

VINICIUS BERTOLAZZI BISCUOLA

MODELO MATEMÁTICO HÍBRIDO DETERMINÍSTICO-ESTOCÁSTICO
PARA A PREVISÃO DA MACROESTRUTURA DE GRÃOS BRUTA DE
SOLIDIFICAÇÃO

Tese apresentada à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo para obtenção
do Título de Doutor em Engenharia

São Paulo

2011

VINICIUS BERTOLAZZI BISCUOLA

MODELO MATEMÁTICO HÍBRIDO DETERMINÍSTICO-ESTOCÁSTICO
PARA A PREVISÃO DA MACROESTRUTURA DE GRÃOS BRUTA DE
SOLIDIFICAÇÃO

Tese apresentada à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo para obtenção
do Título de Doutor em Engenharia

Área de concentração: Engenharia
Metalúrgica e de Materiais

Orientador: Prof. Dr. Marcelo de Aquino
Martorano

São Paulo

2011

FICHA CATALOGRÁFICA

Biscuola, Vinicius Bertolazzi

Modelo matemático híbrido determinístico-estocástico para a previsão da macroestrutura de grãos bruta de solidificação / Vinicius Bertolazzi Biscuola - São Paulo, 2011.

235 p.

Tese (Doutorado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais.

1.Modelos Matemáticos 2.Autômatos Celulares 3.Fenômenos de Transporte 4.Transformações de Fase I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia de Materiais II.t.

AGRADECIMENTOS

Ao professor e orientador Marcelo de Aquino Martorano pela oportunidade, paciência e tempo dispendido nesta longa trajetória.

Aos meus pais por todo o suporte e exemplos transmitidos.

À Marília, pela compreensão nas horas ausentes e por todo o incentivo.

RESUMO

As variáveis de processo determinam as propriedades dos produtos resultantes dos processos de fundição ou de soldagem, que são função da sua macro e microestrutura bruta de solidificação. Um dos parâmetros importantes para se determinar as propriedades de um produto é a posição da transição colunar-equiaxial (CET) e, por este motivo, o entendimento dos fenômenos físicos que causam esta transição é essencial. Com o intuito de se prever a formação da CET, surgiram os métodos empíricos e os modelos matemáticos, que são divididos em dois grandes grupos: modelos determinísticos e modelos estocásticos. Estes dois grupos foram bem estudados, porém nunca foram comparados entre si, particularmente em relação à previsão da posição da CET. O presente trabalho tem como um primeiro objetivo preencher esta lacuna através da comparação entre estes modelos. No entanto, o objetivo principal é apresentar, implementar e validar um novo modelo matemático, denominado de híbrido estocástico-determinístico (CADE -"Cellular Automaton Deterministic"), que combine características importantes e vantajosas de cada um dos dois grupos de modelos. Inicialmente, um modelo representante do grupo dos modelos estocásticos foi implementado e validado frente a resultados disponíveis na literatura. Durante esta validação, foi necessária a elaboração de um critério baseado na razão de aspecto dos grãos para a identificação da CET nas macroestruturas calculadas pelo modelo. Estes resultados foram então comparados com os resultados de modelos determinísticos para, após cuidadosa discussão, possibilitar a proposta e implementação do modelo híbrido. Os modelos determinísticos que utilizam o critério mecânico para prever o bloqueio de grãos colunares e a ocorrência da CET mostram regiões colunares em geral maiores que as previstas pelo modelo estocástico. Por outro lado, os modelos determinísticos que utilizam um critério de bloqueio a partir da interação do campo de concentração de soluto ao redor dos grãos prevêm uma CET em posições semelhantes às calculadas pelos modelos estocásticos. O modelo implementado no presente trabalho é capaz de prever a macroestrutura bruta de solidificação e ainda

utilizar as equações tradicionalmente empregadas nos modelos determinísticos, sem a necessidade de qualquer método extra para prever a posição da frente de crescimento colunar ou o seu bloqueio por grãos equiaxiais.

Palavras-chave: Modelos Matemáticos, Autômato Celulares, Fenômenos de Transporte, Transformações de Fase.

ABSTRACT

The processing variables determine many properties of the products obtained by casting and welding processes and these properties, on the other hand, are strongly affected by the as-cast micro and macrostructure. Particularly the position of the columnar-to-equiaxed transition (CET), which determines the amount of columnar and equiaxed grains in the macrostructure, has an important effect on the properties of as-cast parts. Therefore, understanding the important physical phenomena that cause and affect the formation of the CET plays a crucial role in predicting the as-cast macrostructure. To predict the CET formation, empirical methods and mathematical models have been developed. These models are frequently divided into two main groups: deterministic and stochastic. Both groups have been thoroughly studied, but a comparison between them was never attempted, especially regarding the prediction of the CET position. One of the main objectives of the present work is to fulfill this gap by carefully comparing these models. Nevertheless, the most important objective is to propose, implement, and validate a hybrid stochastic-deterministic model, referred to as CADE (Cellular Automaton Deterministic), that combines some important and well-known features of each model. Initially, a model from the stochastic group was implemented and validated using results available in the literature and then used to analyze the effects of some processing variables on the CET prediction. To carry out this analyzes, a criteria based on the aspect ratio of the grains was proposed and developed to identify the CET region from macrostructure images calculated by the model. The results were compared with those obtained by deterministic models and finally led to the development of the new proposed model. This new model has some characteristics from each group of mathematical models and, for this reason, was denoted as hybrid. A deterministic model based on a mechanical blocking criterion to block columnar grains and define the CET position showed, for the most part, larger columnar regions than those predicted by the stochastic model. A deterministic model with a solutal blocking criterion to predict the CET showed results similar to those calculated

with the stochastic model. The model proposed in the present work (CADE) was able to predict the as-cast macrostructure using the well-established deterministic equations, without the need for a new method to track columnar grains or predict their blocking by equiaxed grains.

Keywords: Mathematical Models, Cellular Automaton, Transport Phenomena, Phase Transformations.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1	- Energia livre em função da temperatura para um metal puro (Ohno, 1976).	37
Figura 2	- Energia livre total em função do raio para um pequeno super-resfriamento e um super-resfriamento maior (Shewmon, 1969).	39
Figura 3	- Representação esquemática da nucleação heterogênea sobre um substrato.	41
Figura 4	- Taxa de nucleação em função do super-resfriamento.	42
Figura 5	- Densidade de núcleos em função do super-resfriamento para o modelo de nucleação instantânea.	43
Figura 6	- Distribuição acumulada de densidade de núcleos em função do super-resfriamento segundo o modelo de nucleação contínua polinomial de Oldfield (1966).	44
Figura 7	- Função densidade de distribuição de super-resfriamentos críticos para nucleação proposta por Rappaz et al. (1986), e Thévoz, Desbiolles e Rappaz (1989).	45
Figura 8	- Modelo proposto por Greer et al. (2000), para as etapas de crescimento de um núcleo sobre um substrato de diâmetro φ .	46
Figura 9	- Distribuição medida do tamanho de partículas sobreposta à distribuição log-normal (Greer, 2003).	48
Figura 10	- Representação das estruturas de grãos que podem ser encontradas após a solidificação de ligas metálicas (Bower; Flemings, 1967).	49
Figura 11	- Representação do campo de soluto e conseqüente super-resfriamento constitucional presentes na frente de crescimento.	51

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 12	- Representação esquemática da teoria da nucleação heterogênea na zona de super-resfriamento constitucional (Spittle, 2006).	52
Figura 13	- Crescimento e destacamento de braços de dendritas (Hutt; StJohn, 1998).	53
Figura 14	- Representação esquemática do crescimento e destacamento de grãos segundo a teoria da separação (Ohno, 1975).	55
Figura 15	- Representação dos grãos no método de Monte Carlo (Spittle; Brown, 1989b)	57
Figura 16	- Exemplo de estrutura calculada pelo Método de Monte Carlo (Spittle; Brown, 1989b).	58
Figura 17	- Modelo de CA onde se utiliza o retângulo de crescimento.	61
Figura 18	- Modelo de CA onde o centro de crescimento não coincide com o centro da célula.	62
Figura 19	- Esquema do envelope dendrítico (octaedro irregular) com suas seis diagonais (D1 a D6) no modelo do CA em três dimensões.	63
Figura 20	- Microestrutura típica calculada pelo modelo de Ravindran, Brown e Spittle (1999).	66
Figura 21	- Representação esquemática dos modelos de difusão propostos por Rappaz e Thévoz (1987 a e b). (a) Representação do envelope dendrítico; (b) perfil de soluto calculado pelo primeiro modelo (Rappaz; Thévoz, 1987a); (c) substituição do cálculo do perfil pela camada de soluto com espessura δ (Rappaz; Thévoz, 1987b).	70
Figura 22	- Representação esquemática do crescimento colunar e equiaxial (Hunt, 1984).	71
Figura 23	- Velocidade de crescimento em função do gradiente de temperatura, mostrando as regiões colunares e equiaxiais (Hunt, 1984).	71

Gracias por visitar este Libro Electrónico

Puedes leer la versión completa de este libro electrónico en diferentes formatos:

- HTML(Gratis / Disponible a todos los usuarios)
- PDF / TXT(Disponible a miembros V.I.P. Los miembros con una membresía básica pueden acceder hasta 5 libros electrónicos en formato PDF/TXT durante el mes.)
- Epub y Mobipocket (Exclusivos para miembros V.I.P.)

Para descargar este libro completo, tan solo seleccione el formato deseado, abajo:

