

OTIMIZAÇÃO DE MALHA NUMÉRICA PARA A SIMULAÇÃO DA SOLIDIFICAÇÃO DE PEÇAS FUNDIDAS

Vinicius Karlinski de Barcellos

UFRGS / CT / LAFUN – Av. Bento Gonçalves, 9500 – Poa/RS. vkbeng@yahoo.com.br

Cristian Pohl Meinhardt

UFRGS / CT / LAFUN – Av. Bento Gonçalves, 9500 – Poa/RS. cristianm@weg.com.br

Jaime Alvares Spim Jr.

UFRGS / CT / LAFUN – Av. Bento Gonçalves, 9500 – Poa/RS. spim@vortex.ufrgs.br

Resumo: O presente trabalho objetivou o desenvolvimento e o emprego de uma malha numérica cilíndrica para a simulação da solidificação em uma peça fundida. Objetivou-se nesse modelo uma otimização de malha que determinasse uma maior precisão de acoplamento em uma geometria específica, no caso cilíndrica. Posteriormente, utilizou-se um software comercial sem a otimização de malha e comparou-se os resultados gerados nesse software e com o modelo proposto, esses resultados também foram comparados com os resultados obtidos na monitorização térmica do resfriamento da ligas A356, em molde de areia. Os resultados comprovaram a validade da malha numérica desenvolvida, e a melhoria da precisão na comparação com os resultados obtidos. Os resultados observam a necessidade do desenvolvimento de softwares inteligentes capazes de reconhecer diferentes geometrias e adaptar malhas otimizadas, garantindo maior aplicabilidade de modelos numéricos na indústria de fundidos.

Palavras-chave:

Fundição, otimização de malha numérica, modelagem numérica, geometria cilíndrica.

1. INTRODUÇÃO

Com o avanço tecnológico, a implementação da modelagem numérica em sistemas de computadores, vem sendo empregada nas indústrias com o intuito de otimizar o custo de produção e a qualidade final do produto. A utilização dessa tecnologia permite prever defeitos e imperfeições no projeto, eliminando o ultrapassado método de tentativa e erro. A simulação do processo de solidificação, atualmente não tem sido utilizada apenas para entender o processo tradicional de fundição, mas também utilizada para definir a correta especificação das propriedades físicas e mecânicas dos materiais.

Um dos métodos bastante utilizado e estudado para o desenvolvimento de modelos numéricos que simulem 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 (Spim, J. A et al, 1997).

A maleabilidade e flexibilidade apresentada na analogia do MDF com redes elétricas são validadas com a observação da facilidade de mapear peças complexas dentro do espaço tridimensional. Em decorrência desta complexidade, o equacionamento dos cálculos numéricos em regiões da peça com geometria aparentemente de difícil solução, incentiva o uso de técnicas mais dinâmicas para o mapeamento térmico do sistema. A funcionalidade e a estabilidade do sistema na simulação valem-se do equilíbrio entre a velocidade de trabalho do computador e o refino do mapeamento físico da peça, ou seja, do erro numérico apresentado nos resultados.

Uma das áreas da ciência da modelagem numérica que recebe atualmente a maior concentração de esforços por parte de seus profissionais, está no pré-processamento. Mais especificamente na geração de malha ou no desenvolvimento de algoritmos computacionais para identificação de geometrias e acoplamento de malhas numéricas. O objetivo deste desenvolvimento está em se criar uma malha numérica, gerada por um simulador, a qual representará a geometria com o menor quantidade de elementos sem que se perca a precisão no cálculo do fenômeno. O foco será a redução no tempo de simulação computacional.

A modelagem da solidificação se popularizou por apresentar uma série de vantagens. Dentre as quais, a modelagem destaca-se por permitir a previsão do perfil térmico de uma peça ao longo do processo de fundição, como a localização dos pontos quentes, e validar os projetos de sistemas de alimentação e massalotagem. A maior dificuldade nessa modelagem, está no fato de que o coeficiente de transferência de calor entre o metal e o molde, principal condição de contorno de tal processo, não é constante. Sabe-se que sua evolução depende de inúmeras características e propriedades do metal fundido, do molde e dos parâmetros de processo. Por apresentar inúmeras variáveis que influenciam em seu comportamento, torna-se uma das principais dificuldades encontradas para simular com precisão o fenômeno de solidificação.

Tabela 1. Nomenclatura

ρ	Densidade do material [kg/m ³]	L	Calor latente do material [J/kg]
C	Calor específico do material [J/kg.K]	f_s	Fração solidificada [%]
T	Temperatura [K]	t	Tempo [s]
$x, y \text{ e } z$	Coordenadas do espaço vetorial [m]	T_f	Temperatura de fusão [K]
K	Condutibilidade térmica do material [W/m.K]	T_L	Temperatura liquidus [K]
$\&$	Termo fonte da equação de diferenças parciais	K_o	Coeficiente de distribuição do soluto [adimensional]
K	Condutividade Térmica do Material	c_s	Calor latente do material no estado sólido
R	O Raio do Cilindro	c_L	Calor latente do material no estado sólido
R_{int}	Raio interno do material	R_t	Resistência térmica do material
D_z	Diferencial de comprimento	C_t	Capacitor térmico do material
Área	Área de troca térmica	c'	Pseudo calor específico do material
h_{new}	Coeficiente de transferência de calor newtoniano	r_0	Raio inicial do elemento de volume
D_z	Diferencial de comprimento	r_1	Raio final do elemento de volume
Dr	Diferencial de raio	$d\phi$	Diferencial de ângulo
Vol	Volume do elemento de Diferenças Finita		

2. MODELO MATEMÁTICO

2.1. Análise Matemática da Solidificação

Na análise matemática da transferência de calor na solidificação, emprega-se a equação geral da condução de calor em regime transitório:

$$\rho \cdot c \frac{\partial T}{\partial t} = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \& \quad (1)$$

O termo fonte da equação de diferenças parciais (ϕ), Eq. (1), que representa a geração interna de calor, é associado à liberação de calor latente proveniente da transformação de fase e varia como função da fração solidificada.

Aplicando-se a técnica de diferenças finitas na Eq. (1), com a analogia de sistemas térmicos e elétricos (Spim, J. A et al, 1997; Spim, J. A; et al, 2000), chega-se na equação discretizada do MDF:

$$T_{i,j}^n = -\frac{\Delta_t}{\tau_{i+1,j}} T_{i+1,j}^{n+1} - \frac{\Delta_t}{\tau_{i-1,j}} T_{i-1,j}^{n+1} - \frac{\Delta_t}{\tau_{i,j+1}} T_{i,j+1}^{n+1} - \frac{\Delta_t}{\tau_{i,j-1}} T_{i,j-1}^{n+1} + \left(1 + \frac{\Delta_t}{\tau_{i,j}}\right) T_{i,j}^{n+1} \quad (2)$$

sendo, o parâmetro τ equivalente ao parâmetro de relaxamento de um circuito elétrico passivo (capacitores + resistores), dado por:

$$\tau = C_t \cdot R_t \quad (3)$$

Para o sistema de coordenadas cilíndricas utiliza-se o elemento diferencial representado na Fig.(1).

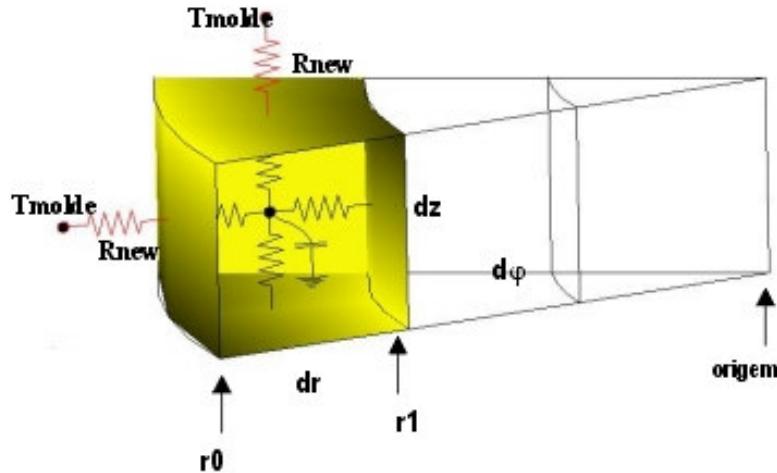


Figura 1. Elemento Diferencial Cilíndrico.

3. APLICAÇÃO DO MODELO NUMÉRICO NA PEÇA DE REFERÊNCIA

3.1. Escolha da região da peça a ser aplicada a malha numérica

O fator decisivo para a escolha da peça, Fig. (2), está no fato desta apresentar uma geometria com simetria de revolução, que facilita a aplicação do modelo proposto. Realizando-se uma análise tridimensional da transferência de calor na peça, observa-se não ser necessária a utilização de uma malha numérica para representar toda a geometria, mas somente em uma fatia desta, é satisfatório para representar o fenômeno de transferência de calor, de maneira global. Esta consideração somente será válida considerando-se uma igualdade nas condições para a extração de calor ao redor da mesma.

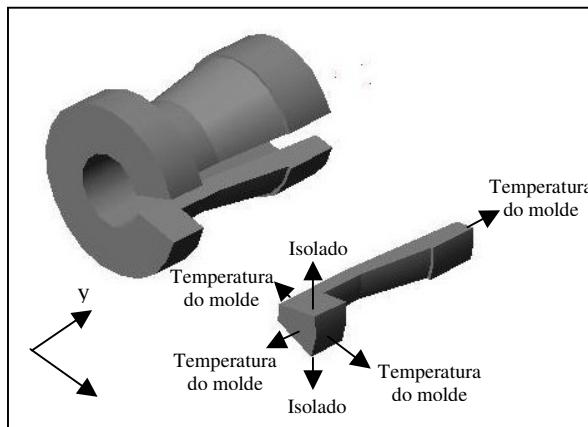


Figura 2. Ilustração representativa da fatia da peça a ser modelada e suas respectivas condições de contorno.

3.2. Desenvolvimento das equações para o cálculo dos resistores e capacitores térmicos

Em uma malha numérica é fundamental saber com exatidão a posição em que se encontra cada elemento. Na analogia utilizada, o cálculo dos resistores térmicos varia conforme a área de passagem do fluxo de calor e esta depende dos valores de r_0 e r_1 . Entretanto, os valores de r_0 e r_1 dependem da posição do resistor dentro de cada elemento, além da localização deste na malha.

Com o objetivo de exemplificar o cálculo das resistências térmicas na direção do eixo y , as Fig. (3a) e Fig. (3b) ilustram uma malha que descretiza a peça em três elementos nesta mesma direção. Para $n = 1$ até N_r , sendo $N_r = 4$.

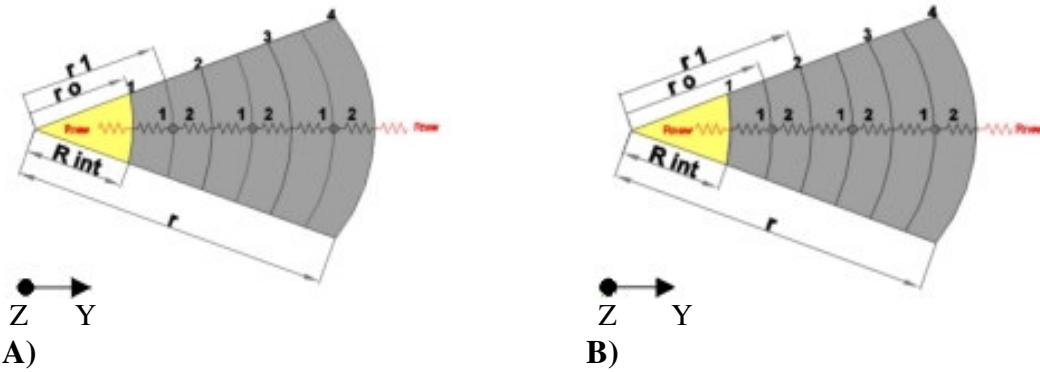


Figura 3. A) Representação de r_0 e r_1 para o cálculo dos resistores na posição 1, na direção do eixo y ; B) Representação de r_0 e r_1 para o cálculo dos resistores na posição 2, na direção do eixo y .

3.3. Acoplamento de malha na peça de referência

O acoplamento de uma malha em geometria complexa tem como característica ser uma das etapas mais complexas de um projeto. Devido à dificuldade em desenvolver programas que identifique uma determinada geometria e acople uma malha da melhor maneira possível, a coordenada cartesiana é unanimidade nos programas comerciais de simulação para indústria de fundição. Com coordenadas cartesianas necessita-se um elevado refino, para representar com fidelidade a geometria desejada, principalmente nos casos de peças que acoplem partes esféricas e cilíndricas. O resultado é um grande número de elementos, e consequentemente, elevado tempo de processamento, além de exigir alta capacidade de máquina para realizar a simulação.

Para gerar a malha em que o conjunto de seus elementos constitua com fidelidade a fatia da peça estudada, com redução na quantidade de elementos sem onerar a precisão, a aplicação de coordenadas cilíndricas é a melhor opção.

4. ALGORITMO DESENVOLVIDO

O algoritmo desenvolvido inicia-se dividindo a fatia da peça em três regiões distintas. O algoritmo apóia-se nas condições de contornos para delimitar as limites geométricos de cada região. Na primeira região foi fixada a origem do sistema de coordenadas, além de ser o ponto inicial do acoplamento. A segunda região não apresenta nenhuma característica marcante, sendo esta simplesmente um pacote cilíndrico. Na terceira região pode-se observar uma configuração geométrica irregular, sendo delimitada por duas curvas. Estas geometrias são denominadas contornos irregulares, e acarretam um erro numérico ou erro de acoplamento bastante sensível ao refino de malha utilizado. Para gerar uma malha em contornos irregulares, identificando as melhores condições de acoplamento, desenvolveram-se comparações entre as áreas cortadas pelas duas curvas que delimitam a terceira região. Se a comparação não for favorável a minimização do erro numérico, o algoritmo desloca o elemento de volume para uma posição que melhor represente a geometria.

Na Figura 4a, a ilustração representa o mecanismo de funcionamento do algoritmo desenvolvido para o acoplamento em contornos irregulares. Na Figura 4b são apresentadas a fatia da peça modelada e as condições de contorno geométricas inseridas no programa desenvolvido.

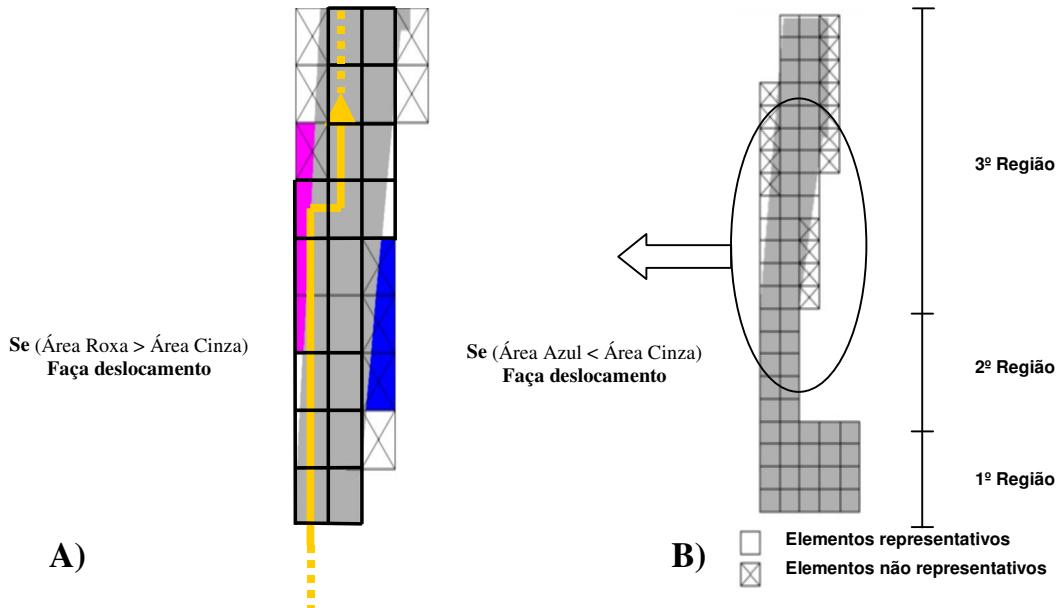
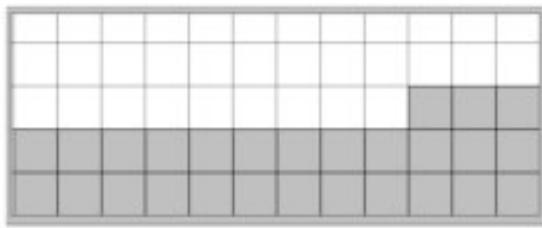


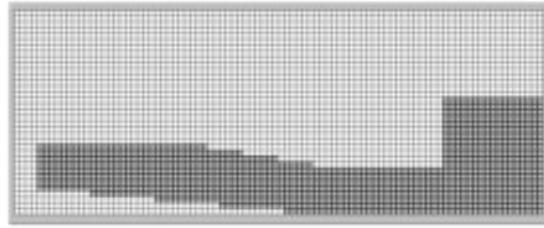
Figura 4. Ilustração representando a fatia da peça modelada. A) ilustração representando o mecanismo de funcionamento do algoritmo desenvolvido para o acoplamento em contornos irregulares; B) condições de contorno geométricas inseridas no programa desenvolvido.

4.1. Refino de malha

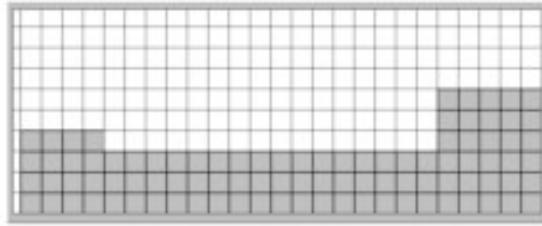
Os erros numéricos provem do acoplamento de malha nos contornos irregulares dos corpos físicos mapeados. O algoritmo desenvolvido gera uma malha, minimizando este erro, independentemente do refino adotado. Ao refinar a malha, o programa representa com maior fidelidade à fatia da peça modelada, consequentemente, o erro numérico diminui. As Figuras (5a) até (5f) apresentam as malhas geradas pelo programa de simulação, observando a quantidade de elementos e seus respectivos erros numéricos. Na Figura (5g) observa-se uma foto da seção da peça em tamanho real.



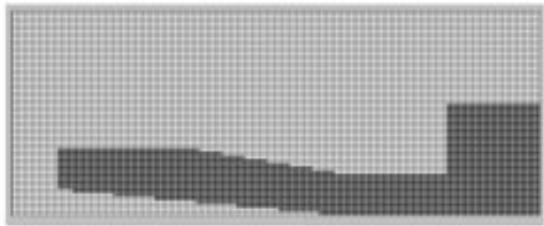
a) $\Sigma = 27$ e E.N. = 40,04 %.



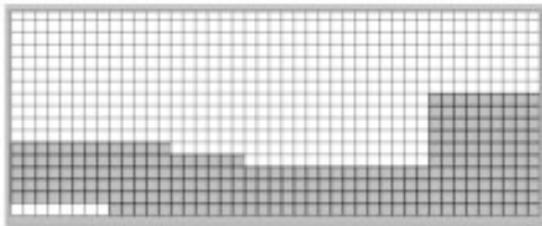
d) $\Sigma = 942$ e E.N. = 12,38 %.



b) $\Sigma = 94$ e E.N. = 16,87 %.



e) $\Sigma = 2027$ e E.N. = 7,60 %.



c) $\Sigma = 250$ e E.N. = 16,81 %.



f) $\Sigma = 8035$ e E.N. = 6,77 %.

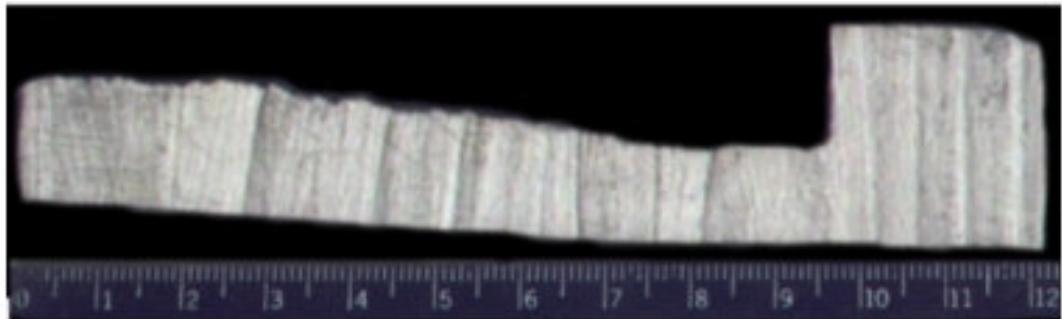


Figura 5. Malhas geradas pelo programa de simulação desenvolvido.
Números de elementos e seus respectivos erros numéricos. a) 27 e 40,04%; b) 94 e 16,87%; c) 250 e 16,81%; d) 942 e 12,38%; e) 2027 e 7,60%; f) 8035 e 6,77%; g) fatia da peça em tamanho real.

5. MATERIAIS E MÉTODOS

Para a aferição do modelo numérico desenvolvido, foi montado um sistema de fundição por gravidade em molde de areia verde. Um bocal de mangueira de incêndio foi utilizado como peça de referência, Fig. (6). A escolha deu-se pelo fato desta apresentar uma geometria cilíndrica de revolução, que facilita a aplicação do modelo proposto. A formação específica de defeitos como: rechupe e trincas térmicas, os quais estão diretamente relacionados com a evolução térmica da peça, sendo estes os defeitos que o modelo é capaz de prever. Como material de trabalho, utilizou-se a liga de alumínio A356. O vazamento foi realizado a uma temperatura de 670 °C. A Tabela (2) apresenta os valores das propriedades termo-físicas da liga A356. Para a monitorização da evolução térmica em pontos específicos do metal, foi utilizado um sistema de aquisição e processamento de

dados, Três termopares Tipo K (Chromel-Alumel) foram devidamente posicionados nas regiões de interesse, conforme Fig (6).

Tabela 2. Propriedades termo físicas dos materiais do molde e respectiva composição(Venkataramani, R. et al, 1995)

Propriedades termofísicas	A356	Molde
Massa específica do líquido (kg/m ³)	2387	---
Massa específica do sólido (kg/m ³)	2690	1521,71
Condutividade térmica do líquido (W/m°C)	110,6	
Condutividade térmica do sólido(W/m°C)	172,8	0,5897
Calor específico do líquido (J/kg.K)	1257,4	---
Calor específico do sólido (J/kg.K)	1707	1075,28
Calor Latente de fusão (KJ/kg)	389	----
Temperatura liquidus (°C)	615	----
Temperatura sólidus (°C)	555	----
Condições de contorno do sistema		
Temperatura de vazamento (°C)	650	
Temperatura ambiente (°C)	14	
Temperatura do molde (°C)	14	
Tempo de enchimento do molde (s) (parâmetro experimental)	5,94	
Coeficiente de transferência de calor metal/molde (W/m ² .K)	100	

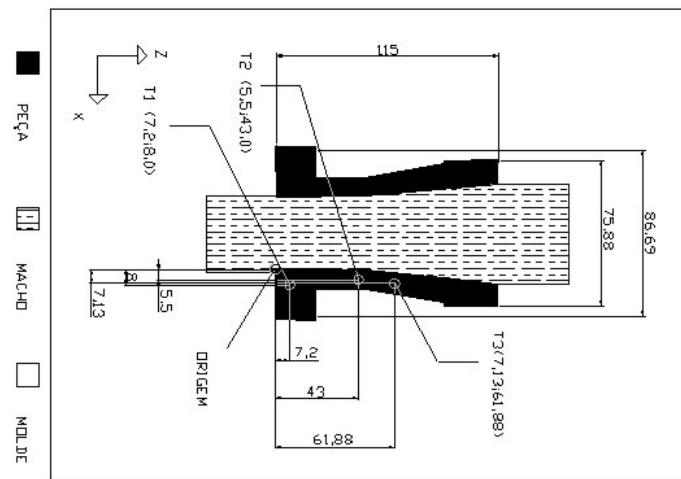


Figura 6. Representação esquemática do sistema de fundição ilustrando o posicionamento dos termopares em relação a origem utilizada no modelo numérico.

6. COMPARAÇÕES ENTRE O PROGRAMA DESENVOLVIDO E O PROGRAMA COMERCIAL

Para efeito de comparação, foi desenvolvido no programa comercial o mesmo ambiente do experimento. Os parâmetros termofísicos e experimentais foram idênticos aos usados para as simulações realizadas no programa desenvolvido. Apenas dois parâmetros devem ser considerados a mais no programa comercial. Estes são: as propriedades termofísicas do molde e o tempo para enchimento do molde. É importante destacar que o programa comercial não utiliza propriedades termofísicas distintas para os estados sólido e líquido do metal. Na Tabela 2, estão listados os parâmetros necessários para gerar as simulações. Nas comparações realizadas procurou-se demonstrar as diferenças entre o modelo aplicado no programa desenvolvido e no comercial em representar o fenômeno de solidificação do sistema de fundição estudado.

As comparações abordam as coordenadas utilizadas em ambos programas para gerar a malha representativa da geometria da peça estudada. Neste contexto, as malhas geradas pelo programa comercial contiveram quantidades de elementos próximas aos gerados pelo programa desenvolvido. Esta comparação é realizada através da representação 3D da geometria da peça e das análises térmicas simuladas.

6.1. Comparação entre coordenadas cartesianas e cilíndricas na representação geométrica da peça de referência

Através de uma comparação entre o modelo aplicado em coordenada cilíndrica e o programa comercial, que utiliza coordenada cartesiana, pode-se comprovar a importância no aprimoramento do estudo no desenvolvimento de algoritmos para o acoplamento de coordenadas adequadas em geometrias de peças da indústria de fundição.

A Figura (7) apresenta uma as geometrias geradas por ambos simuladores (desenvolvido e comercial). Nota-se que com aproximadamente, o mesmo número de elementos, o programa desenvolvido representa com maior fidelidade à geometria da peça modelada. A variação do refino de malha em coordenadas cartesianas não provoca o mesmo efeito observado em coordenadas cilíndricas.

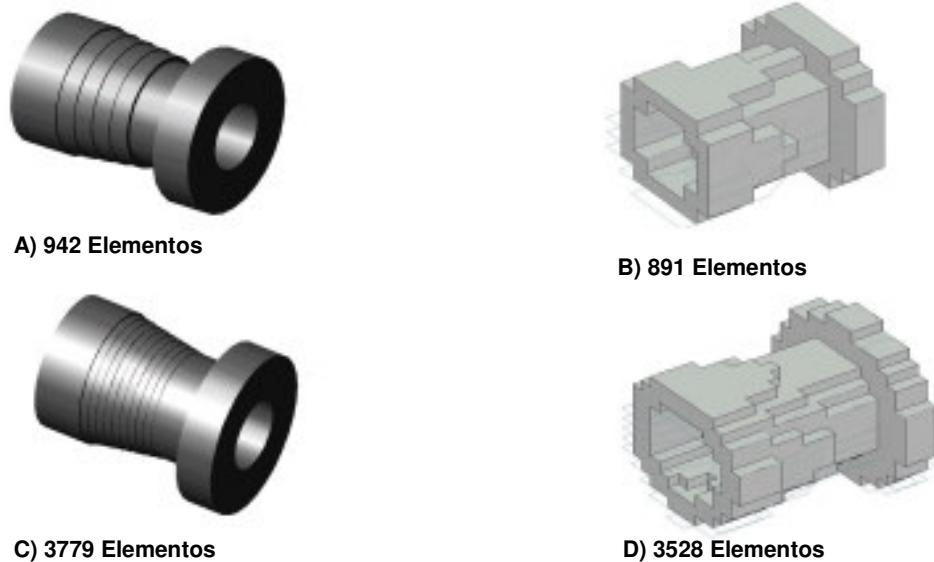


Figura 7. Comparação entre as coordenadas cartesianas e cilíndricas para representação da geometria estudada. A e C) Modelo desenvolvido; B e D) Programa comercial.

Para representar com fidelidade tal geometria, o software comercial necessita 1 milhão de elementos, Fig.(8), enquanto que o modelo desenvolvido requer 3779 elementos para uma representação satisfatória.

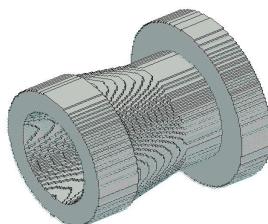


Figura 8. Representação da geometria simulada no programa comercial, com a utilização de 1 milhão de elementos.

No modelo desenvolvido, a peça é fatiada em 100 pedaços, para realizar uma comparação equivalente não considerando apenas a quantidade de elementos simulados, mas o total de elementos para representar a geometria completa, em três dimensões, o modelo desenvolvido utilizaria 377.900 elementos. Isto ainda equivale a 2,67 vezes menos elementos que o programa comercial.

7. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Sabendo-se que o mapa térmico do sistema experimental deve consistir no resultado que permitirá ao usuário a identificação de defeitos oriundos das taxas de solidificação, comparou-se os resultados obtidos por termopares posicionados estratégicamente no interior do metal, com resultados gerados pelo modelo desenvolvido e por um software comercial. Segundo a Figura (6), o termopar nº 1 se encontra próximo a base do sistema. A Figura (9) mostra a comparação dos resultados gerados no modelo desenvolvido e no software comercial em comparação com o resultado experimental. No modelo desenvolvido utilizou-se uma malha composta de 1169 elementos em comparação com 1100 elementos para o software comercial. Devido ao fato do software comercial cobrir toda a peça com uma malha cartesiana, tem-se que o erro associado a esta malha faz-se considerável, uma vez que se objetivou a manutenção do número de elementos entre o modelo desenvolvido e o software comercial para garantia do tempo médio de simulação. Conforme a Figura (9), as discrepâncias do resultado gerado pelo modelo desenvolvido são menores quando comparadas com as discrepâncias apresentadas pelo software comercial. Na Figura (9), após 130 segundos de simulação, tanto o modelo desenvolvido quanto o software comercial tendem a reduzir a temperatura mais rápido que o sistema experimental. Este fato pode ser facilmente descrito pelo fato que tanto o software comercial quanto o modelo desenvolvido trabalham com um coeficiente de transferência de calor constante ao longo de todo o processo. É sabido que ao longo da solidificação as contrações inerentes ao metal devem reduzir de modo considerável o valor do coeficiente de transferência de calor entre o metal e o molde e dessa forma a curva experimental deve garantir menores taxas de resfriamento por tempos mais prolongados. Tanto o modelo desenvolvido como o software comercial responderam bem a tendência do resfriamento na zona pastosa (região entre T_L e T_S). Ambos os modelo trabalham com a formulação de Scheil, entretanto o modelo desenvolvido assume características termofísicas da liga variável entre T_L e T_S , e o software comercial assume valores constantes ao longo de todo o resfriamento.

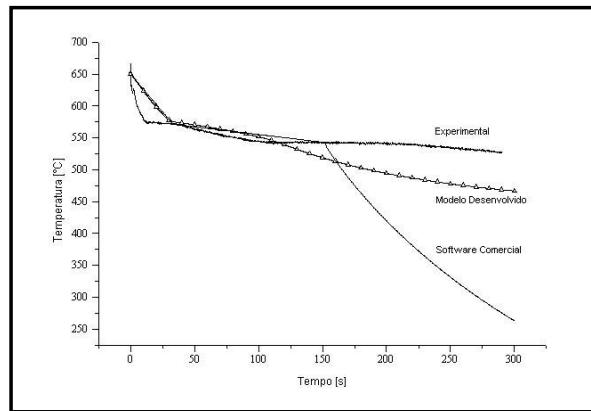


Figura 9. Comparação entre os resultados gerados pelo modelo desenvolvido, software comercial e sistema experimental para o termopar nº 1 (segundo a Fig.(6)).

8. CONCLUSÃO

Observou-se que o modelo desenvolvido mostrou-se aceitável quando comparado com um software comercial. O resultado experimental comprovou a validade do modelo, entretanto a

consideração do valor do coeficiente de transferência de calor entre o metal e o molde constante, consiste em um dos principais elementos de erro tanto para os sistema comerciais quanto para o modelo desenvolvido. Esforços posteriores serão realizados no sentido de compreender a variação deste parâmetro e sua posterior inserção nos modelos numéricos de simulação.

9. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a FAPERGS – Fundação de Amparo a Pesquisa do Rio Grande do Sul e a PROPESQ – Pró-Reitoria de Pesquisa da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

10. REFERÊNCIAS

- 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 PO Box 6122, 13083-970 – Campinas, S. P. Brazil; Journal of the Braz.Soc. Mechanical Sciences - RBCM, V.XIX, No. 3, pp. 392-409;
- Spim, J. A; et al, 2000, "Numerical analysis of solidification of complex shaped bodies: coupling of mesh elements of different geometries", Materials Engineering Department, State University of Campinas, UNICAMP PO Box 6122, 13083-970 – Campinas, S. P. Brazil; Materials Science and Engineering A277 pp. 198-205.
- Dolsak, B.; et al, 2002, "Finite element mesh design expert system", Faculty of Mechanical Engineering, University of Mirobor, Smetanova 17, SI-2000 Maribor, Slovenia Knowlegde-Based System 15 pp. 315-322.
- Rexroth, C. H; et al, 1998, "Exploiting the flexibility of unstructured grids for computing complex flow patterns more precisely"; Lehrstuhl und Institut für Thermische Strömungsmaschinen, Universität Karlsruhe (TH), D-76128 Karlsruhe, Germany; International Journal of Heat and Fluid Flow, Vol. 19 – pp. 439-445.
- Spim, J. A., 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 p.;
- Pehlke, R. D.; et al, 1985, "Metal-mold interfacial heat transfer", University of Michigan, Ann Arbor, MI; Metallurgical and Materials Transactions B, V.16B, pp. 585-594;
- Ohtsuka, Y.; et al, 1982, "Application of a computer simulation system to aluminum permanent mold castings", Toyota Motor Co. Ltd., Japan; AFS Transactions, Vol. 89, pp. 635-646;
- Kurz, W.; et al, 2000, "Solidification microstructures: Recent developments, future directions", Acta Materialia, Vol. 48, pp. 43-70;
- Venkataramani, R.; et al, 1995, "Microestrutural modeling of solidification in A356 alloy", Center for Near-Net Shape Processing of Materials, Ryerson Polytechnic University, Toronto, Canada, M5B 2K3; Materials Characterization Vol. 35, pp. 175-194;

APPLICATION OF THE NUMERIC MODELLING OF CYLINDRICAL SYSTEMS FOR FORECAST OF DEFECTS IN FOUNDRY PRODUCTS

ABSTRACT

The present work aimed at the application of a numeric model developed under the finite difference technique for forecast of the thermal map in foundry products that possess in its structure cylindrical elements. The methodology consisted of the preparation of an industrial piece with cylindrical geometry. Foundry sand was used as mold element and an aluminum alloy as work metal. Thermocouples were used to obtain the experimental results. The numeric model was developed in cylindrical coordinates and it was applied on the foundry system. The results have shown the validity of the numeric model and the applicability of numeric packages to foresee the formation of defects in melted pieces. The comparison of the model results with the results of a commercial package proved the efficiency of the mathematical model.

Key Words: Numeric simulation, Modeling, Foundry, Cylindrical Geometry.