

DESENVOLVIMENTO DE MODELO NUMÉRICO E CORRELAÇÃO EMPIRICA PARA A PREVISÃO DE CARACTERÍSTICAS MECÂNICAS DE PEÇAS FUNDIDAS

Resumo: 12020

Resumo: *O estudo do fenômeno da solidificação em ligas Al-3,5%Cu associado ao desenvolvimento de um modelo numérico de transferência de calor em geometria cilíndrica, permitiu a caracterização mecânica de lingotes solidificados sob diferentes condições de resfriamento. A caracterização mecânica foi realizada por uma correlação empírica entre taxa de solidificação e a microdureza (Vickers) local. O modelo numérico foi aferido com curvas tempo vs temperatura obtidas por termopares instalados no centro dos lingotes. Utilizando-se das simulações pode-se observar a correlação entre a velocidade e o gradiente na frente de solidificação com a transição colunar equiaxial para diferentes condições de resfriamento, nesse caso uma relação matemática da literatura foi utilizada sobre os resultados gerados no modelo numérico, apresentando boa concordância. Os resultados finais gerados pelo modelo numérico, correspondem a mapas de microdureza para as diferentes condições de solidificação.*

Palavras Chaves: Solidificação, Modelagem numérica, Espaçamento dendrítico secundário, Propriedades Mecânicas.

1. INTRODUÇÃO

O controle morfológico em uma peça bruta de fusão é essencial para qualquer processo de solidificação. As características da transformação líquido-sólido, como os gradientes de temperatura, a velocidade de crescimento e a taxa de solidificação variam de processo para processo sendo também função do tempo e do espaço (geometria). O entendimento dessas características com o auxílio de ferramentas computacionais e suas relações com as micro e macroestruturas permitem sua previsão e controle. Com a velocidade e o gradiente de solidificação obtidos pelo modelo e uma relação obtida da literatura pode-se prever as regiões de transição colunar-equiaxial obtendo assim, a previsão da estrutura morfológica de uma peça.

A taxa de solidificação pode ser relacionada com o espaçamento dendrítico secundário (EDS) e seu resultado comparado com os obtidos na literatura, sendo usada como método de aferição do modelo numérico e permitindo o seu relacionamento com a microdureza local.

2. MODELO NUMÉRICO

Um dos métodos mais utilizados e estudados para o desenvolvimento de modelos numéricos que simulam o processo de transferência de calor na solidificação de metais é o Método de Diferenças Finitas (MDF). Um melhoramento e otimização prática do MDF para o desenvolvimento do sistema

tridimensional consistem na aplicação da analogia de sistemas térmicos com circuitos elétricos de resistores e capacitores. Nesse caso utilizou-se um modelo desenvolvido em trabalhos anteriores, (Spim, 1996, Spim 1997 e Spim, 2000).

Esse modelo foi aferido com curvas tempo vs temperatura obtidas por termopares instalados no centro de lingotes de geometria cilíndrica. O sistema cilíndrico experimental, Fig. (1), foi utilizado para diferentes condições de resfriamento. Essas condições foram obtidas variando-se os materiais da parede e da base dos moldes, como mostra a Tab. (1), sendo adotados, para cada condição, diferentes coeficientes de transferência de calor, os quais foram anteriormente aferidos (Pitol, 2001). Na Figura (2) (b) e (c), por exemplo, são visualizadas as evoluções das isotermas *solidus* e *liquidus*, determinadas pelo modelo numérico, com a utilização de um coeficiente de transferência de calor de 200 W/m²K (sistema de areia).

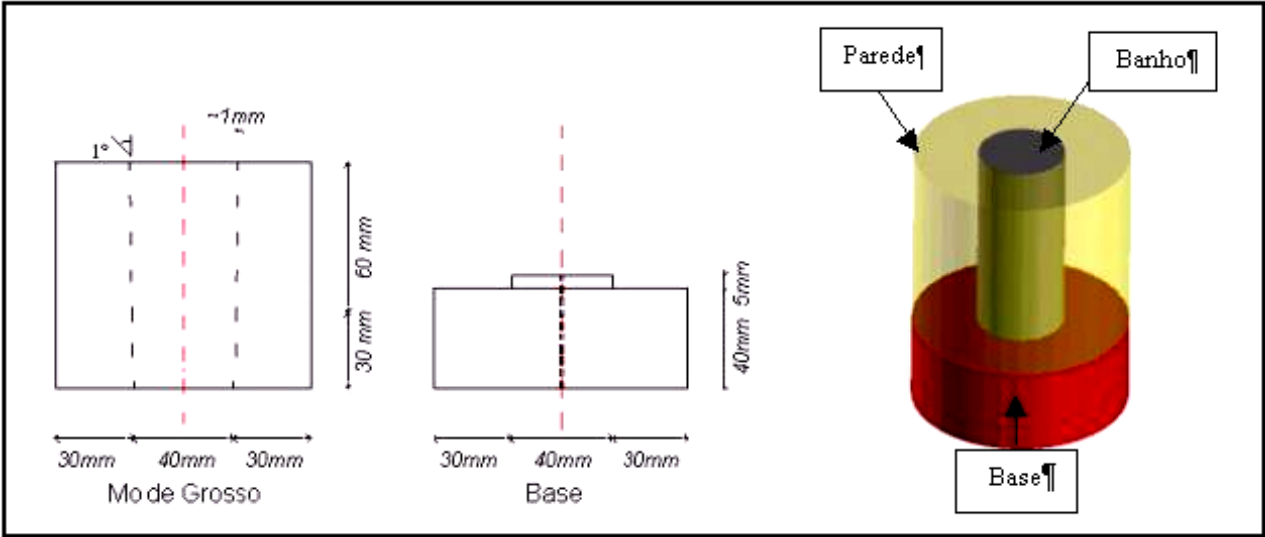


Figura 1: Sistema cilíndrico experimental e modelo para simulação.

Tabela 1: Identificação, distribuição e temperaturas características.

CP	Sistema		Coeficiente de transferência de calor (W/m ² K) – aferidos na simulação		Temperaturas (obtidas experimentalmente)		
	Base	Parede	Parede do molde	Base do molde	Ambiente	Vazamento	Super-resfriamento ΔT (%)
01	Areia	Areia	200	200	22	762	107(14)
02	Areia	Cobre	200	2000	36	760	115(18)
03	Aco	Areia	1000	200	22	762	107(14)

3. TRANSIÇÃO COLUNAR EQUIAXIAL

As morfologias de grão normalmente encontradas na solidificação são a colunar e a equiaxial. O crescimento equiaxial se caracteriza por apresentar orientação aleatória, crescendo em todas as direções. Por outro lado, a estrutura se apresenta de forma colunar se o fluxo de calor é unidirecional (pelo menos localmente). A forma estrutural mista só acontece se for possível nuclear e crescer grãos equiaxiais à frente da interface de crescimento colunar, provocando uma transição entre os modos de crescimento (Kurz, 2001).

A determinação do ponto onde ocorre a transição colunar equiaxial (TCE) é importante para o planejamento do processo e para que se possa projetar as propriedades mecânicas do produto.

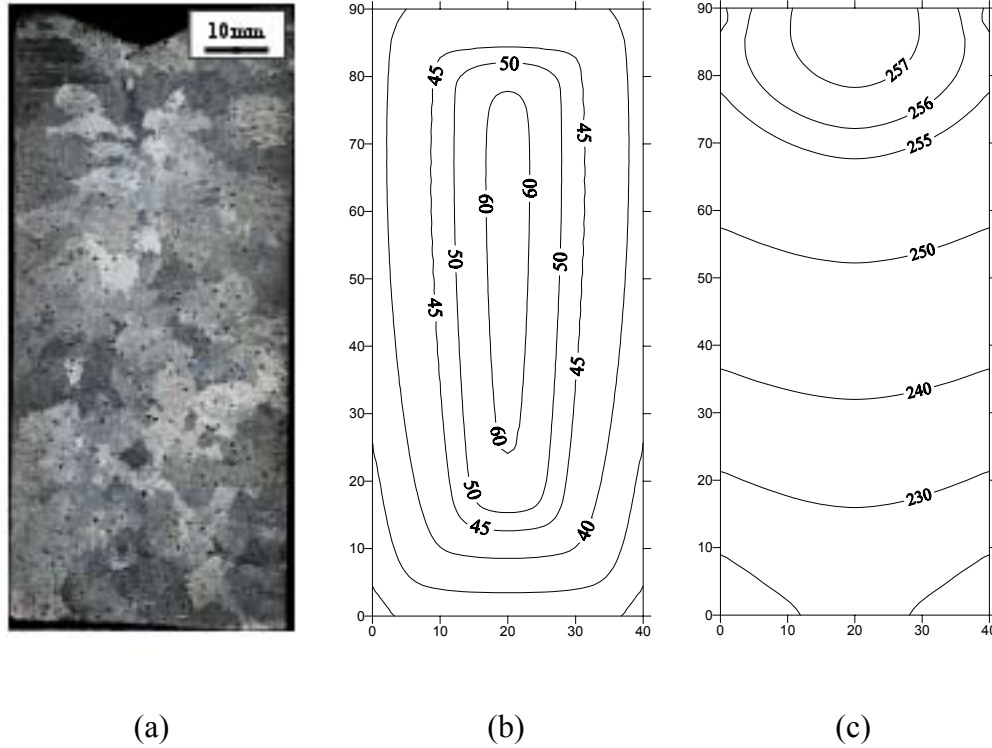


Figura 2: Corpo de prova 1 - (a) a macroestrutura, (b) isothermas *liquidus* e (c) isothermas *solidus*.

3.1. Modelos de Transição Colunar Equiaxial

A base para o entendimento da TCE é o crescimento das dendritas colunares. A difusão do conjunto de dendritas é responsável pelo super-resfriamento da zona líquida à frente das pontas dendríticas, que por sua vez podem permitir a nucleação dos grãos equiaxiais. Dessa forma um modelo de TCE deve levar em conta o fenômeno do crescimento e nucleação.

Embora se possa antecipar a tendência da transição colunar equiaxial pela observação qualitativa de todos os fatores de influência, a previsão quantitativa dessa transição exige a completa compreensão de todos os mecanismos físicos envolvidos. O campo térmico, por exemplo, é afetado significativamente pelo crescimento competitivo - colunar e equiaxial. Uma vez que o crescimento colunar é condicionado pelo movimento das isothermas características, *liquidus* e *solidus*, enquanto o crescimento equiaxial à frente da interface colunar altera o campo de temperatura pela liberação de calor latente. Alguns modelos consideram os crescimentos colunar e equiaxial estacionários, permitindo chegar-se a uma correlação entre a composição da liga, parâmetros térmicos da solidificação e densidade de núcleos. A transição colunar equiaxial pode ocorrer progressivamente para uma dada liga em função de alterações ou no gradiente de temperatura ou na velocidade da frente colunar (Flood, 1987).

Três condições de crescimento podem ocorrer: (1) completamente colunar, (2) colunar e equiaxial e (3) completamente equiaxial. Segundo Kurz et al (2001), se a distância média de crescimento das dendritas colunares é maior que o diâmetro dos grãos equiaxiais, haverá suficiente direcionalidade para reconhecer em parte um crescimento colunar. O resultado final da TCE para uma dada distância entre núcleos, é (Ziv, 1989):

Para estrutura completamente colunar:

$$G_L > 0,617 \cdot (100 \cdot N_0)^{1/3} \cdot \left[1 - \frac{(\Delta T_N)^3}{(\Delta T_C)^3} \right] \cdot \Delta T_C \quad (1)$$

Para estrutura completamente equiaxial

$$G_L < 0,617 \cdot (N_0)^{1/3} \cdot \left[1 - \frac{(\Delta T_N)^3}{(\Delta T_C)^3} \right] \cdot \Delta T_C \quad (2)$$

Onde N_0 representa o número de núcleos por unidade de volume, ΔT_N é o super-resfriamento efetivo nos pontos de nucleação (K), e ΔT_C o super-resfriamento na frente colunar (K), sendo que:

$$\Delta T_C = -8\Gamma m(1-k) \frac{C_0 v}{D} \quad (3)$$

Onde Γ é o coeficiente Gibbs-Thomson, (K.m), k o coeficiente de distribuição, D o coeficiente de difusão de soluto no líquido (m^2/s), m a inclinação da linha *liquidus*, C_0 a concentração de soluto (%).

Dessa forma, a comparação dos resultados obtidos pelas equações acima com os resultados das simulações permitirão, não somente a caracterização da transição colunar equiaxial mas a verificação da capacidade do modelo desenvolvido em relação a previsão da velocidade e do gradiente de solidificação.

4. ESPAÇAMENTO DENDRÍTICO SECUNDÁRIO

Vários modelos foram desenvolvidos para representar o espaçamento dendrítico primário e secundário. Os EDS dependem da taxa de resfriamento e do tempo local de solidificação (t_{SL}), que corresponde ao tempo de passagem das isothermas sólidos e líquidos por uma determinada posição, no caso de solidificação unidirecional, t_{SL} pode ser relacionada na forma (Osório, 2002):

$$t_{SL} = \frac{\Delta T}{G_L v_L} = \frac{\Delta T}{\dot{T}} \quad (4)$$

onde ΔT é o intervalo de solidificação para condições fora do equilíbrio, e o espaçamento dendrítico secundário é usualmente expresso por relações do tipo:

$$\lambda_2 = C(t_{SL})^a \quad (5)$$

Segundo estudos, para uma liga Al 4,5%Cu pode-se esperar uma relação do tipo:

$$\lambda_2 = 7,5(t_{SL})^{0,39} \quad (6)$$

Essa relação foi adotada neste trabalho para averiguar a eficiência do modelo numérico em determinar a taxa de solidificação. As diferenças entre as composições das ligas, de 4,5 para 3,5% Cu, não produzem diferenças significativas nos resultados.

5. PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

Foram realizadas medições de EDS e microdureza Vicker em dez corpos de prova para diferentes condições de solidificação, sendo que nesse trabalho são mostrados apenas os mais representativos, Tab. (1) e Tab. (2). EDS e a microdureza foram medidos nas regiões horizontais e verticais (Fig. (3)) nos diferentes corpos de prova.

Para a determinação dos gradientes e velocidades utilizados na determinação da transição colunar equiaxial foram feitas aquisições, por simulação, das temperaturas na região horizontal central e

vertical dos corpos de prova para 5 tempos diferentes. Esses dados foram comparados com as isotermas de temperatura *liquidus*, sendo que:

$$\dot{T} = G \cdot V \Rightarrow \frac{\Delta T}{\Delta X} \cdot \frac{\Delta X}{\Delta t} = \frac{\Delta T}{\Delta t} \quad (7)$$

onde \dot{T} é a taxa de resfriamento (K/s), G é o gradiente na frente da frente de solidificação (K/mm) e V a velocidade da frente de solidificação (mm/s).

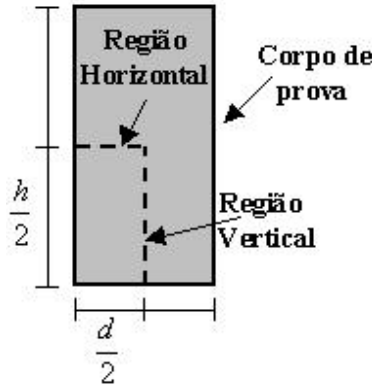


Figura 3: Regiões de análise pelo modelo numérico.

A contagem do número de grãos (N_0) foi feita em uma área de 100mm^2 . Para uma região equiaxial considerou-se que cada grão possuía o formato de uma esfera de forma que se pudesse obter o seu volume. Dividindo 1000mm^3 pelo volume de uma esfera e, descontando a metade do volume das esferas da face obteve-se o número de esferas por unidade de volume. O mesmo procedimento foi realizado para as regiões colunares, nesse caso, considerando os grãos como cilindros.

6. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Na Tabela (2) são apresentados os resultados gerais obtidos no trabalho, onde se observam N_0 , gradientes e velocidades de solidificação. N_0 foi medido conforme procedimento exposto anteriormente, os gradientes e as velocidades de solidificação dos sistemas foram simulados. Mostra-se também, os gradientes calculados segundo a literatura (Eq. (1) e (2)) para a disposição da morfologia do sólido (colunar ou equiaxial). Na Tabela (2), apresenta-se também os valores de EDS e a Microdureza local, medidos para cada sistema.

Na análise da transição colunar equiaxial do corpo de prova 2, Tab. (2), para uma velocidade de solidificação inicial na região horizontal de $1,84\text{ mm/s}$, o gradiente deve ser maior que $2,38\text{ K/mm}$ para que haja uma região totalmente colunar e, menor que $0,51\text{ K/mm}$ para se obter uma região totalmente equiaxial. O gradiente inicial simulado para este corpo de prova é de $2,9\text{ K/mm}$, o que permite afirmar sobre a existência de uma zona colunar nesta região, comprovado pela Fig (4). Nesta figura os valores de gradiente variam com a distância da parede, mostrando três regiões distintas destacadas por linhas verticais; uma região totalmente colunar, uma região de transição colunar equiaxial e uma região totalmente equiaxial. Para a região vertical, o gradiente deve ser menor que $0,51\text{ K/mm}$ para que haja um crescimento totalmente equiaxial, o que é comprovado pelo gradiente simulado na vertical ($0,44\text{ K/mm}$) e pela macrografia da Fig. (4) onde não há a formação de grãos colunares.

Os mesmos resultados podem ser observados no corpo de prova 3, Tab (2) e Fig. (5). Nesse sistema, há uma região totalmente colunar vertical quando o gradiente é maior que $0,71\text{ K/mm}$ e uma totalmente equiaxial para valores menores que $0,15\text{ K/mm}$.

Os gráficos do corpo de prova 1 não são mostrados por não caracterizarem transição colunar equiaxial, o que pode ser comprovado na Fig. (2) e pelos valores de gradiente calculados, mostrados na Tab. (2).

Tabela 2: Resultados obtidos nos corpos de prova.

	cálculo		Simulação				Cálculos		Ensaaios		
Corpo Prova	Estrut.	N ₀	Gradiente próximo às paredes (k/mm)		Velocidade próxima a parede (mm/s)		Gradiente na frente da frente de solidificação calculado (Ziv, 1989) (K/mm)		EDS	Microdureza	
			Horiz.	Vert.		Iniciais					
1	Equiax.	19	0,18	0,16	Horiz.	1,2	Colunar	GL>0,70	66,81	51	
							Equiaxial	GL<0,15			
					Vert.	1,03	Colunar	GL>0,65	68	52	
							Equiaxial	GL<0,14			
2	Colunar	392	2,9	0,44	Horiz.	1,84	Colunar	GL>2,38	17,32	64,7	
							Equiaxial	GL<0,51			
	Equiax.	240			Vert.	2,51	Colunar	GL>2,36	25,47	56,08	
							Equiaxial	GL<0,51			
3	Equiax.	21	0,26	3,18	Horiz.	1,16	Colunar	GL>0,71	45,44	56,98	
							Equiaxial	GL<0,15			
	Colunar	110			Vert.	0,546	Colunar	GL>0,85	18,21	61,44	
							Equiaxial	GL<0,18			

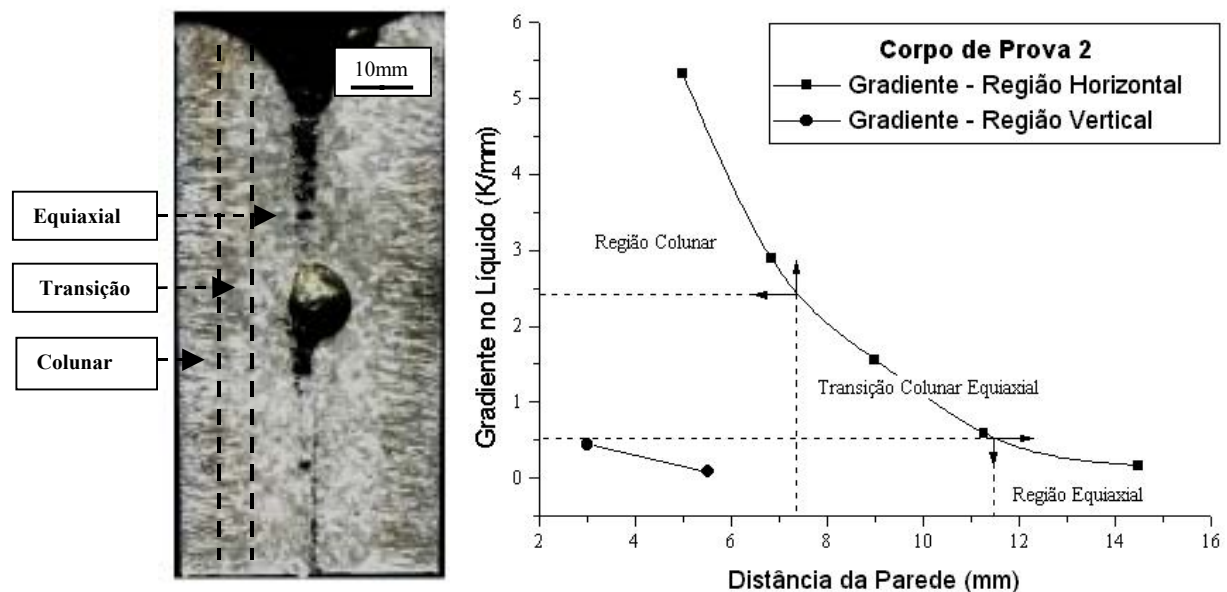


Figura 4: Relação entre o gradiente do modelo e a microestrutura para o corpo de prova 2.

Na análise da correlação entre o EDS e a taxa de solidificação, Fig (6a), observa-se a diminuição do EDS com o aumento da taxa de solidificação simulada pelo modelo, seguindo a tendência observada em literatura, dada pela Eq. (6). Isso permite afirmar que o modelo é capaz de garantir uma boa aproximação tanto das velocidades e gradientes de solidificação, comprovados pelo cálculo da transição colunar equiaxial, quanto da taxa de solidificação, comprovada pela relação com o EDS.

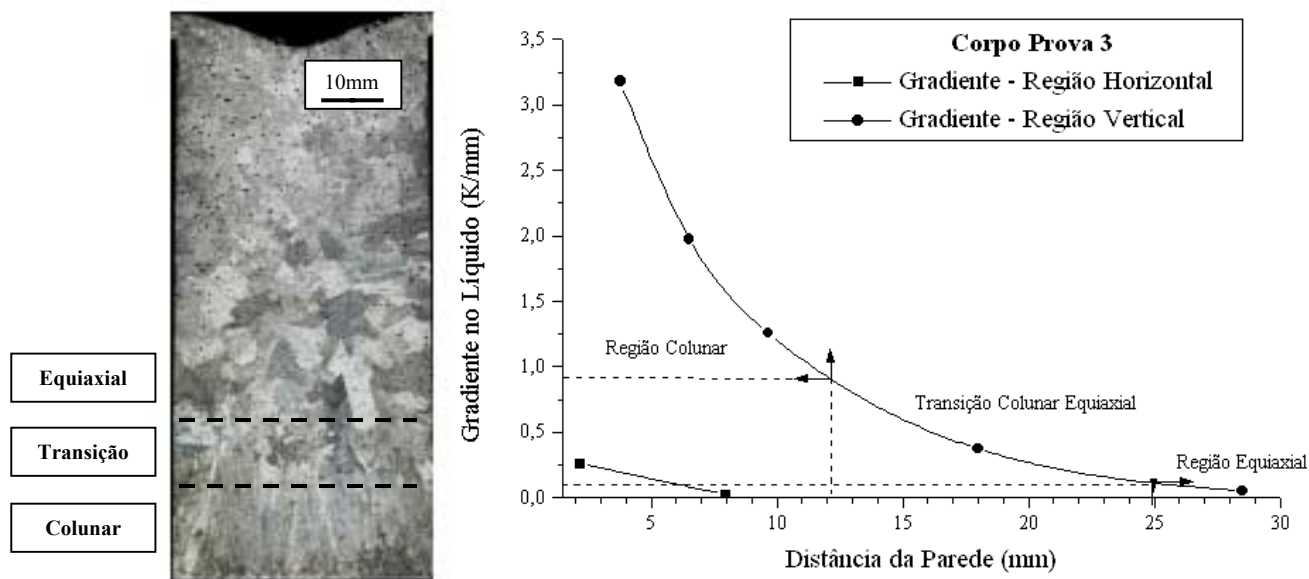


Figura 5: Relação entre o gradiente do modelo e a microestrutura para o corpo de prova 2.

Plotando a taxa de solidificação pela microdureza local, Fig (6b) observa-se uma tendência que pode ser representada por uma relação empírica do tipo:

$$\text{Microdureza}(HV) = 59,15 \cdot \dot{T}^{0,108}$$

Essa relação empírica foi adicionada aos cálculos da taxa de solidificação, no programa numérico, permitindo a obtenção do mapeamento da microdureza na peça. Esse mapeamento é mostrado na Fig (7) junto com a microestrutura dos corpos de prova 1 e 3.

Na Fig. (7) pode-se observar uma diminuição da microdureza da lateral para o centro da peça, seguindo a tendência da diminuição da taxa de solidificação o que é comprovada pelo aumento do espaçamento dendrítico secundário.

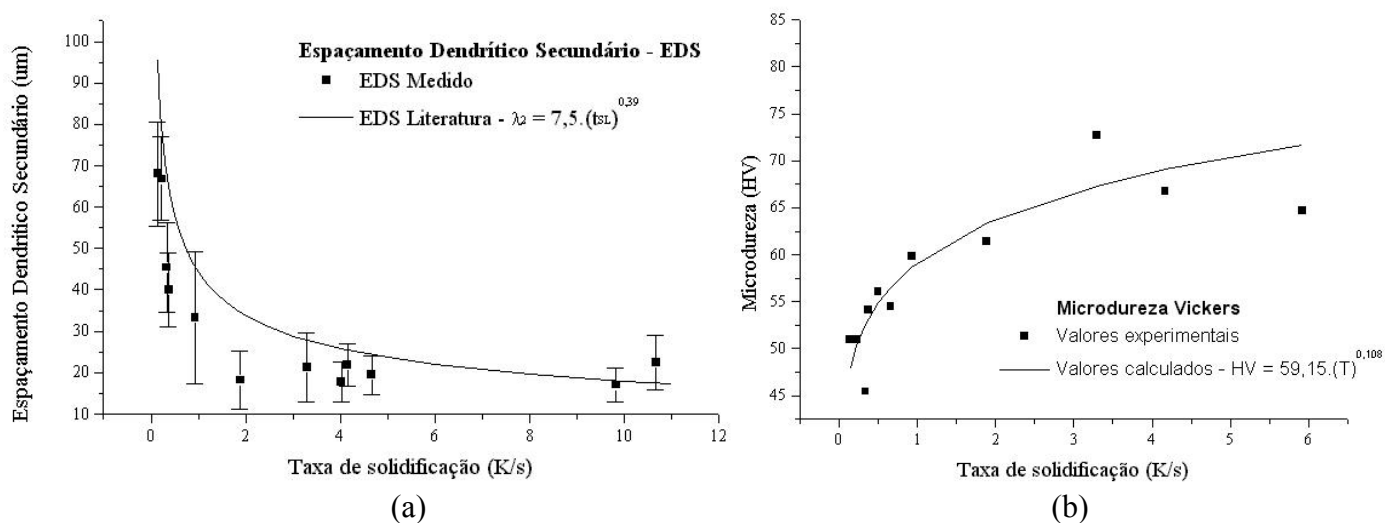


Figura 6: (a) Dados experimentais comparados com os obtidos por equação empírica, Eq. (6), (b) variação da microdureza com a taxa de solidificação seguindo uma tendência empírica.

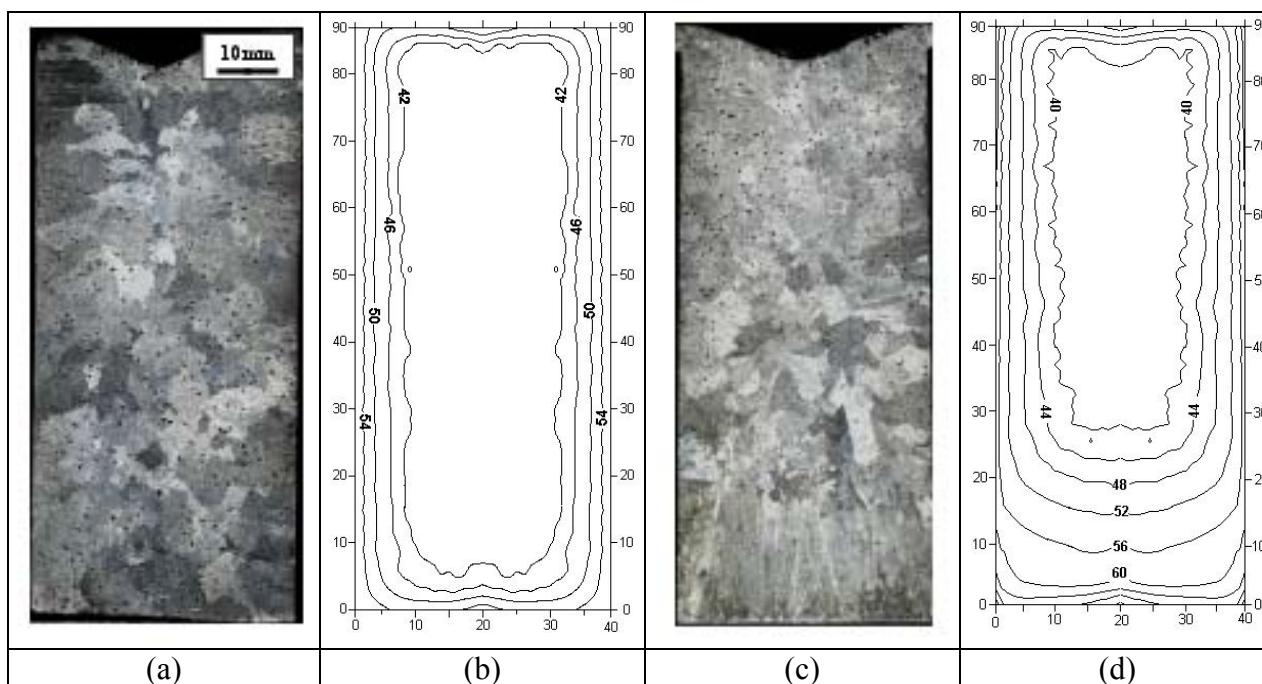


Figura 7: Curvas geradas pelo programa para os corpo de prova 1 e 3, sendo que em (a) e (c) são mostradas as macrografias respectivas a estes corpos de prova, e em (b) e (d) as respectivas curvas de microdureza Vickers obtidas por simulação.

Os resultados de simulação foram confrontados com os resultados dos ensaios de microdureza Tab. (3) e são mostrados na Fig. (8). Os resultados mostram uma boa aproximação dos valores reais e simulados.

Tabela 3 – Valores de microdureza Vickers.

Ponto	Microdureza Vickers (HV)	
	Medida	Simulada
1	45,27	43,07
2	43,89	42,57
3	38,95	41,89
4	40,10	39,95
5	43,89	39,95

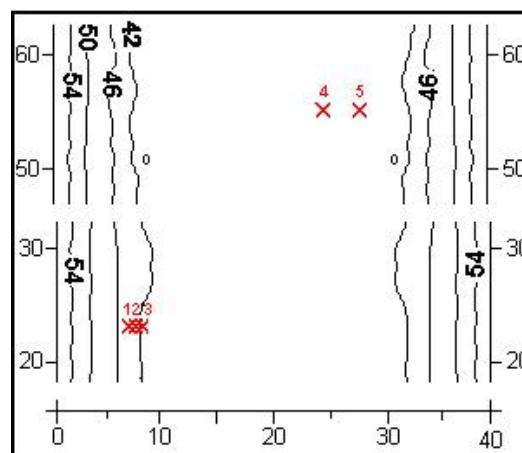


Figura 8: Aferição dos valores de microdureza para o corpo de prova 1.

7. CONCLUSÃO

Os resultados apresentados pelo modelo desenvolvido mostraram-se satisfatórios com as diferentes condições observadas na literatura como a previsão da morfologia, os espaçamentos dendríticos secundários e os parâmetros influentes no fenômeno de solidificação, como as velocidades das frentes *solidus* e *liquidus*, e os gradientes térmicos. A equação empírica que relaciona a taxa de solidificação com a microdureza (Vickers) local, apresentada nesse trabalho, se mostrou eficiente quando comparadas com os resultados reais obtidos nos lingotes solidificados. O presente trabalho apresentou um importante passo para a pesquisa que concerne ao desenvolvimento de softwares que farão a previsão das características mecânicas obtidas em peças da indústria de fundição.

8. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a CNPq, a FAPERGS e a CAPES pelas bolsas e recursos técnicos.

9. REFERÊNCIAS

- Flood, S.C., Hunt, J.D., 1987, "Columnar and Equiaxed Growth", *Journal of Crystal Growth* N° 82, North-Holland, Amsterdam, pp. 543-551.
- Kurz, W.; Benzençon, C.; Gäumann, M.; 2001, "Columnar to equiaxed transition in solidification processing". *Science and Technology of Advanced Materials*, Vol.: 2, pp. 185-191.
- Osório, W. R. ; Garcia, A., 2002, "Modeling dendritic structure and mechanical properties of Zn-Al alloys as a function of solidification conditions". *Materials Science and Engineering*. A325, pp.103-111.
- Pitol, A.B., (2001), "Análise numérica e experimental da solidificação das ligas Al 3,5%Cu e AA356". Dissertação de Mestrado, UFRGS/PPGEM, Porto Alegre, 100 págs.
- Spim Jr., J.A. & Garcia, A., 2000, "*Numerical Analysis of Solidification of Complex Shaped Bodies: Coupling of Mesh Elements of Different Geometries*", *Materials Science & Engineering A*, V.277, pp.198-205.
- Spim, J. A; et al; 1997, "An optimization of The finite difference method for modeling solidification of complex shaped domains", *Materials Engineering Department, State University of Campinas, UNICAMP– Campinas, S. P. Brazil; Journal of the Braz.Soc. Mechanical Sciences - RBCM*, V.XIX, No. 3, pp. 392-409;
- Spim, J. A., Jan (1996); "Aplicação da modelagem matemática na definição integral da solidificação para projeto ou reprogramação de sistemas de fundição", Tese de doutorado; UNICAMP/FEM/DEMA, 241 págs.
- Ziv, I., Weinberg, F., 1989, "The Columnar-to-Equiaxed Transition in Al 3 Pct Cu", *Metallurgical Transactions B*, Vol.: 20B, pp. 731-735.

DEVELOPMENT OF NUMERIC MODEL AND EMPIRIC CORRELATION TO FORECAST MECHANICAL CHARACTERISTICS OF CASTINGS

Eduardo Felipe Folle^[1]
Wilson Fogazzi da Silva Jr.^[2]
Alexandre Pitol Boeira^[3]
Jaime Alvares Spim^[4]

FEDERAL UNIVERSITY OF RIO GRANDE DO SUL

Av. Bento Gonçalves, 9500 / Cx.P. 15.021
91501-970 – Porto Alegre – RS / Brasil
Fone / FAX: (0xx) (51) 3316-6142

ABSTRACT

The study of solidification phenomenon of Al-3,5%Cu alloy and the development of cylindrical numeric models, allowed the characterization of the relationship between the rates involved during the solidification and the spacing dendritic arms with the correlation between the spacing dendritic and the local micro-hardness. The numeric model was checked with experimental results and the columnar to equiaxed transition was confirmed with the comparison of literature models. The results of hardness were measured in the ingots obtained at the laboratory. The objective of this article is to present a numeric modelling in the form of programming routine, which foresees the mechanical characteristic (hardness) of the material as function of the solidification conditions.

KEY WORDS

Numerical Model, Solidification, Mechanical Characteristics

[1] Master's degree student PPGEM / LAFUN / UFRGS

[2] Master's degree student PPGEM / LAFUN / UFRGS

[3] Doctorate degree student UNICAMP

[4] Professor LAFUN/UFRGS