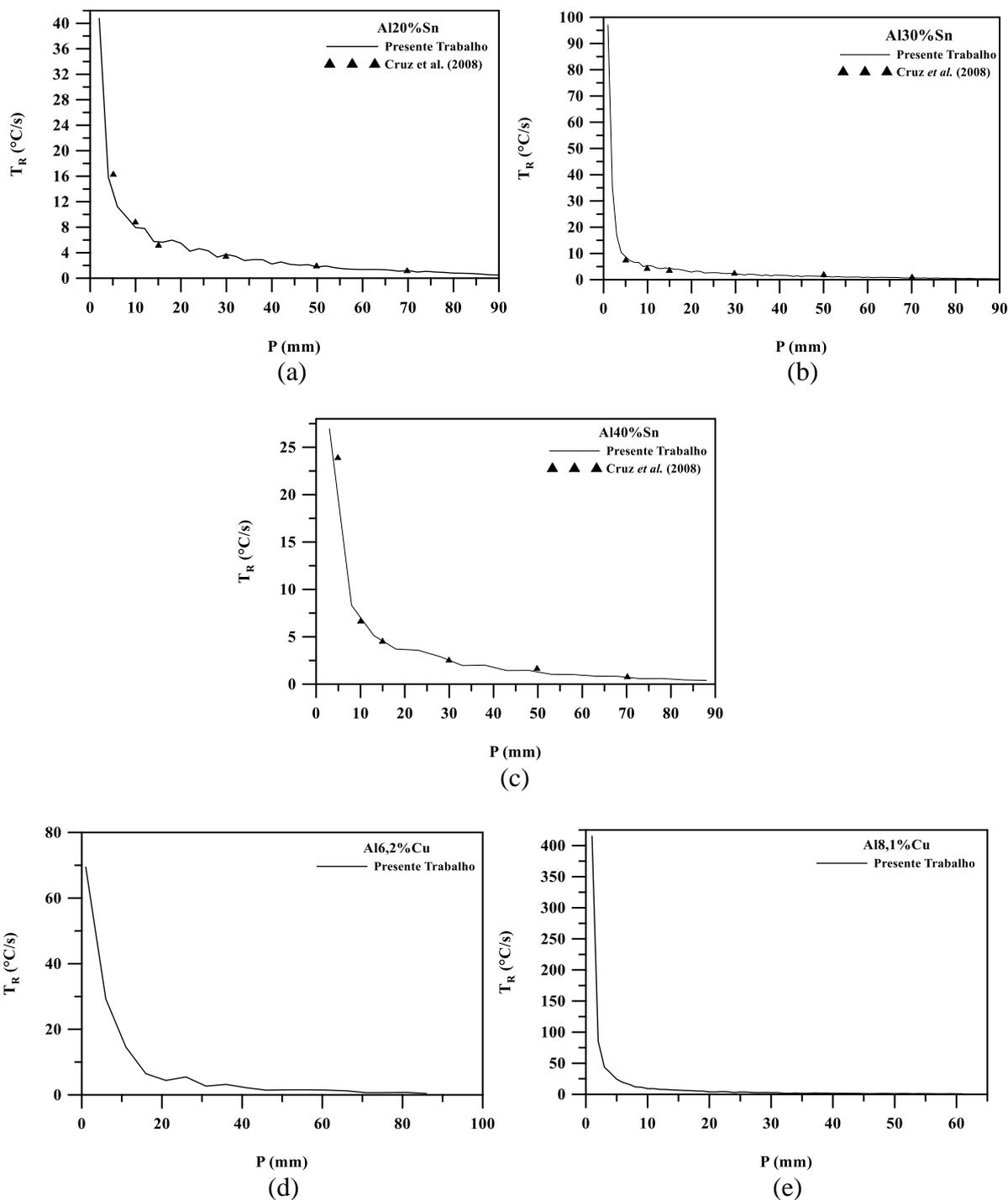


Fonte: a autora

Na Figura 5.7 pode-se observar uma diminuição da taxa de resfriamento com o avanço da solidificação, isto é, quanto mais afastados da base refrigerada, menores são os valores de T_R . Tal fato pode ser explicado pela elevação da resistência térmica à extração

de calor por condução ao longo do fenômeno de solidificação, devido ao aumento da camada solidificada.

Figura 5.7 – Taxas de resfriamento *liquidus* a partir da interface metal/molde em função da posição para as ligas (a) Al20%Sn, (b) Al30%Sn, (c) Al40%Sn, (d) Al6,2%Cu e (e) Al8,1%Cu



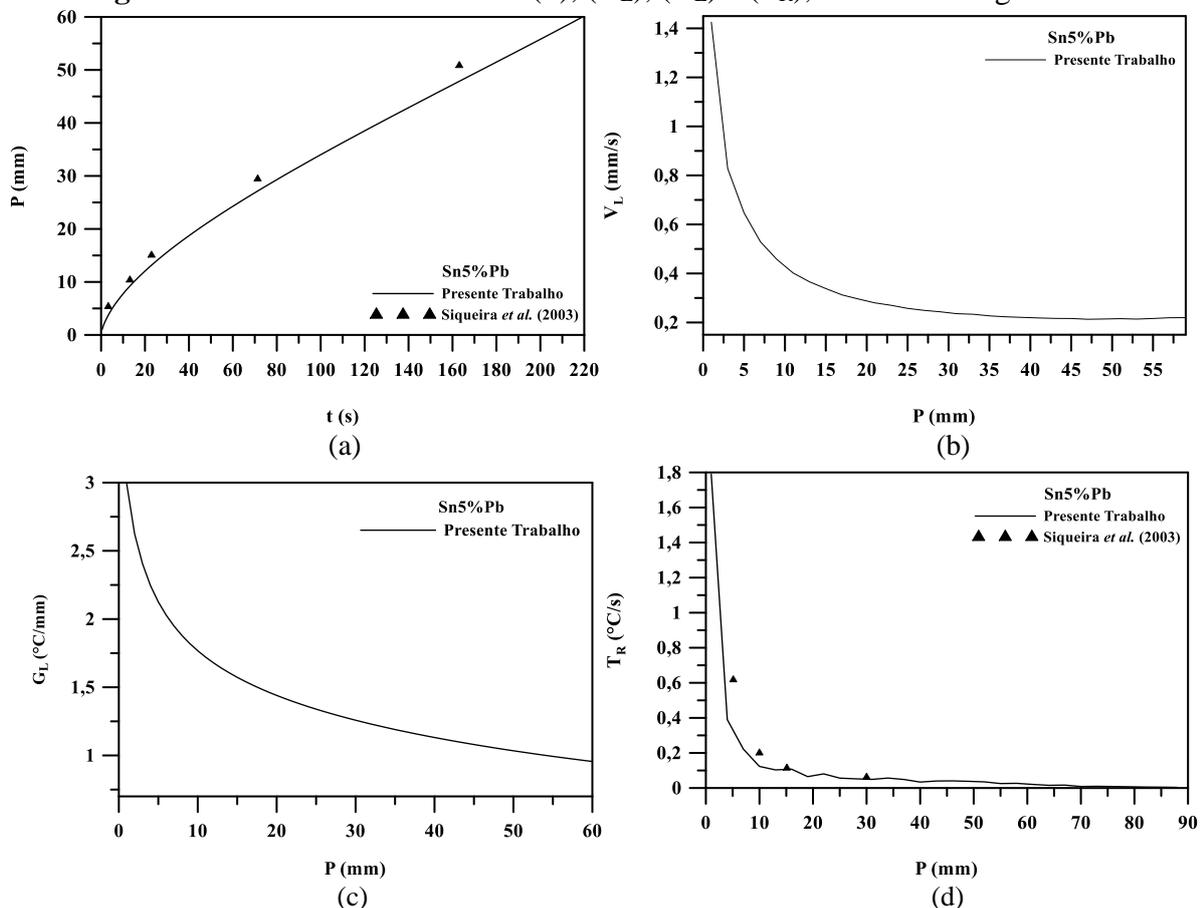
Fonte: a autora

5.3.2.2 Sistema Sn-Pb

A Figura 5.8 (a) mostra as posições teóricas obtidas pela simulação numérica realizada nesse trabalho, comparadas com as posições experimentais da isoterma *liquidus* em função do tempo, obtidas a partir do trabalho de Siqueira, Cheung e Garcia (2003). Conforme pode-se observar apresentam uma concordância satisfatória em relação ao perfil experimental. No item (c) da Figura 5.8, pode-se observar que para o gradiente os valores tendem a diminuir ao longo da posição da isoterma de solidificação, sendo que, para posições mais distantes da interface metal/molde, estes valores tendem a decrescer mais rapidamente até próximo de zero.

Finalmente, para a velocidade e taxa de resfriamento, cujos gráficos são representados nos itens (b) e (d) da Figura 5.8 para a liga Sn5%Pb, percebe-se que ocorre uma diminuição da velocidade de deslocamento da isoterma *liquidus* e da taxa de resfriamento com o avanço da solidificação, isto é, quanto mais afastados da base refrigerada menores são os valores de V_L e T_R . Este fato pode ser explicado pela elevação da resistência térmica à extração de calor ao longo do fenômeno de solidificação, devido ao aumento da camada solidificada.

Figura 5.8 – Parâmetros térmicos (P), (V_L), (G_L) e (T_R), referentes à liga Sn5%Pb



6 CONCLUSÃO

A partir dos resultados obtidos no presente trabalho e da metodologia proposta, quando comparados com os resultados experimentais obtidos a partir da literatura, através dos trabalhos de Cruz *et al.* (2008), Siqueira, Cheung e Garcia (2003) e Boeira, Ferreira e Garcia (2009), podem ser extraídas as seguintes conclusões:

Os resultados obtidos numericamente convergem e portanto há uma consistência direta do código computacional desenvolvido no presente trabalho.

O comportamento semelhante das curvas numéricas e experimentais nas análises dos resultados, confirmam a boa representação da metodologia utilizada. O afastamento de algumas curvas quando comparadas aos resultados experimentais e numéricos, consiste, no fato da elevação da resistência térmica à extração de calor ao longo do fenômeno de solidificação, devido ao aumento da camada solidificada, além das hipóteses simplificadoras adotadas na solução do problema.

Portanto, de forma geral, a aplicação do método das linhas (MOL) na solução das equações de energia, conduziu para resultados satisfatórios, pois o modelo matemático solucionado pelo MOL conseguiu acompanhar a tendência física do fenômeno da solidificação unidirecional vertical ascendente para ligas binárias em estudo, conforme os dados experimentais presentes na literatura.

6.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como sugestões de trabalhos que podem ser feitos para promoverem uma continuação da pesquisa desenvolvida no presente trabalho, propõe-se:

- Continuação do presente estudo utilizando novas metodologias de solução, como, por exemplo, pela Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT);
- Análise de novos parâmetros;
- Realização de experimentos com outros sistemas de ligas, juntamente com a simulação das mesmas ligas para validação dos resultados obtidos;
- Comparar os resultados do presente modelo (modelo de segregação) com um modelo de fronteira móvel;
- Construir um código computacional para a estimativa de parâmetros utilizando o método de Levenberg-Marquardt com objetivo de minimizar a função objetiva.

REFERÊNCIAS

ADAMS, C. M. Thermal considerations in freezing. In: _____. **Liquid metals and solidification**. Cleveland: American Society for Metals, 1958. p. 187-217.

ANDRADE, Suzimara Rossilho de. **Simulação de solidificação de ligas metálicas utilizando método de elementos finitos**. 1999. 68 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica)– Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP. 1999.

ARES, A. E.; SCHVEZOV, C. E. Solidification Parameters During The Columnar – to – Equiaxed Transition in Lead-Tin Alloys. **Metallurgical and Materials Transactions A**, Berlin, v. 31A, p. 1611-1625, 2000.

ASM HANDBOOK. Properties and selection: nonferrous alloys and special-purpose materials – Metals handbook. [S.l.], 1992.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DO ALUMÍNIO. **Fundamentos do alumínio e suas aplicações**. São Paulo: ABAL, 2004.

BENNON, W. D.; INCROPERA, F. P. A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems – I. Model formulation. **Int. J. Heat Mass Transfer.**, v. 30, n. 10, p. 30-2161out. 1987.

BERTELLI, Felipe *et al.* Heat transfer characteristics of inward, outward and upward solidification of an Al-1,5wt%Fe alloy in cylindrical chill molds. **Materials Science fórum JCR**, Philadelphia, v. 730-732, p. 805-810, 2013.

BILONI, H.; MORANDO, R. On the Nature of the Chill Zone in Ingot Solidification. **Transactions of the Metallurgical Society of AIME**, New York City, v. 242, p. 1121, 1968.

BOEIRA, A. P. **Macrossegregação e formação de poros na solidificação de ligas Al – Cu**: modelagem numérica e desenvolvimento experimental. 2006. 180 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica)–Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2006.

BOEIRA, A. P.; FERREIRA, IVALDO L. GARCIA, Amauri. Alloy composition and metal/mold heat transfer efficiency affecting inverse segregation and porosity of as-cast Al–Cu alloys. **Materials and Design**, Philadelphia, v. 30, p. 2090-2098, 2009.

BOWER, T. F.; FLEMINGS, M. C. Formation of the equiaxed zone in ingot solidification. **Transactions of the Metallurgical Society of AIME**, New York City, v. 239, p. 216, 1967.

BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C. **Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno**. Rio de Janeiro: LTC, 2002.

BRITO, Crystopher Cardoso de. **Solidificação transitória de ligas monofásicas e hipoperitética do sistema Zn-Cu**. 2012. 126 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia

Mecânica)–Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 2012.

BRITO, Paulo Miguel Pereira de. **Métodos numéricos adaptativos para a resolução de modelos multidimensionais em engenharia química**. 2010. 334 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química)–Universidade de Coimbra, Coimbra, 2010.

BRODY, H. D.; FLEMINGS, M. C. Solute redistribution in dendritic solidification. **Transactions of the Metallurgical Society of AIME**, New York City, v. 236, p. 615-624, 1966.

BRONSON, Richard; COSTA, Gabriel B. costa. **Differential equations**. 3. ed. New York City: McGraw-Hill, 2006. (Coleção Schaum).

CAMPO, A. Numerical prediction of combined laminar convection in isothermal vertical tubes via the method of lines. **Warme und Stoffübertragung**, Hoboken, v. 23, p. 229-247, 1988.

CANTÉ, M. V. Experimental analysis of the columnar-to-equiaxed transition in directionally solidified Al–Ni and Al–Sn alloys. **Materials Letters**, Philadelphia, v. 61, p. 2135-2138, 2007.

CANTÉ, M. V. **Solidificação transitória, microestrutura e propriedades de ligas Al – Ni**. 2009. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica)–Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2009.

CARSLAW, H. S.; JAEGER, J. C. **Heat conduction in solids**. 2. Ed. London: Oxford University Press, 1959.

CARVALHO, Diego de Leon Brito. **Correlação entre parâmetros térmicos e espaçamentos dendríticos primários de ligas Al-Si durante a solidificação direcional horizontal**. 2013. 95 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica)–Instituto de Tecnologia, Universidade Federal do Pará, Belém, 2013.

CASTANHO, Manoel A. Pires. **Solidificação unidirecional transitória de ligas peritéticas do sistema Pb-Bi**. 2013. 175 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica)–Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2013.

CHALMERS, B. The Structure of Ingots. **The Journal of the Australian Institute of Metals**, Canberra, v. 8, p. 255, 1968.

CHALMERS, B.; WINEGARD, W. C. Supercooling and Dendritic Freezing in Alloys. **Transactions of the ASM**, Cleveland, v. 46, p. 1214, 1954.

CHANG, S.; STEFANESCU, D. M. **Metall mater trans**. 27 ed. [S.l.: s.n.], 1996.

CHAWLA, Nikhilesh; CHAWLA, Krishan K. **Metal matrix composites**. Berlin: Springer, 2005.

CLYNE, T. W. *et al.* The use of empirical, analytical and numerical models to describe solidification of steel during continuous casting. **Journal of Metals**, [S.l.], v. 34, p. 34-39, 1982.

CLYNE, T. W.; KURZ, W. Solute redistribution during solidification with rapid solid state diffusion. **Metallurgical Transactions**, Berlin, v. 12A, p. 965-971, 1981.

COLNAGO, Marilaine. **Estudo da estabilidade do método das linhas usando a dinâmica de um cabo flexível**. 2012. 75 f. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia)–Universidade Estadual Paulista, Presidente Prudente, 2012.

COSTA, C. G.; MENEGUETTE, M.; SOUZA, J. V. C. Sistemas de equações diferenciais ordinárias e o método das linhas: resolvendo equações diferenciais parciais no Matlab. In: SIMPÓSIO DE MATEMÁTICA, 4., 2009, Presidente Prudente. **Anais...** Presidente Prudente: Unesp, 2009.

COSTA, Thiago Antônio Paixão de Souza. **Influência dos parâmetros térmicos na formação da microestrutura de ligas ternárias Al-Cu-Si solidificadas direcionalmente**. 2013. 105 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica)–Universidade Federal do Pará, Belém, 2013.

COSTA, Virgínia. Ligas metálicas: estrutura, propriedades e conservação de objetos culturais. In: SILVA, Armando coelho Ferreira da; HOMEM, Paula menino (Coord.). **Ligas metálicas: investigação e conservação**. Porto: Universidade do Porto, 2008.

CRANK, J. **Free and moving boundary problems**. New York: Oxford Science Publications, 1984.

CRUZ, Kleber Agustin Sabat da. **Microestrutura de solidificação, resistências mecânicas e ao desgaste de ligas Al-Sn e Al-Si**. 2008. 213 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) –Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2008.

CRUZ, Kleber S.; SPINELLI, José E.; FERREIRA, Ivaldo L.; CHEUNG, Noé; GARCIA, Amauri. Microstructural development in Al–Sn alloys directionally solidified under transient heat flow conditions. **Science direct: Materials Chemistry and Physics**, Philadelphia, v. 109, p. 87-98, 2008.

DIAS, Antonio Carlos Pires. **Solidificação de ligas eutéicas livres de Pb para soldagem: parâmetros térmicos e microestrutura**. 2009. 149 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) –Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2009.

DIAS FILHO, José Marcelino da Silva. **Análises térmica e microestrutural na solidificação de ligas monofásica e peritéticas do sistema Zn-Ag**. 2013. 119 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica)–Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2013.

DIAS FILHO, José Marcelino da Silva *et al.* Influência das Variáveis Térmicas Sobre os Espaçamentos Dendríticos Terciários durante a Solidificação Direcional Horizontal da Liga Al-6%Cu. **Matéria**, Rio de Janeiro, v. 20, p. 47-63, 2015.

DING, G. L. *et al.* On primary dendritic spacing during unidirectional solidification. **Acta Materizlia**, Philadelphia, v. 44, n. 9, p. 3705-3709, 1996.

DING, G. L.; TEWARI, S. N. Dendritic morphologies of directionally solidified single crystal along different crystallographic orientations. **Journal of Crystal Growth**, Philadelphia, v. 236, p. 420-428, 2002.

DUSINBERRE, G. M. **Numerical analysis of heat flow**. New York: McGraw Hill Co., 1949.

FERREIRA, Alexandre Furtado; SALVINO, Ingrid Meirelles; PEREIRA, Ivaldo Leão. Modelagem e simulação de microestruturas em ligas quaternárias (Fe-C-P-Mn). In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA DE FABRICAÇÃO, 6., 2011, Caxias do Sul. **Anais...** Rio de Janeiro: ABCM, 2011.

FERREIRA, I. L. **Análises numérica, analítica e experimental da macrossegregação inversa na solidificação**. 2004. Tese (Doutorado)–Universidade de Campinas, Campinas, 2004.

FERREIRA, Josiel Lobato. **Modelagem e simulação do escoamento e da adsorção de gases em uma coluna de leito fixo**. 2012. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Química)–Universidade Federal do Pará, Belém, 2012.

FLEMINGS, M. C. **Solidification processing**. New York: McGraw-Hill Book Co., 1974.

FLOOD, S. C.; HUNT, J. D. Columnar and equiaxed growth I: a model of a colunar front with a temperature dependent velocity. **Journal of Crystal Growth**, Philadelphia, v. 82, p. 543-551, 1987a.

FLOOD, S. C.; HUNT, J. D. Columnar and equiaxed growth II: equiaxed growth ahead of a columnar front. **Journal of Crystal Growth**, Philadelphia, v. 82, p. 552-560, 1987b.

FORTIN, G.; LOUCHEZ, P.; SAMUEL, F. H. Factors controlling heat transfer coefficient at the metal/mold interface during solidification of aluminum alloys an analytical study. **AFS Transaction**, Schaumburg, v. 92, p. 863-871, 1992.

FRANCO, N. B. **Cálculo numérico**. São Paulo: Person Prentice Hall, 2006.

GARCIA, A. Mathematical heat transfer model for the analysis of solidification of binary alloys, In: MULTI-PHASE FLOW AND HEAT TRANSFER SYMPOSIUM, 3., 1983, Miami Beach. **Proceedings...** Amsterdam; Oxford; New York; Tokyo: Elsevier Science Publishers, 1984. p. 541-603.

GARCIA, A. **Solidificação: fundamentos e aplicações**. Campinas: Unicamp, 2001. 399 p.

GARCIA, A. **Solidificação: fundamentos e aplicações**. 2. ed. Campinas: Unicamp, 2007. 400 p.

GARCIA, A.; CLYNE, T. W.; PRATES, M. Mathematical model for the unidirectional solidification of metals II: Massive molds. **Metallurgical Transactions**, Berlin, v. 108, p. 85, 1979.

GARCIA, A.; CLYNE, T. W.; PRATES, M. Mathematical model for the unidirectional solidification of metals I: cooled molds. **Metallurgical Transactions**, Berlin, v. 98, p. 449-453, 1978.

GARCIA, Leonardo Richeli. **Análise da evolução microestrutural e de propriedades mecânicas de ligas Sn-Ag e Sn-Bi para soldagem e recobrimento de superfícies**. 2012. 167 f. Tese (Doutorado)–Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2012.

GOMES, Laércio Gouvea. **Microestrutura dendrítica, macrossegregação e microporosidade na solidificação de ligas ternárias Al-Si-Cu**. 2012. 178 f. Tese (Doutorado)–Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2012.

GOMES, Rodrigo Cavalcanti Fabrino. **Simulação numérica da transferência de calor global na solidificação unidirecional transiente**. 2011. 91 f. Projeto de pesquisa (Graduação em Engenharia Mecânica)–Universidade de Brasília, Brasília, DF, 2011.

GOULART, Pedro Roberto. **Caracterização da microestrutura de solidificação de ligas Al – Fe e correlação com propriedades mecânicas**. 2010. 177 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica)–Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2010.

GOULART, Pedro Roberto. **Variáveis térmicas de solidificação, microestrutura, e propriedades mecânicas de ligas hipoeutéticas Al – Si**. 2005. 123 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica)–Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005.

GRIFFITH, R.; NASSERSHARIF, B. Comparison of one-dimensional interface-following and enthalpy methods for the numerical of phase change. **Numerical heat transfer: part B**, Oxford, v. 18, p. 169-187, 1990.

GUEIJMAN, Sérgio F.; SCHVEZOV, Carlos E.; ARES, Alicia E. Vertical and horizontal directional solidification of Zn-Al and Zn-Ag diluted alloys. **Materials transactions**, Sendai, v. 51, n. 10, p. 1861-1870, 2010.

HAMDI, S. *et al.* Method of lines. **Scholarpedia**, [S.l.], v. 2, n. 7, p. 2859, 2009. Disponível em: <http://www.scholarpedia.org/article/Method_of_lines>. Acesso em: 24 jun. 2014.

HILLS, A. W. D. A generalized integral: profile method for the analysis of unidirectional heat flow during solidification, **Trans. AIME**, New York City, v. 245, p. 1471, 1969.

HRYCAK, P. Problem of solidification with Newton's cooling at the surface. **A. I. ChE. Journal**, New York, v. 9, n. 5, p. 585-589, set. 1963.

IMSL numerical libraries. Houston: Rogue Wave Software, 2014. Version 7.1.0-2014. Disponível em: <<http://www.roguewave.com/products-services/imsl-numerical-libraries>>. Acesso em: 25 ago. 2014.

INFOMET. **Diagrama de fases**: 2015. Disponível em: <<http://www.infomet.com.br/>>. Acesso em: 14 set. 2015.

ISMAIL, A. *et al.* Numerical modelling of tsunami via the method of lines. **Engineering and Technology**, [S.l.], v. 32, p. 177–185, 2007.

JACKSON, K. A.; HUNT, J. D. Lamellar and rod eutectic growth. **Transactions of the AIME**, New York City, v. 236, p. 1129-1142, 1966.

JOSEPH, M. A.; NAGARAJAN, N. M.; RAVINDRAN NAIR, R. Studies on fatigue strength and porosity formation in aluminum silicon eutectic alloy subjected to modification and vibration during solidification. **AFS Transaction**, Schaumburg, v.130, p.1-8, 2001.

JUCÁ, P. C. S. Malhas adaptativas: implantação e comparação crítica dos métodos disponíveis. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA MECÂNICA, 12., 1993, Brasília, DF. **Anais...** Rio de Janeiro: ABCM, 1993. p.137-140.

KUMAR, K. T.; NAMBURU, R. R. Recent advances, trends and new perspectives via enthalpy-based finite element formulation for application to solidification problems. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, Hoboken, v. 30, p.803-820, 1990.

KURZ, W.; FISHER D. J. **Fundamentals of solidification**. Zurich: Trans Tech Publications, 1984.

KURZ, W.; FISHER D. J. **Fundamentals of solidification**. 3. ed. Zurich: Trans Tech Publications, 1992.

LAXMANAN, V. The Gibbs-Thomson effect during cellular and dendritic solidification. **Scripta Materialia**, Philadelphia, v. 37, n. 7, p. 955-962, 1997.

LONDON, A. L.; SEBAN, R. A. Rate of ice formation. **Trans. AIME**, New York City, v. 64, p.771, 1943.

MACHADO, L. F. G. *et al.* Modelagem matemática do processo de extração supercrítica: modelo de duas fases com equilíbrio não linear. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE SISTEMAS PARTICULARES, 34., 2013, Maceió. **Anais...** Maceió: UFAL, 2013. p. 1-10.

MANUTENÇÃO E SUPRIMENTOS. **Usos das ligas de alumínio**. [S.l.], 2012. Disponível em: <http://www.manutencaoesuprimentos.com.br/conteudo/6820-usos-das-ligas-de-aluminio/>>. Acesso em: 12 dez. 2014.

MARTIN, J. W. Precipitation Hardening. **Pergamon Press**, Oxford, 1968.

MARTINS, Marcelo Gonçalves. **Determinação do calor específico de ligas Al-Cu produzidas em um dispositivo de solidificação unidirecional vertical ascendente.** 2008. 86 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica)–Universidade Federal do Pará, Belém, 2008.

MEZA, Elisangela dos Santos. **Modelagem analítica e numérica da solidificação de ligas binárias:** análise de fatores de influência. 2012. 304 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica)–Universidade Estadual de Campinas, Campinas 2012.

MOORE, Walter J. **Físico-química.** Tradução Ivo Jordan. 4. ed. São Paulo: Edgard Blucher, 1976.

MOREIRA, A. L. *et al.* Espaçamentos dendríticos primários da liga Sn-5%Pb solidificada direcionalmente em um sistema horizontal. **Matéria**, Rio de Janeiro, v. 17, p. 1009-1023, 2012.

MOREIRA, Antonio Luciano Seabra *et al.* The columnar to equiaxed transition of horizontal unsteady-state directionally solidified Al-Si alloys. **Materials Research**, São Carlos, v. 17, p. 498-510, 2014.

MOUTINHO, Andréa Moreira. **Influência da convecção termossolutal na transição colunar – equiaxial de ligas de Al – Si sob condições unidirecionais e transitórias de extração de calor.** 2011. 72 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica)–Universidade Federal do Pará, Belém, 2011.

MOUTINHO, Daniel Joaquim da Conceição. **Análise da evolução microestrutural e da formação da macrosegregação e microporosidade na solidificação unidirecional transitória de ligas ternárias Al-Cu-Si.** 2012. 172 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica)–Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2012.

MOUTINHO, Daniel Joaquim da Conceição. **Influência dos parâmetros térmicos de solidificação na transição colunar/equiaxial em ligas do sistema Sn-Pb sob condições transitórias de extração de calor.** 2007. 94 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica)–Universidade Federal do Pará, Belém, 2007.

NEALE, M. J. **The tribology handbook.** 2. ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1995.

NI, J.; INCROPERA, F. P. Extension of the continuum model for transport phenomena occurring during metal alloy solidification: I. the conservation equations. **Pergamon**, Oxford, v. 38, n. 7, p. 1271-1284, 1995.

NOGUEIRA, M. R. *et al.* Espaçamentos dendríticos primários da liga Sn-5%Pb solidificada direcionalmente em um sistema horizontal. **Matéria**, Rio de Janeiro, v. 17, n. 2, p. 1009-1023, 2012.

OHNAKA, I. Mathematical analysis of solute redistribution during solidification with diffusion in solid phase, **Transation ISIJ**, [S.l.], v. 26, p. 1045-1051, 1986.

OHNO, A. Formation mechanism of the equiaxed chill zone in ingots. **Transactions of the Iron and Steel Institute of Japan**, [S.l.], v. 10, p. 459, 1976.

OKAMOTO, T.; KISHITAKE, K.; Dendritic Structure in Unidirectionally Solidified Aluminum, Tin, and Zinc Base Binary Alloys, **Journal of Crystal Growth**, Philadelphia, v. 129, p. 137-146, 1975.

OSÓRIO, W. R. R. *et al.* Mechanical properties as a function of thermal parameters and microstructure of Zn-Al casting. **Journal of Materials Processing Technology**, Philadelphia, v. 143/144, p. 703-709, 2003.

OYMAC, O.; SELCUK, N. Method of lines solution of time-dependent two dimensional navier-stokes equations. **International Journal for Numerical Methods in Fluid**, New York, v. 23, p. 455-466, jan. 1996.

ÖZISIK, M. N. **Boundary value problems of heat conduction**. New York: Dover Publication, 1968.

ÖZISIK, M. N. **Heat Conduction**. 2. ed. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1993.

PARIONA, Moisés Meza; MACHADO, Siliane; CHEUNG, Noé. Simulação numérica do processo de vazamento e de solidificação da liga Cu – 5% Zn em um molde permanente. **Sinergia**, São Paulo, v. 12, n. 1, p. 59-72, jan./abr. 2011.

PASCHKIS, V. Influence of properties on solidification of metals. **Trans. American Foudrymen's Society**, Ann Arbor, p. 54, 1947.

PASCHKIS, V. Rapport au Comité de Transfert de Chaleur. **American Foudrymen Society**, Ann Arbor, p. 23, 1945.

PASCHKIS, V. Solidification of cylinders. **Trans. American Foudrymen's society**, Ann Arbor, v. 61, p. 161, 1953.

PASCHKIS, V. Study on solidification of steel spheres. **Trans. American Foudrymen's society**, Ann Arbor, v. 1948, p. 373, 1956.

PEIXOTO, Leandro César de Lorena. **Microestrutura de solidificação e resistências mecânica e à corrosão de Ligas Pb-Sn diluídas**. São Paulo: Unicamp, 2009.

PERES, M. D. **Desenvolvimento da macroestrutura e da microestrutura na solidificação unidirecional transitória de ligas Al – Si**. 2005. 177 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica)–Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005.

PERES, M. D.; SIQUEIRA, C. A.; GARCIA, A. Macrostructural and microstructural development in Al-Si alloys directionally solidified under unsteady-state conditions. **Journal of Alloys and Compounds**, Philadelphia, v. 381, p. 168-181, 2004.

PERRONE, A. *et al.* Al-Sn thin films deposited by pulsed laser ablation. **Materials Science and Engineering C**, Philadelphia, v. 22, p. 465-468, 2002.

PHAM, Q. T. A fast, unconditionally stable finite-difference scheme for heat conduction with phase change. **International Journal Heat Mass Transfer**, Philadelphia, v. 28, n. 11, p. 2079-1084, 1985.

PINTO, José Carlos; LAGE, Paulo Laranjeira C. **Métodos numéricos em problemas de Engenharia Química**. Rio de Janeiro: UFRJ, 2001. (Série Escola Piloto em Engenharia Química).

POIRIER, D.; SALCUDEAN, M. On numerical method used in mathematical modeling of phase change in liquid metals. **Transaction of the ASME**, Philadelphia, v. 110, p. 562-570, 1988.

PRASADA, A.K. Das; K., MURTY, B.S.; CHAKRABORTY, M. Effect of grain refinement on wear properties of Al and Al-7%Si alloy. **Wear**, Philadelphia, v. 257, p.148-153, 2004.

PRATES, M. **Influência de la capacidade de extracción calórica del sistema metal/molde sobre el proceso de solidificación**. 1971. Tese (Doutoramento)–Universidad Nacional del Sur, Argentina, 1971.

PRATES, M.; DAVIES, G. J. **Solidificação e fundição de metais e suas ligas**. São Paulo: LTC/EDUSP, 1978.

QUARESMA, J. M. V. **Correlação entre condições de solidificação, microestrutura e resistência mecânica**. 1999. 322 f. Tese (Doutorado)–Universidade de Campinas, Campinas, 1999.

QUARESMA, J. M. V.; SANTOS, C. A.; GARCIA, A. Correlation between unsteady-state solidification conditions, dendrite spacings and mechanical properties. **Metallurgical and Materials Transactions**, Berlin, v. 31A, p. 3167-3178, 2000.

RABIN, Y.; KORIN, E. Na eficiente numerical solution for the multidimensional solidification (or melting) problem using a microcomputer. **International Journal Heat Mass Transfer**, Philadelphia, v. 36, n. 3, p. 673-683, 1993.

REINHART, G. *et al.* Investigation of columnar–equiaxed transition and equiaxed growth of aluminium based alloys by X-ray radiography. **Materials Science and Engineering**, Philadelphia, p. 413-414, 2005.

RHINES, F. N. **Phase diagrams in metallurgy: their development and application**. New York: Mc Graw-Hill Inc., 1956.

ROCHA, O. F. L., **Análise teórico-experimental da transição celular/dendrítica e da evolução da morfologia dendrítica na solidificação unidirecional em condições de fluxo de calor transitório**. 2003. 200 f. Tese (Doutorado)–Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2003.

ROCHA, O. F. L.; SIQUEIRA C. A.; GARCIA A. Cellular/dendritic transition during unsteady-state unidirectional solidification of Sn-Pb alloys. **Materials Science and Engineering A**, Philadelphia, v. 347, p. 59-69, 2003A.

ROCHA, O. L. *et al.* Coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde e variáveis térmicas na solidificação direcional horizontal da liga Al-6%Cu. **Holos**, Natal, v. 29, n. 5, 2013.

ROCHA, Otávio Lima *et al.* The columnar to equiaxed transition in the directional solidification of aluminum based multicomponent alloys. **REM: Revista Escola de Minas**, Belo Horizonte, v. 68, p. 85-90, 2015.

RODRIGUES, Jean Robert Pereira. **Efeito da composição nos parâmetros térmicos e estruturais de ligas Al-Mg solidificadas unidirecionalmente**. 2007. Tese (Doutorado)–Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 2007.

ROSA, D. M. **Estruturas celulares, transição celular/dendrítica e estruturas dendríticas na solidificação unidirecional transitória**. 2007. 198 f. Tese (Doutorado), Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2007.

ROSA, D. M. *et al.* Cellular growth during transiente directional solidification Pb–Sb alloys. **Journal of Alloys and Compounds**, Philadelphia, v. 422, p. 227-238, 2006.

ROSSITTI, Sérgio Mazzer. **Processos e variáveis de fundição**. São Paulo: Grupo Metal, 1993. Disponível em: <<http://www.grupometal.com.br/download/03.pdf>>. Acesso em: 23 ago. 2014.

RUAN, Y.; LIU, J. C.; RICHMOND, O. A deforming finite elemento method for analysis of alloy solidificaton problems. **Finite elements in analysis and desing**, Philadelphia, v. 12, p.49-63, 1993.

RUDLLE, R. W. **The solidification of casting**. London: The Institute of Metals, 1957.

SADIKU, M.; GARCIA, R. Methods of lines solution of axisymmetric problems. **Southeastcon Conference**, [S.l.], p. 527-530, abr. 2000.

SADIKU, M. N. O.; OBIOZOR, C. N. A. Simple introduction to the method of lines. **International journal of electrical engineering education**, Thousand Oaks, v. 37, p. 282-296, 2002.

SAHEB, N. *et al.* Effect of Ti addition on wear properties of Al-Si eutetic alloys. **Wear**, Philadelphia, v. 249, p. 656-662, 2001.

SAMARSKII, A. A. *et al.* Numerical simulation of convection/diffusion phase problems: a review. **International journal of heat mass transfer**, Philadelphia, v. 36, n. 17, p. 4095-4106, 1993.

SANTOS, Rezende Gomes dos. **Desenvolvimento de um método para análise da solidificação de metais em geometrias cilíndricas**. 1980. 212 f. Tese (Doutorado)–Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1980.

SANTOS, Rezende Gomes dos. **Transformações de fases em materiais metálicos**. São Paulo: Unicamp, 2006.

SCIAMA, G. Calcul du temps de refroidissement de jets cylindriques coules em moules metalliques. **Fonderie**, [S.l.], v. 218, p.138, 1964.

SCHIESSER, W. E.; GRIFFITHS, G. W. **A compendium of partial differential equation models: method of lines analysis with Matlab**. New York: Cambridge University Press, 2009. 489 p. Disponível em: <<http://ksu.edu.sa/sites/py/ar/mpy/departments/math/learnResources/ResourceCenter/Documents/ala.PDF>>. Acesso em: 10 out. 2014.

SHIH, Y. P. TSAY, S. Y. Analytical solutions for freezing a saturated liquid inside or outside cylinders. **Chemical Engineering Science**, Philadelphia, v. 26, p. 809-816, 1971.

SILVA, Bismark Luiz. **Parâmetros térmicos de solidificação, microestrutura e resistência mecânica de ligas eutéicas Sn-0,7%Cu-(xNi)**. 2013. Dissertação (Mestrado)–Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2013.

SILVA, Carlos Adriano Moreira. **Análise de um problema de difusão-convecção e reação em superfície baseado em um biossensor utilizando o método das linhas: modelagem matemática com camada de hidrogel**. 2013. Trabalho de conclusão de curso (Engenharia Química)–Universidade Federal do Pará, Belém, 2013.

SILVA, Elizeu Melo da. **Solução híbrida da equação de advecção: dispersão em meios porosos**. 2013. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química)–Universidade Federal do Pará, Belém, 2013.

SILVA, José Nazareno Santos da. **Projeto, conclusão e aferição de um dispositivo de solidificação unidirecional horizontal refrigerado à água**. 2007. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica)–Universidade Federal do Pará, Belém, 2007.

SILVA, Maria Adrina Paixão de Souza da. **Solidificação transitória de ligas hipomonotética e monotética do sistema Al-Bi**. 2008. 104 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica)–Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2008.

SILVA, Maria Adrina Paixão de Souza da. **Solidificação transitória de ligas dos sistemas monotéticos Al-Bi, Al-Pb e Al-In**. 2011. 145 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica)–Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2011.

SIQUEIRA, C.; CHEUNG, N.; GARCIA, A. Solidification thermal parameters affecting the columnar to equiaxed transition. **Metallurgical and Materials Transactions A**, Berlin, v. 33A, p. 2107-2118, 2002.

SIQUEIRA, C.; CHEUNG, N.; GARCIA, A. The columnar to equiaxed transition during solidification of Sn–Pb alloys. **Journal of Alloys and Compounds**, Philadelphia, n. 351, p. 126-134, 2003.

SIQUEIRA FILHO, C. A. **Influência de parâmetros térmicos de solidificação na transição colunar/equiaxial**. 2002. 204 f. Tese (Doutorado)–Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade de Campinas, Campinas, 2002.

SOUTHIN, R. T. Discussion of – Influence of Mechanical Stirring on Columnar to Equiaxed Transition in Aluminium-Copper Alloys. **Transactions of the Metallurgical of Society AIME**, New York City, v. 242, n. 10, p. 2240-2248, 1968.

SPIM JR, J. A.; GARCIA, A. A Modified Network Approach for Modeling Solidification of Complex Shaped Domains. **Numerical Heat Transfer: part B**, Oxford, v. 38, p. 75-92, 2000.

SPIM JR, J. A.; GARCIA, A. Modelagem numérica da solidificação baseada na analogia entre sistemas térmicos e elétricos. In: CONGRESSO DE ENGENHARIA E CIÊNCIAS DOS MATERIAIS, 10., 1995, Águas de Lindóia. **Anais...** São Paulo: Metallum, 1995. v. 2. p. 594-597.

SPIM JUNIOR, Jaime Alvares. **Aplicação da modelagem matemática na definição integral da solidificação área projeto ou programação de sistemas de fundição**. 1996. 253 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química)–Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1996.

SPINELLI, J. E. **Influência da convecção no líquido nas variáveis térmicas e estruturais na solidificação descendente de ligas Sn-Pb**. 2005. 189 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica)–Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005.

SPINELLI, J. E.; FERREIRA, I. L.; GARCIA, A. Influence of melt convection on the columnar to equiaxed transition and microstructure of downward unsteady-state directionally solidified Sn-Pb alloys. **Journal of Alloys and Compounds**, Philadelphia, v. 384, p. 217-226, 2004.

STEFANESCU, D. M. **Science and engineering of casting solidification**. New York: Kluwer academic/plenum publishers, 2002.

SWAMINATHAN, C. R.; VOLLER, V. R. A general enthalpy method for modeling solidification processes. **Metallurgical Transactions**, Berlin, v. 23B, p. 651-664, 1992.

TALER, J.; DUDA, P. Solution of nonlinear inverse heat conduction problems using method of lines. **Heat and Mass Transfer**, Berlin, v. 37, p. 147-155, maio 1999.

THERMO-Calc-Academic 5.0 limited version. [S.l.]: Thermo-Calc software AB, 2015a.

TUCCI, C. E. M. **Modelos hidrológicos**. Porto Alegre: UFRGS, 1998.

VISKANTA, R. Heat transfer during melting and solidification of metals. **Journal of Heat Transfer ASME**, Philadelphia, v. 110, p. 1205-1229, 1988.

VOLLER, V. R. Fast implicit finite-difference method for the analysis of phase change problems. **Numerical Heat Transfer: part B**, Oxford, v. 17, p. 155-169, 1990.

VOLLER, V. R.; CROSS, M. Accurate solutions of moving boundary problems using the enthalpy method. **International Journal of heat mass transfer**, Philadelphia, v. 24, p. 545-556, 1981.

VOLLER, V. R.; SWAMINATHAN, C. R. General Source-Based Method for solidification phase change. **Numerical heat Transfer**, Oxford, v. 19, p. 175-189, 1991.

WALTON, D.; CHALMERS, B. The origin of the preferred orientation in the colunar zone of ingots, **Transactions of the Metallurgical Society AIME**, New York City, v. 215, p. 447, 1959.

WANG, F. Y.; BECKERMANN, C. Prediction of columnar-to-equiaxed transition during diffusion-controlled dendritic alloy solidification. **Metallurgical and Materials Transactions**, Berlin, v. 25A, p. 1081, 1994.

YANG, S. *et al.* On cellular spacing selection of Cu-Mn alloy under ultra-high temperature gradient and rapid solidification condition. **Scripta Materialia**, Philadelphia, v. 42, p. 543-548, 2000.

YNOUE, Mário M. **Modelagem matemática da solidificação de ligas binárias com aplicação no cálculo da macrossegregação inversa**. 1992. 142 f. Dissertação (Mestrado)—Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade de Campinas, Campinas, 1992.

YUAN, G. C. *et al.* Study on crystallization and microstructure for new series of Al-Sn-Si alloys. **Materials Science and Engineering, A**, Philadelphia, v. 280, p. 108-115, 2000.