

UTILIZAÇÃO DO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS NA SIMULAÇÃO DE PROCESSOS DE SOLIDIFICAÇÃO DE LIGAS METÁLICAS

**Suzimara Rossilho de Andrade
Rezende Gomes dos Santos**

Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica, Departamento de Engenharia de Materiais, CP: 6122, CEP.: 13083-970, Campinas, SP, Brasil. E-mail : suzi@fem.unicamp.br, rezende@fem.unicamp.br

Resumo

O trabalho analisa a aplicação do Método de Elementos Finitos na simulação do processo de solidificação de peças metálicas. O *software*, de aplicação genérica, Ansys é utilizado como ferramenta para resolução dos problemas. O Ansys é um programa que utiliza o Método de Elementos Finitos para a resolução de problemas mecânicos, e esse trabalho explora a sua aplicação na área térmica, mais especificamente, nos processos de transformação de fase. Simulações do processo de solidificação, das ligas Zn-2%Al e Al-4,5%Cu, são desenvolvidas, variando-se as formas e materiais dos moldes. As curvas de resfriamento obtidas numericamente, para o metal e o molde, são comparadas com resultados experimentais. Após a análise dos resultados são também apresentadas outras simulações com algumas variações em relação às já citadas com o objetivo de melhor demonstrar as possibilidades de aplicação do programa Ansys salientando sua capacidade de pré e pós - processamento.

Palavras-chave : Simulação, Solidificação, Ligas Metálicas.

1. INTRODUÇÃO

A análise matemática do processo de solidificação é bastante complexa, envolvendo equações diferenciais com condições de contorno não lineares, para as quais soluções analíticas exatas são raras e limitadas. Os métodos numéricos têm adquirido uma importância crescente nos últimos anos associada ao intenso desenvolvimento da área computacional. Os principais métodos numéricos utilizados para análises matemáticas de processos de solidificação são o Método das Diferenças Finitas (MDF), o Método de Elementos Finitos (MEF) e o Método dos Volumes Finitos (MVF). Basicamente, um modelo matemático deve tratar de três aspectos relativos ao fenômeno da solidificação : a transferência de calor no metal (líquido e sólido) e no molde, a liberação de calor latente durante a mudança de fase e a transferência de calor nas interfaces do metal com o molde, do metal com o meio ambiente e do molde com o meio ambiente. Quanto maior o rigor matemático aplicado no equacionamento e solução do problema, em cada um de seus aspectos, maior precisão terão os resultados.

O objetivo desse trabalho é desenvolver simulações numéricas do processo de solidificação de metais e ligas utilizando o software de aplicação genérica Ansys que resolve, numericamente, variados problemas mecânicos pelo Método de Elementos Finitos.

São desenvolvidas simulações da evolução térmica ocorrida no metal e no molde, durante a solidificação da liga Zn-2%Al em molde cilíndrico de aço, e da liga Al-4,5%Cu em molde

triangular de areia. Os resultados teóricos são, então, comparados com resultados obtidos experimentalmente.

2. SIMULAÇÃO TÉRMICA UTILIZANDO O ANSYS

A análise térmica desenvolvida pelo Ansys calcula a distribuição de temperatura e parâmetros térmicos relacionadas em um sistema ou componente. Os parâmetros térmicos de interesse são :

- distribuição de temperatura ;
- quantidade de calor ganha ou perdida ;
- gradientes térmicos;
- fluxos de calor .

A base para a análise térmica no Ansys é a equação de balanço de calor obtida a partir do princípio da conservação de energia.

$$\rho \cdot c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \{v\}^T \{L\} T \right) + \{L\}^T \{q\} = \ddot{q} \quad (1)$$

onde :
 ρ = densidade
 c_p = calor específico
 T = temperatura
 t = tempo

$\{L\} = \left(\frac{\partial}{\partial X}, \frac{\partial}{\partial Y}, \frac{\partial}{\partial Z} \right)$ = vetor operador

$\{v\} = (V_x, V_y, V_z)$ = vetor velocidade para transporte de calor

$\{q\}$ = vetor fluxo de calor

...

\ddot{q} = quantidade de calor gerado por unidade de volume. (*Ansys Theory Reference*, 1996)

A simulação pelo método de elementos finitos calcula as temperaturas nodais e a partir dessas obtém outros parâmetros térmicos.

O programa trabalha com os três principais modos de transferência de calor : condução, convecção e radiação. Além dos modos de transferência de calor pode-se simular efeitos como transformações de fase (que é o caso desse trabalho) e geração interna de energia (devido ao efeito Joule, por exemplo). A liberação do calor latente durante a solidificação é tratada através do método da entalpia.

O Ansys pode realizar a análise térmica tanto em regime transiente como em regime estacionário. Esse trabalho trata o processo de solidificação como um processo de regime transiente.

2.1 Construção do modelo

A construção do modelo de elementos finitos é a primeira e mais demorada parte do processo. O pré processamento de dados engloba a escolha do tipo de análise, tipo de elemento a ser utilizado, as constantes reais do problema, as propriedades físicas dos materiais e a geometria do sistema metal/molde.

O Ansys possui mais de 100 tipos diferentes de elementos para serem escolhidos. O tipo de elemento determina o grau de liberdade do problema, a disciplina a que se refere

(estrutural, térmica, magnética, mecânica de fluidos etc.), define se o modelo será bi ou tridimensional, qual tipo de simetria será considerado, etc. O elemento utilizado nas simulações desse trabalho é o **Plane 77**, esse elemento possui apenas um grau de liberdade, a temperatura. É um elemento bidimensional que pode gerar dois tipos de simetria : uma "tipo espelho" a partir de um eixo escolhido e outra rotacional em torno de um eixo.

A maioria dos elementos requer propriedades físicas dos materiais que eles estão representando dependendo de sua aplicação. Essas propriedades podem ser lineares ou não-lineares, isotrópicas ou anisotrópicas, constantes ou dependentes da temperatura. Dentro de uma mesma análise pode-se ter vários conjuntos de propriedades que definem os múltiplos materiais que podem compor o modelo. As propriedades relevantes na análise térmica são: condutibilidade térmica, densidade, calor específico e entalpia.

Definidas as propriedades, o próximo passo é gerar um modelo de elementos finitos que se adeque à geometria do sistema a simular. Descreve-se a forma geométrica do sistema e instrui-se o Ansys para, automaticamente, dividi-lo em elementos e nós, controlando-se o tamanho desejado.

As malhas utilizadas nas simulações são fixas e a forma é definida pelo programa, para cada sistema metal/molde simulado, a partir do tipo e tamanho de elemento utilizado.

Especificar as condições de contorno e os intervalos de tempo são as próximas tarefas. Inicialmente, no caso da análise térmica, o tipo de análise é escolhido entre transiente e estacionário. Aplica-se , então, as condições iniciais e de contorno do problema , que nesse caso, englobam temperatura inicial do material metálico e do molde, valor do coeficiente de transferência de calor por convecção e indicação das regiões onde ocorre esse tipo de fluxo (interface molde/meio envolvente) e temperatura do meio que envolve o sistema. Finalmente, se escolhe o intervalo de tempo utilizado nos cálculos e o tempo total de simulação e o programa está pronto para iniciar a solução do problema.

2.2 Condições de contorno e simplificações adotadas.

Os dois casos analisados nesse trabalho foram tratados, basicamente, da mesma maneira. Como já citado, o mesmo tipo de elemento foi utilizado, **Plane 77**, sendo diferente, entretanto, o tipo de simetria proposto. Outra semelhança entre os modelos, é que foram tratados bidimensionalmente e utilizaram a mesma adaptação descrita a seguir para que os resultados apresentados fossem os mais próximos possíveis aos experimentais.

No processo real de solidificação, o contato térmico, na interface metal/molde, não é perfeito devido a contração do metal líquido após a transformação de fase, o processo de transferência de calor pode ser encarado como sendo unicamente realizado através de um filme fino gasoso que preenche o espaço, denominado *gap*, entre as superfícies (Prates, 1978). A formulação proposta é :

$$q_N = h_i \cdot (T_{is} - T_{im}), \quad (2)$$

onde : h_i = coeficiente Newtoniano de transferência de calor (determinado, na maioria das vezes, experimentalmente) [W/K.m²],

T_{is} = temperatura do material metálico solidificado [K],

T_{im} = temperatura da parede interior do molde [K].

Essa contração do metal, e conseqüentemente, esse processo de transferência de calor não são considerados pelo Ansys, que considera contato perfeito entre os metais e transferência de calor apenas por condução, sendo a convecção tratada apenas na interface entre o molde e o meio que o envolve.

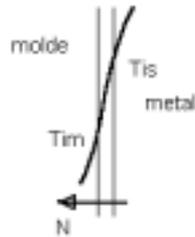


Figura 1 : Transferência Newtoniana de calor.

Para contornar esse problema, foi introduzido entre o metal e o molde um terceiro material (Andrade, 1999), ou pode-se dizer um segmento do molde, de espessura muito pequena, cujo coeficiente de transferência de calor Newtoniano é transformado em condutibilidade térmica relacionando-se as equações de condução e convecção :

- Equação da condução :

$$q = \frac{k}{\Delta x} (T_1 - T_2) \quad (3)$$

- Equação da convecção :

$$q = h_i (T_1 - T_2) \quad (4)$$

Obtendo-se:

$$\frac{k}{\Delta x} = h_i \quad e, \quad k = h_i \cdot \Delta x, \quad (5)$$

onde : k = condutibilidade térmica [W/K.m]

Δx = tamanho do *gap* simulado [m].

Para cada caso, o coeficiente de transferência h_i é transformado em condutibilidade térmica, pela equação 5, que é atribuída como uma das propriedades do material que compõem o pequeno espaço, entre o material e o molde, criado em cada modelo.

3. MATERIAIS E MÉTODOS

A liga Zn-2%Al foi solidificada utilizando-se um molde cilíndrico de aço-carbono, material condutor que funciona como absorvedor de calor do sistema. Para garantir a predominância do fluxo de calor radial, as bases inferior e superior do molde foram isoladas por material refratário a base de sílica.

O molde apresenta uma pequena conicidade para facilitar o procedimento de desmoldagem. O diâmetro médio interno do molde é de 60mm, externo de 160mm e 180mm de altura .

No ensaio foram obtidos perfis de temperatura em três pontos do material metálico, sendo que os termopares foram posicionados em um mesmo plano perpendicular ao eixo do molde e em posições diferentes em relação ao centro. A liga foi fundida em um cadinho de carbetto de silício, revestido internamente por uma pintura de material refratário para evitar algum tipo de contaminação, e vazada a uma temperatura, aproximadamente, 10% maior que a temperatura

líquidus. As curvas foram registradas por termopares tipo K conectados a um registrador de dados digital que armazenou os dados que depois foram descarregados em um micro.

Na segunda experiência, a liga Al-4,5%Cu foi solidificada em um molde triangular de areia com resina de cura a frio.

O registrador com os termopares tipo K também foram utilizados nesse experimento. O molde consistia em um triângulo equilátero com paredes de espessura de 50mm e com paredes internas de 80mm de comprimento .

A liga foi fundida, também, em um cadinho de carvão de silício recoberto por massa refratária. Antes do vazamento o molde foi aquecido a uma temperatura de aproximadamente 150°C para evaporação de água que poderia causar acidentes decorrentes do contato com o alumínio líquido. Durante o vazamento, a temperatura do molde era de aproximadamente 50°C, e a liga foi vazada a uma temperatura cerca de 10% superior a temperatura *líquidus* .

Tabela 1 : Propriedades termofísicas das ligas utilizadas

Propriedade	Al-4,5%Cu	Zn-2%Al	Referência
Densidade no estado sólido [kg/m ³]	2600	6820	Poirier et al, 1987; Pehlke et al, 1982
Densidade no estado líquido [kg/m ³]	2450	6400	Poirier et al, 1987; Pehlke et al, 1982
Calor específico no estado sólido [J/kg K]	1100	489	Sahn e Hansen, 1984; Pehlke et al, 1982
Calor específico no estado líquido [J/kg K]	900	525	Sahn e Hansen, 1984; Pehlke et al, 1982
Temperatura <i>Líquidus</i> [°C]	646	402	Swaminathan, 1994
Temperatura <i>Sólidas</i> [°C]	548	382	Swaminathan, 1994
Condutibilidade Térmica [W/mK]	200 - 548 °C 100 - 646 °C	114 - 382 °C 84 - 402 °C	Voller e Sundarraj, 1995; Birch, 1990
Calor Latente [J/kg]	390000	112200	Voller e Sundarraj, 1995; Birch, 1990

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

As curvas teóricas de resfriamento da liga Zn-2%Al obtidas através da simulação no Ansys estão comparadas a seguir com as curvas obtidas experimentalmente (figura 2). Durante a experiência, monitorou-se a evolução térmica da liga em solidificação através de termopares posicionados a uma mesma altura do cilindro em três posições diferentes em relação ao centro: a 1mm da interface metal/molde, a 15mm da interface e no centro do cilindro.

O superaquecimento adotado foi da ordem de 10% acima da temperatura *líquidus* da liga, sendo que a temperatura de vazamento (T_v) foi de 443°C, e adotou-se a temperatura inicial do molde como sendo a temperatura ambiente (26°C). Foram utilizados valores variáveis com a temperatura para o coeficiente de transferência de calor Newtoniano (h_i), (tabela 2). O coeficiente convectivo de transferência de calor na interface molde/meio foi considerado constante e igual a 90W/m²K.

No caso da liga Al-4,5%Cu o calor era extraído pelas paredes do molde de areia, sendo que as faces superior e inferior foram, também, isoladas com material refratário.

A simulação foi realizada a partir de um corte da seção triangular transversal do sistema metal/molde e as curvas térmicas experimentais registradas por termopares localizados em um mesmo plano, em diferentes posições do metal. No modelo numérico utilizou-se um valor

constante de coeficiente de calor Newtoniano obtendo-se resultados teóricos satisfatórios quando comparados aos resultados experimentais (figura 3).

O valor adotado para o coeficiente de transferência de calor Newtoniano foi de $500\text{W/m}^2\text{K}$, e o valor do coeficiente convectivo, na interface molde/meio foi de $80\text{W/m}^2\text{K}$.

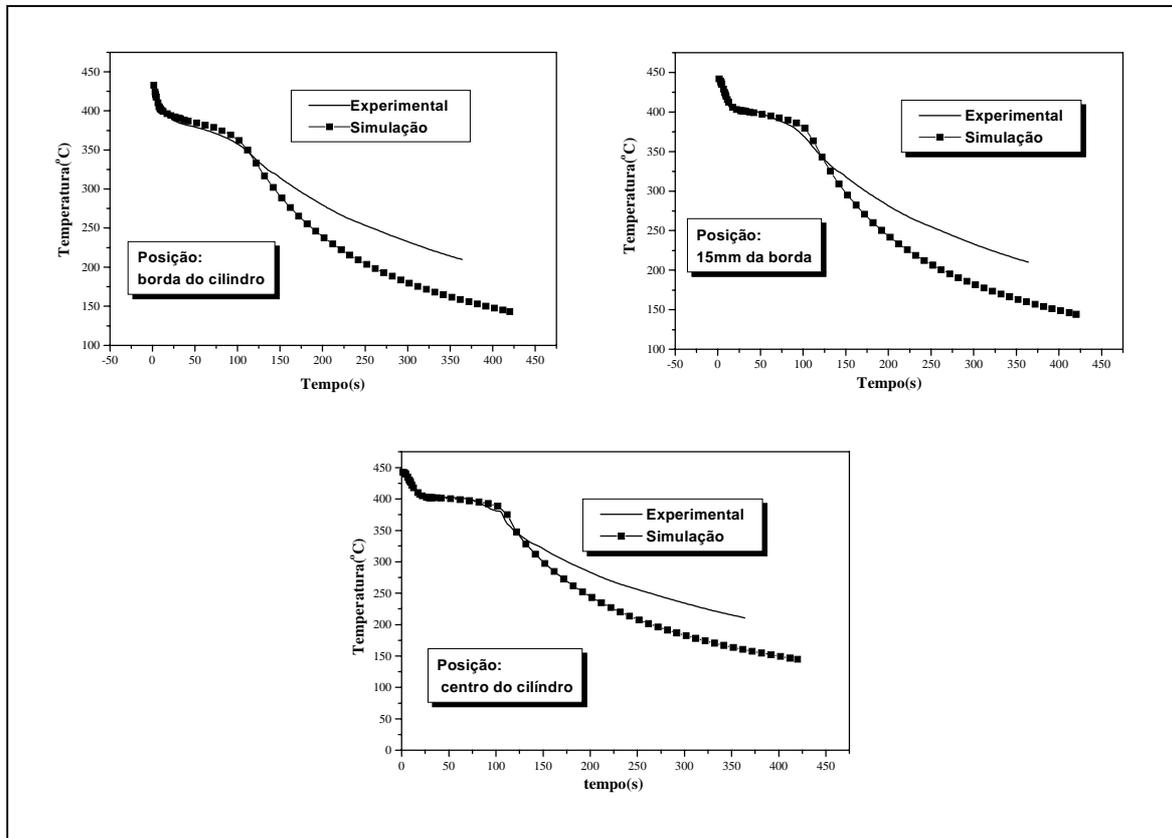


Figura 2: Curvas experimentais e simuladas da solidificação radial de um lingote cilíndrico de 60mm de diâmetro da liga Zn-2%Al, considerando-se h_i variável no tempo

Tabela 2 : Variação do coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde durante a solidificação da liga Zn-2%Al em molde cilíndrico de aço com extração de calor radial.

Temperatura. ($^{\circ}\text{C}$)	h_i ($\text{W/m}^2\text{K}$)
120	500
250	500
382	900
402	1000
443	2000

Os valores dos coeficientes foram estimados a partir de trabalhos anteriores referentes a sistemas metal/molde semelhantes (Amstalden, 1995; Melo,1996; Osório, Quaresma, Neto, Garcia; 1998).

As curvas teóricas referentes à simulação da solidificação da liga Zn-2%Al apresentam valores muito próximos aos experimentais durante o período de solidificação, e vai se distanciando da curva experimental durante o resfriamento do material já solidificado (figura 2).

Vários fatores têm influência sobre o resultado teórico, como por exemplo as propriedades do material metálico utilizado, as condições de contorno adotadas pelo modelo numérico, as propriedades do molde e os coeficiente de transferência de calor nas interfaces metal/molde e molde/meio envolvente.

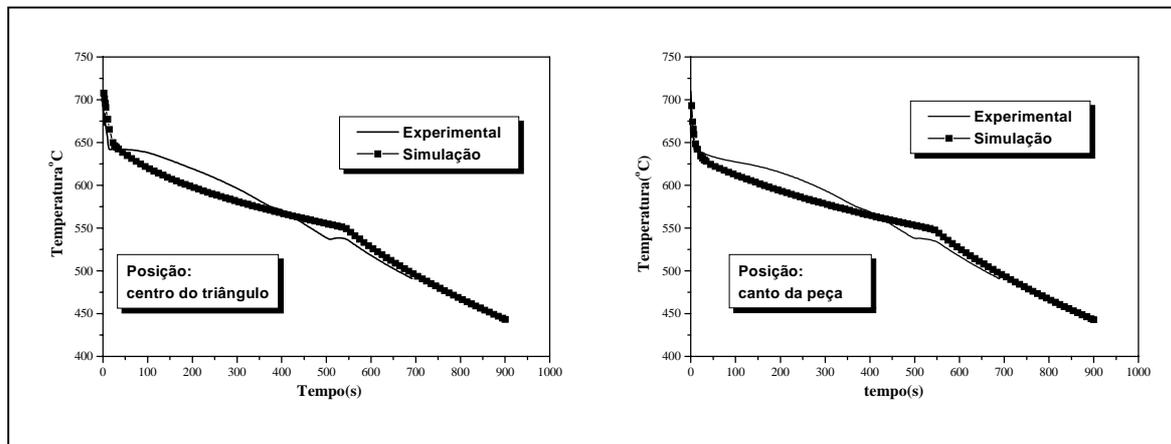


Figura 3 : Curvas experimentais e simuladas da solidificação da liga Al-4,5%Cu em molde triangular de areia.

As propriedades dos materiais metálicos, tanto no estado líquido como no sólido, são dependentes da temperatura e os valores nem sempre são totalmente conhecidos. Nesses dois estados encontram-se valores diferentes das propriedades termofísicas em diferentes fontes de informação, isso pode causar erros nos resultados teóricos, pois o grau de precisão dos dados físicos utilizados em qualquer modelagem matemática é de grande importância, influenciando os resultados muito significativamente.

As condições de contorno adotadas podem, também, ser uma fonte de erro. No caso da solidificação da liga Zn-2%Al, o molde era cilíndrico e as bases superior e inferior foram isoladas com material refratário para garantir a predominância de fluxo de calor através da parede do molde. Na simulação consideramos o molde de tamanho infinito para garantirmos fluxo radial de calor e não o isolamento por material cerâmico. Outra condição de contorno adotada que pode não estar representando totalmente a realidade é o coeficiente de transferência de calor por convecção entre o molde e o meio. Esse coeficiente é adotado como sendo constante, entretanto pode sofrer variações devido a um possível aumento da temperatura ambiente ao redor do molde que, no caso da simulação, não se altera.

No caso da solidificação em molde de areia os valores obtidos com a simulação diferem, no máximo, em 5% dos valores experimentais. Nesse caso a solidificação ocorre bem mais lentamente que no caso do molde de aço, ocorrendo, praticamente, uma homogeneização da temperatura da peça antes da mudança de estado (Andrade, 1999). Devido a essa solidificação ocorrer de forma lenta e mais perto do equilíbrio, um valor constante do coeficiente h_i foi suficiente para obtermos resultados teóricos satisfatórios.

Os modelos obtidos com a aplicação do Ansys apresentam vantagens relacionadas com suas ferramentas de pós - processamento, que permitem analisar, através de imagens que representam a peça em sua forma real, a evolução da solidificação em função do tempo. Como exemplos, na figura 4 são apresentadas as peças simuladas em determinados instantes mostrando a evolução do processo de solidificação. Nesse caso, os intervalos de temperatura que compreendem as regiões sólida, pastosa e líquida estão representadas por tons diferentes de cinza, mas pode-se obter qualquer coloração desejada para cada intervalo de temperatura.

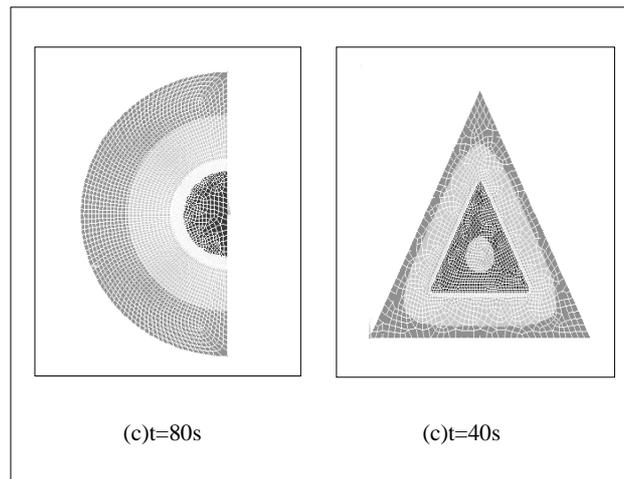


Figura 4 : Visualização da evolução da solidificação : (a) - solidificação da liga Zn-2%Al (após 80s), (b) - solidificação em molde de areia da liga Al-4,5%Cu (após 40s).

5. CONCLUSÕES

Comparando-se os resultados experimentais com os resultados das simulações realizadas com o Ansys conclui-se que o programa pode efetuar, com uma boa margem de segurança, a modelagem de processos de solidificação de ligas metálicas. Apesar de alguns resultados apresentarem algumas diferenças entre as curvas teóricas e experimentais, nota-se que não houve comprometimento dos resultados até o final da solidificação, sendo que os maiores erros ocorrem somente durante o resfriamento da peça já solidificada.

Além dos confiáveis resultados teóricos obtidos na simulação de processos de solidificação das ligas metálicas, o programa apresenta vantagens relacionadas com pré e pós - processamento que tornam conveniente sua utilização. Como exemplos dessas vantagens pode-se citar as facilidades de programação quanto a definição da geometria desejada e a capacidade de tratamento bidimensional e tridimensional dos problemas a serem analisados.

A adaptação utilizada para reproduzir o efeito do *gap* de ar formado na interface metal/molde, se mostrou eficiente e, portanto, pode-se considerar que o programa Ansys pode ser utilizado também na estimativa de valores do coeficiente de transferência de calor Newtoniano. A partir de propriedades físicas bem definidas de ligas metálicas e resultados experimentais de processos de solidificação, o programa pode avaliar, se necessário, esse coeficiente a partir do ajuste de curvas teóricas a curvas de solidificação obtidas experimentalmente.

Finalmente, conclui-se que, o programa apresentou bons resultados nos casos analisados e os resultados das simulações podem ser, portanto, utilizados nos cálculos de vários parâmetros importantes que determinam as propriedades de uma peça que passou por um processo de fundição, como por exemplo, localização e dimensão de poros, os tempos de solidificação local e conseqüentemente as distâncias entre os espaçamentos interdendríticos. E, ainda, considerando-se a possibilidade de tratamento tridimensional e as facilidades de construção dos modelos, pode-se utilizar o programa na otimização de processos de fundição quanto a forma de vazamento, grau ideal de superaquecimento, material do molde utilizado, projeto de alimentadores etc.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Amstalden, J. F., 1995, "Análise da formação de coquilhamento inverso e do número de nódulos de grafita durante a solidificação de ferros fundidos nodulares hipoeutéticos", Dissertação (Mestrado), Faculdade de Engenharia Mecânica, UNICAMP, Campinas, S.P., Brasil, 112p.
- Andrade, S. R., 1999, " Utilização do método de elementos finitos para simulação de processos de solidificação de ligas metálicas", Dissertação (Mestrado), Faculdade de Engenharia Mecânica, UNICAMP, Campinas, S.P., Brasil, 68p.
- *Ansys Manual Guide*, 8.ed., New York : SAS IP, Inc., 1998. Cap. 1: Ansys Thermal Analysis Guide, Cap. 4 : Ansys Elements Reference, Cap. 6: Ansys Theory Reference.
- Birch, J., 1990, Castings Manager, Zinc Development Association, New Alloys for Zinc Casting, *Materials & Design*, vol. 11.
- Melo, Mírian L. N. Motta, 1996,"Análise numérico/experimental da formação de microporosidades durante a solidificação de ligas de alumínio", Tese (Doutorado),: Faculdade de Engenharia Mecânica, UNICAMP, Campinas, S.P., Brasil, 253p.
- Osório, W. R. R., Quaresma, J. M. V., Neto, M. F., Garcia, A., 1999," Estrutura dendrítica e parâmetros térmicos na solidificação de ligas Zn-Al" , em : CBECIMAT - Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais, Curitiba, Brasil.
- Prates, M., Davies, G.J. , 1978 "Solidificação e fundição de metais e suas ligas", São Paulo, LTC/EDUSP.
- Pehlke, R. D., et al, 1982, "Summary of Thermal Properties for Casting Alloys and Mold Materials" , Michigan : University of Michigan.
- Poirier, D. R., Uem, K., Maples, A. L., 1987, "A thermodynamic prediction for microporosity formation in aluminium-rich Al-Cu alloys" *Metall. Trans.*, vol.18A, p. 1979-1987.
- Sahn, P. R., Hansen, P. N., 1984, "Numerical Simulation and Modeling of Casting and Solidification Processes for Foundry and Casthouse", Aachen, Ed. CIATF.
- Swaminathan, C. R., Voller, V. R., 1992, "A general enthalpy method for modeling solidification processes", *Metall. Trans. B*, vol. 23B, p. 651-664.