

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE A REDAÇÃO FINAL  
DA TESE DEFENDIDA POR ERNANDES MARCOS  
DA SILVEIRA RIZZO E APROVADA PELA  
COMISSÃO JULGADORA EM 07/10/94.

  
ORIENTADOR

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE MATERIAIS**

**ANÁLISE NUMÉRICA E EXPERIMENTAL  
DA SOLIDIFICAÇÃO DO AÇO RÁPIDO M2 NO  
PROCESSO DE FUNDIÇÃO DE PRECISÃO**

**Ernandes Marcos da Silveira Rizzo  
Orientador : Rezende Gomes dos Santos**

Número de publicação FEM: 44/94

Dissertação apresentada à comissão de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia Mecânica da UNICAMP, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica modalidade "Materiais e Processos de Fabricação.

Campinas  
1994



UNIDADE	BC
N.º CHAMADA:	TIUNICAMP
	R529a
V. Ex.	
I. WSO BC/	23041
PROG.	286/94
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	11/11/94
N.º CPD	

CM-00063182-3

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA CENTRAL - UNICAMP

R529a Rizzo, Ernandes Marcos da Silveira  
Análise numérica e experimental da solidificação do aço rápido M2 no processo de fundição de precisão / Ernandes Marcos da Silveira Rizzo. - - Campinas, SP : [s.n.], 1994.

Orientador : Rezende Gomes dos Santos.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas.  
Faculdade de Engenharia Mecânica.

1. Modelos matemáticos. 2. Fundição de Precisão 3. Aço-ferramenta. 4. Solidificação. I. Santos, Rezende Gomes dos. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Mecânica. III. Título.

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de : MESTRADO

Título da Tese : ANÁLISE NUMÉRICA E EXPERIMENTAL DA SOLIDIFICAÇÃO DE  
UM AÇO FERRAMENTA NO PROCESSO DE FUNDIÇÃO DE  
PRECISÃO

Autor : ERNANDES MARCOS DA SILVEIRA RIZZO *529*

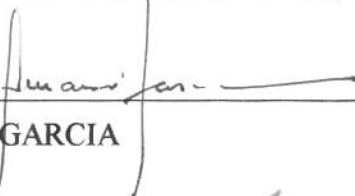
Orientador : Prof. Dr. REZENDE GOMES DOS SANTOS *1*

Aprovado por:



---

Prof. Dr. REZENDE GOMES DOS SANTOS, Presidente



---

Prof. Dr. AMAURI GARCIA



---

Dr. EDUARDO ALBERTIN

Campinas, 07 de OUTUBRO 1994

À Cristina

## AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer às pessoas e instituições que possibilitaram de uma maneira ou de outra a realização deste trabalho.

À Escola Técnica Federal do Espírito Santo, pela liberação concedida para a realização do Curso de Mestrado na UNICAMP.

Ao Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo - IPT -, particularmente à Divisão de Metalurgia, pela cessão dos laboratórios para a realização de grande parte das experiências.

À Universidade Federal do Espírito Santo e a CAPES pela concessão da bolsa de estudos.

À Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo - FAPESP - pela liberação de verbas para a compra de materiais e equipamentos.

Ao professor Rezende Gomes dos Santos pela orientação, apoio e dedicação durante todo o período de execução deste trabalho.

Ao pesquisador do IPT Mário Boccalini pela coorientação, sempre consciente e segura deste trabalho.

À Luciana, Ricardo Fuoco, Albertin, Edson, Alzira, Almeida, Mariza, Sérgio e demais funcionários da Divisão de Metalurgia do IPT pela colaboração indispensável à realização deste trabalho.

Aos professores Sérgio Tonini Button, Rubens Caram e Amauri Garcia pelas discussões ao longo deste trabalho e cessão de materiais e equipamentos para a realização das experiências.

Aos colegas, funcionários e professores do Departamento de Engenharia de Materiais pela agradável convivência e colaboração durante o período de realização do Curso de Mestrado.

Aos colegas João, Cristina, Manassés, Rogério e especialmente à amiga Mirian pelas valiosas sugestões, discussões e companheirismo, fundamentais para a conclusão deste trabalho.

## RESUMO

A utilização de modelos matemáticos para análise, controle e otimização de processos que envolvam a solidificação de metais e ligas metálicas vem aumentando nos últimos anos e tem permitido a simulação dos efeitos de determinadas variáveis do processo nas características do produto obtido, incluindo a previsão da microestrutura e da formação de defeitos.

As variações de temperatura no sistema metal/molde foram monitoradas através de um sistema de aquisição de dados acoplado a um microcomputador e os resultados obtidos foram usados para a determinação da variação do coeficiente de transferência de calor durante o processo, utilizando um método numérico. A validade do método foi comprovada pela realização de experiências com uma liga de cobre e zinco e com o vazamento do aço ferramenta M2 em moldes cerâmicos instrumentados e com diferentes condições de resfriamento na interface metal/molde.

O método desenvolvido permite a análise da influência dos parâmetros térmicos na formação da microestrutura do aço ferramenta M2 quando da utilização do processo de fundição de precisão. No método é possível a consideração de um coeficiente de transferência de calor variável na interface metal/molde, bem como de propriedades termofísicas do metal e do molde variando com a temperatura, e pode ser utilizado para a determinação da variação dos espaçamentos interdendríticos secundários em função das características do sistema metal/molde. São também analisados a influência da velocidade de resfriamento sobre o tipo e morfologia dos carbonetos eutéticos formados na etapa de solidificação do aço ferramenta M2.

## **ABSTRACT**

The heat transfer between metal and a preheated shell mold during the investment casting process affect decisively the microstructure and properties of the casting. As during solidification the heat transfer occur associated with phase change the analytical treatment of the problem is limited and numerical analysis has increased recently.

In this study the variation of metal/mold interfacial thermal resistance with time is determined, from the thermal history at various thermocouple location in the casting and mold, by using the methods of adjusting numerical model to experimental thermal profiles.

Correlation between metal/mold interface condition and microstructure formation was analyzed during the solidification of castings of a cooper-zinc alloy in metallic and sand molds and tool steel in ceramic molds of investment casting process. Temperature distribution throughout the casting and mold was monitored and used to estimate the heat transfer coefficient in metal/mold interface. The dendrite arm spacing variation was also measured. A numerical method, which had the accuracy improved by the experimental results, was applied to analyze the influence of heat transfer coefficient in the microstructure of the castings.

## ÍNDICE

1 - INTRODUÇÃO	
1.1 - Considerações Gerais	1
1.2- Tipos de modelagem	2
1.2.1 - Modelos Analógicos	2
1.2.2 - Modelos Empíricos	3
1.2.3 - Modelos Analíticos	4
1.2.4 - Modelos Computacionais	5
1.3 - Modelagem da Solidificação dos Metais	6
1.4 - Espaçamentos Interdendríticos	19
1.5 - Processo de Fundição de Precisão	20
1.6 - Objetivos deste Trabalho	22
1.7 - Referências Bibliográficas	26
2 - MODELAGEM NUMÉRICA DA SOLIDIFICAÇÃO DE METAIS E LIGAS METÁLICAS	
2.1 - Problemas de Fronteira Móvel	32
2.2 - Métodos Numéricos Aplicáveis a Problemas com Mudança de Fase	38
2.3 - Aplicação do Método da Entalpia	40
2.4 - Métodos Numéricos	44
2.4.1 - Análise de Erros	45
2.4.2 - Propriedades dos Métodos Numéricos	47
2.5 - Transferência de Calor Através da Interface Metal/Molde	49
2.6 - Caracterização da Interface Metal/Molde	50
2.7 - Determinação de $h$	56
2.8 - Referências Bibliográficas	60
3 - CARACTERÍSTICAS DE SOLIDIFICAÇÃO DO AÇO RÁPIDO M2	
3.1 - Introdução	66
3.2 - Etapas da Solidificação	69
3.2.1 - Líquido $\Rightarrow$ ferrita delta	69
3.2.2 - Reação peritética: líquido + ferrita delta $\Rightarrow$ austenita	69
3.2.3 - Reação eutética: líquido $\Rightarrow$ austenita + carbonetos	71
3.2.4 - Ferrita Delta $\Rightarrow$ Austenita + Carbonetos	76



3.3 - Estrutura Bruta de Fundição	77
3.4 - Referências Bibliográficas	80
<b>4 - DESENVOLVIMENTO DO MÉTODO NUMÉRICO</b>	
4.1 - Introdução	83
4.2 - Aplicação do Método de Diferenças Finitas Explícito	83
4.3 - Avaliação do Método de Diferenças Finitas Explícito	89
4.4 - Cálculo do Espaçamento Interdendrítico Secundário	92
4.5 - Determinação do Coeficiente de Transferência de Calor na Interface Metal/Molde (h) Através do Método da Comparação de Perfis Térmicos Numéricos e Experimentais	94
4.6 - Verificação do Modelo Proposto para o Cálculo dos Perfis Térmicos	95
4.6 - Referências Bibliográficas	97
<b>5 - PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL</b>	
5.1 - Materiais e Métodos	100
5.2 - Ensaaios	117
5.2.1 - Análises Químicas	117
5.2.2 - Metalografias	117
5.2.3 - Análise Térmica Diferencial	120
5.3 - Referências Bibliográficas	122
<b>6 - RESULTADOS E DISCUSSÕES</b>	
6.1 - Primeiro Grupo de Experimentos	123
6.2 - Segundo Grupo de Experimentos	125
6.3 - Terceiro Grupo de Experimentos	138
6.4 - Quarto Grupo de Experimentos	139
<b>7 - CONCLUSÕES</b>	170
<b>APÊNDICES</b>	
1 - Simbologia	172
2 - Propriedades dos Materiais	175
3 - Equação de Brody-Flemings Modificada	176

## 1 - INTRODUÇÃO

### 1.1 - Considerações Gerais

O aumento contínuo do nível de qualidade de peças fundidas, induziu o surgimento de um grande número de pesquisas dos diversos fenômenos relacionados com a obtenção de peças por fundição. Assim, atualmente a obtenção de peças fundidas baseia-se na aplicação cada vez maior de conhecimentos científicos e tecnológicos, aliados a técnicas computacionais no sentido de: conhecer, qualificar, quantificar e controlar os diversos fenômenos físicos e metalúrgicos inerentes ao processo de fundição.

Um exemplo deste progresso é o considerável crescimento da utilização de modelos matemáticos na análise, controle e otimização de processos de fabricação por fundição já implantados ou em implantação. O potencial destes modelos para produzir ganhos em eficiência nos processos é o fator motivador deste aumento. Além disto, os modelos matemáticos de processos complexos são freqüentemente aplicados para isolar e identificar os efeitos de alterações em determinadas variáveis no produto final<sup>1</sup>. Em boa parte dos casos, não é possível implementar tais alterações experimentalmente, por dificuldades impostas pelo processo em si ou devido ao tempo necessário para realizar toda a série de experimentos. Nestes casos o pesquisador pode utilizar o modelo matemático para simular os efeitos de mudanças em determinadas variáveis de processo nas características do produto.

A modelagem de processos de fundição surgiu a partir da associação da engenharia de processos com os mais tradicionais campos científicos tais como: termodinâmica, mecânica dos fluidos, transferência de calor, métodos matemáticos e computacionais e metalurgia. Desta forma desenvolveu-se uma metodologia de análise que começa<sup>1</sup> com a tentativa de se determinar, a partir de princípios básicos, quais os fenômenos físicos que ocorrem durante o processo de fabricação por fundição cujo entendimento permite prever quais são as conseqüências da variação de determinados parâmetros na qualidade do produto.

A modelagem da solidificação de peças fundidas apresenta um certo grau de complexidade pois processos que envolvem mudança de fase são inerentemente bastante difíceis de serem analisados já que a **equação de momento**, a **equação da energia** e a

**equação da continuidade** junto com as condições de contorno nas interfaces devem ser resolvidas simultaneamente. Além do mais, devido a natureza transiente dos fenômenos envolvidos, as localizações das interfaces moveis no metal, devem ser consideradas no modelo<sup>2,3</sup>.

## 1.2 - Tipos de Modelagem

Basicamente pode-se classificar a modelagem de processos, de acordo com a metodologia utilizada, nos seguintes grupos<sup>4</sup>:

- modelo analógico;
- modelo empírico;
- modelo analítico;
- modelo computacional.

Nas aplicações em fundição, os modelos computacionais podem ser subdivididos em geometricamente baseados e fisicamente baseados (também conhecidos como mecânicos ou fundamentais). Modelos analógicos podem ser por analogia física ou analogia por circuito elétrico. Os modelos empíricos podem ser preditivos ou históricos. Os modelos analíticos podem ser exatos ou aproximados.

### 1.2.1 - Modelos Analógicos

A solidificação de ligas é um fenômeno físico complexo. A maioria dos fundidos apresenta geometrias complicadas. O comportamento do molde ainda não é muito bem entendido para a maioria dos processos de fundição e além disso o molde dificulta a visualização dos fenômenos em curso. Assim, o desenvolvimento de um modelo que possa prever com precisão diversos aspectos da solidificação de um fundido real, fornecendo resultados que possam ser facilmente interpretados, constitui de um desafio.

Pelas razões expostas acima, os primeiros trabalhos<sup>4</sup> foram realizados com **modelos analógicos físicos**, utilizando-se compostos orgânicos, os quais solidificam como um metal ou liga, isto é, com o mínimo de mudanças no volume e com segregação semelhante às ligas. Após o vazamento destes compostos nos moldes, seguido de sua solidificação, os mesmos

são cortados e inspecionados. Em alguns casos, moldes transparentes podem ser utilizados e, se o composto orgânico também é transparente, a solidificação pode ser acompanhada diretamente. Entretanto, a dificuldade de se encontrar sistemas análogos e de se construir moldes transparentes, tem desencorajado o uso deste tipo de modelagem, apesar de ainda serem usados para o estudo de fenômenos básicos de solidificação.

Um outro **modelo analógico físico** se baseia na similaridade, utilizada para evitar os problemas computacionais do fluxo de fluido em sistemas de canais, na qual utiliza-se água em moldes transparentes pois, existe uma certa similaridade entre o metal líquido e a água quanto a viscosidade cinemática. Estes modelos são freqüentemente utilizados para demonstrar os fundamentos do fluxo de fluido, mas raramente são usados para projetar os sistemas de canais. Deve-se considerar também que estes modelos são limitados pela diferença na tensão superficial entre os sistemas molde transparente/água e molde de areia/metal, o que dificulta a compreensão da interação no fluxo entre o metal e os óxidos no sistema de canais.

Apesar das relações matemáticas que governam o fluxo de calor e de fluido serem bem conhecidas há vários anos, as dificuldades computacionais impostas por tais relações desestimulavam seu uso nos primeiros computadores. Porém, era conhecido que circuitos elétricos tem uma certa analogia com a transferência de calor (temperatura/voltagem; fluxo de calor/corrente elétrica; capacidade térmica/capacidade elétrica; resistência térmica/resistência elétrica) e poderiam ser utilizados para determinar o fluxo de calor em formas bidimensionais complexas, realizando-se um **modelo analógico por circuito elétrico**. Apesar dos resultados obtidos terem ajudado na demonstração do fluxo de calor, eles não podem ser aplicados em fundidos comerciais.

### 1.2.2 - Modelos Empíricos

Dentre os modelos empíricos preditivos temos os chamados sistemas especialistas, já disponíveis para microcomputadores, nos quais muitas das regras utilizadas por especialistas de uma fundição podem ser postas de forma tal que possam ser usadas por outras pessoas envolvidas no processo produtivo, para orientar suas decisões diante dos problemas de processo. Apesar de não existir uma única solução para a fabricação de uma peça qualquer por fundição, existem uma série de opiniões valiosas, embora algumas vezes conflitantes, que podem auxiliar na resolução dos problemas citados<sup>5</sup>. Entretanto, existe ainda uma série

de problemas envolvidos no uso de sistemas especialistas, os quais estão ainda sendo analisados. No momento, os sistemas especialistas devem ser adaptados para reconhecer uma família de peças fundidas e as características de peças específicas tais como: tratamentos especiais, machos, pinturas especiais no molde, resfriadores, etc.

Em relação aos modelos empíricos históricos, até o momento muito se tem feito no sentido de entender e aplicar o controle estatístico de processos (CEP) ao processo de fundição. Supreendentemente<sup>3</sup>, pouco se considera o fato de que o CEP fornece um modelo empírico do processo de fundição. Quando o sistema é mais refinado, utilizando inclusive sensores *on line* para monitorar o processo, a combinação do CEP com os sistemas especialistas é de grande potencial para um controle do processo em tempo real bastante eficiente.

### 1.2.3 - Modelos Analíticos

Nos **modelos analíticos exatos**, o estudo é feito baseando-se numa equação que descreve na sua forma exata, o fenômeno em estudo. A principal característica destes modelos<sup>6,7</sup>, consiste no fato de não incorporarem nenhuma aproximação de caráter matemático, embora um certo número de hipóteses físicas tenham de ser adotadas para permitir a solução do problema. Estes tratamentos podem ainda ser divididos de acordo com a hipótese assumida para a resistência na interface metal/molde em contato térmico perfeito (molde de areia) e contato térmico imperfeito (molde metálico). As seguintes hipóteses são assumidas:

- o fluxo de calor é unidimensional;
- o metal solidifica com uma interface sólido/líquido macroscopicamente plana;
- o calor liberado pelo metal é totalmente absorvido pelo molde, sendo que a temperatura externa deste é mantida constante;
- a temperatura na interface metal/molde permanece constante ao longo do processo de solidificação;
- não ocorrem fluxos de massa no líquido, seja por convecção ou segregação de solutos;
- as propriedades físicas do sistema não se alteram ao longo do processo.

Devido às simplificações assumidas com vistas a facilitar a resolução das equações, este tipo de abordagem tem aplicações altamente limitadas.

A principal característica dos **modelos analíticos aproximados**<sup>7</sup> consiste na imposição de uma expressão matemática para representar o perfil térmico da camada de metal sólido, para então derivar-se uma expressão para a cinética de solidificação. Como a integração posterior é numérica, não é compensador pois, é mais válido neste caso utilizar diretamente o computador (modelos computacionais físicos).

#### 1.2.4 - Modelos Computacionais

Os **modelos computacionais empíricos** são baseados no cálculo, através do uso de microcomputadores, das dimensões do sistema de alimentação e enchimento, fazendo uso de equações empíricas que tradicionalmente são resolvidas "manualmente"<sup>8</sup>. Assim, não é necessário a realização de operações mais complexas como reticulação da peça<sup>9</sup>. Por exemplo, comparando-se a relação entre volume e a área de superfície de diferentes seções do fundido para se determinar a seqüência de solidificação do mesmo. Esta operação é a aplicação da bem conhecida regra de Chvorinov que, juntamente com outras regras para a localização dos massalotes, permite a determinação das dimensões deste.

Um outro exemplo é o cálculo das dimensões do sistema de canais utilizando-se a equação de Bernoulli, baseando-se na determinação do tempo de enchimento e auxiliado por outras recomendações empíricas<sup>8</sup>.

Os **modelos computacionais empíricos** têm a vantagem da simplicidade e facilidade de cálculo, sendo porém limitados pois não permitem determinar gradientes térmicos e são insensíveis às mudanças de temperatura de vazamento ou meio de moldagem (apesar de existirem modelos que admitem correções empíricas). É necessário ainda, certa habilidade na divisão do fundido em módulos para a análise em questão.

De tudo se conclui que estes modelos são de uso restrito a fundições cujo programa de produção (tipo de peças) não se alteram constantemente, assim como os equipamentos e materiais de moldagem.

Nos **modelos computacionais físicos**<sup>10</sup> tenta-se superar as limitações dos modelos computacionais empíricos através do emprego de métodos numéricos para se resolver as equações relativas ao fenômeno que está sendo modelado. Os principais métodos numéricos podem ser agrupados em :

- método dos elementos finitos - MEF;
- método das diferenças finitas - MDF;
- método dos volumes finitos - MVF;
- método dos elementos de contorno - MEC;

para os quais existem disponíveis, em maior ou menor grau conforme o método, diversos pacotes computacionais.

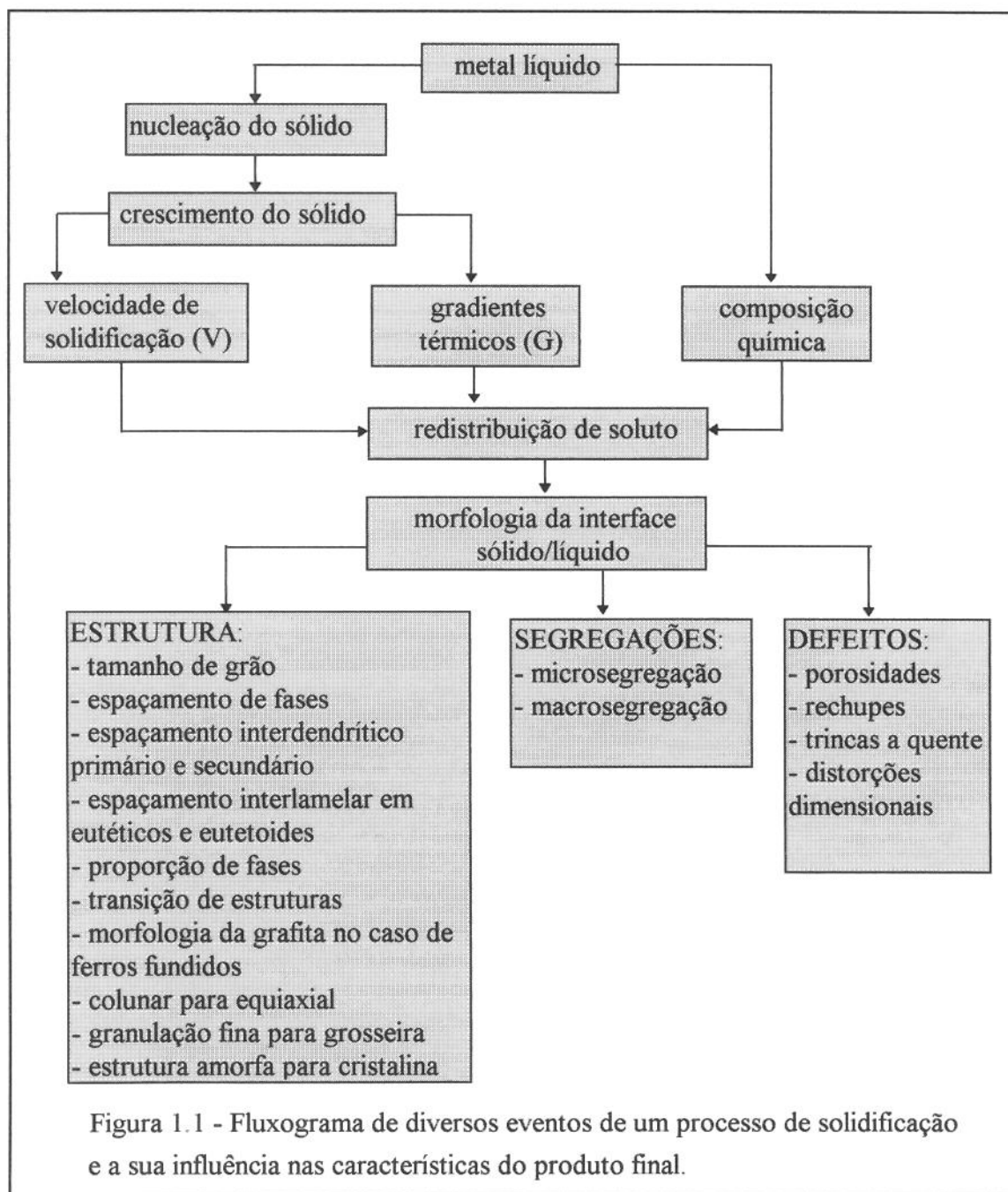
Como a análise dos vários fenômenos presentes no processo de fundição ao mesmo tempo exige grande capacidade computacional (dentre outras dificuldades), é vantajoso analisar um fenômeno de cada vez, pois, com a redução do número de equações envolvidas, torna-se mais fácil desenvolver um método rápido com um algoritmo otimizado<sup>11</sup>. Para todo fenômeno a ser estudado, é necessário uma **função critério** para converter os parâmetros básicos calculados (temperatura, velocidade, concentração, etc) em informações úteis. Por exemplo: será a peça fundida sã, será ela sensível a trincas, o molde foi adequadamente preenchido, etc. Tais funções são muito mal estabelecidas hoje em dia mas, a medida que os parâmetros básicos se tornarem mais rapidamente calculáveis, a **função critério** poderá ser progressivamente melhor obtida por comparação dos mesmos com resultados experimentais.

### 1.3 - Modelagem da Solidificação dos Metais

De acordo com Garcia<sup>7</sup>, a análise do fenômeno da solidificação dos metais apresenta fundamentalmente dois aspectos:

- um aspecto metalúrgico ligado à composição química do metal;
- um aspecto térmico relativo à história térmica anterior do metal, aos modos pelo qual o calor é transferido e à distribuição de temperaturas no interior da peça a cada instante do processo.

Na Figura 1.1 pode-se observar que a interação entre estes dois aspectos determinará as características da microestrutura do metal solidificado e conseqüentemente suas propriedades. Na mesma Figura apresenta-se os três grupos de parâmetros que são normalmente estudados. Neste trabalho o estudo está voltado para a formação de microestruturas durante a solidificação das peças fundidas, portanto, será destacado apenas este fenômeno para análise.





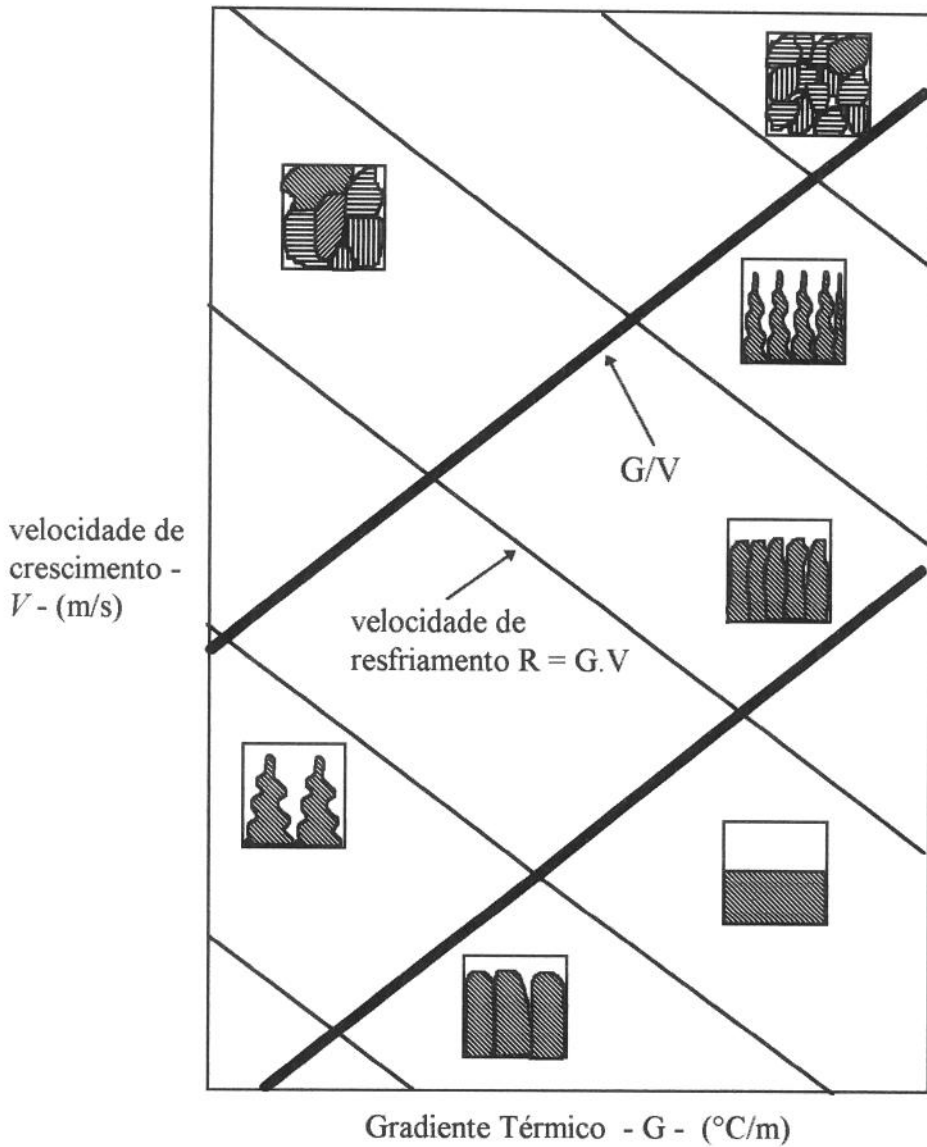


Figura 1.2 - Influência do Gradiente térmico ( $G$ ) e da velocidade de solidificação ( $V$ ) na formação de microestruturas segundo Kurz e Fisher<sup>12</sup>. Alterações na velocidade de resfriamento ( $R = G \times V$ ) mantendo-se  $G/V$  constante mudam a escala da microestrutura, mas não a sua forma (morfologia). Para o caso de manter  $R$  constante e alterar a relação  $G/V$ , a forma irá variar permanecendo inalterada a escala da morfologia. Não se considera no diagrama acima a influência de fluxos convectivos na transição de colunar para equiaxial.

A influência dos parâmetros térmicos **velocidade de solidificação** ( $V$ ) e **gradiente de temperatura** ( $G$ ) na formação das microestruturas foi sintetizada por Kurz<sup>12</sup> através do diagrama esquemático apresentado na Figura 1.2. Observa-se neste diagrama que as alterações na **velocidade de resfriamento**  $R$  ( $R = G \cdot V$ ) implicam em mudança na escala da microestrutura formada (por exemplo altera-se os espaçamentos interdendríticos) enquanto que a relação  $G/V$  determina o tipo de morfologia de crescimento<sup>1</sup>.

Um dos maiores desafios na modelagem dos problemas relativos a solidificação são as interações entre diversos fenômenos físicos que ocorrem em diferentes níveis, desde a **escala atômica**, passando pela **escala das interfaces** e pela **escala do grão** até a **escala do sistema** conforme esquematiza a Figura 1.3 para o caso de solidificação dendrítica. Também na Figura 1.3 é apresentada uma sistematização a partir dos dados de Kurz e Fisher<sup>12</sup>, Viskanta<sup>13,14</sup> e Beckermann e Wang<sup>15</sup> do tipo de fenômeno a ser estudado com o respectivo nível de análise e a ordem de grandeza típica correspondente.

A divisão dos níveis de análise feita acima não é rigorosa pois, como será visto adiante, existem fenômenos que devem ser modelados nos vários níveis simultaneamente. Para melhor compreensão procurar-se-á relacionar o fenômeno em estudo com o nível de análise.

A nucleação e posteriormente o crescimento do próprio cristal, se dá pela adesão de átomos aos sítios do núcleo em crescimento. A **nível atômico**<sup>16</sup>, temos que pela caracterização das forças de ligação de uma liga e a descrição do modo de vibração dos átomos, usando-se técnicas estatísticas, é possível modelar a cinética de crescimento e a morfologia do cristal. Um exemplo de estudo em **escala atômica** descrito por Flemings<sup>17</sup> é apresentado na Figura 1.4 que mostra esquematicamente o processo de nucleação. Os átomos se agregam em embriões no líquido ou num substrato exterior e, ao atingirem uma temperatura abaixo da temperatura de fusão de equilíbrio termodinâmico, eles alcançam um raio crítico,  $r^*$ , tornando-se núcleos estáveis, passando a crescer rapidamente para formar um grão sólido.

---

<sup>1</sup> não se considera aqui a influência de fluxos convectivos na transição entre estruturas colunares para equiaxiais. Observa-se que forte convecção diminuirá o comprimento da zona dendrítica e favorecerá a formação de uma estrutura de grãos equiaxiais.

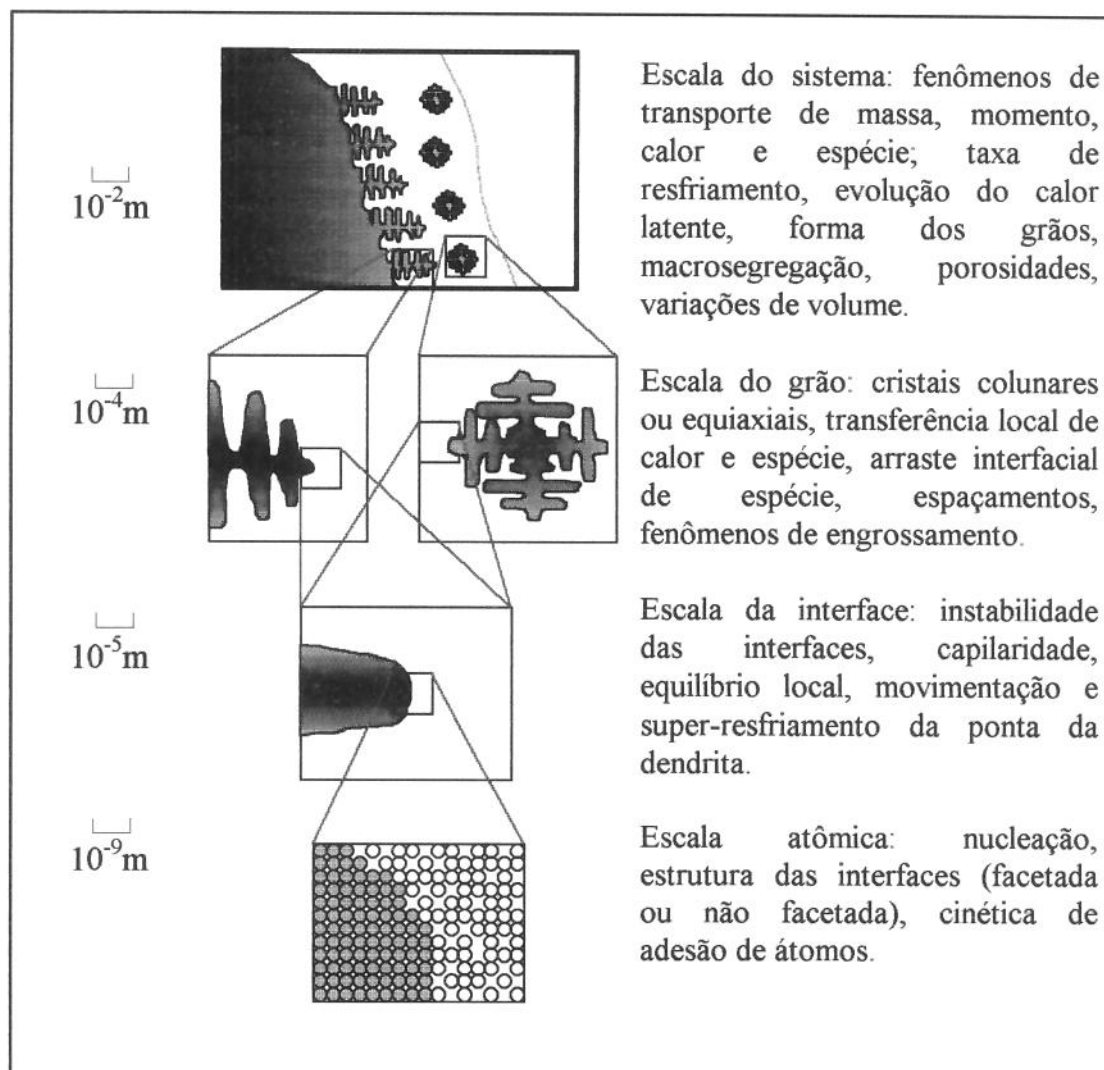


Figura 1.3 - Representação esquemática dos níveis de modelagem de diversos fenômenos físicos presentes no processo de solidificação dendrítica<sup>15</sup>.

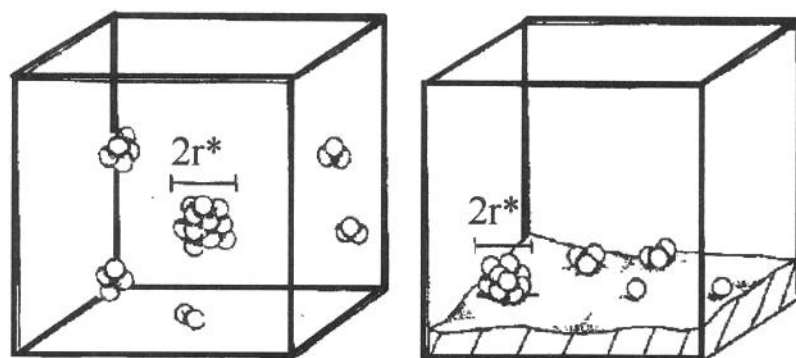


Figura 1.4 - Exemplo de modelagem em escala atômica: a) nucleação homogênea e b) nucleação heterogênea<sup>16</sup>.

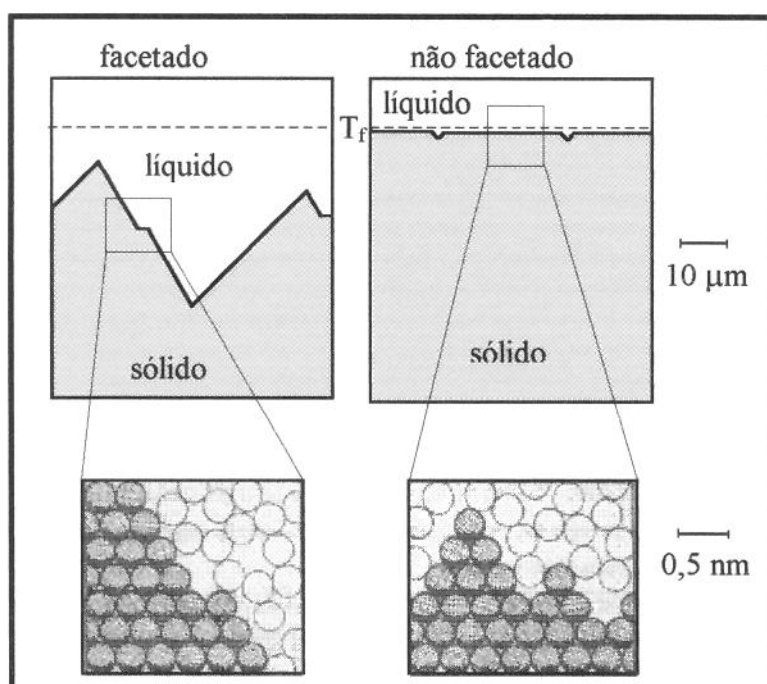


Figura 1.5 - Característica da interface sólido/líquido em escala atômica<sup>12</sup>.

Depois que o núcleo é formado segue-se a etapa de crescimento, na qual a morfologia é determinada por três efeitos<sup>12</sup>:

- a cinética de adesão de átomos a interface sólido/líquido;
- a capilaridade;
- a difusão de calor e massa.

Ainda na **escala atômica** temos que os estudos sobre a cinética de adesão de átomos à interface se concentram na característica desta interface sólido/líquido (facetada ou não facetada) durante o crescimento conforme a Figura 1.5<sup>16,12</sup>.

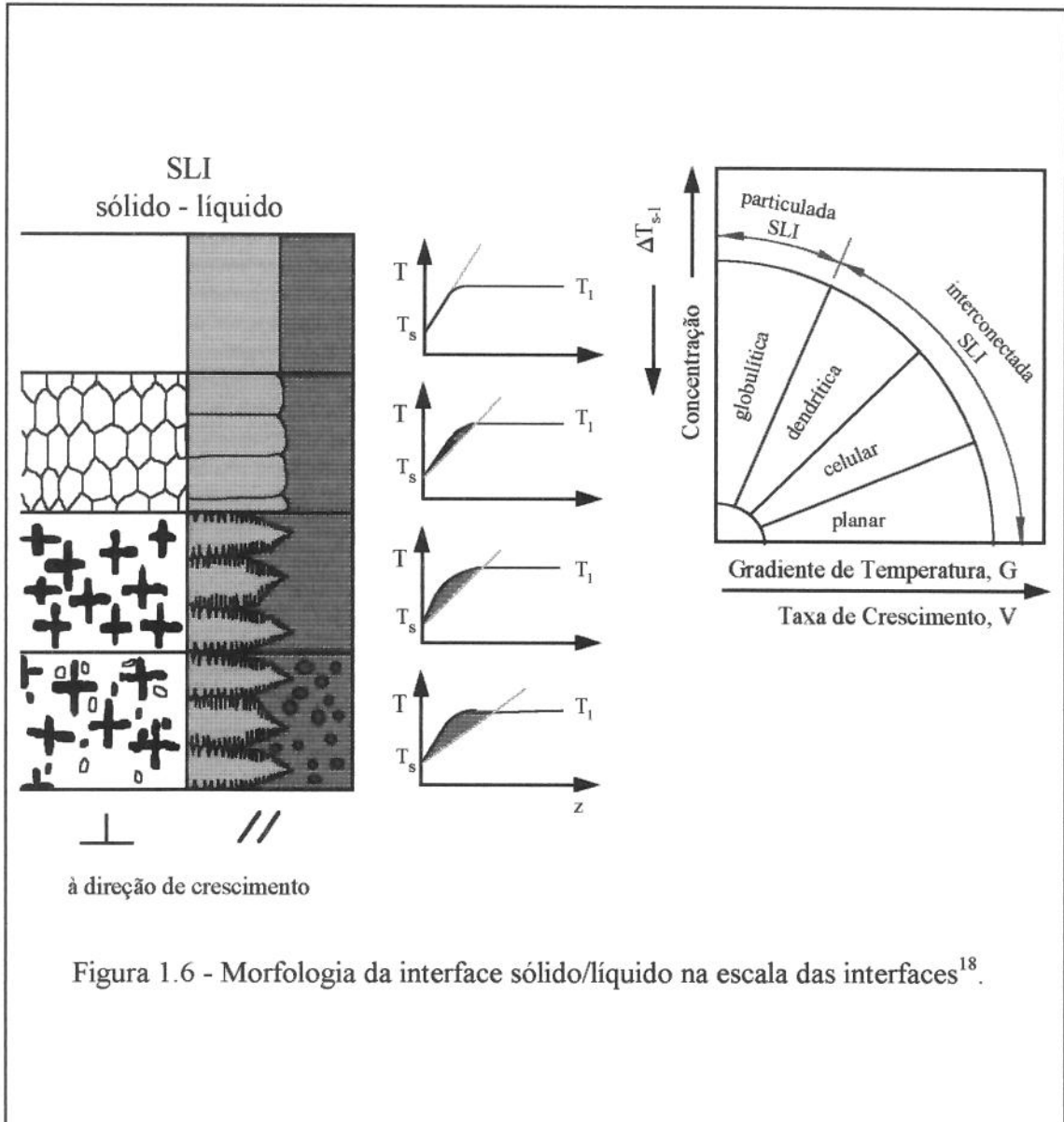
Uma interface facetada é particular dos não metais sendo caracterizada por uma alta entropia de fusão<sup>12</sup> devido a grande diferença entre as estruturas e ligações nas fases sólida e líquida. Numa interface não facetada ou difusa os átomos podem ser recebidos em qualquer sítio da superfície sólida e a forma do cristal é controlada pela difusão de calor (metais puros) ou soluto (ligas). Devido a anisotropia nas propriedades, tal como a energia interfacial, ocorre o crescimento de braços dendríticos. Este tipo de interface é caracterizada por uma baixa entropia de fusão.

Já na **escala da interface** a preocupação maior é com a instabilidade da interface, através do estudo da morfologia da interface sólido/líquido, onde podemos estabelecer a seguinte classificação, representada esquematicamente na Figura 1.6<sup>18</sup>.

- planar
- a - interconectada - celular
- dendrítica

- b - particulada - globulítica

A formação das morfologias mencionadas acima está diretamente ligada com a interação de dois eventos atuando na interface sólido/líquido<sup>12</sup>: a **capilaridade** e o **fluxo microscópico de calor e soluto**<sup>12,19</sup> (no caso de ligas). O efeito de capilaridade está relacionado com o grau de super-resfriamento<sup>12,19</sup>. Já o efeito do fluxo de calor e soluto pode ser analisado através da Figura 1.6 que mostra esquematicamente os vários tipos de interfaces sólido/líquido em função do super-resfriamento constitucional e da velocidade de extração de calor para ligas monofásicas<sup>18</sup>.



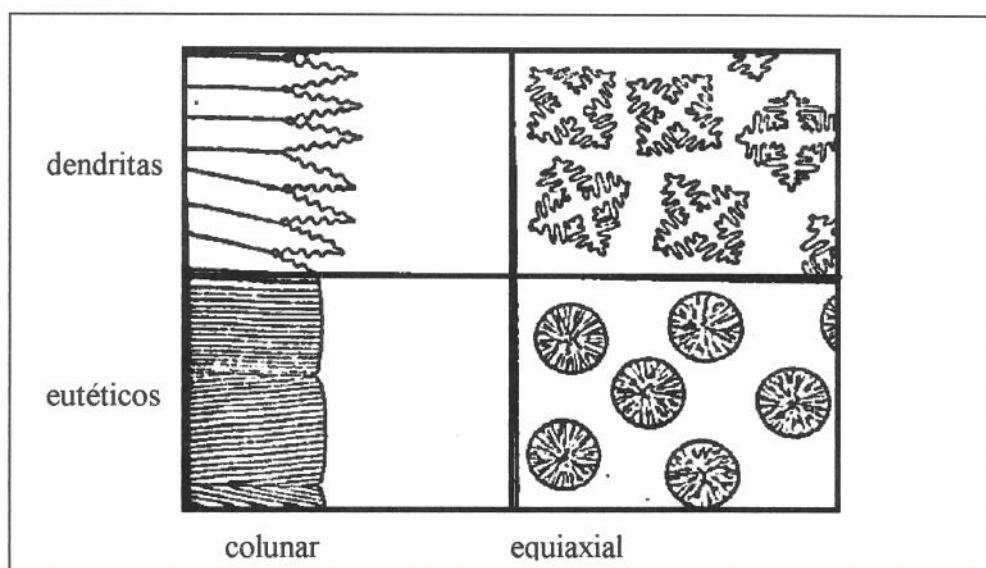


Figura 1.7 - Morfologias de crescimento dos metais.

Nos estudos a **nível da escala dos grãos** conhecido ainda como estudos a **nível microscópico** pode-se agrupar as mais importantes microestruturas de solidificação em duas classes de morfologia de crescimento<sup>20</sup>: dendritas e eutéticos.

Dependendo das condições de nucleação e do fluxo de calor, essas morfologias irão se formar como cristais equiaxiais (crescimento livre em um líquido super-resfriado) ou como cristais colunares (crescimento em um gradiente de temperatura positivo) conforme a Figura 1.7 .

No caso de dendritas, é importante em primeiro lugar distinguir<sup>20</sup> entre crescimento colunar (controlado pela difusão de soluto) e crescimento equiaxial (controlado pela difusão de calor e/ou soluto). O primeiro caso ocorre apenas em ligas ao passo que o último pode ocorrer tanto em substâncias puras como em ligas.

As principais diferenças<sup>2</sup> entre crescimento colunar e equiaxial são mostradas na Figura 1.8 . A mais importante variável que implica na transição de um para outro tipo de crescimento, tratando-se de escala microscópica, é o valor do gradiente de temperatura na interface sólido/líquido ( $G$ ) positivo para o crescimento colunar e negativo para o crescimento equiaxial.

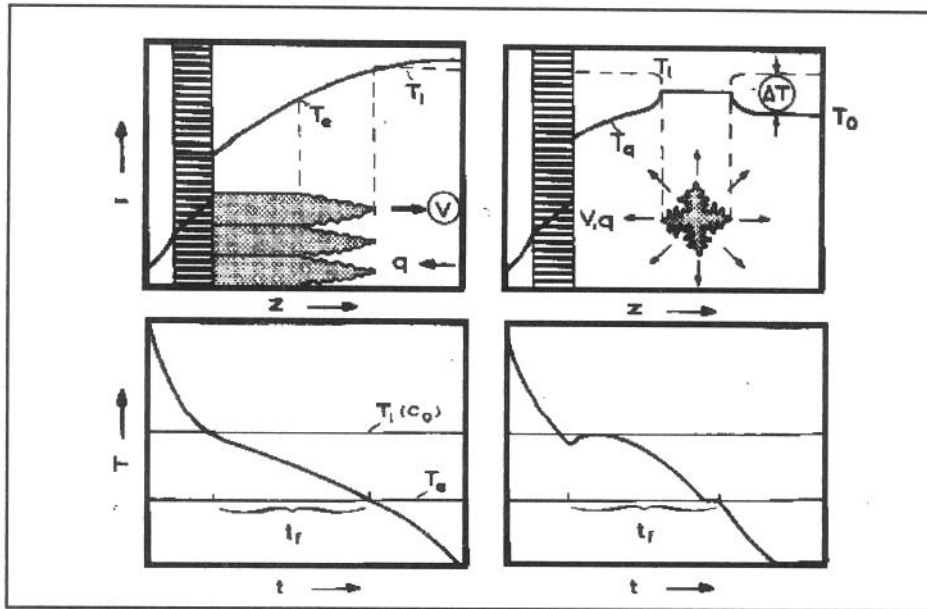


Figura 1.8 -Principais diferenças entre crescimento colunar e equiaxial<sup>12</sup>.

Para o caso de crescimento de dendritas equiaxiais é necessário levar em conta<sup>21</sup>, além das equações de balanço de calor com a lei da cinética da interface do grão, a equação que relaciona a difusão de soluto. No caso de eutéticos a concentração da liga é normalmente alta<sup>20</sup>, resultando que o crescimento será limitado, quase sempre, pela difusão de soluto. Diante disso, uma distinção entre crescimento colunar ou equiaxial não é necessária.

Existem 2 diferentes tipos de microestruturas eutéticas: regulares e irregulares (Figura 1.9). O primeiro é característico de sistemas metal/metalo e o segundo de eutéticos metal/não metal com é o caso de duas importantes ligas de fundição - Al-Si e Fe-C (ferro fundido), as quais devem ser modeladas de maneiras diferentes<sup>20</sup>.

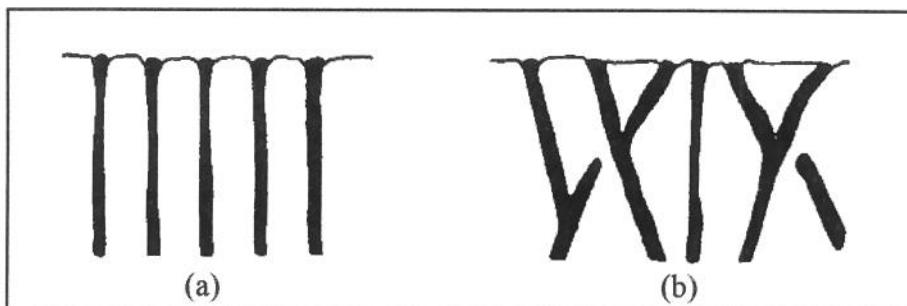


Figura 1.9 - Morfologias da estrutura eutética para o caso de crescimento colunar: a) regular b) irregular.



Os modelos microscópicos mencionados acima são importantes em si, mas seriam de pouca valia para a engenharia de materiais na indústria, caso não pudessem ser aplicados nas complexas situações encontradas na prática. Por outro lado, para auxiliar a engenharia de produção e desenvolvimento, muitos trabalhos e códigos computacionais foram desenvolvidos no **nível macroscópico**, chamado ainda de **escala do sistema**, desde a década de 50. Estes lidavam essencialmente com o transporte de calor e massa. Quase todos eles tem o inconveniente de não considerar a morfologia da interface entre líquido e sólido. É nesta região que as microestruturas primárias e os microdefeitos, características que afetam fortemente as propriedades finais do metal solidificado, se desenvolvem. Basicamente um **macro-modelo** lida com um ou mais das seguintes equações:

- equação de conservação de energia;
- equação de conservação da massa;
- equação de conservação do momento;
- equação de conservação espécie.

Desta forma, um modelo completo para simulação da solidificação de peças fundidas de formas complexas deveria incluir<sup>22</sup> tanto **macro-modelos** para descrever o fluxo de calor do metal para o molde, fluxo de fluido do metal líquido durante o preenchimento do molde, distribuição de tensões durante a solidificação da peça, quanto **micro-modelos** para avaliar a liberação de calor latente durante a solidificação, o fluxo de fluido na zona pastosa e a formação de microestruturas<sup>23,24,25</sup>. Além do mais, as interações entre o metal e o molde devem ser consideradas antes e após a solidificação.

A elaboração de um modelo que envolva todos estes grupos de equações é extremamente complicada e resulta em um alto custo computacional. Existe ainda uma série de dificuldades nesta combinação de micro/macro modelagem. Por exemplo<sup>20</sup>, a dificuldade de se modelar o crescimento dendrítico é devido principalmente ao fato que as equações de transporte de calor e massa devem ser resolvidas, em princípio, nos três níveis simultaneamente: ao nível da extremidade da dendrita, na desconhecida fração sólida do grão e no próprio fundido.

Assim, normalmente se estabelecem aproximações de modo a diminuir o número de equações envolvidas. Como exemplo desta metodologia considera-se a modelagem do sistema metal e molde representado na Figura 1.10<sup>26</sup>. Observa-se nesta Figura um perfil

típico de distribuição de temperatura ao longo do metal e do molde para um caso de fluxo de calor unidirecional e a curva de fração sólida na zona pastosa. Na modelagem deste sistema<sup>26</sup> foi aplicada a equação da conservação da energia na forma da equação de transferência de calor (macro-modelo) e a liberação de calor latente foi associada à evolução de fração sólida (micro-modelo).

Na Figura 1.11 é apresentado um fluxograma típico para a descrição micro/macrocópica da solidificação<sup>21</sup> do sistema da Figura 1.10. Simplificadamente, diríamos que em primeiro lugar deve-se calcular a evolução do campo de temperatura sem levar em conta qualquer super-resfriamento<sup>24</sup> (modelagem a nível macroscópico). Uma vez que o campo de temperatura é conhecido, a velocidade das isothermas correspondentes ao líquido e ao sólido pode ser deduzida, assim como o gradiente térmico na interface. A partir destes valores, o super-resfriamento de microestruturas colunares e os parâmetros da microestrutura (espaçamentos entre braços de eutéticos e dendritas) podem, por exemplo, ser calculados utilizando-se as mais recentes teorias de formação de microestruturas.

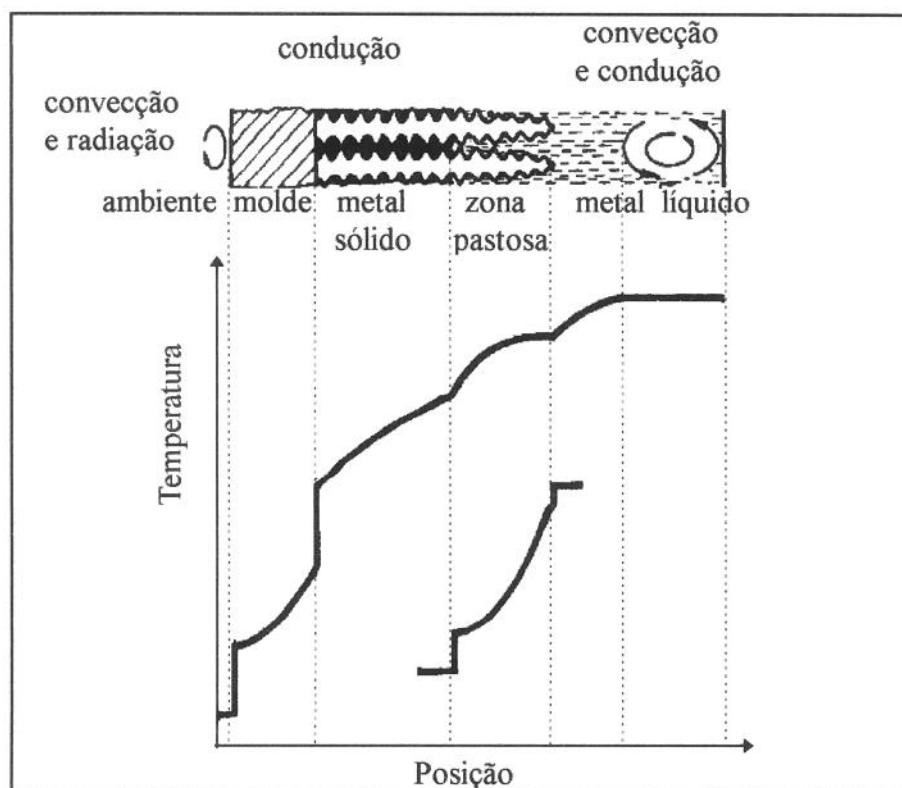


Figura 1.10 - Representação esquemática de um sistema metal e molde, com um perfil térmico típico de temperatura e a curva de fração sólida em função da temperatura para a zona pastosa.

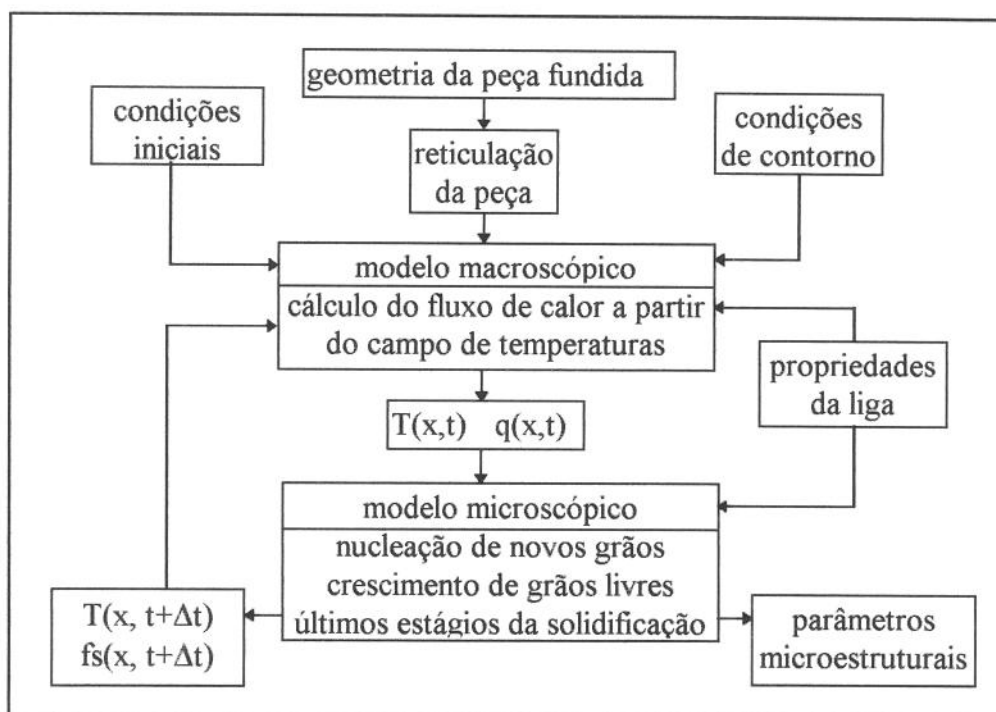


Figura 1.11 - Fluxograma esquemático da associação de modelos micro e macroscópicos.

Apesar do grande número de estudos desenvolvidos nesta área, a conjugação de todos estes modelos num só pacote computacional ainda não é possível<sup>27</sup>, sendo que os pacotes computacionais (*softwares*) atualmente disponíveis fazem uso de uma série de aproximações para se obter determinados parâmetros do processo em estudo.

A aplicação de tais pacotes na simulação do fluxo de calor num sistema metal e molde que descreva um processo real de fundição, encontra algumas dificuldades entre as quais podem ser destacadas<sup>1,2</sup>:

- a descrição geométrica da peça e a correspondente aplicação do modelo em duas e três dimensões;
- o tratamento adequado da evolução do calor latente de fusão durante a solidificação;
- a disponibilidade de dados precisos de propriedades termofísicas, principalmente a sua variação com a temperatura (inclusive para temperaturas elevadas), para os materiais que constituem a peça fundida e o molde e
- a resistência térmica na interface metal/molde e molde/ambiente.

#### 1.4 - Espaços Interdendríticos

De acordo com Flemings<sup>28</sup> e Feurer<sup>29</sup>, o controle do espaçamento dendrítico secundário ( $\lambda_2$ ) é importante porque junto com o espaçamento interdendrítico primário ( $\lambda_1$ ) determinam os espaçamentos de precipitados ou porosidades, afetando consideravelmente as propriedades mecânicas no estado bruto de fundição, como por exemplo a tenacidade. Nota-se ainda a aplicação de determinados tratamentos térmicos posteriores, como por exemplo a homogeneização, dependem desses espaçamentos.

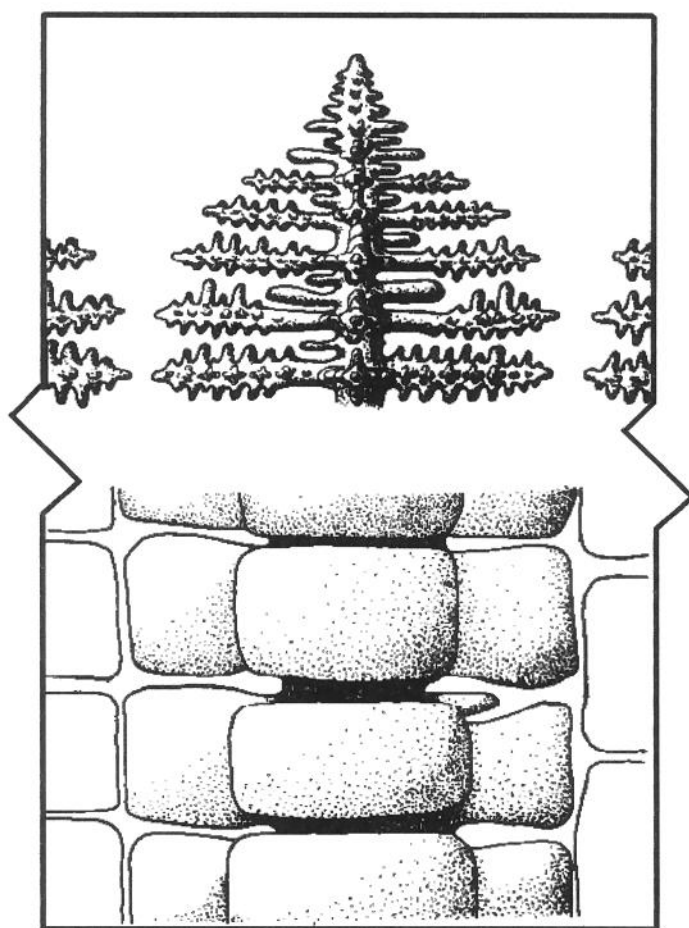


Figura 1.12 - Representação esquemática do mecanismo de crescimento de dendritas em estruturas colunares<sup>12</sup>.

Segundo Kurz<sup>12</sup> uma vez que o espaçamento primário é estabelecido, ele não mudará durante ou após a solidificação, o que não é verdade para os espaçamentos secundários. De acordo com o mecanismo proposto por Kurz<sup>12</sup> o crescimento de braços secundários de dendrita é iniciado bem próximo da extremidade do braço primário (Figura 1.12<sup>19</sup>). Pequenas perturbações vão crescer na interface sólido/líquido na forma de células, sendo algumas delas eliminadas por suas vizinhas e outras se tornam braços secundários crescendo perpendicularmente ao braço primário (no caso de cristais cúbicos). Os ramos maiores destes braços secundários crescem eliminando, por fusão, os menores e uma vez que os campos de difusão das extremidades da dendrita entram em contato com os ramos crescendo nas dendritas vizinhas, eles encerram o crescimento. Desta forma, com o decorrer da solidificação ocorre um aumento do espaçamento entre braços secundários de dendrita.

Em trabalhos mais recentes, já se analisam a interação de grupos de dendritas<sup>17</sup>, onde se procura entender os fatores que afetam o espaçamento entre braços primários de dendritas e o desenvolvimento de análises para predizer estes espaçamentos.

## 1.5 - Processo de Fundição de Precisão

A produção de peças metálicas pelo processo de fundição de precisão tem apresentado um crescimento considerável nos últimos anos em função das suas características específicas tais como: ótimo acabamento superficial, alta precisão dimensional, microestrutura com um grau de refino conveniente e adequação para a produção em série, mesmo para metais com alto ponto de fusão, como é o caso de superligas e de aços ferramenta. Assim esse processo mostra-se altamente competitivo em termos de custo qualidade quando se necessita de uma alta escala de produção<sup>30-34</sup>.

O fluxograma das etapas do processos de fundição de precisão ou microfundição, também conhecido como “processo em cera perdida” é apresentado na Figura 1.13<sup>35</sup>.

Os modelos são fabricados através da injeção de cera em matrizes metálicas montadas em máquinas apropriadas. Uma composição média da cera fornecida pelo *Metals Handbook*<sup>35</sup> indica cera de carnaúba (30 a 70 %), resinas (20 a 60 %), Plástico (0 a 20%) e outros aditivos (0 a 5%). Após a retirada da matriz os modelo são montados em torno de uma haste de cera (colados por fusão) formando a árvore de modelos.

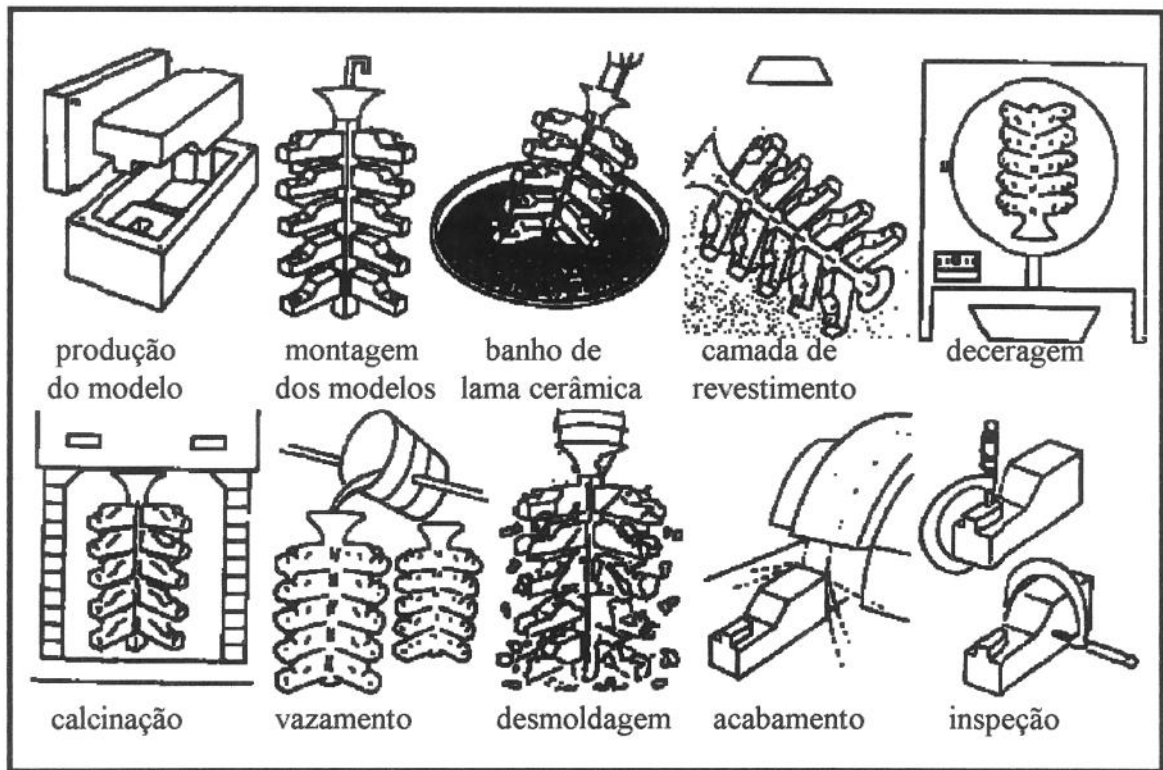


Figura 1.13 - Fluxograma das etapas do processo de fundição de precisão.

A operação de revestimento cerâmico consiste em mergulhar a árvore em um banho de **lama cerâmica** e a seguir aplicar sobre esta lama úmida uma camada de **revestimento** a base de material refratário seco e granulado. A árvore assim capeada é deixada secar em um ambiente com temperatura e umidade controlada de modo a garantir a reprodutibilidade dimensional das peças. Após a secagem a operação é repetida várias vezes, usando-se progressivamente material mais grosseiro, de modo a se obter uma casca com espessura adequada. A **lama cerâmica** é feita a base de um ligante inorgânico<sup>31</sup> (normalmente a sílica coloidal, o silicato de sódio ou o silicato de etila) e material refratário em pó (o silicato de zircônio ou a sílica vítrea). O **revestimento** é realizado em um tanque com leite fluidizado consistindo de óxido de zircônio (chamote ou mulita). No processo de fundição de precisão que utiliza casca cerâmica<sup>1</sup> tem-se a repetição das operações descritas acima de 5 a 12 vezes obtendo-se cascas com espessuras de 8 a 15 mm.

<sup>1</sup> existe ainda o processo com molde sólido que se restringe a produção de peças pequenas (em média 25 g) sendo o processo em casca dominante nas aplicações industriais<sup>30</sup>.

Depois realiza-se a **deceragem** em autoclave para retirar a cera por fusão do interior do molde. O molde a seguir é enviado para um forno para **calcinação** em alta temperatura (cerca de 1100°C) onde seca completamente e adquire resistência mecânica, perdendo também qualquer traço de cera restante da deceragem.

Saindo do forno de calcinação o molde, ainda quente, recebe o metal líquido. O vazamento pode ser realizado por ao ar, ao vácuo ou por aspiração<sup>36</sup>. A seguir são realizadas as operações de desmoldagem e acabamento.

## 1.6 - Objetivos deste Trabalho

O processo de fundição por cera perdida caracteriza-se por ser adequado e vantajoso na produção de peças com geometria intrincada, requisitos estreitos de tolerância dimensional e acabamento superficial, bem como nos casos em que a redução ou eliminação de usinagem representa vantagem técnica e/ou econômica<sup>37</sup>.

A obtenção de ferramentas para diversas operações (forjamento, corte, conformação de plástico, etc) representa um caso típico em que todas aquelas características são contempladas. Desta forma a aplicação do processo de fundição de precisão na produção de ferramentas pode trazer vantagens em relação ao processo convencional de usinagem intensiva de um bloco fundido e conformado mecanicamente<sup>38-40</sup>. Algumas destas vantagens já estão plenamente estabelecidas:

a - Redução do custo de fabricação:

Obtida principalmente, através da diminuição (ou até mesmo eliminação) do tempo despendido com as operações de usinagem, as quais são bastante dificultadas pelas características intrínsecas dos materiais utilizados na confecção das ferramentas (elevada resistência ao desgaste).

b - Liberdade no projeto da ferramenta:

O processo de fundição de precisão por cera perdida não tem limitação quanto à reprodução de formas complexas.

c - Aumento da vida útil:

Em consequência do item a, torna-se viável fabricar as ferramentas com materiais que apresentam maior resistência ao desgaste e, conseqüentemente, maior vida útil.

Há, porém, uma abordagem ainda pouco explorada que possui potencial para tornar a aplicação do processo de fundição de precisão na confecção de ferramentas, mais do que vantajosa, necessária para a obtenção de um salto de qualidade no desempenho destas ferramentas. Lembrando que os materiais empregados possuem microestruturas caracterizadas por elevada fração volumétrica de carbonetos primários (em grande parte responsável pela resistência ao desgaste e, nas ferramentas de corte, pela ação de corte), esta abordagem baseia-se na obtenção de um direcionamento favorável destes carbonetos nas regiões mais solicitadas da ferramenta (crescimento na direção perpendicular à superfície da peça). Há resultados, na literatura, que mostram a melhoria da resistência ao desgaste em decorrência do direcionamento e controle dos carbonetos primários<sup>41,42</sup>.

A obtenção deste controle da microestrutura bruta de fundição depende, para uma dada liga, das condições térmicas prevaletentes durante a solidificação desta no interior do molde. No caso específico do controle da morfologia e tipo dos carbonetos eutéticos, a velocidade de resfriamento é um parâmetro importante.

Assim, em linhas gerais, na linha de pesquisa de fundição de precisão de aços ferramentas, os seguintes aspectos tem particular importância:

a - Determinar as condições térmicas prevaletentes na solidificação de ligas metálicas em moldes do processo de fundição por cera perdida:

Observa-se que este assunto é abordado pela literatura de maneira imprecisa, destacando-se: a ausência de dados de propriedades termofísicas dos materiais que constituem o molde e da liga metálica; a falta de dados da resistência térmica variando com o tempo na interface metal/molde cerâmico, metal/resfriador e entre o molde e o meio circundante; equações que relacionem a variação da entalpia com a variação da temperatura de maneira precisa.

b - Estudar a viabilidade da aplicação de técnicas para alterar as condições térmicas determinadas no item a:

Ao contrário do que ocorre com outros processos de fundição (molde de areia e molde permanente), não estão estabelecidas no caso de fundição de precisão por cera



perdida, técnicas para alteração das condições térmicas vigentes, como, por exemplo, a utilização de resfriadores e/ou de espessura de molde variável.

Os resultados obtidos neste trabalho constituirão base para a realização, numa etapa posterior, de estudos visando o controle microestrutural de fundidos de precisão.

Determinou-se a utilização de um aço rápido tipo M2 para a condução dos experimentos em função de três fatores:

a - a microestrutura bruta de fundição deste aço é sensível a variação de parâmetros térmicos<sup>43-46</sup>;

b - o emprego deste aço no estado bruto de fundição visando a obtenção de ferramentas fundidas por fundição de precisão não é um assunto inexplorado, havendo trabalhos publicados neste sentido<sup>47-50</sup>;

c - o desenvolvimento de ferramentas por fundição de precisão é uma linha de pesquisa conduzida pelo Laboratório de Fundição do IPT, que está inserido no âmbito deste trabalho.

A partir das considerações acerca da importância da utilização da modelagem e simulação dos fenômenos relacionados com a solidificação de ligas metálicas, associado ao controle do processo e às características dos produtos obtidos, tem-se como principais objetivos deste trabalho:

- o desenvolvimento de um método numérico para a simulação da solidificação de ligas metálicas aplicado ao processo de fundição de precisão;

- o desenvolvimento de um método numérico aplicável à determinação do coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde ( $h$ );

- a avaliação da influência da velocidade de resfriamento nas microestruturas de estado bruto de fundição de um aço rápido M2, envolvendo tipos e morfologias dos carbonetos eutéticos formados e valores do espaçamento interdendrítico secundário;

- a validação do método proposto através do seu emprego na simulação da solidificação da liga 63,5% de Cu e 36,5% de Zn em moldes de areia e de cobre.

Na implementação do modelo numérico para a simulação da solidificação de ligas metálicas, será estudado o emprego do método numérico de diferenças finitas explícito.

O modelo desenvolvido deverá permitir inicialmente a determinação dos seguintes parâmetros do processo de solidificação:

- evolução dos perfis de temperatura no tempo no metal e no molde;
- distribuição de temperatura ao longo do sistema metal e molde em um determinado instante;
- gradientes de temperatura e velocidades de resfriamento ao longo do sistema metal e molde;
- a evolução de fração sólida;
- a posição das isoterms *solidus* e *liquidus* durante a solidificação;
- o tempo local de solidificação;
- a determinação do espaçamento interdendrítico primário e secundário;

Paralelamente ao desenvolvimento dos modelos numéricos citados anteriormente, será realizada uma série de experiências de laboratório visando a comprovação e a otimização dos modelos, no que diz respeito a determinação de parâmetros térmicos e microestruturais.

## 1.7 - Referências Bibliográficas do Capítulo 1

- 1-DANTZIG, J.A. Mathematical modeling of solidification processes. In: TECHNOLOGY FOR PREMIUM QUALITY CASTINGS, **Proceedings**.The Metallurgical Society, 1988, p.41-55.
- 2-KIM. J.H.; LIM,I.C.; YANG,H. Comparison of four different latent heat models during the phase-change process. AFS Transactions,v. 92, p.947-54,1992.
- 3-PRAKASH, C. Two-phase model for binary solid-liquid phase change,part 1: governing equations. Numerical Heat Transfer, Part B, v.18, 1990,p.131-145.
- 4-PIWONKA, T.S. Process Modeling and Control in Foundry Operations. Journal of Metals, fev. 1989,p.38-42.
- 5-SAHM, P.R.; HANSEN, P.N. Numerical Simulation and Modeling of Casting and Solidification Process for Foundry and Casthouse. Aachen, Ed. CIATF,1984.
- 6-CARAM, R. Modelagem Matemática, Simulação e Otimização do Processo de Solidificação. Campinas,1988. 192p. Tese (Doutorado) - Faculdade de Engenharia de Campinas, UNICAMP.
- 7-GARCIA, A. Solidificação dos Metais. - Apostila do Curso - Faculdade de Engenharia Mecânica - UNICAMP, 1980
- 8-MARIOTTO, C.L.; ALBERTIN, E.;FUOCO,R. Sistemas de Enchimento e Alimentação de Peças Fundidas. 1.ed. São Paulo, Édile Serviços Gráficos e Editora, ABM, 1987.
- 9-BERRY, J.T.; PEHLKE, R.D. Modeling of Solidification Heat Transfer.Metals Handbook, 9ed.,v.15 - Casting - ASM 1988 - p.858-66.
- 10-SMITH, G.D. Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods. 3 ed. New York, Oxford University Press, 1985.
- 11-KIMINAMI, C.S.; BRUCK, R.S. Simulação Numérica e Modelação de Processos de Fundição e Solidificação. Série Monográfica número 02 - Ministério das Relações Exteriores -Boon - 1986.

- 12-KURZ, W.; FISHER, D.J. Fundamentals of Solidification. 3.ed. Switzerland, Trans Tech Publications, 1992.
- 13-VISKANTA, R. Transport phenomena during solidification of binary systems, In: ENCIT- Encontro Nacional de Ciências Térmicas, 4., Rio de Janeiro, dez. 1992, **Anais**. ABCM, p. P-39-P-50.
- 14-SANTOS, R.G.; MELLO, M.L.M.M. - Simulação da Solidificação de Metais e Ligas Através da Aplicação de Métodos Numéricos, In: IX CBECIMAT, Águas de São Pedro, 1990. **Anais**. p. 823-826.
- 15-BECKERMANN, C.; WANG, C.Y. Incorporating Interfacial Phenomena in Solidification Models. Journal of Metals, v.46, jan. 1994, p.42-7.
- 16-DAVIES, V.L. Modelling Solidification Processes and Computer Aided Design of Castings. In: Centennial Celebration - University of Sheffield, Sheffield, 1984. **Proceedings**. p.101-13.
- 17-FLEMINGS, M.C. - Opening Adress: Process modeling and process development. In: SOLIDIFICATION TECHNOLOGY in the foundry and cast house, Coventry, set. 1980. **Proceedings**. The Metals Society, 1980. p.3-14.
- 18-SAHM, P.R. and HANSEN, P.N. - Numerical Simulation and Modeling of Casting and Solidification Process for Foundry and Casthouse CIATF - 1984
- 19-TRIVEDI, R.; KURZ, W. Solidification Microstructures: A conceptual approach. Acta Metall Mater, v.42, No.1, 1994, p.15-23.
- 20-KURZ, W.; TRIVEDI, R. Recent Advances in Modeling of Solidification Microstructures. In: Solidification, London, 1987. **Proceedings**. The Institute of Metals, 1988. p.1-12.
- 21-RAPPAZ, M.; LINDSCHEID, H. Micro-/Macroscopic Modeling of Equiaxed Solidification. In: STATE OF THE ART OF COMPUTER SIMULATION OF CASTING AND SOLIDIFICATION PROCESSES, Strasbourg, 1986. **Proceedings**. Strasbourg, Les éditions de physique, 1986. p.277-84.

- 22-UPADHYA, G.; PAUL, A.J. Comprehensive casting analysis model using a geometry-based technique followed by fully coupled 3-D fluid flow, heat transfer and solidification kinetics calculations. AFS Transactions, v. 92, 1992,p.925-33.
- 23-STEFANESCU, D.M.; UPADHYA, G.; BANDYOPADHYAY, D.; CHEN, I.G. Modeling the Evolution of Equiaxed Microstructures in Castings. Jornal of Metals, fev 1989,p.22-25.
- 24-RAPPAZ, M.; STEFANESCU, D.M. Modeling of Microstructural Evolution. Metals Handbook, v.15 - Casting, 9. , 1988, p.883-91.
- 25-STEFANESCU, D.M.; UPADHYA,G.; BANDYOPADHYAY, D. Heat Transfer-Solidification Kinetics Modeling of Solidification of Castings. Metallurgical Transactions A, v.21, 1990, p.997-1005.
- 26-CLYNE, T.W. Numerical modelling of directional solidification of metallic alloys.Metal Science, v.16, set.1982, p.441-50.
- 27-STEFANESCU, D.M. Critical Review of the Second Generation of Solidification Models for Castings: Macro Transport-Transformation Kinetics Codes. In: SIXTH CONFERENCE IN A SERIES ON MODELING CASTING AND WELDING PROCESS, Palm Coast,1993. **Proceedings**. TMS, p.3-20.
- 28-FLEMINGS, M.C. Solidification Processing. 1 ed. New York, Ed. McGraw-Hill,1974.
- 29-FEURER, U. Influence of Alloy Composition and Solidification Conditions on Dendrite Arm Spacing, Feeding and Hot Tearing Properties of Aluminium Alloys.In: THE SYMPOSIUM ON QUALITY CONTROL OF ENGINEERING ALLOYS, Delft, 1977. **Proceedings**. p.131-45.
- 30-STURM, J.C.; SAHM, P.R. Computer simulation for the solidification of investment casting process, In: Seventh world conference on investment casting, Munich,1988,p. 13.01-13.16..
- 31-PIWONKA, T.S.; JORDAN, C.; BERRY, J.T. - Process modeling investment casting: a state of the art asseement, In: Seventh world conference on investment casting, Munich, 1988, p.12.01-12.10.

- 32-CHANDRA, U. Benchmark problems and testing of a finite element code for solidification in investment castings, International Journal for Numerical Methods in Engineering, v 30, 1990, p. 1301-1320.
- 33-HOGAN, R.E. Thermal analysis of the cooling and solidification of investment casting, In: First international conference on transport phenomena in processing, Hawaii, 1992,p. 352-361.
- 34-GANDIN, Ch. A.; RAPPAZ, M.; TINTILLIER, R. Three-dimensional probabilistic simulation of grain structures: application to superalloy precision castings, Metallurgical Transactions A, v 24A, 1993,p.467-479.
- 35-HORTON, R.A. Investment Casting. Metals Handbook, 9ed.,v.15 - Casting - ASM 1988, p.253-69.
- 36-ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE FUNDIÇÃO. Fundição de Precisão/Microfusão. São Paulo, 2.ed., MIC-CONSIDERR/ABIFA, 1986
- 37-MARIOTTO, C.L.; PINTO, E.O.C. Fundição de precisão: uma tecnologia sofisticada em desenvolvimento no IPT, Metalurgia, v.29, n.182, jan. 1983, p.77-82.
- 38-NICHOLS, M. A. Precision Cast Tooling, Tool and Manufacturing Engineer, p.48-50, ago. 1965.
- 39-STUTZMAN, G. D. Cast tooling gets better, American Machinist, v.113, n.3, p.93-96, fev. 1969.
- 40-SREDEN, M. J. Who's afraid of cast-to-size tooling, AFS Transactions,v.77, p.9-12, 1977.
- 41-TSYPIN, I. I. et al Influence of  $M_7C_3$  carbides orientation on the wear resistance of 300kh20DNF white iron - Translated of Metallovedeniei Termisheskaya Obratobka Metallov, n.10, p.26-28, out. 1991.
- 42-SU, J. Y. et al An investigation of abrasive wear resistance of unidirectionally solidified high chromium iron, Wear of Materials, p.621-624, 1985.
- 43-YU, A. et al Structure and properties of high-speed steels in relation to the cooling rate in the temperature range of primary crystallization, Translated of Metallovedenie i Termisheskaya Obratobka, Metallov, n.6 p. 44-46, jun. 1979.

- 44-FREDRIKSSON, H. & NICA, M. The influence of vanadium, silicon and carbon on the eutectic reaction in M2 high speed steels, Scandinavian Journal of Metallurgy, v. 8, p. 243-253, 1979.
- 45-FISHMEISTER, H.S et al The role of  $M_2C$  carbide in high speed steel, p.15-19, 1986.
- 46-KARAGOZ, S. et al Solidification of high speed steels, Metallurgical Transactions A, v. 20A, p.2133-2148, out. 1989.
- 47-BEELEY, P.R. & SHOKUHFAR, A. Some developments in cast steels for tooling, In: First International Steel Foundry Congress, Chicago, p.173-182, 1985.
- 48-BEELEY, P.R. & SHOKUHFAR, A. Cast tool steels, The British Foundryman, p.289-296, July, 1985.
- 49-BEELEY, P.R. Cast steels for tools and dies: a review, The British Foundryman, p.441-445, Nov. 1986.
- 50-SHOKUHFAR, A. Solidification phenomena and properties of some cast tools steels, In: Proceedings of the Sixth International and Steel Congress, Nagoya, p. 721-728, 1990.

## 2 - MODELAGEM NUMÉRICA DA SOLIDIFICAÇÃO DE METAIS E LIGAS METÁLICAS

### 2.1 - Problemas de Fronteira Móvel

Neste capítulo serão abordados os problemas relativos a modelagem do fenômeno da solidificação de metais e ligas metálicas. Em primeiro lugar serão discutidas as dificuldades inerentes aos casos de condução de calor com mudança de fase e no capítulo 4 serão apresentados os esquemas numéricos utilizados neste trabalho para se resolver este tipo de problema.

Muitos problemas de engenharia envolvem a transferência de calor acompanhada de **mudança de fase** no meio que está conduzindo o calor ou **mudança de composição** devido a certas reações químicas que se propagam através do meio. Tais fenômenos são normalmente acompanhados por liberação ou absorção de energia térmica na zona onde ocorrem. A energia liberada ou absorvida é, respectivamente, distribuída ou retirada do sistema circunvizinho<sup>1</sup>.

A característica essencial e comum neste tipo de sistema é que existe uma interface separando duas regiões com diferentes propriedades termofísicas e esta interface se move em função do tempo, contribuindo para tornar o problema não linear<sup>1</sup>. Nesta interface a energia é liberada ou absorvida.

No caso de problemas de condução envolvendo fusão ou solidificação, esta energia é o calor latente. Para a resolução de tais tipos de problemas é necessário a determinação do modo e da taxa com a qual a interface se move. Este problema é essencialmente não linear, de forma que soluções específicas para cada caso devem ser encontradas e não podem ser superpostas. Este problema se diferencia dos problemas usuais de condução de calor pelo tratamento da condição de contorno na interface sólido/líquido. Será feito uma breve descrição de como é feito este tratamento e das dificuldades inerentes ao mesmo.

Um caso importante de condução de calor envolvendo mudança de fase, para o qual existe solução exata, é o caso geral de condução transiente unidirecional num sólido com propriedades constantes com a temperatura e nenhuma geração de energia interna. Stefan<sup>2</sup> em 1891 foi um dos primeiros a discutir a solução desta equação com fronteira móvel. Ele



estudou a taxa de formação de gelo nos mares polares e por esta razão o problema de condução de calor com fronteira móvel é conhecido na literatura como **problema de Stefan**.

Na realidade a primeira solução exata foi determinada por Franz Neumann, que a apresentou em seus trabalhos por volta de 1860. Contudo, eles não foram publicados antes de 1912. A **solução de Neumann** corresponde ao caso onde a água é um corpo semi-infinito que começa a solidificar com a frente de solidificação se movendo na direção positiva, para o qual temos uma equação parabólica para cada fase<sup>3</sup>, sendo as condições de contorno e iniciais simples e bem definidas<sup>2</sup>.

A solução deste problema fornecida por Neumann, considerando a difusividade térmica do sólido e do líquido constante com a temperatura e a posição em cada estado, assim como a generalização da solução de Neumann, são dadas por Carslaw e Jaeger<sup>4</sup>. Para outras condições de contorno, ou para cilindros e esferas não existe solução exata<sup>5</sup> aplicáveis a casos práticos de fundição.

O método de solução apresentado por Neumann foi estendido (soluções analíticas aproximadas) para o tratamento de por exemplo: propriedades termofísicas variando linearmente com a temperatura, condição de contorno do tipo convectiva na interface metal/molde e para outras geometrias. Uma revisão de tais soluções foi realizada por Lunardini<sup>6</sup> e por Crank<sup>7</sup>.

Apesar dos métodos de soluções analíticas e analíticas aproximadas fornecerem soluções que podem ser parametrizadas, elas tem uma aplicação limitada devido as restrições impostas para a sua solução. Surge daí a necessidade de se utilizar os métodos numéricos.

O tratamento do calor latente associado a mudança de fase constitui-se num dos principais problemas na modelagem da solidificação de metais. Por exemplo, para o caso da solidificação de metais puros ou de ligas eutéticas, temos uma situação similar a apresentada na Figura 2.1, ou seja, as fases líquida e sólida estão separadas por uma interface plana. Considerando o caso de solidificação unidirecional, coordenadas retangulares, sem convecção no metal líquido, sem redistribuição de soluto e propriedades termofísicas do

metal variáveis com a temperatura e com a posição, as equações diferenciais de conservação da energia que governam o fenômeno são dadas por:

$$\rho_{cl}(x, T) \cdot c_{cl}(x, T) \cdot \frac{\partial T_{cl}(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ k_{cl}(x, T) \cdot \frac{\partial T_{cl}(x, t)}{\partial x} \right] \quad \text{para } 0 \leq x < S_f \quad (2.1)$$

$$\rho_{cs}(x, T) \cdot c_{cs}(x, T) \cdot \frac{\partial T_{cs}(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ k_{cs}(x, T) \cdot \frac{\partial T_{cs}(x, t)}{\partial x} \right] \quad \text{para } S_f \leq x < S_i \quad (2.2)$$

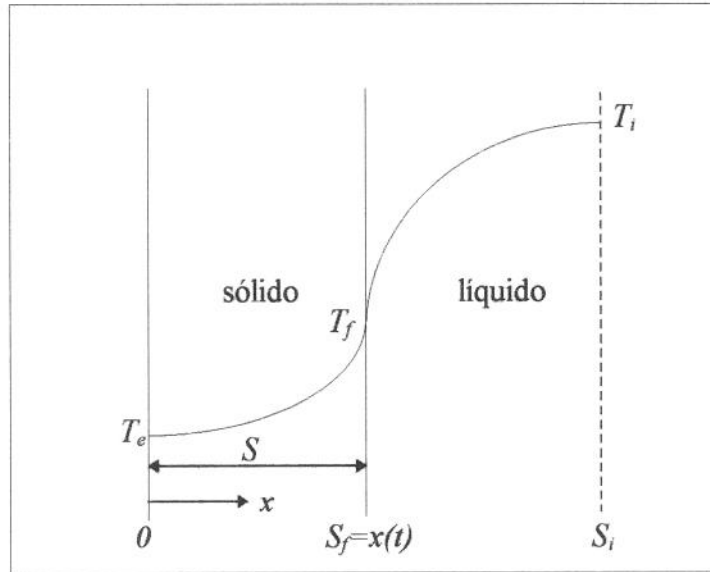


Figura 2.1 - interface sólido/líquido plana para o caso da solidificação de metais puros e ligas eutéticas.

Existem duas relações fundamentais que devem ser satisfeitas na interface sólido/líquido<sup>1</sup>. Em primeiro lugar a temperatura na interface sólido/líquido deve ser contínua e igual a temperatura de fusão do metal:

$$T_{cl} = T_{cs} = T_f \quad \text{para } S_f = x(t) \quad (2.3)$$

Em segundo lugar, o balanço de energia deve ser satisfeito na interface sólido/líquido de acordo com a equação 2.4<sup>5,8,1,9,10,11,3</sup>:

$$q_{cs} - q_{cl} = \frac{dL_f}{dt} \quad (2.4)$$

sendo  $q_{cs}$  e  $q_{cl}$  respectivamente os fluxos de calor saindo e entrando na interface sólido/líquido. Define-se ainda:

$$\frac{dL_f}{dt} = L_f \cdot \rho \cdot \frac{dS_f}{dt} \quad (2.5)$$

onde  $dL_f$  é o calor latente liberado quando a frente de solidificação se move numa distância  $dS_f$ . Substituindo 2.5 em 2.4 obtemos:

$$q_{cs} - q_{cl} = L_f \cdot \rho \cdot \frac{dS_f}{dt} \quad (2.6)$$

ou seja, o fluxo líquido de calor através da interface sólido/líquido é igual a energia liberada na interface por unidade de área por unidade de tempo como resultado da liberação de calor latente durante a solidificação<sup>1</sup>. A equação 2.6 despreza as diferenças de massa específica entre as fases sólida e líquida de modo a atender a consideração de que não existe convecção no metal líquido, apenas condução.

$$\rho_{cs} = \rho_{cl} = \rho \quad (2.7)$$

A equação 2.6 pode ser reescrita como<sup>5</sup>:

$$\left[ k_{cs} \cdot \frac{\partial T_{cs}}{\partial x} - k_{cl} \cdot \frac{\partial T_{cl}}{\partial x} \right]_{x=S_f(t)} = L_f \cdot \rho \cdot \frac{dS_f}{dt} \quad (2.8)$$

Para o molde temos:

$$\rho_m(x, T) \cdot c_m(x, T) \cdot \frac{\partial T_m(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ k_m(x, T) \cdot \frac{\partial T_m(x, t)}{\partial x} \right] \quad (2.9)$$

As condições de contorno podem ser reunidas em três categorias: do tipo essencial, do tipo natural e do tipo convectiva, que são apresentadas esquematicamente a seguir para diversas posições no metal e no molde (Figura 2.2):

<sup>1</sup> caso não seja uma frente plana, ao invés de  $\frac{dS}{dt}$  seria  $1 - f_s$ , ou seja, o quanto de sólido que se formou na zona pastosa<sup>12</sup>.

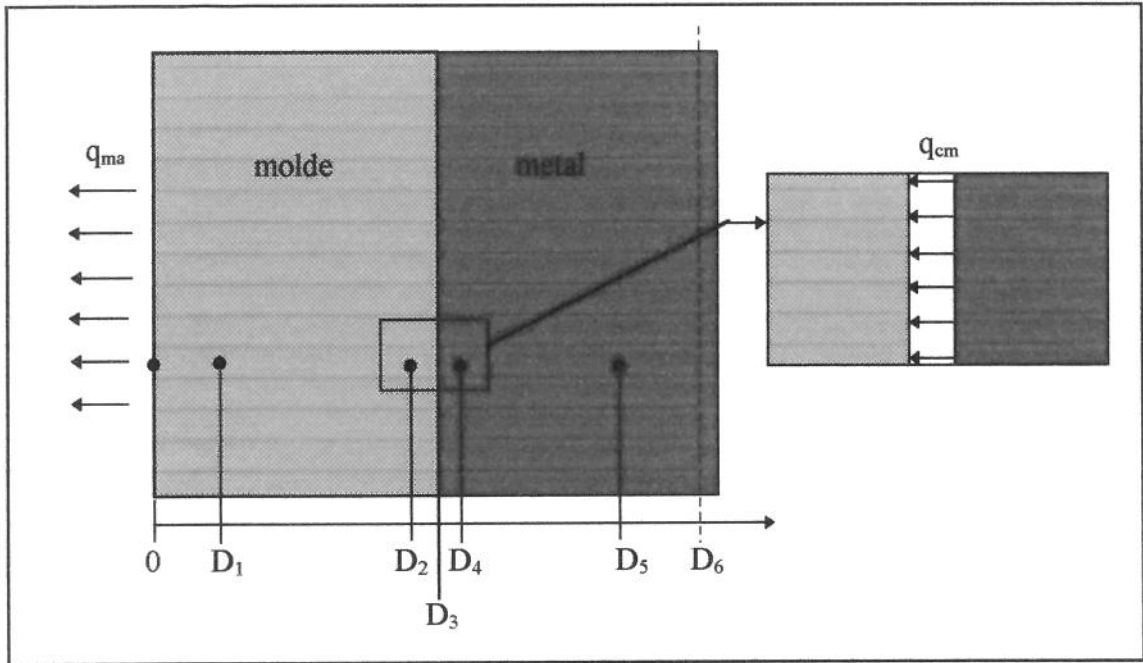
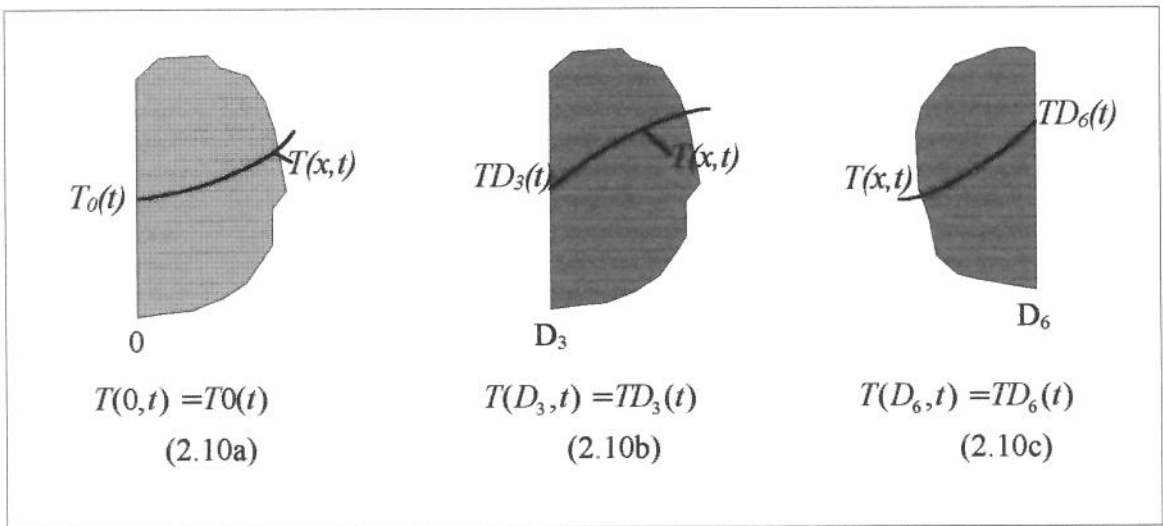


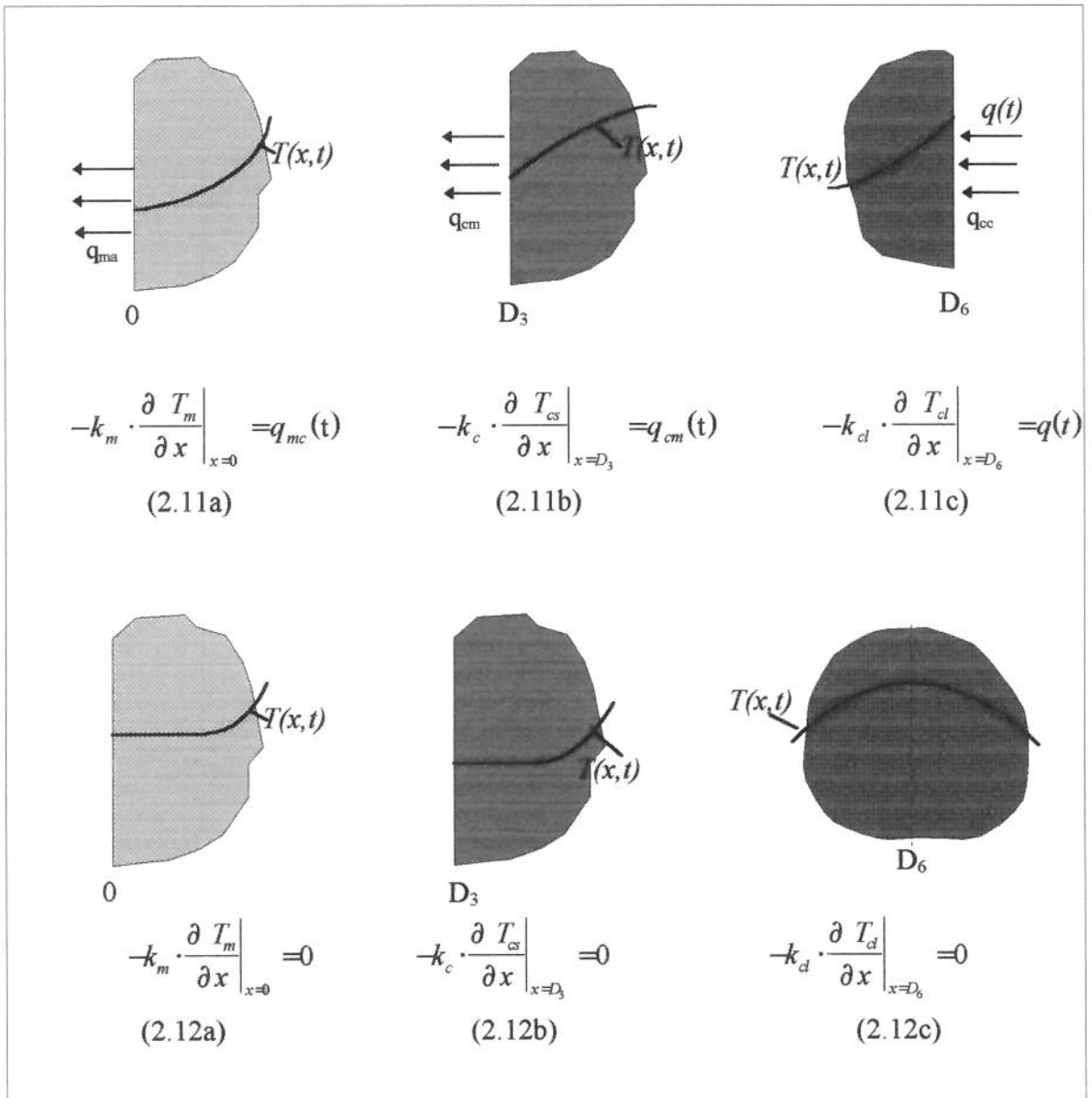
Figura 2.2 - Desenho esquemático de um sistema metal e molde.

a - condições do tipo essencial:



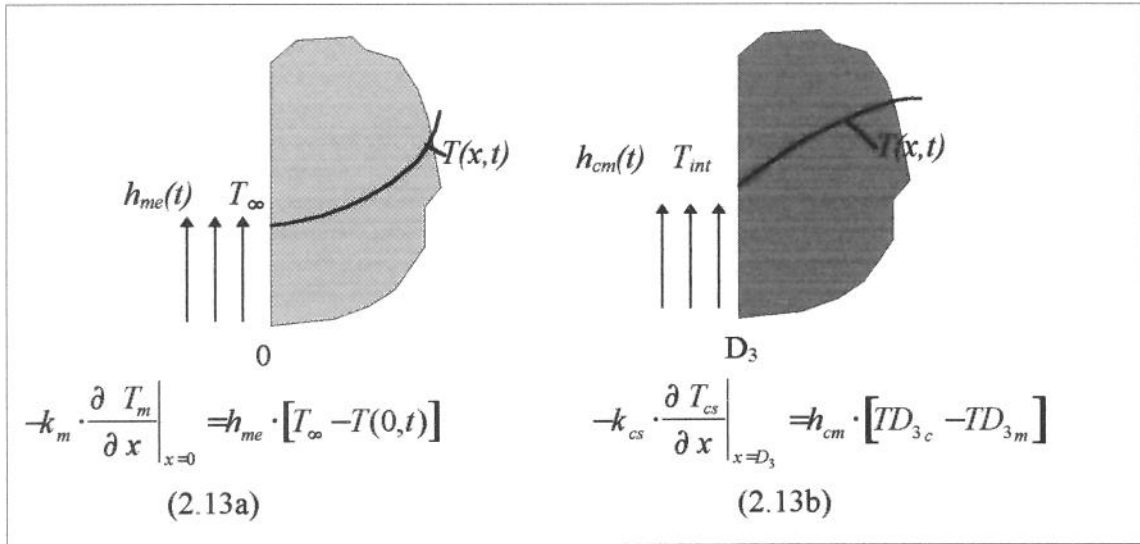
se  $T_0(t)$ ,  $TD_3(t)$  ou  $TD_6(t)$  forem constantes, esta condição é conhecida como do primeiro tipo ou condição de Dirichlet.

b - condições do tipo natural:



se  $q(t)$  for constante temos a condição de contorno do segundo tipo ou condição de Neumann. A equação 2.11c corresponde ao caso do metal em contato com uma superfície adiabática e a equação 2.12c corresponde ao caso de simetria na peça.

c - condição convectiva:



esta condição é conhecida como do terceiro tipo ou de Fourier e é obtida a partir do balanço de energia nas interfaces metal/molde e molde/ambiente.

Consideraremos a princípio como condição inicial uma distribuição uniforme de temperatura, tanto no metal líquido, como no molde:

Após a apresentação do equacionamento acima, o problema direto pode ser definido como<sup>13</sup>: dado as condições iniciais, as condições de contorno (temperatura ou fluxos) deve-se resolver as equações 2.1, 2.2, 2.8 para o metal<sup>2</sup> e assim calcular o campo de temperaturas  $T(x,t)$  para um determinado intervalo de  $x$  e de  $t$ , além da velocidade da frente de solidificação e da posição da mesma ao longo do tempo.

## 2.2 - Métodos Numéricos Aplicáveis a Problemas com Mudança de Fase

Muitos métodos já foram propostos para se resolver o problema colocado no item anterior. Crank<sup>7</sup>, Samarskii et al<sup>14</sup> e Viskanta<sup>1</sup> agruparam estes métodos de uma maneira geral em: **método de malha (domínio ou frente) fixa**, **método de malha móvel** e **métodos analíticos**.

<sup>2</sup> se não for o caso de interface sólido/líquido plana, seria necessário resolver uma equação que relaciona-se fração sólida com temperatura

As vantagens e limitações dos **métodos analíticos** já foram objeto de discussão anterior (capítulo 1).

As técnicas de **malha móvel**<sup>12</sup> envolvem malhas deformáveis ou móveis de elementos finitos ou de diferenças finitas. A malha é continuamente móvel para se adaptar ao movimento da frente de solidificação, de modo que a localização da interface sólido/líquido é avaliada para todo intervalo de tempo da discretização<sup>14</sup>. Os algoritmos utilizados são bastante complicados e implicam em um maior custo computacional.

Pode-se dividir as técnicas de **malha móvel** em 3 grupos: **mudança de coordenadas**, **malhas deformáveis** e **malhas adaptativas**<sup>14,15</sup>. No caso de **mudança de coordenadas**, a interface sólido/líquido é fixada com um sistema de transformações de coordenadas apropriado. Por exemplo, com  $X = \frac{x}{s}(t)$  a interface está sempre estacionária em  $X = 1$ . Tais métodos de transformação introduzem complicações desde que a posição da frente não é especificada em princípio, mas ao contrário faz parte da solução do problema. Entretanto, para aqueles problemas onde a posição da frente de solidificação é conhecida *a priori*, pode-se mostrar que a técnica de transformação oferece vantagens significativas.

No método 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. Realiza-se então os cálculos no próximo passo de tempo já com nova distribuição de nós.

Na discretização por **malhas adaptativas**, segundo Jucá<sup>16</sup>, 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. O princípio fundamental deste método é dispor de uma malha cujos pontos se movem, enquanto a solução do problema físico evolui, concentrando-os em regiões de maiores gradientes da solução, à medida que estas regiões são identificadas.

Nos métodos de **malha fixa** não existe necessidade da localização da interface durante os cálculos. Como principais exemplos deste grupo temos os conhecidos<sup>17,18,14</sup>

**método da temperatura**, onde a temperatura é tomada como a variável dependente<sup>1</sup>, e o **método da entalpia**, sendo a entalpia e a temperatura as variáveis em questão.

No **método da temperatura** (conhecido ainda como método do calor específico equivalente ou ainda método da capacidade térmica equivalente) as equações de conservação da energia são escritas separadamente para as fases líquida e sólida<sup>1</sup> (equações 2.1, 2.2) e acopladas na interface sólido/líquido através da equação 2.8<sup>1,14</sup>. O calor latente é considerado através da substituição deste por um calor específico equivalente<sup>2,19</sup> para todo o intervalo de solidificação<sup>3</sup>.

O **método da entalpia**, conhecido ainda como formulação fraca, tem como principal vantagem o fato de não ser necessário um tratamento explícito da condição da interface sólido/líquido<sup>20,21,22,23</sup>. Isto é conseguido por meio da reformulação das equações da conservação da energia através da introdução de um termo apropriado de fonte de calor, de modo que uma equação diferencial simples é resolvida, através da consideração de uma malha fixa, para todo o domínio discretizado do metal (sólido e líquido). Desta forma é possível a utilização, mediante simples modificações, dos pacotes numéricos de transferência de calor existentes<sup>24</sup> e podem ser estendidos para a solução de problemas multidimensionais<sup>25</sup>.

Um dos maiores problemas na utilização do **método da entalpia** é a determinação da entalpia total em cada célula da malha discretizada. A entalpia de uma célula sob mudança de fase depende da evolução de fração sólida nesta célula. Quando a malha discretizada é suficientemente refinada de modo que dois ou mais nós façam parte da região em mudança de fase em todo o tempo, resulta em bons resultados<sup>22</sup>. Por outro lado, no caso de uma discretização grosseira ou quando o intervalo de solidificação é estreito, a solução pelo **método da entalpia** pode produzir um certo número de falsos patamares de solidificação.

### 2.3 - Aplicação do Método da Entalpia

Pelas vantagens discutidas no item anterior, será utilizado neste estudo o **método da entalpia**. Na aplicação deste esquema, ao invés da utilização das equações 2.1 e 2.2 para o

---

<sup>3</sup> no caso de metais puros ou ligas de composição eutética, é necessária a consideração de um intervalo artificial de solidificação<sup>25</sup>.



metal líquido e para o metal sólido respectivamente, a equação de conservação de energia na forma da equação de condução de calor pode ser escrita, a **nível macroscópico**<sup>26</sup>, para todo o metal como:

$$\rho_c(x,T) \cdot c_c(x,T) \cdot \frac{\partial T_c(x,t)}{\partial t} - \dot{Q}(x,T) = \frac{\partial}{\partial x} \left[ k_c(x,T) \cdot \frac{\partial T_c(x,t)}{\partial x} \right] \quad (2.14)$$

sendo  $\dot{Q}(x,T)$  o calor latente liberado durante a solidificação, dado por:

$$\dot{Q}(x,T) = L_f \cdot \rho_c(x,T) \cdot \frac{\partial f_s(x,T)}{\partial t} \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial f_s(x,T)}{\partial t} = \frac{\partial f_s(x,T)}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.16)$$

$$\dot{Q}(x,T) = L_f \cdot \rho_c(x,T) \cdot \frac{\partial f_s(x,T)}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.17)$$

$$H(T) = \int_{T_{ref.}}^T c_c(T) \cdot \rho_c(T) \cdot dT - L_f \cdot f_s(T) \cdot \rho_c(T) + L_f \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \rho_c(T) \cdot c_c(T) \cdot \frac{\partial T_c}{\partial t} - \rho_c(T) \cdot L_f \cdot \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (2.19)$$

substituindo as equações 2.15 e 2.19 na equação 2.14 obtemos:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = k_c(T) \cdot \frac{\partial^2 T_c}{\partial x^2} \quad (2.20)$$

Observa-se que na equação 2.15 o termo  $f_s$  representa o valor médio de fração sólida para um pequeno elemento de volume onde coexistem as fases líquido e sólido. Portanto,  $f_s$  varia continuamente entre 0 e 1. Para que esta consideração seja válida, a escala deste elemento de volume deve ser muito maior que a da microestrutura e muito menor que a escala do sistema em estudo<sup>26</sup>. Em condições típicas de solidificação, temos escalas da ordem de  $10^{-2}$  m e  $10^{-5}$  m para o sistema e para as microestrutura da interface respectivamente

(capítulo 1), de forma que uma célula da discretização (elemento de volume) para simulação computacional deve ser da ordem de  $10^{-2}$  a  $10^{-3}$  m.

A evolução da fração sólida ( $f_s$ ) deve ser calculada através da utilização de um modelo a **nível microscópico**. Tais modelos são normalmente baseados em soluções idealizadas da equação de difusão de soluto em escala microscópica<sup>27</sup>. Por exemplo, se tivermos uma completa mistura de soluto no líquido, pode-se utilizar as conhecidas equações da **regra da alavanca** e a **equação de Scheil**, correspondendo respectivamente ao caso de uma completa mistura do soluto no sólido em escala microscópica e no caso de não haver difusão de soluto no sólido. Os modelos mais sofisticados de evolução de fração sólida propostos em trabalhos mais recentes que levem em conta fenômenos que ocorrem a nível microscópico tais como: nucleação, super-resfriamento do metal, engrossamento.

Considerando aqueles casos onde a entalpia pode ser dada apenas como função da temperatura, temos basicamente 3 situações representadas na Figura 2.2:

- curva **a** - solidificação isotérmica de um metal puro ou liga de composição eutética, onde o calor latente é liberado a uma temperatura constante<sup>24</sup> correspondente a temperatura de fusão ( $T_f$ );
- curva **b** - ocorre uma liberação linear do calor latente através do intervalo de solidificação<sup>24,28,29</sup> ( $T_{is} - T_{fs}$ );
- curva **c** - devido a não linearidade da liberação de calor latente no intervalo de solidificação -  $T_{is}$  a  $T_{eut}$  - deve-se utilizar a **equação de Scheil**, onde a descontinuidade da curva representa a transformação isotérmica do líquido remanescente na temperatura eutética. Caso não conste no diagrama de fases a reação eutética, pode-se utilizar uma equação que corresponda a **regra da alavanca** ou ainda uma **equação quadrática**<sup>24,28,29</sup>.

As curvas **a**, **b** e **c** da Figura 2.3 representam sistemas nos quais o calor específico é função apenas da temperatura e o calor latente de fusão é constante. Em todos estes casos a entalpia pode ser calculada como<sup>24</sup>:

$$H(T_c) = f_s(T_c) \cdot \int_{T_{ref.}}^T c_{cs}(T_c) \rho_c(T_c) dT_c + [1 - f_s(T_c)] \cdot \int_{T_{ref.}}^T c_{cl}(T_c) \rho_l(T_c) dT_c + [1 - f_s(T_c)] \rho_c(T_c) \cdot L_f \quad (2.21)$$

onde  $T_{ref.}$  é uma temperatura de referência arbitrária.

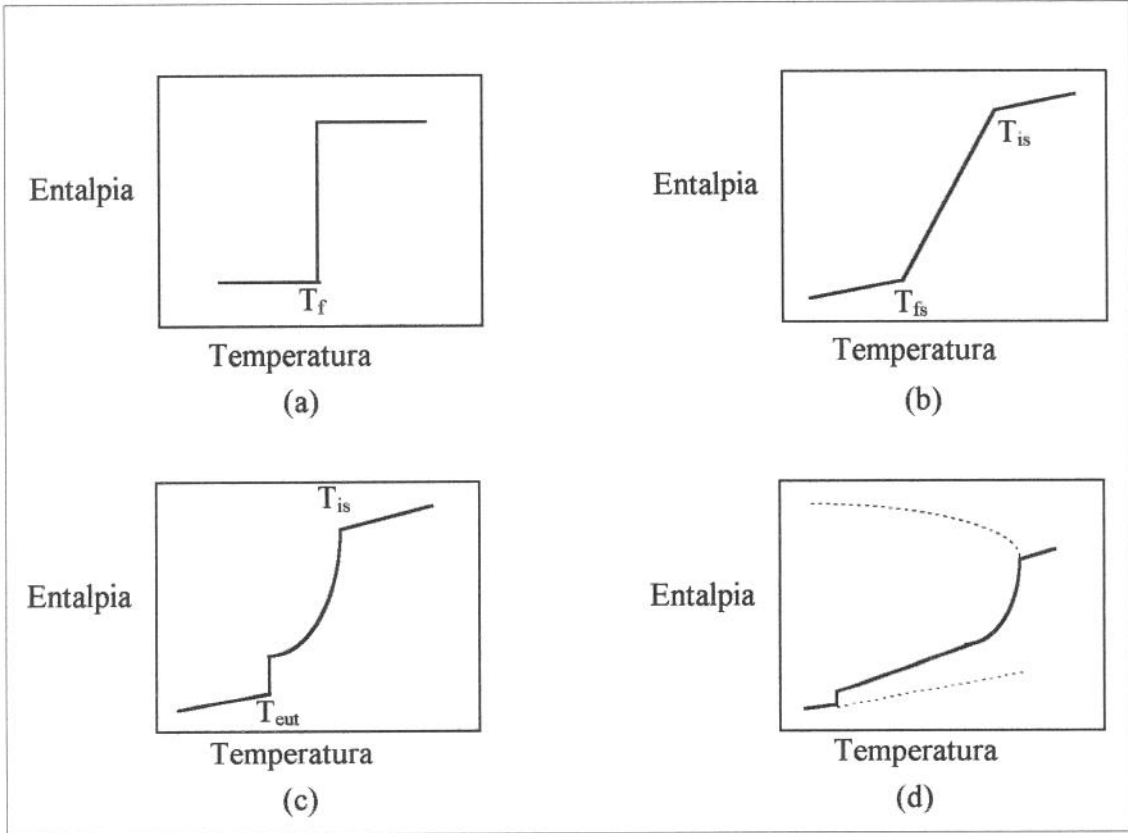


Figura 2.3 - Alguns exemplos da relação entre temperatura e entalpia

Em contraste com as curvas **a**, **b** e **c**, a curva **d** apresenta um caso onde devido aos efeitos de redistribuição de soluto, a consideração de liberação do calor latente de fusão como função apenas da temperatura não é válida e não é possível explicitar uma relação entre fração sólida e temperatura. Nestes casos, a fração sólida é expressa como função do tempo ou de outras variáveis. Trabalhos a este respeito foram publicados por Poirier e Nandapurkar<sup>30</sup>, Kanetkar e Stefanescu<sup>31</sup> e Rappaz e Stefanescu<sup>32</sup>.

Como um exemplo da aplicação de modelos microscópicos de solidificação, a Figura 2.4 apresenta os resultados obtidos por Chen e Tsai<sup>29</sup> para as curvas da evolução de fração sólida com a temperatura para a liga de Al-4,5 Cu e para o aço com 1% Cr utilizando: a regra linear, a equação quadrática, a regra da alavanca e a equação de Scheil.

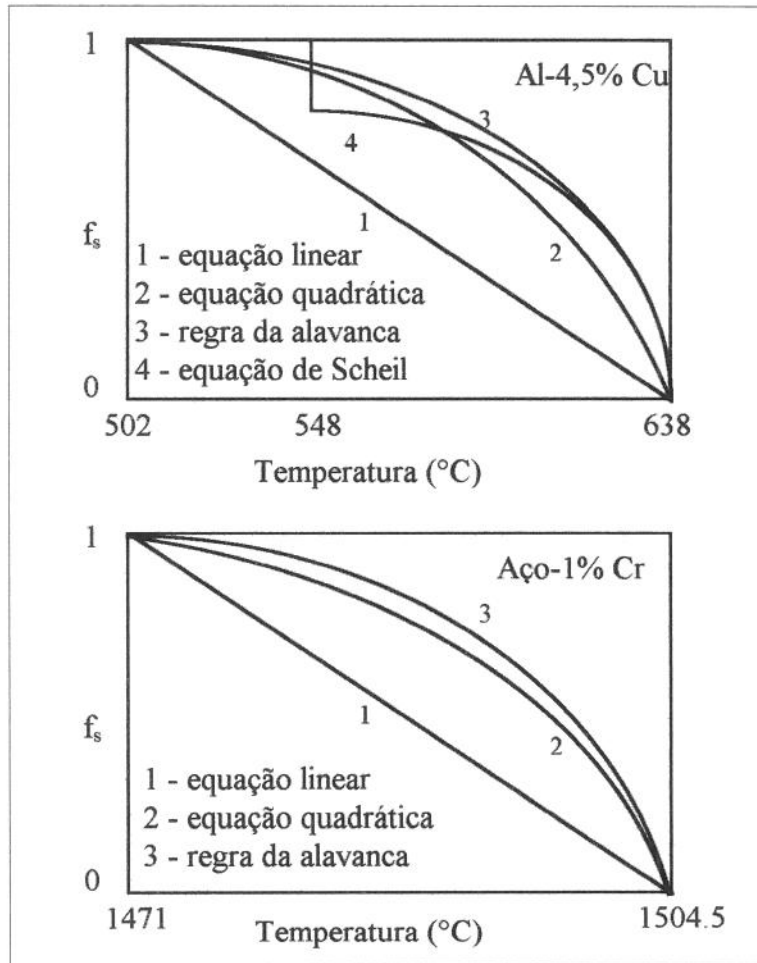


Figura 2.4 - Relação entre fração sólida ( $f_s$ ) e temperatura para 2 ligas em função do tipo de equação de evolução de  $f_s$  empregada<sup>29</sup>.

Diante das considerações feitas acima, pode-se concluir que a seleção da função que relacione temperatura com entalpia depende da liga ou metal em estudo e do nível de complexidade do método numérico utilizado<sup>29</sup>.

## 2.4 - Métodos Numéricos

Para se resolver a equação 2.20 podem ser aplicados vários métodos numéricos. A seleção de um certo método depende das características do mesmo e das particularidades do problema a ser resolvido. Primeiramente analisaremos as principais propriedades que podem ser utilizadas para se avaliar a conveniência da aplicação de um determinado método numérico. No capítulo 4, sob a luz destas considerações, descreveremos as características

fundamentais do método numérico utilizado neste trabalho para a discretização de equações diferenciais que governam o fenômeno da solidificação.

### 2.4.1 - Análise de Erros

Em primeiro lugar vamos considerar que a Figura 2.5 represente esquematicamente o fluxograma para a obtenção da solução de um determinado problema físico:

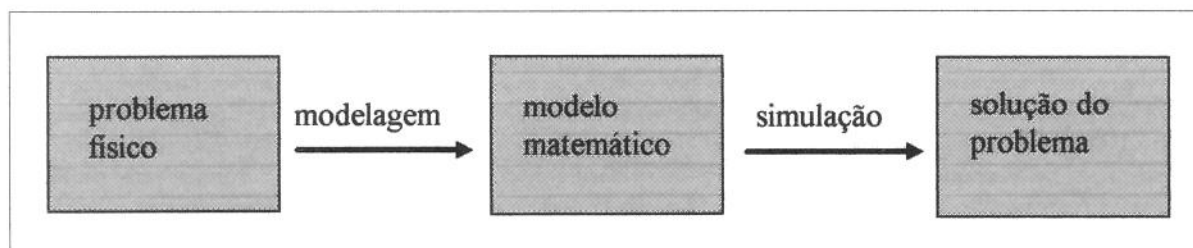


Figura 2.5 - Etapas de modelagem e simulação de problemas físicos.

Na fase de modelagem é necessário o equacionamento do fenômeno físico em estudo, definindo-se quais são as variáveis relevantes (leis de conservação da massa, da quantidade de movimento, da energia, etc) e como elas se relacionam (equações constitutivas)<sup>33</sup>. Normalmente, são necessárias várias simplificações do mundo físico para termos um modelo matemático com o qual se possa trabalhar pois, nem tudo que influencia no fenômeno pode ser levado em consideração, introduzindo-se incertezas, que juntamente com as incertezas inerentes a etapa de medição dos parâmetros de processo, as incertezas relativas as condições iniciais, etc, chamaremos de **erro inicial**. A influência destas perturbações no resultado final vai depender da estabilidade do problema. Em algumas situações conhecidas como problemas malpostos ou malcondicionados, sua influência pode ser desastrosa e inviabilizar completamente as soluções numéricas usualmente aplicadas. Neste caso são necessárias soluções numéricas especializadas conhecidas como problemas inversos.

Na etapa de implementação computacional do modelo (simulação) utilizando-se um determinado método numérico temos também a introdução de erros, conhecidos como **erros numéricos**<sup>34</sup>, que podemos classificar ainda como **erros de arredondamento** e **erros de truncamento**.

Devido a limitações físicas da máquina, esta deve trabalhar com um número finito de dígitos para representar os números reais<sup>33</sup> ocorrendo assim a introdução erros, quando não for possível se representar um determinado valor real, chamados de **erros de arredondamento**. Mesmo que a princípio um erro na 12<sup>a</sup> casa decimal, se analisado individualmente, parece ser muito pequeno, certos algoritmos permitem ao erro crescer até o ponto onde este domina a solução numérica de um problema<sup>35</sup>. Como recursos para amenizar este tipo de erro temos a utilização de dupla precisão, onde a mantissa é representada com o dobro de números da precisão simples, acarretando contudo, um aumento no tempo de computação ou ainda o uso de computadores que sejam capazes de trabalhar com um maior número de dígitos para a representação de um número.

Os **erros de truncamento** são causados pelo fato dos métodos numéricos empregarem uma aproximação para representar operações matemáticas e quantidades exatas, ou seja, são provenientes da utilização de processos que deveriam ser infinitos ou muito grandes para a determinação de um valor e que, por razões práticas, são truncados.

O **erro numérico total** é a soma do **erro de arredondamento** com o **erro de truncamento**. Normalmente para a redução do **erro de truncamento** deve-se diminuir o tamanho do incremento. Entretanto, isto leva a um maior número de operações de computação produzindo assim um aumento no **erro de arredondamento**. A Figura 2.6 apresenta<sup>36</sup> esquematicamente o **erro numérico total** em função das considerações feitas acima.

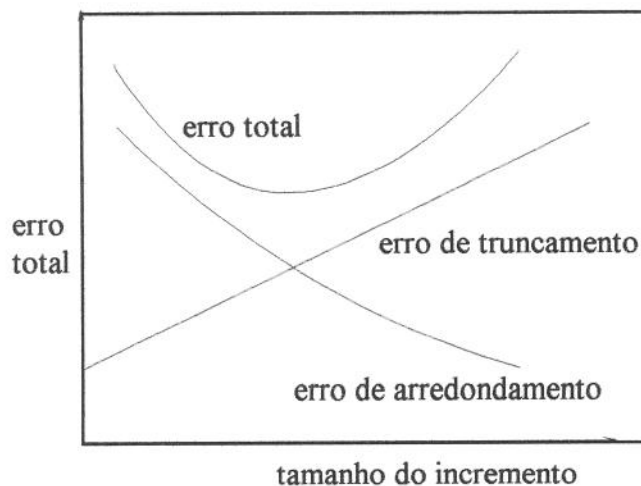


Figura 2.6 - Representação esquemático do erro total

## 2.4.2 - Propriedades dos Métodos Numéricos

Feitas as considerações sobre os tipos de erros, os métodos numéricos podem ser avaliados tomando-se como base as seguintes propriedades<sup>34,35,37,38</sup>:

- consistência numérica;
- estabilidade numérica;
- convergência;
- precisão;
- eficiência.

### a - consistência numérica

De acordo com Minkowycz<sup>35</sup>, a primeira exigência para qualquer esquema de discretização das equações diferenciais parciais pelo método de diferenças finitas é a **consistência numérica**. Segundo Shih<sup>37</sup> uma equação discretizada é dita consistente com a equação diferencial original se o **erro de truncamento** aproxima-se de zero quando o tamanho da malha e o intervalo de tempo tendem a zero.

### b - estabilidade numérica

O termo **estabilidade**, quando usado para qualificar um método numérico, nós dá informações sobre a sensibilidade do método aos **erros de arredondamento** acumulados nos cálculos<sup>33</sup>. Assim, um método é estável quando os erros não crescem durante a etapa de solução do problema. Se a solução aplicada a cada nó de um esquema de discretização para equações diferenciais, no caso da aplicação de um esquema de discretização para equações parciais, apresenta resultados que comportam-se oscilatoriamente e que gradualmente, através de um processo de amplificação, tem essa oscilação aumentada, o esquema é instável<sup>37</sup>.

Na determinação da **estabilidade** da discretização de um sistema transiente, pode-se utilizar dois critérios. O primeiro é conhecido como método da matriz e o segundo como critério de von Neumann<sup>37,39</sup>. O método de von Neumann (método da série de Fourier<sup>40</sup>) têm aplicação limitada para os casos estudados aqui pois, é insensível aos efeitos de condições de contorno nas interfaces<sup>37,5</sup>.

### c - convergência

**Convergência** é provavelmente a mais importante propriedade numérica dos esquemas de discretização, pois, se a **estabilidade** e a **consistência** numérica, como será visto adiante, estão diretamente associadas com o método de diferenças finitas, a **convergência** está relacionada com a maioria dos métodos numéricos<sup>37</sup>.

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. Suponhamos que  $Y_o(x,t)$  seja a solução obtida com a equação discretizada para um determinado nó e que  $Y_e(i\Delta x, j\Delta t)$  seja a solução exata para aquele ponto. Um dado esquema numérico é dito convergente se:

$$\left| Y_o(i\Delta x, l\Delta t) - Y_e(x,t) \right| \rightarrow 0 \quad \text{com} \quad \Delta x, \Delta t \rightarrow 0 \quad (2.22)$$

Na escolha de um determinado método deve-se levar em conta, além do fato do mesmo ser ou não convergente, qual é a velocidade de convergência, pois, um método pode convergir muito lentamente e por isto não se adequado.

### d - precisão

Basicamente a **precisão** pode ser avaliada pela aproximação que existe entre a solução obtida utilizando a equação discretizada e a solução exata. Observa-se que se o problema tem solução analítica exata, a análise de precisão é direta. Entretanto, na maioria dos caso de solidificação isto não ocorre, devendo-se adotar critérios para assegurar a precisão, como por exemplo, aumentado-se o refinamento da malha quando se utilizar o método de diferenças finitas ou ainda aumentando a taxa de convergência de um dada função de interpolação quando se aplicar o método dos elementos finitos<sup>37</sup>. Normalmente estas operações acarretam um aumento do custo computacional.

### e - eficiência

Um algoritmo computacional pode ser considerado **eficiente** se ele necessitar de uma pequena quantidade de reserva de memória, assim como utilizar pouco tempo de processamento<sup>37</sup>. A necessidade de memória está diretamente relacionada com a quantidade



e tipo de dados e com a codificação das instruções. O custo computacional depende diretamente do algoritmo utilizado e do tipo de linguagem computacional empregada.

## 2.5 - Transferência de Calor Através da Interface Metal/Molde

Como foi visto no capítulo 1, uma das principais dificuldades encontradas na aplicação de modelos matemáticos para a simulação da transferência de calor nos processos de fundição de metais é a determinação de valores confiáveis dos coeficientes de transferência de calor nas interfaces metal/molde e molde/ambiente. Por este motivo, a determinação correta do coeficiente de transferência de calor, principalmente na interface metal/molde ( $h$ ), tem sido objeto de estudo de diversos pesquisadores, como pode ser constatado pela revisão apresentada pelas referências 41, 42, 43, 44, 45, 46 e 23, pois, a confiabilidade, ou seja, a precisão dos resultados quando da utilização de qualquer método de solução do problema do fluxo de calor no sistema metal/molde, por mais elaborado que tenha sido o método adotado, depende fundamentalmente de como é considerada a resistência térmica nestas interfaces, visto que em determinadas situações, estas podem exercer um controle efetivo das condições de resfriamento.

A Figura 2.7, compilada a partir dos resultados apresentados por Ho e Pehlke<sup>41</sup>, mostra os gráficos de tempo de solidificação em função do valor constante de  $h$ , para o caso de solidificação de alumínio em 3 tipos de moldes: molde de areia, molde de aço e molde de cobre. Observa-se em primeiro lugar, que para um mesmo valor de  $h$  ( $10^3$  W/m<sup>2</sup>K) temos 70, 90 e 1250 segundos como tempo de solidificação respectivamente para os moldes de cobre, aço e areia. Esta variação no tempo de solidificação está diretamente relacionada com as propriedades termofísicas do material do molde. Nota-se ainda que para o valor de  $h$  variando de 2 ordens de grandeza,  $10^2$  a  $10^4$  para moldes de areia e de  $10^3$  a  $10^5$  para moldes metálicos, temos que o tempo de solidificação varia de 62% e 290% respectivamente, demonstrando assim a maior influência de  $h$  no caso de moldes metálicos, tornando-se neste caso inclusive o parâmetro de controle do fluxo de calor<sup>46</sup>.

A avaliação feita acima corresponde ao caso de valores constantes no tempo para  $h$ . Como veremos em seções posteriores, em boa parte dos casos o valor de  $h$  é variável com o tempo, tornando o problema bem mais complexo, tanto do ponto de vista da determinação de  $h$ , como da introdução de seu valor nos modelos matemáticos.

A influência de  $h$  nos perfis de solidificação varia também com a posição do ponto em análise no metal. Como um exemplo deste comportamento, Palmieri<sup>47</sup> cita o caso da solidificação de grandes lingotes de aço em lingoteiras de ferro fundido, onde verifica-se que a influência de  $h$  no resultado calculado para o tempo local de solidificação numa determinada região da peça, decresce da superfície para o centro.

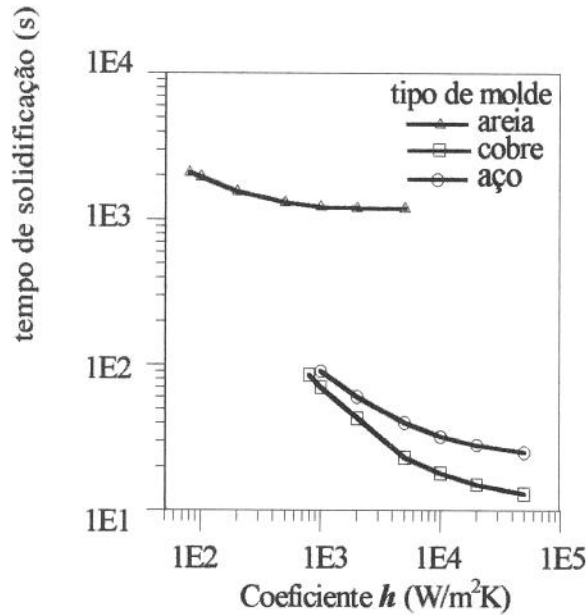


Figura 2.7 - tempo de solidificação em função do coeficiente de transferência de calor para 3 tipos de materiais de molde de acordo com Ho e Pehlke<sup>41</sup>.

Neste trabalho será feita uma análise de algumas metodologias utilizadas na determinação de  $h$  e a sua aplicação no caso de fundição de precisão.

## 2.6 - Caracterização da Interface Metal/Molde

Considerando que o projeto de fundição de uma determinada peça esteja adequado, o metal líquido preencherá totalmente a cavidade do molde. Como consequência do fluxo de calor do metal para o molde, formar-se-á uma casca de metal sólido, a qual estará inicialmente em contato com o molde. Com o progresso da solidificação, as condições térmicas na interface metal/molde podem mudar. Por exemplo, o metal ao solidificar contrai

enquanto o molde pode expandir, resultando na formação de um *gap* de ar entre o metal e o molde. Destaca-se ainda que a parede do molde possui uma certa rugosidade superficial que não é “preenchida” pelo metal líquido devido a tensão superficial deste.

De acordo com Ho e Pehlke<sup>48</sup>, três mecanismos podem afetar a natureza da interface metal/molde, ou seja, influenciar na complexidade da troca térmica entre a superfície do metal e a superfície do molde:

- a - a interação das superfícies metal/molde em função das diferentes naturezas físico-química entre o metal e o molde;
- b - as transformações sofridas pelos materiais do metal e do molde;
- c - efeitos de geometria.

A partir dos mecanismos enumerados acima e através de uma análise da tendência da variação de  $h$  com o tempo (na forma de gráficos) apresentados por vários pesquisadores<sup>41,49,42,45,46,47,50,51</sup>, sob várias combinações de metal, molde, posição, geometria, pressão externa aplicada, dentre outros parâmetros específicos discutidos por cada referência, pode-se considerar que existem 4 possibilidades para o comportamento da interface metal/molde:

- 1 - zona transiente;
- 2 - zona de contato *conforming*;
- 3 - zona de contato *nonconforming* e
- 4 - zona com formação de *gap* de ar.

As Figuras 2.8 e 2.9 apresentam esquematicamente estas possibilidades.

Detalhes sobre o estado transiente são difíceis de serem obtidos, pois, este ocorre durante a fase de preenchimento do molde. De acordo com Fortin et al<sup>23</sup>, sua ocorrência está ligada a tensão superficial do líquido, que aumenta significativamente com a queda de temperatura e posterior solidificação, dificultando uma análise quantitativa do valor de  $h$ . Também é de grande importância a consideração da vazão de preenchimento do molde nesta análise<sup>43,46</sup>. As flutuações observadas no gráfico da Figura 2.8 são devido a turbulência no fluxo de metal líquido, que rompe a fina camada que se solidifica.

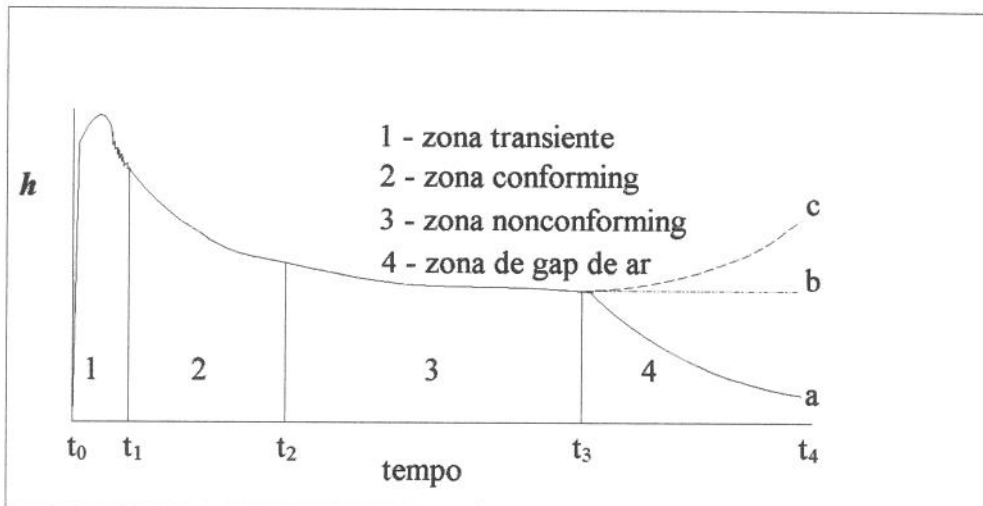


Figura 2.8 - Perfil típico do coeficiente  $h$  na interface metal/molde durante o processo de solidificação.

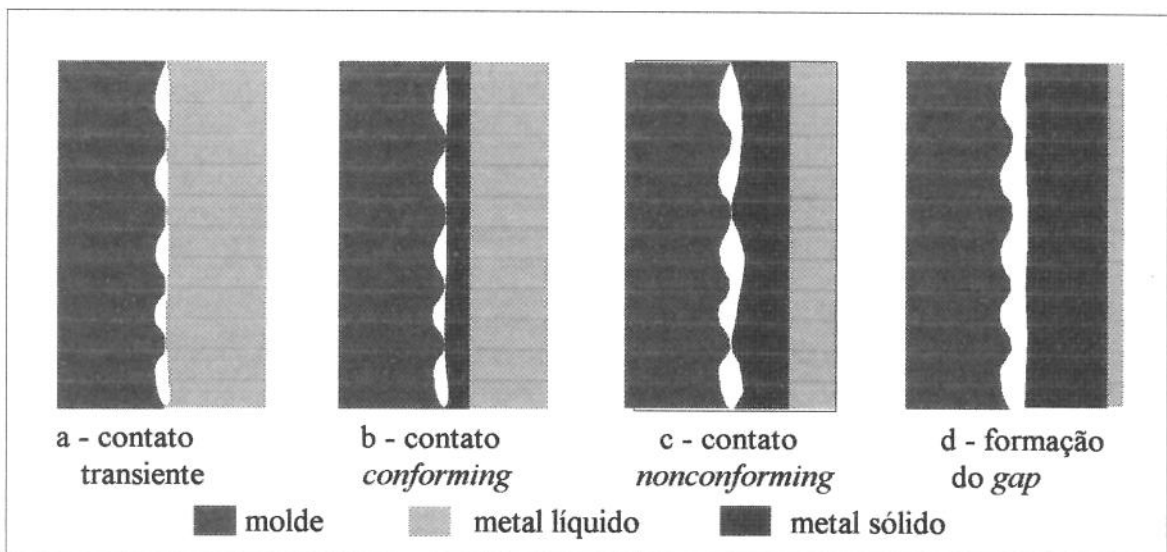


Figura 2.9 - Evolução esquemática da interface metal/molde durante o processo de solidificação.

Na etapa *conforming*, o contato entre o metal líquido e o molde é favorecido pela atuação da pressão metalostática e pelo fato do molde quando aquecido, em algumas situações, se deslocar na direção do fundido. Nesta situação, temos um grande número de pontos de contato tendo os mesmos uma maior área para efetuar a troca térmica. Segundo Prates e Biloni<sup>52</sup>, para o caso de moldes metálicos, a solidificação é iniciada por sítios de nucleação do tipo pré-dendríticos naquelas regiões de contato, onde o fluxo de calor é consideravelmente alto. Com a continuidade do fluxo de calor, uma fina camada de metal

solidificado é formada, a qual vai estar submetida a uma série de forças de origens diversas (Figura 2.10).

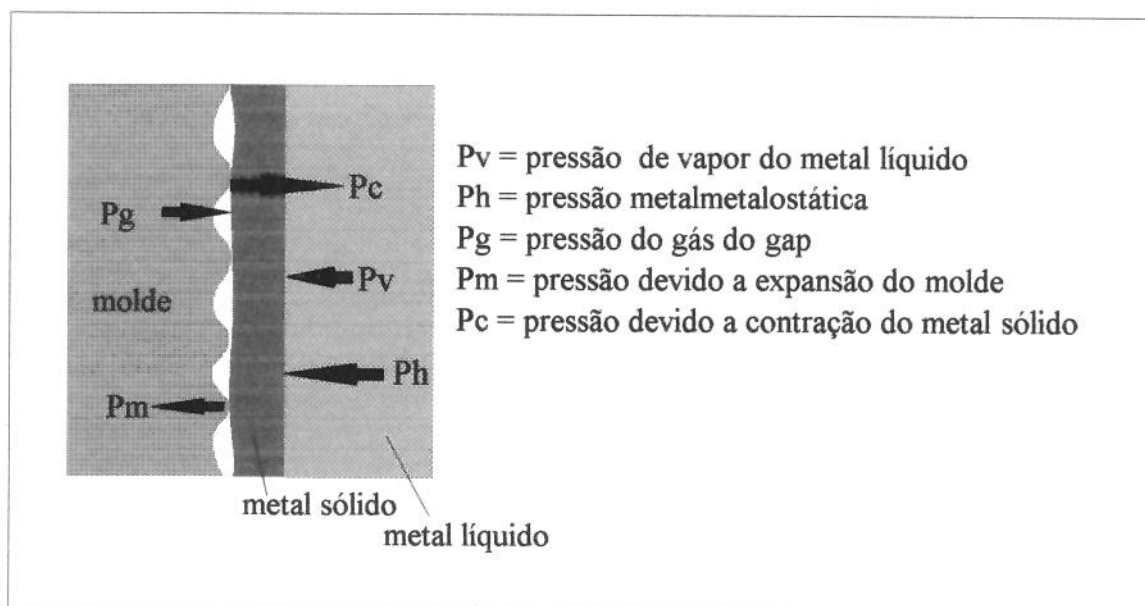


Figura 2.10 - Pressões atuantes na interface metal/molde durante o processo de solidificação.

Com o aumento da espessura de camada solidificada, esta passa de um comportamento onde a mesma se deformava plasticamente sob a ação da pressão hidrostática do metal líquido, favorecendo o contato *conforming*, para um estado onde a maior rigidez associada a maior espessura e ao abaixamento da temperatura da casca, leva a formação do estado *nonconforming*<sup>41,53,48,23</sup>, onde temos um menor número de pontos em contato com a correspondente menor área de troca térmica. Neste estágio a variação de  $h$  é muito pequena devido a maior rigidez da casca quanto a deformações e uma relativamente estável diferença de temperaturas na interface metal/molde.

Após o estado *nonconforming*, pode ser formado um *gap* entre o metal e o molde, ou seja, a separação física dos mesmos<sup>42</sup>. O condicional está colocado em função da posição da superfície em análise e do material do molde. Por exemplo, regiões inferiores da peça ou aquelas que ao iniciar a contração são pressionadas contra as paredes do molde, tendem a permanecer em contato durante todo o processo de solidificação<sup>54</sup>, portanto, o *gap* não se forma e temos um comportamento de  $h$  segundo a curva **b** da Figura 2.8. Um caso mais crítico análogo da situação descrita acima, ocorre quando se tem a presença de machos

(metálicos ou não) cilíndricos num molde, ocorrendo um aumento da pressão de contato quando da contração. Neste caso temos a curva *c* da Figura 2.8 .

Se a geometria do fundido é tal que a superfície do mesmo se afasta do molde quando da contração formando um *gap*, *h* se comporta segundo a curva *a* da Figura 2.8.

É importante considerar ainda a presença de possíveis recobrimentos nas superfícies do metal e do molde. Em temperaturas elevadas, um filme de óxido pode se formar na superfície do metal e do molde, principalmente no caso de se tratar de resfriadores ou molde metálicos. Devido a baixa condutibilidade dos filmes de óxidos, ocorre uma queda da transferência de calor por condução nos contatos sólidos. Quanto a utilização de películas de recobrimentos depende da natureza das mesmas (isolantes ou condutoras) e de sua rugosidade<sup>55,45,56</sup>.

Deve-se salientar que podemos encontrar num mesmo sistema metal e molde, a presença dos 3 tipos de deslocamentos relativos entre as superfícies do metal e do molde descritos acima, dificultando a análise do problema<sup>54</sup> quando aplicado aos casos reais de peças fundidas. Por exemplo, temos na Figura 2.11 que, de acordo com a posição da superfície em estudo (posições 1, 2 e 3), pode ocorrer a formação do *gap* de ar (posição 1) que corresponde a curva *a* (Figura 2.8); o contato permanecer durante toda a solidificação (posição 2) semelhante ao fenômeno descrito pela curva *b*; a superfície do molde pode ser pressionada pela superfície do metal quando da contração deste (posição 3) levando a um aumento do valor de *h* conforme descreve a curva *c*.

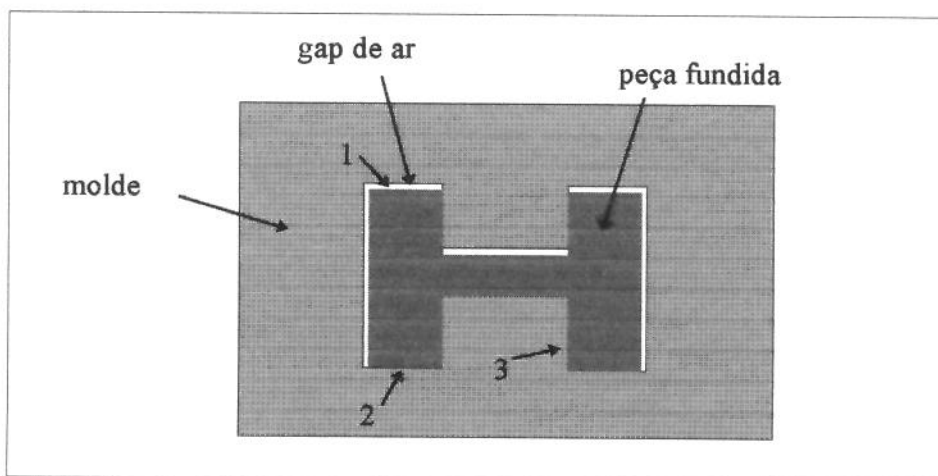


Figura 2.11 - Formação do *gap* de ar em determinadas regiões do molde.

O fenômeno de transferência de calor na interface metal/molde é apresentado esquematicamente na Figura 2.12. Segundo Ho e Pehlke<sup>48</sup> e Fortin et al<sup>23</sup>, o fluxo de calor próximo a interface metal/molde, nos pontos de contato entre a superfície do metal e do molde (caminho A da Figura 2.12), é microscopicamente tridimensional e numa região relativamente distante da interface unidimensional. Observa-se ainda que quando existe contato entre o metal e o molde, as temperaturas nas interfaces deste dois materiais são iguais, o que não ocorre naquelas regiões onde não existe o contato (devido a rugosidade ou ao *gap*) como no caminho B da Figura 2.12b. Desta forma, o coeficiente de transferência de calor nesta interface ( $h$ ), do ponto de vista macroscópico, pode ser escrito como a soma de 3 componentes:

$$h = h_s + h_c + h_r \quad (2.23)$$

onde:

$h_s$  = condução nos pontos de contato

$h_c$  = convecção através do *gap*

$h_r$  = radiação através do *gap*

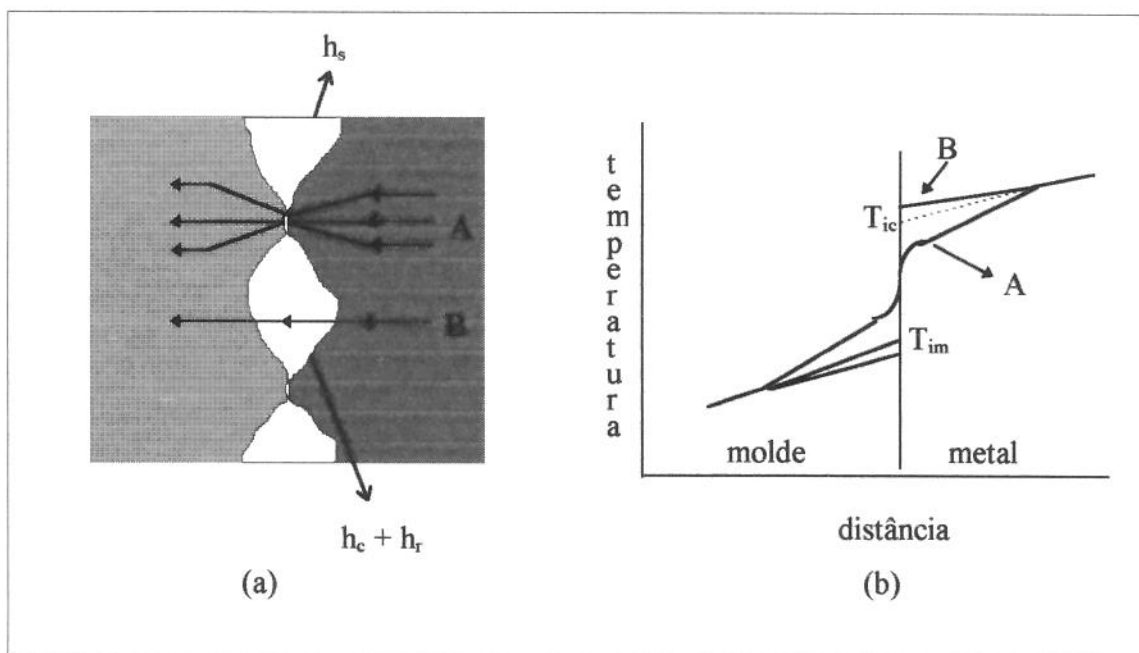


Figura 2.12 - a) representação esquemática do fluxo de calor na interface metal/molde; b) perfis de temperatura próximo à interface metal/molde em função do caminho seguido pelo fluxo de calor<sup>41</sup>.

## 2.7 - Determinação de $h$

Sob condições bem específicas podem ser obtidas expressões analíticas para  $h_s$ ,  $h_c$  e  $h_r$ <sup>53,48,57</sup>. Nestes casos a resistência térmica na interface metal/molde é expressa em termos, por exemplo, da condutibilidade térmica do metal e do molde, da superfície real em contato, do número de pontos de contato por unidade de área, do atual perfil de rugosidade da superfície<sup>45</sup>, etc. Estes modelos concordam com as experiências realizadas pelos seus autores quando se trata de corpos elásticos, mas seu uso para configurações de metal/molde tem pouco significado, pois, as propriedades mecânicas dos materiais em processo de solidificação e a qualidade das superfícies em contato não podem ser modeladas precisamente.

Como exemplo destas expressões analíticas, Ho e Pehlke<sup>48</sup> citam a equação proposta por Rapier para  $h_s$ , desde que a pressão de contato seja razoavelmente alta, de modo a garantir uma interface *conforming* :

$$h_s \propto \frac{k_m}{w} \cdot \left[ \frac{P}{Hd} \right]^{0.5} \quad (2.24)$$

Para  $h_c$ , na condição de *gap* idealizado entre duas superfícies paralelas separadas por um contato áspero, Sharma e Krishnan<sup>45</sup> fornecem:

$$h_c = \frac{k_g}{\Delta x_g} \quad (2.25)$$

Segundo Ho e Pehlke<sup>48</sup> e Nishida et al<sup>42</sup> a radiação através do *gap* ( $h_r$ ) pode ser dada por:

$$h_r = \frac{[\sigma \cdot (T_c^2 + T_m^2) \cdot (T_c + T_m)]}{\left[ \left[ \frac{1}{\varepsilon_c} \right] + \left[ \frac{1}{\varepsilon_m} \right] - 1 \right]} \quad (2.26)$$

Analisando as equações que descrevem cada modo de transferência de calor, chegamos as seguintes conclusões:



- quanto maior for a pressão de contato (P), maior será a área de contato e menor a espessura do *gap* ( $\Delta x_g$ ), favorecendo transferência por condução ( $h_s$ ) e convecção ( $h_c$ ), em detrimento da transferência por radiação<sup>48</sup> ( $h_r$ );

- para baixas temperaturas, a transferência de calor através do *gap* é predominantemente por convecção, sendo desprezível a radiação<sup>55</sup>.

Em função das dificuldades apresentadas para a determinação analítica do coeficiente  $h$ , foram desenvolvidos formas alternativas para se obter o coeficiente de transferência de calor variável com o tempo na interface metal/molde para os processos de fundição. Estas formas podem ser agrupadas basicamente nas seguintes metodologias:

- a - resistência térmica interfacial;
- b - comparação de perfis térmicos numéricos e experimentais;
- c - utilização de parâmetros microestruturais e
- d - utilização do método do inverso da condução de calor.

Naquelas situações onde se forma um *gap* entre o metal e o molde, pode-se determinar  $h$  através da equação 2.25 , a partir da definição de **resistência térmica interfacial** ( $R_i$ )<sup>56,45,49,46</sup>:

$$R_i = \frac{1}{h} = \frac{\Delta x_g}{k_g} \quad (2.28)$$

Existem dois problemas associados com a determinação do *gap* a partir da equação 2.28 . Em primeiro lugar, apesar da literatura comumente se referir a separação entre o metal e o molde como *gap* de ar, a determinação da composição correta do gás presente nesta região é um problema complexo<sup>54</sup>. Destaca-se ainda que ocorre uma variação desta composição no decorrer do processo de aquecimento e resfriamento do molde alterando portanto, a correspondente condutividade térmica do gás variando com a temperatura. Em segundo lugar, a determinação da variação da espessura do *gap* com o tempo exige uma instrumentação bastante precisa<sup>49</sup>, além desta espessura variar com a posição da superfície no molde. Observa-se também que este método só seria válido para aquelas situações em que um *gap* de ar se formar desde o início do processo pois, do contrário, teríamos uma resistência térmica igual a zero.

A determinação de  $h$  através da **comparação de perfis térmicos numéricos e experimentais**, consiste em se obter, para uma ou mais posições no sistema metal e molde, a evolução de temperaturas através da utilização de um sistema de aquisição de dados e, através de um processo computacional iterativo, determinar-se qual seria o  $h$  necessário para se obter aquele perfil, a menos de um pequeno desvio previamente estipulado. A comparação dos perfis é feita utilizando-se as temperaturas medidas em determinados intervalos de tempo. A Figura 2.13 mostra por exemplo, as curvas que foram obtidas para  $h$  na interface metal/molde utilizando-se o método da comparação de perfis térmicos numéricos e experimentais (curva a) e o valor constante fornecido por Sturm e Sahn<sup>44</sup> (curva b), para o caso de vazamento da liga de alumínio A356 em moldes cerâmicos para fundição de precisão.

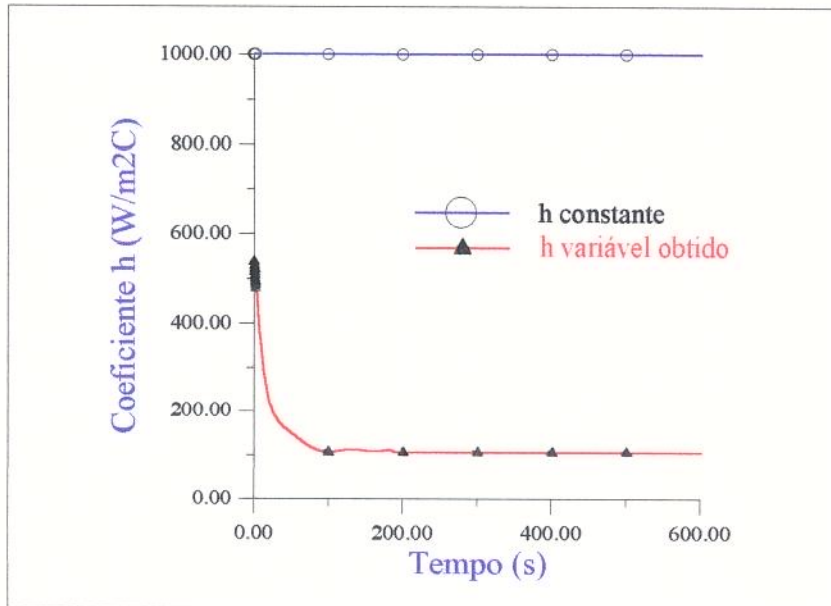


Figura 2.13 - Coeficientes de transferência de calor na interface metal/molde utilizados nos cálculos<sup>58</sup>.

Para a determinação de  $h$  através da **utilização de parâmetros microestruturais**, é necessário o emprego de um modelo matemático que descreva o fluxo de calor no sistema metal e molde acoplado às leis de crescimento dendrítico<sup>59,44</sup>. Neste método, utiliza-se os resultados de um parâmetro da microestrutura do metal ou liga em estudo obtido experimentalmente, por exemplo o espaçamento interdendrítico secundário, para se determinar qual o grau de resfriamento (tempo local de solidificação) correspondente. Através da utilização de um modelo numérico, obtém-se então qual o coeficiente  $h$  que forneça o este tempo local de solidificação calculado.

O **método do inverso da condução de calor** consiste em primeiro lugar na obtenção da distribuição espacial e temporal das temperaturas, através de medidas experimentais de temperaturas em determinados pontos do sistema metal e molde. Vários termopares são colocados em posições específicas no metal e no molde, e a evolução de temperaturas é armazenada por um sistema de aquisição de dados. Após esta etapa, utiliza-se um processo de minimização de funções que relacione as temperaturas determinadas por um método numérico de obtenção do perfil térmico do sistema com as temperaturas adquiridas experimentalmente, de forma a se determinar uma variação de  $h$  com o tempo.

## 2.8 - Referências Bibliográficas do Capítulo 2

- 1-VISKANTA, R. Heat Transfer During Melting and Solidification of Metals. Journal of Heat Transfer, v. 110, nov. 1988, p.1205-19.
- 2-SANTOS, R.G. Métodos Numéricos Aplicados a Solidificação - Apostila do Curso - Faculdade de Engenharia Mecânica - UNICAMP, 1994.
- 3-ECKERT, E.R.G.; DRAKE Jr, R.M. Analysis of Heat and Mass Transfer, Tokyo, McGraw-Hill Kogakusha, Ltd, 1972.
- 4-CARSLAW, H.S.; JAEGER, J.C. Conduction of Heat in Solids. 2.ed. Londres, Oxford University Press, 1959, p.282-96.
- 5-ÖZISIK, M.N. Boundary Value Problems of Heat Conduction. New York, Dover Publications, 1968.
- 6-LUNARDINI, V.J. - Free and Moving Boundary Problems, 1990.
- 7-CRANK, J. - Free and Moving Boundary Problems, Clarendon Press, Oxford, 1984.
- 8-SHAMSUNDAR, N. Comparison of Numerical Methods for Diffusion Problems with Moving Boundaries. Moving boundary Problems, Ed. D.G. Wilson et al, 1978, p.167-85.
- 9-VOLLER, V.; CROSS, M. Accurate Solutions of Moving Boundary Problems Using the Enthalpy Method. Int. Journal Heat Mass Transfer, v.24, 1981, p.545-56.
- 10-POIRIER, D.; SALCUDEAN, M. On Numerical Methods Used in Mathematical Modeling of Phase Change in Liquid Metals. Transactions of the ASME, v.110, 1988, p.562-70.
- 11-RABIN, Y.; KORIN, E. An Efficient Numerical Solution for the Multidimensional Solidification (or Melting) Problem using a Microcomputer. Int. Journal Heat Mass Transfer, v.36, No.3, 1993, p.673-83.

- 12-RUAN, Y.; LIU, J.C.; RICHMOND, O. A Deforming Finite Element Method for Analysis of Alloy Solidification Problems. Finite Elements in Analysis and Design, v.12, 1993, p.49-63.
- 13-ZABARAS, N. Inverse Finite Element Techniques for the Analysis of Solidification Processes. Int. Journal for Numerical Methods in Engineering, v.29, 1990,p.1569-87.
- 14-SAMARSKII, A.A.;VABISHCHEVICH, P.N.; ILIEV, O.P.; CHURBANOV, A.G. Numerical Simulation of Convection/Diffusion Phase Change Problems - A Review. Int. Journal Heat Mass Transfer, v.36, No.17, 1993, p.4095-106.
- 15-SILVA, R.S.; GALCÃO, A.C. Formulações adaptativas e sua aplicação a problemas de convecção-difusão. In: COBEM- Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, 12., Brasília, dez. 1993, **Anais**. p.197-200.
- 16-JUCÁ, P.C.S. Malhas adaptativas: Implementação e comparação crítica dos métodos disponíveis. In: COBEM-Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, 12., Brasília, dez. 1993, **Anais**. p.137-140.
- 17-KUMAR, K. T.; NAMBURU, R.R. Recent Advances, Trends and New Perspectives via Enthalpy-Based Finite Element Formulation for Applications to Solidification Problems. Int. Journal for Numerical Methods in Engineering, v.30, 1990, p.803-20.
- 18-VOLLER,V.R.; SWAMINATHAN General Source-Based Method for Solidification Phase Change. Numerical Heat Transfer, v.19, 1991, p.175-189
- 19-PHAM, Q. T. A fast, unconditionally stable finite-difference scheme for heat conduction with phase change. Int. Journal Heat Mass Transfer, v.28, No.11, 1985, p.2079-84.
- 20-VOLLER, V. R. Fast implicit finite-difference method for the analysis of phase change problems. Numerical Heat Transfer, Part B, v.17, 1990,p. 155-69.
- 21-VOLLER, V. R.; PRAKASH, C. A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mush region phase-change problems. Int. Journal Heat Mass Transfer. v. 30, No.8, 1987, p.1709-18.

- 22-GRIFFITH, R.; NASSERSHARIF, B. Comparison of One-Dimensional Interface-Following and Enthalpy Methods for the Numerical Solution of Phase Change. Numerical Heat Transfer, Part B, v.18, 1990, p.169- 187.
- 23-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 Transactions, v.92, 1992, p 863-71.
- 24-SWAMINATHAN, C.R.; VOLLER, V.R. A general enthalpy method for modeling solidification processes. Metallurgical Transactions B, v. 23, 1992, p. 651-64.
- 25-SALCUDEAN, M.; ABDULLAH, Z. On the Numerical Modelling of Heat Transfer During Solidification Processes. International Journal for Numerical Methods in Engineering. v.25, 1988, p.445-73.
- 26-BECKERMANN, C.; VISKANTA, R. Mathematical modeling of transport phenomena during alloy solidification. American Society of Mechanical Engineers, v.46, No 1, jan. 1993, p.1-27.
- 27-KURZ, W.; FISHER, D.J. Fundamentals of Solidification. 3.ed. Switzerland, Trans Tech Publications, 1992.
- 28-KIM, J.H.; LIM, I.C.; YANG, H. Comparison of four different latent heat models during the phase-change process. AFS Transactions, v. 92, p.947-54, 1992.
- 29-CHEN, J.H.; TSAI, H.L. Comparison on Different Modes of Latent Heat Release for Modeling Casting Solidification. AFS Transactions, v.90, 1990, p.539-46.
- 30-POIRIER, D.R.; NANDAPURKAR, P. Enthalpies of Binary Alloy During Solidification, Metallurgical Transactions A, v.19, 1988, p. 3057-61.
- 31-KANETKAR, D.M.; STEFANESCU, D. M. Equiaxed Dendritic Solidification of Single Phase Alloys: A Solidification Kinetics and Heat transfer Model, In: IV MODELLING OF CASTING AND WELDING PROCESS, 1988. Anais. p. 697-708.

- 32-RAPPAZ, M.; STEFANESCU, D.M. Modeling of Microstructural Evolution. Metals Handbook, v.15 - Casting, 9. , 1988, p.883-91.
- 33-CUNHA, C. MÉTODOS NUMÉRICOS Para as Engenharias e Ciências Aplicados. CAMPINAS, Ed. da UNICAMP, 1993.
- 34-CHAPRA, S.C.; CANALE, R.P. Numerical Methods for Engineers. 2.ed., New York, McGraw-Hill Book Company, 1990.
- 35-MINKONYCZ, W.J., E. Numerical Methods for Moving Boundary Problems. Handbook of Numerical Heat Transfer, New York, John Wiley & Sons, Inc., 1988, p.15-50.
- 36-JAIN, M.K., Numerical Solution of Differential Equations, New Delhi ,Wiley, 1984, 2ed.
- 37-SHIH,T.M. Numerical Heat Transfer. Washington, Hemisphere, 1984.
- 38-CROFT, D.R.;LILLEY, D.G. Heat Transfer Calculations Using Finite Difference Equation. Londres, Applied Science Publishers LTD, 1977.
- 39-JALURIA, Y.;TORRANCE,K.E. Computational Heat Transfer, Washington, Hemisfere, 1986, 500p.
- 40-SMITH, G.D. Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methodos. 3 ed. New York, Oxford University Press, 1985.
- 41-HO, K.; PEHLKE, D. Metal-mold Interfacial Heat Transfer. Metallurgical Transactions B, v.16, 1985, p.585-94.
- 42-NISHIDA, Y.; DROSTE, W.; ENGLER, S. The Air-Gap Formation Process at the Casting-Mold Interface and the Heat Transfer Mechanism through the Gap. Metallurgical Transactions B, v.17, dez. 1986, p.833-44.
- 43- ISAAC, J.; REDDY, G.P.; SHARMA, G.K. Experimental Investigation of the Influence of Casting Parameters on the Formation and Distribution of Air Gap During the Solidification of Castings in Metallic Molds. AFS Transactions, v.85, 1985, p.29-34.

- 44-GARCIA, A.; CLYNE, T.W. A versatile technique for characterization of metal/mould heat transfer and correlation with thermal and structural effects. In: **SOLIDIFICATION TECHNOLOGY** in the foundry and cast house, Coventry, set. 1980. **Proceedings**. The Metals Society, 1980. p.33-9.
- 45-SHARMA, D. G. R.; KRISHNAN, M. Simulation of Heat Transfer at Casting Metal-Mold Interface. AFS Transactions, v.91, 1991, p.429-38.
- 46-ISAAC, J.; REDDY, G.P.; SHARMA, B.E. Variations of Heat Transfer Coefficients during Solidification of Casting in Metallic Moulds. The British Foundryman, nov. 1985, p. 465-68.
- 47-PALMIERE, W. Simulação da solidificação de lingotes cilíndricos de aço médio-carbono através de método numérico. Campinas, 1990. 149p. Dissertação (Mestrado) - Faculdade de Engenharia de Campinas, UNICAMP.
- 48-HO, K.; PEHLKE, R. D. Mechanisms of Heat Transfer at the Metal/Mold Interface. AFS Transactions, v.84, 1984, p.587-98.
- 49-RAZAVI, S. H.; SHAHVERDI, H. R.; FARHADI, F.; VARAHRAM, N.; DAVAMI, P.; ASGARI, K. Solidification Simulation of Al-12%Si in Permanent Moulds. In: **WORLD FOUNDRY CONGRESS, 59.**, São Paulo, 1992. **Proceedings**. São Paulo, ABIFA, 1992, p.9.2-9.9.
- 50-PRABHU, K. N.; MADHESWARAN, D.; KUMAR, T. S. P.; VENKATARAMAN, N. Computer Modeling of Heat Flow and Microstructure Fineness in Chill-Cast Aluminum Alloy LM-24. AFS Transactions, v.92, 1992, p.661-17.
- 51-WU, M. H.; WANG, Y. X.; GUO, T.; ZHANG, Q.X. Computer-Aided Chill Design for Steel Casting. AFS Transactions, v.92, 1992, p.27-35.
- 52-PRATES, M.; BILONI, H. Variable Affecting the Nature of the Chill Zone. Metallurgical Transactions, v.3, jun. 1972, p.1501-10.
- 53-HO, K; PEHLKE, R.D. Transient Methods for Determination of Metal-Mold Interfacial Heat Transfer. AFS Transaction, v.83, 1983, p.689-98.
- 54-CAMPBELL, J. - Solidification modelling: current limitations and future potential. Materials Science and Technology, v.7, out. 1991,p.885-94.



- 55-KUMAR, T.S.P.; PRABHU, K.N. Heat Flux Transients at the Casting/Chill Interface during Solidification of Aluminum Base Alloys. Metallurgical Transactions B, v.22, out.1991, p.717-26.
- 56-ISAAC, J.; REDDY, G.P.; SHARMA, G.K. Numerical Simulation of Solidification of Casting in Metallic Molds. AFS Transactions, v. 85, 1985, p.123-32.
57. BHAVSAR, R.D.; HUI, D. & SMITH, R.W. - Inverse Chill in Cast Iron, Transactions of Japan Institute of Metals, v.28, n<sup>o</sup>10, p.797- 807, 1987.
- 58- RIZZO, E.M.S.; MELO, M.L.N.M.; SANTOS, R.G. Análise Numérico/experimental de um Processo de Fundição de Precisão. In: ANAIS DO I WORKSHOP BRASILEIRO DE FUNDIÇÃO DE PRECISÃO, Porto Alegre, 1993. **Anais**. p.188-195.
- 59-CARAM, R.; IERARDI, M.C.; GARCIA, A. Determinação do coeficiente de transmissão de calor metal/molde em função da microestrutura de solidificação. In: CBECIMAT-CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS, 8., Campinas, 1988. **Anais**. p.155-58.

### 3 - CARACTERÍSTICAS DE SOLIDIFICAÇÃO DO AÇO RÁPIDO M2

#### 3.1 - Introdução

Na seleção de um material a ser utilizado na fabricação de uma ferramenta, é necessário analisar quais são as condições de aplicação da mesma, tais como: a natureza das forças aplicadas, a temperatura de trabalho além de fatores adicionais como por exemplo a presença ou não de lubrificação. Nas operações de corte é necessária a combinação de propriedades como: **resistência ao desgaste**, **tenacidade** e **estabilidade térmica**<sup>1,2</sup> (capacidade de manter a resistência em temperaturas elevadas), possuindo o aço M2 ótima combinação das duas primeiras porém, com baixa **estabilidade térmica**<sup>3</sup>. Entretanto, considerando-se que nas operações de corte de materiais a **resistência ao desgaste** e a **tenacidade** são os requisitos mais importantes, o M2 torna-se a primeira opção quando da seleção de aços para fabricação de ferramentas de corte<sup>3</sup>.

Neste capítulo será feita uma breve revisão a respeito da seqüência de solidificação do aço rápido M2, as microestruturas que podem ser obtidas e as propriedades inerentes as mesmas. Também será feita uma análise da influência dos parâmetros térmicos, relativos ao sistema metal e molde, na microestrutura de estado bruto de fundição do aço M2.

O estudo da formação da microestrutura do aço rápido M2 apresenta um certo grau de dificuldade devido ao surgimento de diversas fases durante a solidificação, sendo que as mesmas se formam fora das condições de equilíbrio termodinâmico devido ao resfriamento rápido do metal<sup>4</sup>. Além disso, a composição química deste aço complica a análise, pois existem pelo menos 5 elementos interferindo na solidificação.

Utilizaremos, para o estudo da seqüência de solidificação do aço rápido M2, o diagrama de fases pseudobinário construído por Horn e Brandis<sup>5</sup>, o qual corresponde a composição nominal deste material (Fe-6%W-5%Mo-4%Cr-2%V), conforme apresenta a Figura 3.1a, pois, nos trabalhos mais recentes sobre a solidificação deste aço<sup>6,7,8,9</sup>, este diagrama é considerado como base para o estudo da seqüência de solidificação.

Tal diagrama fornece apenas uma descrição esquemática das etapas de solidificação do aço rápido M2, em virtude de ainda não ser disponível um diagrama de fases que

considere os vários constituintes. Particularmente não é possível prever os tipos e quantidades de carbonetos<sup>6</sup> agrupados sob o termo C.

Observa-se que nos estudos da seqüência de solidificação do aço rápido M2, grande atenção é dada aos efeitos da **composição química base**<sup>10,11,12,13</sup>, da **velocidade de resfriamento**<sup>6,11,14</sup> e da presença de **teores residuais de alguns elementos**<sup>9</sup> na evolução da microestrutura nos diversos estágios da solidificação. No presente estudo, as análises se concentraram na avaliação do efeito da variável **velocidade de resfriamento** na etapa de solidificação e nas microestruturas formadas, considerando-se uma determinada composição para o aço rápido M2.

A opção acima é justificada pelo fato de estarmos interessados na determinação de condições ótimas de resfriamento visando a obtenção de microestruturas que correspondem às propriedades mecânicas adequadas às ferramentas de corte obtidas pelo processo de fundição de precisão.

Na Tabela 4.1 são apresentadas as composições especificadas para o aço rápido M2 pelas normas ABNT NBR 6189/1982<sup>15</sup> e AISI<sup>16</sup>. A norma ABNT segue a classificação fornecida pela norma ASTM.

Tabela 3.1 - Especificações de composição química normalizadas para o aço rápido M2<sup>16,15</sup>.

composição química												
norma	designação	C	Cr	W	Mo	V	Mn	Si	P	S	Co	Ni
AISI	M2	0,78- 0,88	3,75- 4,50	5,50- 6,75	4,50- 5,50	1,75- 2,20	0,15- 0,40	0,20- 0,45	<0,03	<0,03	-	<0,30
ABNT	M2 médio C	0,78- 0,88	3,75- 4,50	5,50- 6,75	4,50- 5,50	1,75- 2,20	0,15- 0,40	0,20- 0,45	-	-	-	-
ABNT	M2 alto C	0,95- 1,05	3,75- 4,50	5,50- 6,75	4,50- 5,50	1,75- 2,20	0,15- 0,40	0,20- 0,45	-	-	-	-

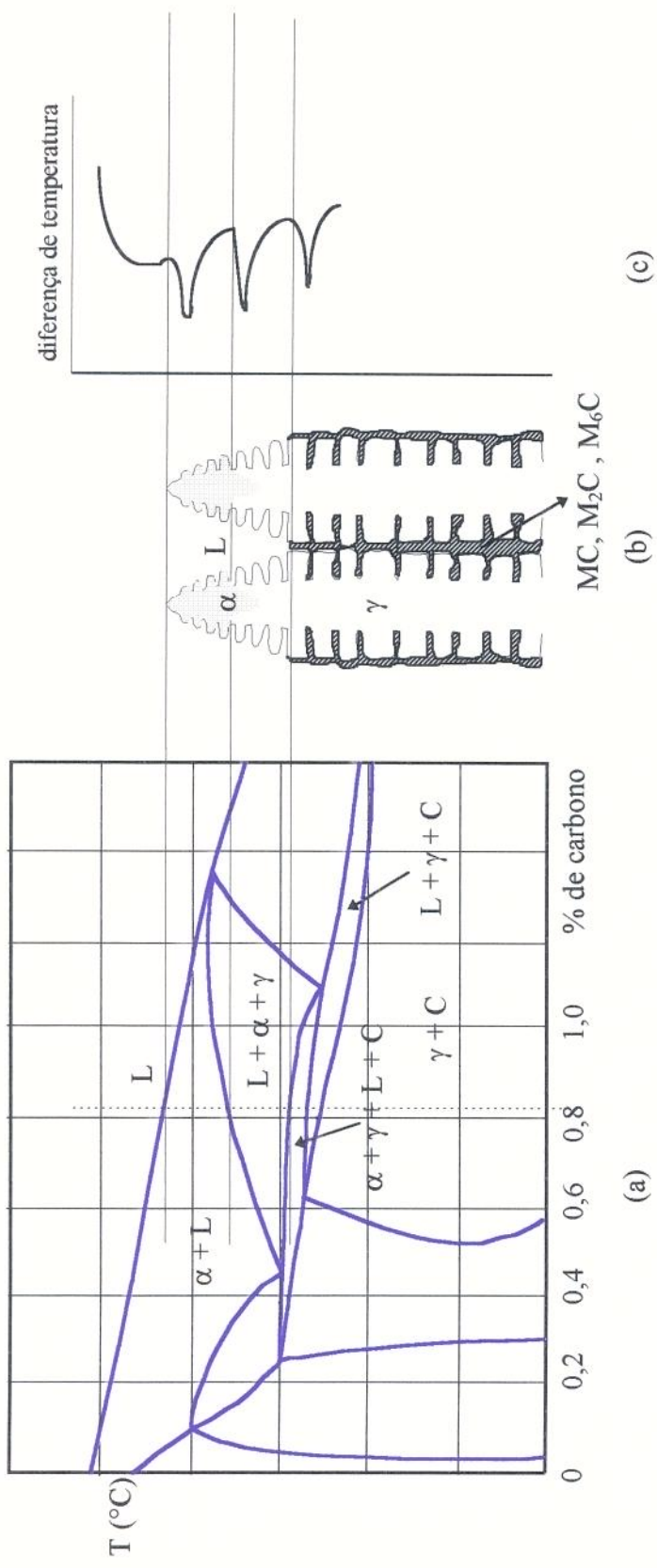


Figura 3.1 - (a) diagrama de fases pseudobinário proposto para o aço rápido M2; (b) desenho esquemático do crescimento dendrítico característico deste material; (c) curva de análise térmica típica para o aço rápido M2.

### 3.2 - Etapas da Solidificação

Pode-se a princípio considerar que, à medida que a temperatura cai, o aço rápido M2, na composição estabelecida na Tabela 3.1, passa pelas seguintes etapas de solidificação<sup>6,4,9</sup>, descritas pelo diagrama de fases da Figura 3.1a :

- 1 - líquido  $\Rightarrow$  ferrita delta
- 2 - reação peritética: líquido + ferrita delta  $\Rightarrow$  austenita
- 3 - reação eutética: líquido  $\Rightarrow$  austenita + carbonetos
- 4 - ferrita delta  $\Rightarrow$  austenita + carbonetos

#### 3.2.1 - Líquido $\Rightarrow$ Ferrita Delta<sup>1</sup>

O início da precipitação de ferrita delta primária a partir da fase líquida, considerando fixa a composição química, depende da velocidade de resfriamento pois, a temperatura *liquidus* do aço M2 sofre influência desta variável, diminuindo com o aumento da velocidade, embora de maneira pouco significativa. Ao se atingir, no resfriamento, a temperatura *liquidus*, a ferrita delta surge e passa a crescer na forma de dendritas<sup>6</sup> (Figura 3.1b). A ferrita formada pode dissolver grandes quantidades de W, V e Cr, sendo relativamente pequena a solubilidade do carbono, ocorrendo assim uma forte segregação deste último para o líquido restante<sup>11</sup>.

#### 3.2.2 - Reação Peritética: Líquido + Ferrita Delta $\Rightarrow$ Austenita

A **reação peritética** da fase líquida com a ferrita delta primária formando austenita não é caracterizada no diagrama da Figura 3.1a devido ao fato deste representar apenas uma seção do diagrama de fases Fe-W-Mo-Cr-V-C. Esta reação ocorre devido ao aumento do teor de elementos de liga no líquido próximo às interfaces  $\alpha/L$  que, aliado a uma diminuição da temperatura, leva à formação de austenita nesta interface, que é acompanhada de uma menor segregação do carbono<sup>17</sup> devido a uma maior solubilidade deste na fase  $\gamma$ .

<sup>1</sup> aqui adotar-se-á a representação de ferrita delta por  $\alpha$  como é utilizada pelo artigo de Horn e Brandis<sup>5</sup> e de Golczewski et al<sup>8</sup>.

Paralelamente a esta transformação, as dendritas continuam a crescer lateralmente, aumentando ainda mais a concentração de elementos de liga no líquido restante.

Segundo McLaughin<sup>18</sup> e Fredriksson<sup>19</sup> a reação peritética se desenvolve em dois estágios<sup>9</sup>:

a - **reação peritética** (parcial): nucleação e crescimento da fase peritética (austenita) ao longo da interface L/ $\alpha$ , ocorrendo o consumo parcial destas duas fases. Este estágio é relativamente rápido, pois, depende somente do transporte (difusão) de elementos de liga na fase líquida.

b - **transformação peritética** : quando todas as superfícies da fase pró-peritética (ferrita delta) estiverem cobertas pela fase peritética, cessando assim o contato mútuo entre as fases L,  $\alpha$  e  $\gamma$ , o crescimento da fase peritética passa a ocorrer através de duas reações distintas:  $\alpha \Rightarrow \gamma$  (reação em estado sólido que ocorre no centro das dendritas) e  $L \Rightarrow \gamma$ , cujas cinéticas são determinadas pela difusão dos elementos de liga pela fase  $\gamma$ , o que é mais difícil em relação a difusão na fase líquida, resultando no controle da reação como um todo por esta etapa.

Segundo Barkalow et al<sup>20</sup>, para as velocidades normais de resfriamento, a **reação peritética** como um todo não se completa, resultando numa região central de ferrita  $\delta$  na dendrita de austenita, ocorrendo posteriormente (reações em estado sólido), conforme McLaughin et al<sup>18</sup> e Ghomashchi e Sellars<sup>21</sup>, a formação de carbonetos no centro das dendritas .

O termo **reação peritética** aplicado ao estudo de um sistema com seis componentes como o aço M2 é utilizado apenas para indicar a natureza do processo de transformação, não implicando no equilíbrio invariante existente em sistemas mais simples<sup>20</sup>. A **reação peritética** em estudo ocorre numa faixa de temperaturas.

A temperatura de início da **reação peritética** é influenciada não só pela composição química base, como também pela velocidade de resfriamento durante a solidificação<sup>18</sup>, diminuindo com o aumento desta variável<sup>18</sup>.

Observa-se ainda que o aumento da velocidade de resfriamento durante a solidificação favorece o consumo de ferrita na transformação<sup>22</sup>  $\alpha \Rightarrow \gamma$  (**transformação peritética**). Isso se deve ao fato de que a segregação de elementos ferritizantes para a ferrita delta, na transformação  $\alpha \Rightarrow \gamma$ , é suprimida pela elevada velocidade de resfriamento, impedindo a estabilização da ferrita residual. A estabilização desta ferrita aconteceria se devido a um resfriamento lento a ferrita fosse enriquecida em elementos ferritizantes.

Ainda na **transformação peritética**, Kirk<sup>23</sup> observou que durante a formação de dendritas de austenita a partir do líquido ( $L \Rightarrow \gamma$ ) ocorre, se a velocidade de resfriamento for alta, a formação de braços secundários de austenita a partir dos braços primários da própria austenita. Estes braços secundários de austenita vão envolver os braços secundários de ferrita.

### 3.2.3 - Reação Eutética: Líquido $\Rightarrow$ Austenita + Carbonetos

O líquido restante localizado nas regiões interdendríticas (Figura 3.1b), enriquecido em carbono e em elementos ferritizantes em decorrência das reações 1 e 2, transforma-se através de sucessivas **reações eutéticas**, a medida que a temperatura cai<sup>2</sup>, em agregados de austenita e carbonetos conhecidos<sup>6</sup> como **carbonetos eutéticos** (ou eutético ledeburítico). Na microestrutura à temperatura ambiente, estes eutéticos formam uma **rede interdendrítica contínua**, sendo possível a formação de até três tipos de carbonetos a saber:  $M_2C$ ,  $M_6C$  e  $MC$  (Figura 3.2), onde o M representa um ou mais elementos químicos presentes na composição do carboneto.

A fração volumétrica total de eutético, bem como a de cada um dos três tipos, é função da composição química base, da velocidade de resfriamento e da presença de teores residuais de alguns elementos, que afetam a severidade da segregação<sup>11</sup>. Estes fatores também influenciam a seqüência de precipitação dos eutéticos  $\gamma +$  carbonetos e a temperatura de início de decomposição do eutético do líquido interdendrítico.

Segundo Fredriksson e Brising<sup>11</sup>, a fração volumétrica total do eutético diminui com o aumento da velocidade de resfriamento. Este comportamento pode ser observado na

<sup>2</sup> aqui também o termo reação eutética é utilizado para indicar a natureza do processo de transformação pois, não implica no equilíbrio invariante já que temos a precipitação dos carbonetos numa faixa de temperaturas

Figura 3.3 obtida pelos mesmos autores a partir de um trabalho experimental levando em conta ainda o teor de carbono.

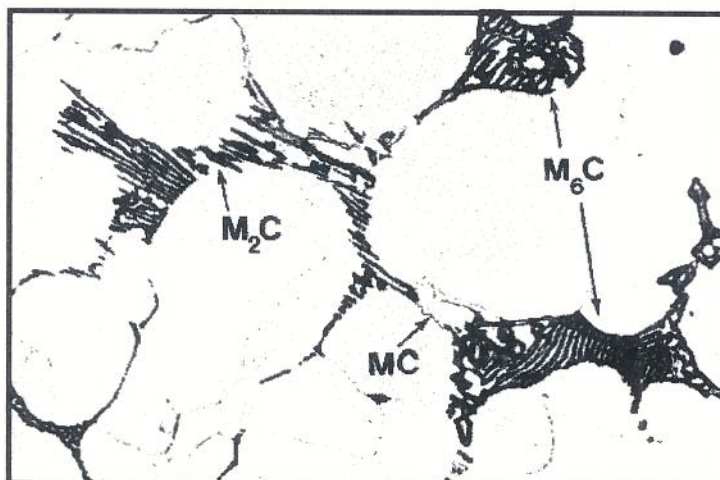


Figura 3.2 - Principais tipos de carbonetos eutéticos que podem estar presentes na microestrutura do aço rápido M2 à temperatura ambiente com velocidade de resfriamento de 0,04 K/s (imagens de eletrons secundários; amostra sem ataque)<sup>6</sup>.

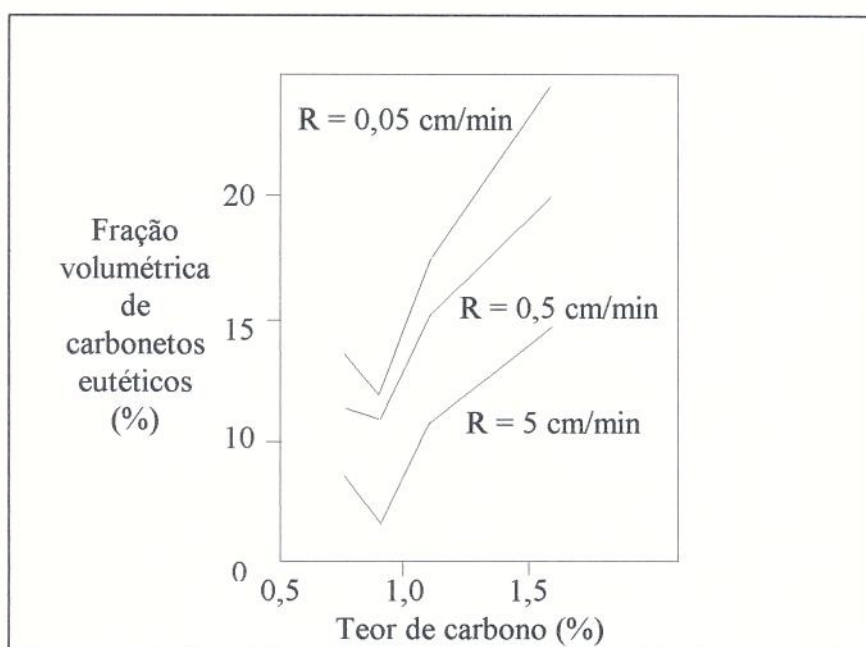


Figura 3.3 - Variação da fração volumétrica da estrutura eutética em função da velocidade de resfriamento e da porcentagem em peso de carbono<sup>11</sup>.



Na Tabela 3.2 temos um exemplo da composição média dos carbonetos que constituem o eutético para um aço com 0,85 % de carbono. Os valores desta tabela são colocados apenas de forma ilustrativa, pois existe uma grande variação de dados na literatura em função de diferentes composições químicas base e velocidades de resfriamento<sup>4,9</sup>.

Tabela 4.2 - Composição típica dos carbonetos eutéticos<sup>21</sup>.

tipo de carboneto	análise química (% em peso)				
	Fe	W	Mo	V	Cr
M <sub>6</sub> C	34,1	38,3	20,3	4,3	3,0
M <sub>2</sub> C	7,2	49,3	21,3	14,7	7,6
MC	1,1	33,0	14,5	46,3	5,1

Quanto à formação e à morfologia dos três eutéticos temos:

a - Eutético gama + M<sub>6</sub>C :

A formação do carboneto M<sub>6</sub>C limita-se às ligas com baixos teores de V e/ou carbono<sup>20</sup> e/ou solidificadas sob baixas velocidades de resfriamento, sendo, nestes casos, o primeiro carboneto a se precipitar<sup>11</sup>, devido ao menor nível de segregação de elementos de liga para o líquido.

A morfologia característica é do tipo **espinha de peixe**, com lamelas de M<sub>6</sub>C separadas umas das outras pela austenita, quando as seções transversais são observadas por microscopia ótica (Figura 3.4a) . A morfologia deste eutético não sofre influência da composição química e da velocidade de resfriamento, ocorrendo somente uma diminuição do espaçamento interlamelar quando se aumenta a velocidade de resfriamento.

b - Eutético gama + MC

Nas experiências realizadas por Fredriksson e Brising<sup>11</sup> observou-se que para baixas velocidades de resfriamento e baixo teor de C o carboneto M<sub>6</sub>C é o primeiro a se formar e

cerca de 20°C abaixo precipita o carboneto MC que cresce através de uma reação eutética competitiva. No caso de velocidades de resfriamento intermediárias, é o primeiro carboneto a se formar<sup>11</sup>.

A morfologia do carboneto MC varia em função do teor de V<sup>20</sup>, caracterizando-se como **partículas maciças isoladas** para um baixo teor de V<sup>11</sup> ou como uma morfologia **semelhante a dendrítica** (V maior que 1,9%) típico de velocidades de resfriamento intermediárias<sup>11</sup>. Resultados da literatura indicam que a velocidade de resfriamento não influenciam a morfologia do MC<sup>25</sup>.

### c - Eutético gama + M<sub>2</sub>C

Quando a solidificação ocorre sob velocidades de resfriamento extremamente elevadas (540 °C/min), independente da composição química base, o único carboneto formado é o M<sub>2</sub>C na morfologia de **bastonetes**<sup>11</sup> (Figura 3.4b), sendo que em baixas velocidades o M<sub>2</sub>C surge na morfologia tipo "**leque**"<sup>20</sup> (Figura 3.4c). Para velocidades de resfriamento intermediárias, o carboneto M<sub>2</sub>C precipita depois do carboneto MC<sup>11</sup> e na forma de **lamelas**<sup>24</sup> (Figura 3.4d).

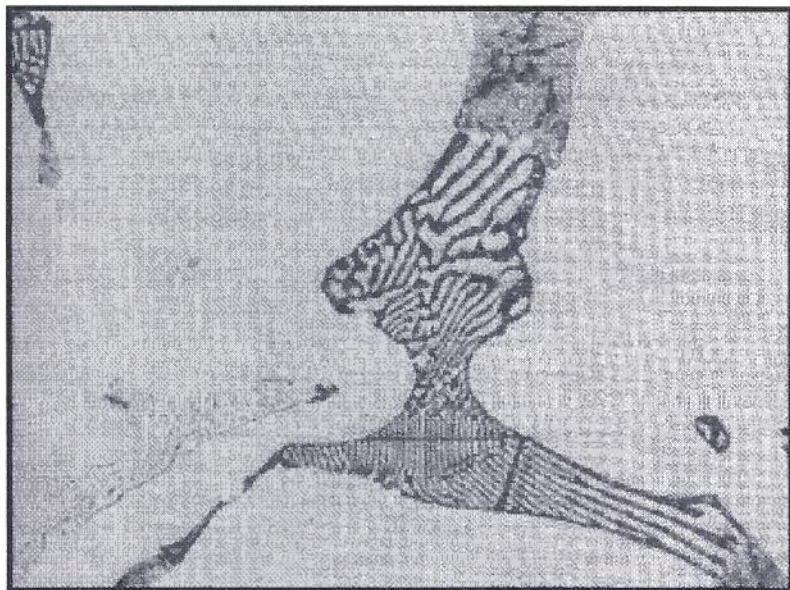


Figura 3.4a - Morfologia tipo espinha de peixe para o carboneto M<sub>6</sub>C (aumento de 2/3 x 400 e R=0,054 cm/min.)<sup>11</sup>.

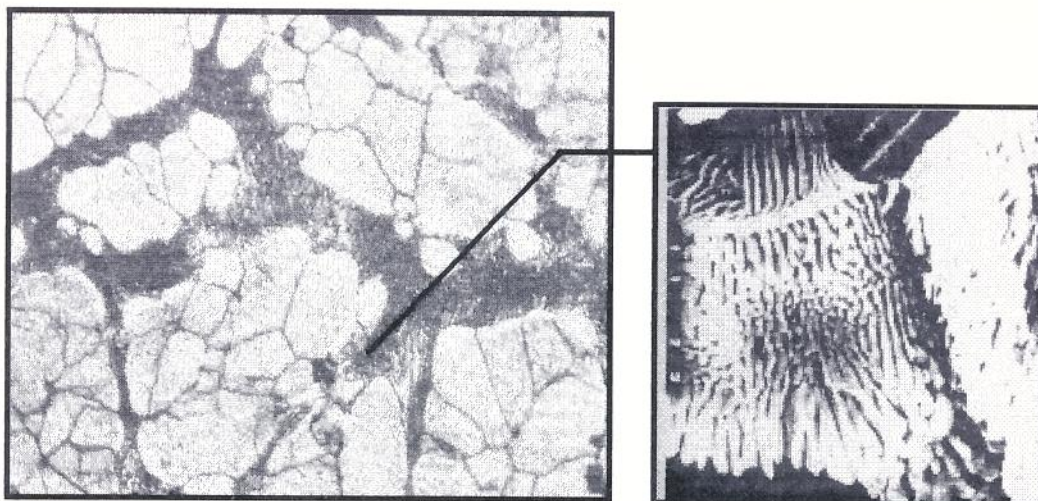


Figura 3.4b - Morfologia tipo bastonetes para o carboneto  $M_2C$  (aumento  $2/3 \times 1200$   $R=5,4$   $cm/min.$ )<sup>11</sup> e no detalhe uma micrografia por MEV (o aumento desta micrografia não é fornecido pela referência)<sup>24</sup>.

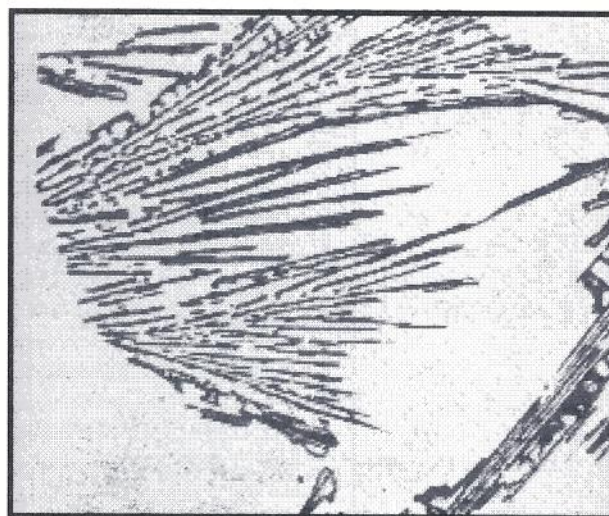


Figura 3.4c - Morfologia tipo leque para o carboneto  $M_2C$  (495x, ataque:  $KMnO_4$ )<sup>20</sup>.

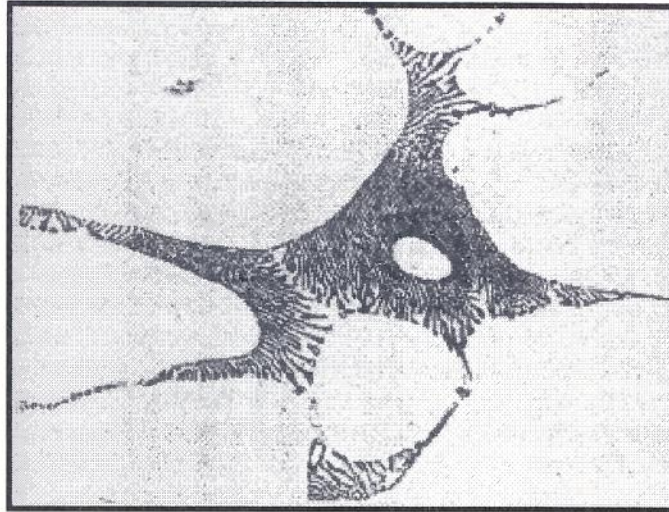


Figura 3.4d - Morfologia tipo lamelar para o carboneto  $M_2C$  (não é fornecido o aumento da micrografia na referência<sup>24</sup>).

### 3.2.4 - Ferrita Delta $\Rightarrow$ Austenita + Carbonetos

Acompanhando a solidificação pelo diagrama da Figura 3.1a, observa-se que existe uma reação de decomposição da ferrita delta residual nas regiões intradendríticas, pois, sob baixas velocidades de resfriamento, a mesma não é consumida pela reação peritética<sup>23,25</sup>. Esta decomposição, conhecida como reação eutetóide- $\delta$ <sup>11,6</sup>, como mencionado no item anterior, ocorre em temperaturas próximas às da reação eutética<sup>11</sup>, ou seja, 1250 °C<sup>23,26</sup>, formando-se um agregado de austenita e carbonetos (carbonetos primários), cuja morfologia é semelhante ao produto da reação eutetóide<sup>27</sup>.

À medida que aumenta a velocidade de resfriamento, aumenta o super-resfriamento cinético desta reação e segundo Hoyle<sup>27</sup>, pode até ser suprimida para velocidades extremamente elevadas (resfriamento em água). Do ponto de vista de seqüência de solidificação do aço M2, a importância desta reação advém do fato de que sua ocorrência impõe a necessidade de que o carbono seja transportado desde a fase líquida até a ferrita delta (através da fase peritética gama), dado que esta possui teor de carbono inferior às fases austenita e carboneto. Em consequência, o líquido empobrecido em carbono transforma-se em austenita, alterando-se assim a relação entre as frações volumétricas de austenita e carboneto no eutético interdendrítico<sup>25,26</sup>.

Com a continuação do resfriamento, abaixo da linha *solidus*, haverá ainda a precipitação de uma serie de outros carbonetos<sup>21</sup> através de reações em estado sólido. Os tipos e morfologias de carbonetos formados nestas reações não serão abordadas neste trabalho, pois, o mesmo se restringe apenas aos carbonetos eutéticos formados durante a etapa de solidificação. Ao atingir a temperatura ambiente, a austenita se transforma, dependendo da cinética de resfriamento, quase completamente em martensita. Na Figura 3.5 é apresentado um desenho esquemático proposto por Ghomaschi e Sellars<sup>21</sup> de uma estrutura bruta de fundição do aço M2

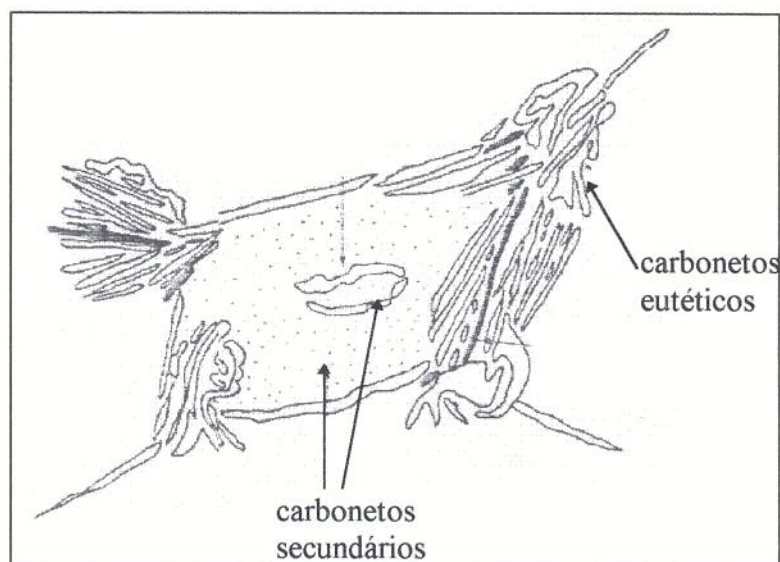


Figura 3.5 - Representação esquemática da microestrutura bruta de fundição do aço M2 segundo Ghomaschi e Sellars<sup>21</sup>.

### 3.3 - Estrutura Bruta de Fundição

Analisando os eventos de solidificação do aço rápido M2 descritos acima, em relação à **morfologia dos carbonetos eutéticos**, concluímos que, para uma dada composição química, os **tipos** de carbonetos formados bem como sua **forma, tamanho e distribuição espacial**, são determinados ao longo do processo de solidificação do metal<sup>6</sup>.

De acordo com Shokuhfar a **microestrutura ideal** de um aço ferramenta é normalmente constituída de uma **matriz tenaz** (finos grãos de martensita temperada)

contendo **carbonetos de endurecimento secundário** a nível sub-microscópico, **carbonetos eutéticos** e **carbonetos primários** de *forma esférica*, de *pequeno tamanho* e *distribuídos homogeneamente*<sup>1</sup>. Este tipo de microestrutura pode ser obtida pela técnica de metalurgia do pó ou por métodos convencionais como a conformação plástica de lingotes fundidos.

A **microestrutura bruta de fundição** objetivada nos roteiros clássicos de processamento dos aços rápidos M2 através de conformação mecânica, constitui-se de carbonetos eutéticos de menor tamanho possível e homogeneamente distribuídos. No caso da obtenção direta por fundição de ferramentas de corte, deve-se ainda considerar que a rede interdendrítica de colônias eutéticas não é quebrada através do trabalho mecânico, tornando-se mais importante o controle da microestrutura bruta de fundição. Este controle abrange as seguintes características microestruturais:

- morfologia dos carbonetos eutéticos
- estrutura dendrítica:
  - tamanho dos grãos macroscópicos
  - morfologia (colunar ou equiaxial) dos grãos macroscópicos
  - espaçamento interdendrítico primário
  - espaçamento interdendrítico secundário

Por sua vez, a influência dos carbonetos nas propriedades do aço M2 está diretamente relacionada com o modo sob a qual estes constituintes se precipitam<sup>21</sup>. Em primeiro lugar, os carbonetos que são parcialmente dissolvidos na matriz durante a austenitização controlam aquelas propriedades que dependem da composição da matriz, como, por exemplo, a **estabilidade térmica**. Além disso, a presença de carbonetos influencia diretamente nas propriedades mecânicas, particularmente a **resistência ao desgaste**, relacionada com a **fração volumétrica**, geralmente em altas percentagens<sup>20,6</sup>, e a alta dureza destes constituintes, principalmente aqueles carbonetos eutéticos interdendríticos<sup>21</sup>. Por sua vez, a **distribuição espacial** assim com o **tamanho** destes carbonetos possui uma marcante influência na **tenacidade** destes aços pois, por exemplo, carbonetos de grandes dimensões nucleiam micro-trincas que podem eventualmente causar rupturas<sup>6,28</sup>.

A espessura das lamelas dos carbonetos eutéticos determina o tamanho dos carbonetos na forma de blocos, responsável por 50% do desempenho de corte do aço no produto final<sup>6</sup>. Esta espessura é fortemente influenciada pela velocidade de resfriamento ( $R$ )

para os aços rápidos<sup>6</sup>, sendo que para uma dada valor de  $R$ , o carboneto  $M_6C$  é sempre mais grosseiro que o  $M_2C$ , realçando esta diferença de espessura no final das lamelas de  $M_6C$ .

Observa-se ainda que quanto maior a velocidade de resfriamento menor a fração volumétrica de colônias eutéticas<sup>6,11,14</sup> levando a uma distribuição mais homogênea dos carbonetos eutéticos interdendríticos.

Para o aço M2 o controle do **espaçamento interdendrítico secundário** ( $\lambda_2$ ) é importante, pois, este parâmetro junto com o **espaçamento interdendrítico primário** ( $\lambda_1$ ), determina o volume das “poças eutéticas”, onde se precipitam os carbonetos eutéticos. Como foi apresentado no capítulo 1, os valores de  $\lambda_2$  e de  $\lambda_1$  estão diretamente relacionados com a velocidade de resfriamento.

Durante a solidificação e enquanto as dendritas são monofásicas ferríticas (reação 1) o valor de  $\lambda_2$  é influenciado pelo gradiente térmico na fase líquida ( $G_L$ ) e pela velocidade de crescimento das dendritas<sup>23</sup> assim como pelos fenômenos de engrossamento e coalescimento<sup>22,23</sup>. Na medição de  $\lambda_2$  não é possível se distinguir as etapas ferrítica e austenítica da solidificação do aço M2, pois, tais medições são realizadas à temperatura ambiente.

Para o controle do **tamanho dos grãos macroscópicos** são empregados *refinadores* que atuam sobre a dendrita de ferrita primária, através da formação de uma maior fração de grãos equiaxiais, levando assim a um aumento da fração da superfície de interface de sólido/líquido interdendrítico. Este líquido ao se decompor promoverá uma distribuição mais homogênea das colônias eutéticas. Os *refinadores* podem ser compostos que agem como nucleantes da ferrita primária promovendo a nucleação heterogênea da ferrita, impedindo seu crescimento, como é o caso de carbonetos, nitretos e carbonitretos de Ti, V, Zr e Nb, que possuem elevado ponto de fusão e estrutura cristalina semelhante à da ferrita.

### 3.4 - Referências Bibliográficas do Capítulo 3

- 1-SHOKUH FAR, A. Solidification Phenomena and Properties of Some Cast Tool Steel. In: INTERNATIONAL IRON AND STEEL CONGRESS, 6., Nagoya, 1990. **Proceedings**. p. 721-28.
- 2-ROBERTS, G.A.; CARY, R.A. Tool Steels. Metals Park, Ohio, American Society for Metals, 1980, p.627-39.
- 3-Selection of Materials for Cutting Tools. In: Metals Handbook, v.3, 9 ed., 1989, p.470-7.
- 4-MAKRAY, E. L. Estrutura Bruta de Fusão de Aço Ferramenta Contendo Nióbio. Campinas, 1983. 295p. Tese (Doutorado) - Faculdade de Engenharia de Campinas, UNICAMP.
- 5-HORN, E.; BRANDIS, H. DEW-Techn. Ber., v.11, 1971, p. 147-54 referenciado por FISCHMEISTER, H.F.; RIEDL R.; KARAGÖZ, S. Solidification of High-Speed Tool Steels. Met. Trans. A, v. 20, out. 1989, p. 2133-48.
- 6-FISCHMEISTER, H.F.; RIELL, R.; KARAGÖZ, S. Solidification of High-Speed Tool Steels. Met. Trans. A, v.20, out. 1989, p. 2133-48.
- 7-HOYLE, G. High Speed Steels, Cambridge, Butterworths, 1988, p. 7-13.
- 8-GOLCZEWSKI, J.; FISCHMEISTER, H.F. Calculation of phase equilibria for AISI M2 high-speed steel. Steel Research, v.63, n.8, 1992, p. 354-60.
- 9-BOCCALINI Jr., M. Um Estudo Morfológico dos Carbonetos Eutéticos do Aço Rápido AISI M2. São Paulo, 1994. 71 p. Exame de Qualificação (Doutorado). Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, USP.
- 10-KIYAN, C.; SANTOS, R.G. - Analytical analysis of heat flow and microstructure formation during solidification of metallic alloys. In: 14TH CANADIAN CONGRESS OF APPLIED MECHANICS, Ontario, 1993. **Anais**. p. 665-668,



- 11-FREDRIKSSON, H.; BRISING, S. The Formation of Carbides during Solidification of High-speed Steels. Scandinavian J. of Met., v.5, 1976, p. 268-75.
- 12-BEELEY, P.R.; SHOKUHFAR, A. Some Developments in Cast Steels for Tooling. In: INTERNATIONAL STEEL FOUNDRY CONGRESS, 1.,1985. **Proceedings.** p. 173-82.
- 13-BEELEY, P.R.; SHOKUHFAR, A. Cast tool steels. The British Foundryman, jul. 1985, p. 289-96.
- 14-Guide to the Solidification of Steels. Stockholm, Jernkontoret, 1977, p. 134.
- 15-ABNT, Aço-Ferramenta: Especificação - NBR 6189 out. 1982
- 16-Machining of Tool Steels. In: Metals Handbook, v.16-Machining, 9 ed., 1989, p. 708-32.
- 17-ZOU, J.; TSENG, A.A. Microscopic Modeling of Fundamental Phase Transformations in Continuous Casting of Steel. Met. Trans. A, v.20, fev. 1992, p. 457-467.
- 18-McLAUGHLIN, J.; KRAFT, R.W.; GOLDSTEIN, J.I. Characterization of the Solidification Structures Within the Dendritic Core of M2 High Speed Steel. Met. Trans. A, v.8, nov. 1977, p. 1787-92.
- 19-FREDRIKSSON, H.; NYLÉN, T. Mechanism of Peritectic Reactions and Transformations. Metal Science.v.16, jun.1982, p. 283-94.
- 20-BARKALOW, R.H.; KRAFT, R.W.; GOLDSTEIN, J.I. Solidification of M2 High Speed Steel. Met. Trans., v.3, abr. 1972, p. 919-26.
- 21-GHOMASHCHI, M.R.; SELLARS C.M. Microstructural changes in as-cast M2 grade high speed steel during high temperature treatment. Metal Science, v.18, jan. 1984, p. 44-8.
- 22-WATMOUGH, T.; GOUWENS,P.R. Cast High Speed Steels. Transactions AFS, v.74, 1966, p.769-89.

- 23-KIRK, F.A. High-speed and tool steels. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON TOWARDS IMPROVED PERFORMANCE OF TOOL MATERIALS, Teddington, 1981. **Proceedings**. London, Metals Society, 1982, p. 45-51.
- 24-FREDRIKSSON, H.; NICA, M. The Influence of V, Si and C on the Eutectic Reaction in M2 High Speed Steel. Scandinavian J. of Met., v.8, 1979, p. 243-53.
- 25-GELLER, Y. Tool Steels. Moscow, Mir Publishers, 1978, p.13-44.
- 26-American Society for Testing Materials (ASTM).1993.Standard Specification for Cast Tool Steel. ASTM A 597.Seção 1, v.01.02, p.314-5.
- 27-HOYLE, G. High Speed Steels. Cambridge, Butterworth, 1988, p.1-5.
- 28-SHELTON, P.W.; WRONSKI. A.S. Cracking in M2 high speed steel. Metal Science, v.17, nov.1983, p. 533-539.

## 4 - DESENVOLVIMENTO DO MÉTODO NUMÉRICO

### 4.1 - Introdução

Neste capítulo serão descritos os métodos numéricos desenvolvidos e implementados via computador, utilizados no cálculo dos perfis térmicos, da determinação do coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde e dos parâmetros microestruturais.

O estudo dos fenômenos, descritos acima, relativos à solidificação de ligas metálicas realizado neste trabalho, passa pela utilização das equações relativas a problemas de transferência de calor unidirecionais ou radiais. Na resolução destas equações será empregado o método de **diferenças finitas explícito** devido às facilidades de implementação computacional oferecidas por este método, aliado ao fato de não ser necessário a discretização das equações em duas ou três dimensões ou para formas geométricas complexas, onde seria mais interessante o emprego de métodos numéricos mais elaborados (por exemplo o método de elementos finitos conforme capítulo 1 deste trabalho).

### 4.2 - Aplicação do Método de Diferenças Finitas Explícito

Primeiramente, vamos considerar, para um sistema metal e molde em que o fluxo de calor é unidirecional (Figura 4.1), a aplicação da discretização pelo método de diferenças finitas explícito para a equação 2.20 correspondente as malhas no **interior do metal**, com exceção da interface metal/molde e na região de simetria (Figura 4.1 - malha e), transformando-a em equações algébricas<sup>1</sup>, ou seja:

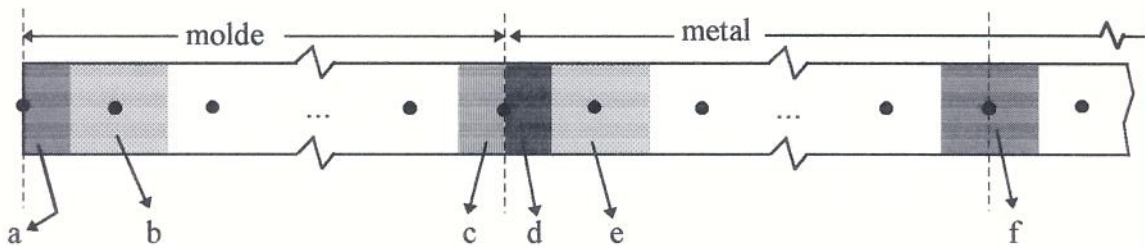


Figura 4.1 - Distribuição de malhas no sistema metal e molde

$$\frac{\partial H}{\partial t} = k_c(T_c) \frac{\partial^2 T_c}{\partial x^2} \quad (4.1)$$

ou, colocando em forma de diferenças finitas:

$$\frac{H_i^{l+\Delta t} - H_i^l}{\Delta t} = k_c(T_c) \cdot \frac{T_{c_i+\Delta x}^l - 2T_{c_i}^l + T_{c_i-\Delta x}^l}{\Delta x^2} \quad (4.2)$$

ou ainda

$$\frac{\Delta x^2}{\Delta t} \cdot \frac{1}{k_c(T_c)} (H_i^{l+\Delta t} - H_i^l) = T_{c_i+\Delta x}^l - 2T_{c_i}^l + T_{c_i-\Delta x}^l \quad (4.3)$$

rearranjando obtém-se:

$$H_i^{l+\Delta t} = H_i^l + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \cdot k_c(T_c) \cdot (T_{c_i+\Delta x}^l - 2T_{c_i}^l + T_{c_i-\Delta x}^l) \quad (4.4)$$

e fazendo:

$$\alpha_c(T_c) = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \cdot k_c(T_c) \quad (4.5)$$

resulta em:

$$H_i^{l+\Delta t} = H_i^l + \alpha_c(T_c) \cdot (T_{c_i+\Delta x}^l - 2T_{c_i}^l + T_{c_i-\Delta x}^l) \quad (4.6)$$

Para o **interior do molde** (Figura 4.1 - malha b) o equacionamento é mais simples pois o mesmo não sofre mudança de fase durante o seu aquecimento e posterior resfriamento. Portanto, temos:

$$\frac{\partial T_m(x,t)}{\partial t} = \frac{k_m(T_m)}{c_m(T) \cdot \rho_m(T)} \cdot \frac{\partial^2 T_m(x,t)}{\partial x^2} \quad (4.7)$$

que colocando em termos de diferenças finitas resulta em:

$$\frac{T_{m_i}^{l+\Delta t} - T_{m_i}^l}{\Delta t} = \frac{k_m(T)}{c_m(T) \cdot \rho_m(T)} \cdot \frac{T_{m_i+\Delta x}^l - 2T_{m_i}^l + T_{m_i-\Delta x}^l}{\Delta x^2} \quad (4.8)$$

e fazendo

$$Fo_m(T_m) = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \cdot \frac{k_m(T_m)}{c_m(T_m) \cdot \rho_m(T_m)} \quad (4.9)$$

obtém-se:

$$T_{m_i}^{l+1} = T_{m_i}^l + Fo_m(T_m) \cdot (T_{m_{i+1}}^l - 2T_{m_i}^l + T_{m_{i-1}}^l) \quad (4.10)$$

Para o **molde na interface metal/molde** podemos aplicar a equação da conservação da energia considerando, em primeiro lugar, como volume de controle a parte da malha relativa ao molde conforme a Figura 4.1 malha c:

$$\dot{E}_{entra} + \dot{E}_{gerada} - \dot{E}_{sai} = \dot{E}_{armazenada} \quad (4.11)$$

A energia gerada é igual a zero ( $\dot{E}_{gerada} = 0$ ) pois não se considera a geração de qualquer forma de energia no molde.

$$q_{newtoniano} - q_{condução} = q_{armazenada} \quad (4.12)$$

Substituindo os termos correspondentes a cada termo da equação acima tem-se:

$$h_{cm}(t) \cdot A \cdot (T_{c_i} - T_{m_i}) - k_m(T_m) \cdot A \cdot \frac{\partial T_m}{\partial x} = m_m \cdot c_m \cdot \frac{\partial T_m}{\partial t} \quad (4.13)$$

e fazendo:

$$m_m = \rho_m \cdot V_m = \rho_m \cdot A \cdot \frac{\Delta x}{2} \quad (4.14)$$

discretizando pelo método de diferenças finitas explícito obtém-se:

$$h_{cm}(t) \cdot A \cdot (T_{c_i}^l - T_{m_i}^l) - k_m(T_m) \cdot A \cdot \frac{(T_{m_i}^l - T_{m_{i-1}}^l)}{\Delta x} = \rho_m(T_m) \cdot A \cdot \frac{\Delta x}{2} \cdot c_m(T_m) \cdot \frac{(T_{m_i}^{l+1} - T_{m_i}^l)}{\Delta t} \quad (4.15)$$

ou ainda, rearranjando a equação 4.15:

$$T_{m_i}^{l+H} = T_{m_i}^l + \frac{2 \cdot \Delta t}{\rho_m(T_m) \cdot c_m(T_m) \cdot \Delta x} \cdot h_{cm}(t) \cdot (T_{c_i}^l - T_{m_i}^l) - \frac{2 \cdot \Delta t \cdot k_m(T_m)}{\rho_m(T_m) \cdot c_m(T_m) \cdot \Delta x^2} \cdot (T_{m_i}^l - T_{m_{i-1}}^l) \quad (4.16)$$

e fazendo:

$$Bi_{cm}(T, t) = \frac{h_{cm}(t) \cdot \Delta x}{k_m(T_m)} \quad (4.17)$$

resultando em:

$$T_{m_i}^{l+H} = T_{m_i}^l + Fo_m(T_m) \cdot Bi_{cm}(T, t) \cdot (T_{c_i}^l - T_{m_i}^l) - 2 \cdot Fo_m \cdot (T_{m_i}^l - T_{m_{i-1}}^l) \quad (4.18)$$

Aplicando-se agora o balanço de energia na **interface metal/molde** tendo como volume de controle a parte da malha de interface relativa ao **metal** (Figura 4.1 - malha d), temos que  $\dot{E}_{gerada} \neq 0$ , pois, existe a liberação de calor latente do metal que solidifica sendo a equação de balanço dada por:

$$q_{condução} + q_{calor\ latente} - q_{newtoniano} = q_{armazenada} \quad (4.19)$$

Substituindo os termos correspondentes a cada termo da equação acima tem-se:

$$k_c(T_c) \cdot A \cdot \frac{\partial T_c}{\partial x} + \rho_c(T_c) \cdot A \cdot \frac{\Delta x}{2} \cdot \frac{\partial f_s}{\partial t} \cdot L_f - h_{cm}(t) \cdot A \cdot (T_{c_i} - T_{m_i}) = m_c \cdot c_c \cdot \frac{\partial T_c}{\partial t} \quad (4.20)$$

sendo:

$$m_c = \rho_c \cdot V_c = \rho_c \cdot A \cdot \frac{\Delta x}{2} \quad (4.21)$$

substituindo as equações diferenciais parciais e a equação 4.21 em 4.20 resulta em:

$$k_c(T_c) \cdot \frac{\partial T_c}{\partial x} - h_{cm}(t) \cdot (T_{c_i} - T_{m_i}) = \rho_c(T_c) \cdot c_c(T_c) \cdot \frac{\Delta x}{2} \cdot \frac{\partial T_c}{\partial t} - \rho_c(T_c) \cdot \frac{\Delta x}{2} \cdot L_f \cdot \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (4.22)$$

substituindo agora a equação 2.19 em 4.22 obtém-se:

$$k_c(T_c) \cdot \frac{\partial T_c}{\partial x} - h_{cm}(t) \cdot (T_{c_i} - T_{m_i}) = \frac{\Delta x}{2} \cdot \frac{\partial H}{\partial t} \quad (4.23)$$

ou ainda:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{2}{\Delta x} \cdot \left[ k_c(T_c) \cdot \frac{\partial T_c}{\partial x} - h_{cm}(t) \cdot (T_{c_i} - T_{m_i}) \right] \quad (4.24)$$

que pode ser discretizado utilizando-se o esquema de diferenças finitas:

$$\frac{H_i^{l+1} - H_i^l}{\Delta t} = \frac{2}{\Delta x} \cdot \left[ k_c(T_c) \cdot \frac{(T_{c_i+1}^l - T_{c_i}^l)}{\Delta x} - h_{cm}(t) \cdot (T_{c_i}^l - T_{m_i}^l) \right] \quad (4.25)$$

resultando em:

$$H_i^{l+1} = H_i^l + \frac{2 \cdot \Delta t}{\Delta x} \cdot \left[ k_c(T_c) \cdot \frac{(T_{c_i+1}^l - T_{c_i}^l)}{\Delta x} - h_{cm}(t) \cdot (T_{c_i}^l - T_{m_i}^l) \right] \quad (4.26)$$

Para o **molde na interface molde/ambiente** podemos aplicar a equação da conservação da energia, considerando como volume de controle a parte da malha relativa ao molde conforme a Figura 4.1 - malha a:

$$\dot{E}_{entra} + \dot{E}_{gerada} - \dot{E}_{sai} = \dot{E}_{armazenada} \quad (4.11)$$

considerando ainda que não existe a geração de energia no molde ( $\dot{E}_{gerada} = 0$ ):

$$q_{conduç \tilde{a}} - (q_{convecç \tilde{a}} + q_{radiaç \tilde{a}}) = q_{armazenada} \quad (4.27)$$

$$k_m(T) \cdot A \cdot \frac{\partial T_m}{\partial x} - \left\{ h_{cme}(t) \cdot A \cdot (T_{m_i} - T_{ambiente}) + \left[ \varepsilon \cdot \sigma \cdot A \cdot \left[ (T_{m_i})^4 - (T_{ambiente})^4 \right] \right] \right\} = m_m \cdot c_m \cdot \frac{\partial T_m}{\partial t} \quad (4.28)$$

O fluxo de calor por radiação pode ser reescrito como:

$$q_{\text{radiação}} = \varepsilon \cdot \sigma \cdot \left[ (T_{m_i})^2 - (T_{\text{ambiente}})^2 \right] \cdot (T_{m_i} + T_{\text{ambiente}}) \cdot (T_{m_i} - T_{\text{ambiente}}) \quad (4.29)$$

o que permite a definição de um coeficiente de transferência de calor por radiação<sup>2</sup> ( $h_{rme}$ ):

$$h_{rme} = \varepsilon \cdot \sigma \cdot \left( (T_{m_i})^2 - (T_{\text{ambiente}})^2 \right) \cdot (T_{m_i} + T_{\text{ambiente}}) \quad (4.30)$$

de forma que possibilita que se estabeleça um coeficiente total de transferência de calor na interface molde/ambiente ( $h_{me}$ ):

$$h_{me} = h_{cme} + h_{rme} \quad (4.31)$$

Substituindo a equação 4.31 em 4.28 e realizando a discretização:

$$k_m(T_m) \cdot \frac{(T_{m_i+1}^l - T_{m_i}^l)}{\Delta x} - \left[ h_{me}(t) \cdot (T_{m_i}^l - T_{\text{ambiente}}^l) \right] = \rho_m(T_m) \cdot \frac{\Delta x}{2} \cdot c_m(T_m) \cdot \frac{(T_{m_i+1}^{l+1} - T_{m_i}^l)}{\Delta t} \quad (4.32)$$

ou ainda:

$$T_{m_i}^{l+1} = T_{m_i}^l - \frac{2 \cdot \Delta t}{\rho_m(T_m) \cdot c_m(T_m) \cdot \Delta x} \cdot \left[ h_{me}(t) \cdot (T_{m_i}^l - T_{\text{ambiente}}^l) \right] + \frac{2 \cdot \Delta t \cdot k_m(T)}{\rho_m(T_m) \cdot c_m(T_m) \cdot \Delta x^2} \cdot (T_{m_i+1}^l - T_{m_i}^l) \quad (4.33)$$

fazendo:

$$Bi_{me}(T, t) = \frac{h_{me}(t) \cdot \Delta x}{k_m(T_m)} \quad (4.34)$$

obtem-se:

$$T_{m_i}^{l+1} = T_{m_i}^l - 2 \cdot Fo_m \cdot Bi_{me}(T, t) \cdot (T_{m_i}^l - T_{\text{ambiente}}^l) + 2 \cdot Fo_m \cdot (T_{m_i+1}^l - T_{m_i}^l) \quad (4.35)$$



Para o caso de uma geometria **simétrica para o metal** (condição de contorno 2.1.12c), temos para a malha correspondente ao centro da peça a situação apresentada na Figura 4.1 - malha f:

$$T_{c_{i-1}}^l = T_{c_{i+1}}^l \quad , \quad (4.36)$$

modificando-se assim ligeiramente a equação 4.6 obtém-se:

$$H_i^{l+1} = H_i^l + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \cdot k_c(T_c) \cdot (2 \cdot T_{c_{i-1}}^l - 2 \cdot T_{c_i}^l) \quad (4.37)$$

No caso de geometria cilíndricas pode-se converter as equações 4.1 e 4.7 para coordenadas cilíndricas, obtendo-se:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = k_c(T_c) \left[ \frac{\partial^2 T_c}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial T_c}{\partial r} \right] \quad (4.38)$$

Para o molde tem-se:

$$\rho_m(T_m) \cdot c_m(T_m) \cdot \frac{\partial T_m}{\partial t} = k_m(T_m) \cdot \left[ \frac{\partial^2 T_m}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial T_m}{\partial r} \right] \quad (4.39)$$

Tomando-se estas duas últimas equações pode-se realizar o mesmo processo de discretização para o metal e molde descrito anteriormente obtendo-se as correspondentes equações ao longo do sistema.

### 4.3 - Avaliação do Método de Diferenças Finitas Explícito

A seguir será apresentada uma breve comparação entre os métodos de diferenças finitas implícito e explícito, justificando a escolha deste último. Em primeiro lugar será feita uma análise das propriedades numéricas, discutidas no capítulo 2, apresentadas pelos diferentes métodos de diferenças finitas (MDF) explícito e implícito.

a - consistência numérica:

Não existe diferença entre a ordem do erro de truncamento associado aos esquema de discretização pelos método de diferenças finitas explícito em relação ao implícito puro. Este erro é dado por<sup>2</sup>:

$$\text{erro de truncamento} = (\Delta t) + (\Delta x)^2 \quad (4.40)$$

A ordem deste erro poderia ser reduzida com a utilização da discretização das equações pelo método de diferenças finitas utilizando-se o esquema implícito alternativo de Crank-Nicolson. Entretanto, Shamsundar e Roosz<sup>3</sup> não recomendam este esquema para problemas envolvendo mudança de fase pois, o maior esforço computacional envolvido não se traduz em uma maior precisão nos resultados.

b - estabilidade numérica

A equação discretizada por **MDF explícito** para as **malhas interiores do molde** (equação 4.10) pode ser reescrita como:

$$T_{m_i}^{l+1} = Fo_m \cdot (T_{m_{i+1}}^l - T_{m_{i-1}}^l) + (1 - 2 \cdot Fo_m) \cdot T_{m_i}^l \quad (4.41)$$

Reescrevendo também a equação para a malha na **interface metal/molde** do lado do **molde** (equação 4.18):

$$T_{m_i}^{l+1} = Fo_m(T_m) \cdot Bi_{cm}(T, t) \cdot Tc_i^l + 2 \cdot Fo \cdot T_{m_{i-1}}^l + (1 - 2 \cdot Fo + Fo_m(T_m) \cdot Bi_{cm}(T, t)) \cdot T_{m_i}^l, \quad (4.42)$$

e a equação para a malha na **interface molde/ambiente** do lado do **molde** (equação 4.35):

$$T_{m_i}^{l+1} = \left( -2 \cdot Fo_m \cdot Bi_{me}(T, t) - 2 \cdot Fo_m \right) T_{m_i}^l - 2 \cdot Fo_m \cdot Bi_{me}(T, t) \cdot \left( T_{ambiente}^l \right) + 2 \cdot Fo_m \cdot \left( T_{m_{i+1}}^l \right) \quad (4.43)$$

As equações algébricas 4.41, 4.42 e 4.43 podem ser colocadas na forma de matriz:

$$\begin{bmatrix} T_{m_0}^{l+1} \\ T_{m_1}^{l+1} \\ T_{m_i}^{l+1} \\ \vdots \\ T_{m_i}^{l+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_1 & 2 \cdot Fo_m & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 2 \cdot Fo_m & [1 - 2 \cdot Fo_m] & 2 \cdot Fo_m & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 2 \cdot Fo_m & [1 - 2 \cdot Fo_m] & 2 \cdot Fo_m & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 2 \cdot Fo_m & R_2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} T_{m_0}^l \\ T_{m_1}^l \\ T_{m_i}^l \\ \vdots \\ T_{m_i}^l \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -2 \cdot Fo_m \cdot Bi_{me}(T,t) \cdot T_{ambiente} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ Fo_m(T) \cdot Bi_{cm}(T,t) \cdot Tc_i^l \end{bmatrix}, \quad (4.44)$$

onde:

$$R_1 = 1 - 2 \cdot Fo_m \cdot Bi_{me}(T,t) - 2 \cdot Fo_m \quad \text{e} \quad (4.45)$$

$$R_2 = 1 + 2 \cdot Fo_m \cdot Bi_{cm}(T,t) - 2 \cdot Fo_m \quad (4.46)$$

A análise pelo método da matriz do sistema fornecido acima leva a definição do limite de estabilidade<sup>2,4,5,6,7</sup>:

$$0 < Fo_m < 0,5 \quad (4.47)$$

O critério de estabilidade dado pela equação 4.47 pode também ser deduzido a partir de considerações físicas, pois, observado-se que o termo  $(1 - 2 \cdot Fo)$  deve ser sempre negativo, do contrário a consideração da conservação da energia (segunda lei da termodinâmica) seria violada<sup>8,9</sup> de modo que, para o caso unidirecional com coordenadas retangulares, temos<sup>1</sup>:

$$Fo_m < 0,5 \quad , \quad (4.48)$$

<sup>1</sup> Para o caso de fluxo radial e coordenadas cilíndricas tem-se<sup>9</sup>:  $Fo_m < 0,25$ .

assim como para os nós da interface<sup>9</sup>:

$$Fo_m \leq \frac{1}{2 \cdot (1 + Bi_{me})} \quad (4.49)$$

A análise realizada anteriormente para o molde pode ser aplicada para o metal obtendo-se resultados semelhantes.

Croft e Lilley apresentam a mesma análise descrita acima para o caso de aplicação do método implícito puro para o molde e para o metal, verificando que este é incondicionalmente estável<sup>9</sup>.

Apesar do método implícito puro apresentar algumas vantagens sobre o método explícito, principalmente no que diz respeito a estabilidade, neste trabalho optou-se pela utilização do método explícito devido a possibilidade de implementação computacional mais rápida deste método (os algoritmos que utilizam o método implícito são mais complexos e exigem maior memória RAM do computador). O problema da estabilidade foi contornado através da utilização de relações entre o passo no tempo e o tamanho da malha discretizada que atendessem as condições dadas pelas equações 4.48 e 4.49 aplicadas ao metal e ao molde.

#### 4.4 - Cálculo do Espaçamento Interdendrítico Secundário

No estudo da formação de microestruturas do aço rápido M2 só é possível, devido às características de solidificação deste material, a observação experimental do espaçamento interdendrítico secundário.

As teorias para o cálculo dos espaçamentos interdendríticos consideram que este é determinado em função do gradiente de temperatura na interface sólido/líquido ( $G$ ), da velocidade de avanço desta interface ( $V$ ) e da composição da liga<sup>10</sup>. Por sua vez temos que o tempo local de solidificação ( $t_{ls}$ ), ou seja, o tempo decorrido entre o início e o fim da solidificação para uma dada posição, é dado por:

$$t_{ls} = \frac{\Delta T}{R} \quad , \quad (4.50)$$

onde  $R$  é a velocidade de resfriamento na interface sólido/líquido dada por:

$$R = G \cdot V \quad (4.51)$$

Considerando que o engrossamento dos braços secundários das dendritas ocorre pelo mecanismo de refusão dos braços secundários mais finos e o aumento do diâmetro dos braços mais espessos, tendo como força motriz a diferença de potencial químico entre dois cristais com diferentes energias interfaciais (diferentes curvaturas)<sup>11,12,13</sup>. Este fenômeno de engrossamento foi modelado por Kattamis e Flemings<sup>14</sup> e Feurer<sup>13</sup> que assumiram uma geometria cilíndrica para os braços secundários da dendrita e, após uma série de investigações experimentais realizadas para várias ligas<sup>13</sup>, estabeleceram que, fixada a composição química, o espaçamento interdendrítico secundário é dado, para os casos de solidificação direcional e crescimento colunar<sup>11</sup>, pela seguinte equação<sup>12</sup>:

$$\lambda_2 = K_1 \cdot R^{-\alpha} = K_2 \cdot t_{ls}^n \quad , \quad (4.52)$$

onde  $\alpha$  e  $n$  são constantes e  $K_1$  e  $K_2$  dependem da composição da liga.

Nota-se ainda que na determinação de  $\lambda_2$  é necessário uma média das medidas ao longo da dendrita, pois o espaçamento aumenta da raiz até o topo das dendritas.

Por sua vez Feurer apresentou ainda:

$$\lambda_2 = B_0 \cdot (M \cdot t_{ls})^n \quad , \quad (4.53)$$

onde  $M$  é uma constante que depende da composição da liga:

$$M = \frac{\Gamma \cdot D \cdot \ln \left[ \frac{C_l^m}{C_o} \right]}{m \cdot (1 - k) \cdot (C_o - C_l^m)} \quad , \quad (4.54)$$

sendo  $C_l^m$  geralmente igual a  $C_e$ . Os valores de  $n$  e de  $B_0$  são normalmente determinados experimentalmente e para o caso de ligas com mais de dois constituintes, o valor de  $M$  também deve ser determinado experimentalmente.

No caso do aço M2 não é possível a aplicação da equação 4.54. Entretanto, Gunji et al<sup>15</sup> determinaram, a partir de dados experimentais, a seguinte equação para  $\lambda_2$ :

$$\lambda_2 = 100 \cdot (R^{-0.28}) \quad , \quad (4.55)$$

onde  $\lambda_2$  é dado em  $\mu\text{m}$  e a velocidade de resfriamento  $R$  é dada em  $^\circ\text{C}/\text{min}$ .

Por sua vez Fischmeister et al<sup>16</sup> apresentaram uma equação geral para os aços ferramenta:

$$\lambda_2 = A \cdot R^{-b} \quad (4.56)$$

onde:  $30,6 < A < 47,4$  ( $\mu\text{ms}/\text{K}$ )  
 $0,34 < b < 0,38$

sendo que  $A$  depende do intervalo de solidificação, do volume de carbonetos e da temperatura de formação destes<sup>17</sup>.

Se resolvermos a equação 4.56 com valores de  $A$  próximos do limite inferior e valores de  $b$  próximos do limite superior, obteremos resultados de  $\lambda_2$  semelhantes nas equações 4.55 e 4.56.

#### **4.5 - Determinação do Coeficiente de Transferência de Calor na Interface Metal/Molde ( $h$ ) Através do Método da Comparação de Perfis Térmicos Numéricos e Experimentais**

Na utilização da metodologia baseada na comparação dos perfis térmicos numéricos e experimentais para o cálculo de  $h$ , as temperaturas adquiridas para as posições monitoradas são tratadas na forma de arquivo de dados ou através da aproximação por polinômios de maior grau para determinadas faixas, correspondentes às regiões da curva

experimental que apresentam declividade semelhante<sup>18</sup>. A seguir este arquivo de dados, ou os polinômios obtidos, são utilizados para a obtenção do perfil de temperatura na interface metal/molde no lado do metal, através de um método de extrapolação linear.

Utilizando-se um programa de diferenças finitas explícito e considerando o fluxo de calor unidirecional, são obtidas as curvas de resfriamento, correspondentes às posições monitoradas e à interface metal/molde, para uma dada aproximação inicial do valor de  $h$ . A diferença entre as temperaturas calculadas e medidas (extrapoladas) na interface metal/molde é computada e, se maior ou menor que um valor previamente estipulado, o valor de  $h$  é alterado para a obtenção de uma nova temperatura pelo método numérico, até que se encontre um valor que atenda a tolerância estipulada e assim se repita o mesmo processo para um novo incremento do tempo. Com isso consegue-se determinar um perfil de variação de  $h$  durante o de solidificação.

#### 4.6 - Verificação do Modelo Proposto para o Cálculo de Perfis Térmicos

É prudente que antes da utilização do modelo matemático desenvolvido para a simulação numérica da solidificação de ligas metálicas, que o mesmo seja testado através da comparação com resultados disponíveis na literatura. Com esse objetivo, foi realizada a simulação da solidificação da liga Al-4.5Cu num sistema com as seguintes características:

- molde refrigerado, considerado como um absorvedor perfeito de calor;
- resfriamento unidirecional;
- 3 °C de sobreaquecimento;
- a coquilha refrigerada está posicionada sob a peça em processo de solidificação, de modo que não favorecendo a formação de *gap* de ar, permitindo assim a consideração de um coeficiente  $h$  constante sem incorrer em grandes erros;

Para a simulação pelo método numérico foram utilizados os seguintes parâmetros:

- os dados de propriedades termofísicas da liga Al-4.5Cu variando com a temperatura;
- o cálculo da evolução de fração sólida através da equação de Brody-Flemings<sup>19</sup>;

- o valor do coeficiente  $h$  apresentado por Garcia e Clyne<sup>20</sup>, determinado por estes autores pelo método da consideração de uma espessura virtual na interface metal/molde<sup>21</sup>, é constante e igual a 4400 W/m<sup>2</sup>K;

Na Figura 4.2 são mostrados os resultados da simulação realizada com o modelo desenvolvido neste trabalho juntamente com os resultados experimentais e simulados numericamente (por diferenças finitas) apresentados por Garcia e Clyne<sup>20,22,23</sup>. Observa-se uma grande concordância entre as curvas, indicando que o modelo proposto é suficientemente preciso para o cálculo de perfis térmicos.

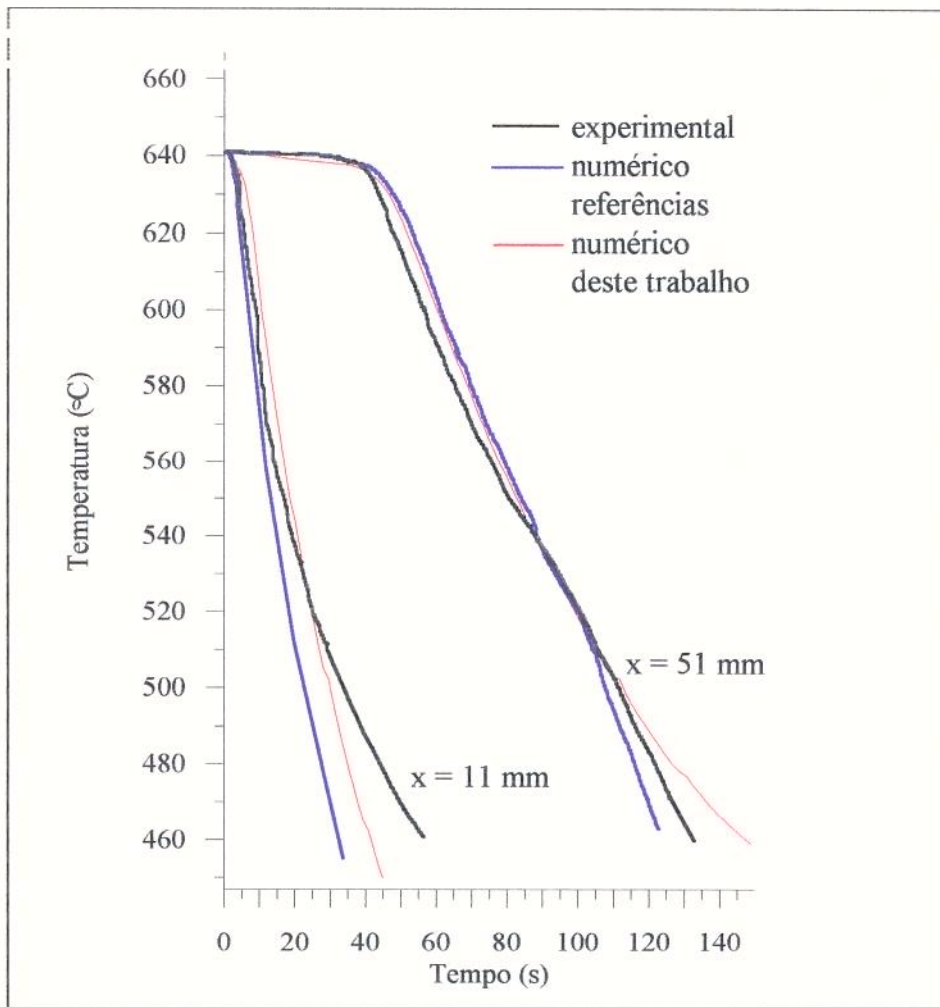


Figura 4.2 - Comparação entre as curvas de resfriamento para a solidificação da liga Al-4,5Cu em molde refrigerado.



#### 4.7 - Referências Bibliográficas do Capítulo 4

- 1-SALCUDEAN, M.; ABDULLAH, Z. On the Numerical Modelling of Heat Transfer During Solidification Processes. International Journal for Numerical Methods in Engineering. v.25, 1988, p.445-73.
- 2-SMITH, G.D. Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods. 3 ed., New York, Oxford University Press, 1985.
- 3-SHAMSUNDAR, N.; ROOZ, E. Numerical Methods for Moving Boundary Problems. Handbook of Numerical Heat Transfer, New York, John Wiley & Sons, Inc., 1988, p.747-87.
- 4-ÖZISIK, M.N. Boundary Value Problems of Heat Conduction. New York, Dover Publications, 1968.
- 5-JALURIA, Y.;TORRANCE,K.E. Computational Heat Transfer, Washington, Hemisphere, 1986.
- 6-CUNHA, C. Métodos Numéricos para as Engenharias e Ciências Aplicados. CAMPINAS, Ed. da UNICAMP, 1993.
- 7-SHIH,T.M. Numerical Heat Transfer. Washington, Hemisphere, 1984.
- 8-RIEDER,W.G.; BUSBY,H.R. Introductory Engineering Modeling Emphasizing Differential Models and Computer Simutations. Flórida, Robert E. Krieger, 1990.
- 9-CROFT, D.R.;LILLEY, D.G. Heat Transfer Calculations Using Finite Difference Equation. Londres, Applied Science Publishers LTD, 1977.
- 10-TRIVEDI, R. Interdendritic Spacing: Part II. A Comparison of Theory and Experiment. Metallurgical Transactions A, v.15, jun. 1984, p.977-82.
- 11-KURZ, W.;FISHER, D.J. Fundamentals of Solidification. 3.ed. Switzerland, Trans Tech Publications, 1992.

- 12-GLICKSMAN, M.E.; VOORHEES, P.W. Ostwald Ripening and Relaxation in Dendritic Structures. Metallurgical Transactions A, v.15,1984, p.995-1001.
- 13-FEURER,U. Influence of Alloy Composition and Solidification Conditions on Dendrite Arm Spacing, Feeding and Hot Tearing Properties of Aluminium Alloys. In: THE SYMPOSIUM ON QUALITY CONTROL OF ENGINEERING ALLOYS, Delft, 1977. **Proceedings**. p.131-45.
- 14-FLEMINGS, M.C. Solidification Processing.1 ed. New York, Ed. McGraw-Hill,1974.
- 15-FISCHMEISTER, H.F.; RIELL, R.; KARAGÖZ, S. Solidification of High-Speed Tool Steels. Met. Trans. A,v.20,out. 1989,p. 2133-48.
- 16-GEYING, A.; LIXIN,L. Dendrite Spacing in Unidirectionally Solidified Al-Cu Alloy. Journal of Crystal Growth, v.80, 1987, p.383-92.
- 17-GUNJI, K.; KUSAKA, K.; ISHIKAWA, E.; SUDO,K. Solidification Structure of High Speed Tool Steel. Transactions ISIJ, v.14, 1974, p.257-66.
- 18-RIZZO,E.M.S.; MELO,M.L.N.M.; SANTOS,R.G. Análise Numérico/Experimental de um Processo de Fundição de Precisão. In: ANAIS DO I WORKSHOP BRASILEIRO DE FUNDIÇÃO DE PRECISÃO, Porto Alegre, 1993. **Anais**. p.188-195.
- 19-REDDY,G.S.; MASCARENHAS, W.J.; REDDY,J.N. Numerical Simulation of Solidification of Molten Aluminum Alloys in Cylindrical Molds. Metallurgical Transactions, v.24B, ago.1993, p.677-84.
- 20-GARCIA, A.; CLYNE, T.W. A versatile technique for characterization of metal/mould heat transfer and correlation with thermal and structural effects. In: SOLIDIFICATION TECHNOLOGY in the foundry and cast house, Coventry, set. 1980. **Proceedings**. The Metals Society, 1980. p.33-9.
- 21-GARCIA, A. Desenvolvimento e Verificação Experimental de um Modelo Matemático para a análise da Solidificação Unidirecional de Metais. Tese (Doutorado) - Faculdade de Engenharia Mecânica - UNICAMP, 1978.

- 22-CLYNE, T.W. Numerical modelling of directional solidification of metallic alloys. Metal Science, v. 16, set. 1982, p.441-50.
- 23-CLYNE, T.W. The Use of Heat Flow Modeling to Explore Solidification Phenomena. Metallurgical Transactions, v. 13B, set. 1982, p.471-78.

## 5 - PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

### 5.1 - Materiais e Métodos

Foram realizados 4 grupos de experimentos conforme a seqüência apresentada abaixo:

- 1º grupo - calibração da instrumentação;
- 2º grupo - validação do modelo proposto;
- 3º grupo - verificação da direção preferencial de troca de calor;
- 4º grupo - aplicação do modelo ao aço rápido M2.

Para o **primeiro grupo** de experimentos foram utilizadas cápsulas para análise térmica de ferros fundidos, constituída de um molde fabricado pelo processo *shell molding* e um termopar tipo S (Pt - Pt 10% Rd) com fios de 0,063 mm de diâmetro protegido por um tubo de quartzo de 3 mm de diâmetro externo e 1 mm de diâmetro interno. Foram incorporados a este molde um tubo de quartzo de 3,5 mm de diâmetro externo e 2 mm de diâmetro interno revestindo um termopar tipo S com fios de 0,35 mm de diâmetro e um termopar tipo S também com fios de 0,35 mm de diâmetro dentro de uma miçanga de alumina com a junta de medição do termopar em contato direto com o metal. Este arranjo experimental pode ser observado na Figura 5.1 .

Neste 1º grupo de experimentos foi utilizado o ferro fundido cinzento de composição eutética (carbono equivalente = 4,3%) elaborado em forno à indução com 25 kg de capacidade e 50 kVA de potência nominais A frequência de operação deste forno é de 3000 Hz . O controle de temperatura do metal líquido foi realizado por meio de um pirômetro de imersão com termopar tipo S. Os termopares foram conectados a uma placa de aquisição de dados montada em um microcomputador PC AT 286 através de cabos de compensação, sendo dois cabos (conectados aos termopares protegidos por quartzo) com isolamento interna de borracha e a externa com malha trançada de aço galvanizado e um cabo de compensação (conectado ao termopar inserido na miçanga) com isolamento interna e externa por borracha.

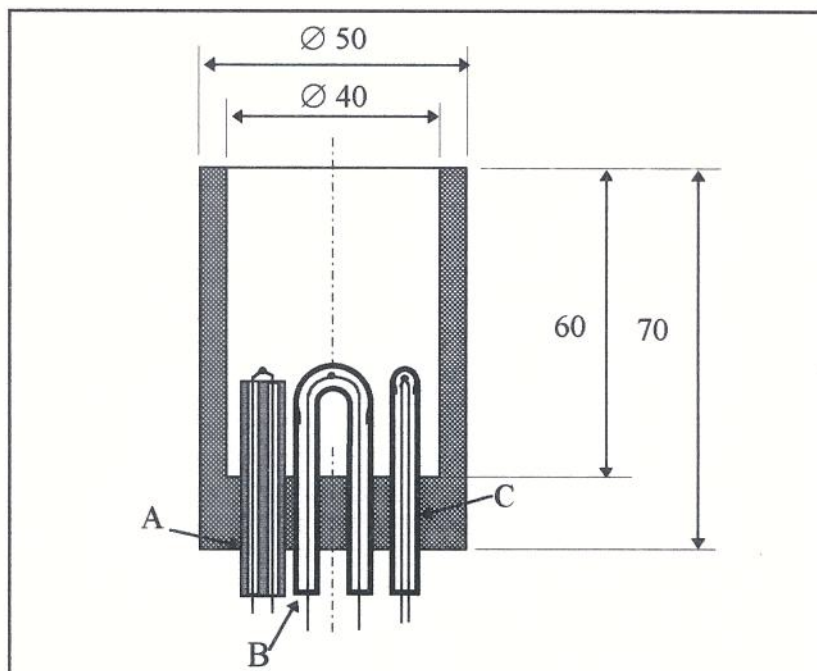


Figura 5.1 - Desenho esquemático da montagem dos termopares no molde utilizado

O sistema de aquisição de dados utilizado neste primeiro grupo de experimentos, foi composto por uma placa de placa adaptadora para PC (código ADR PC/XT/AT da MOLDAÇO) conectada, através de um cabo paralelo, a uma placa de conversão analógico digital de 12 bits de resolução e 8 canais multiplexados, com um amplificador de sinal ajustável e tempo de conversão de 10 micro segundos (código AD-03 da MOLDAÇO). A placa seleciona um entre oito canais por software. O fundo de escala foi ajustado para 16 mV através de controle dos amplificadores na placa AD-03. Em virtude do ambiente onde foram realizadas as experiências gerar uma grande quantidade de ruídos (fornos a indução, rede elétrica, muflas, etc) que afetavam muito a precisão do valor de temperaturas medidos, foi necessário a instalação de filtros passa baixa na placa de aquisição. Estes filtros são constituídos de um banco de capacitores instalados na placa AD-03.

Para o controle deste sistema de aquisição de dados foi desenvolvido um programa computacional na linguagem Turbo Pascal versão 7.0. Este programa tinha como principais funções:

- a seleção do canal com o sinal a ser adquirido;

- a seleção da frequência de aquisição de dados;
- a aquisição do sinal;
- a conversão do sinal de tensão em mV para a temperatura correspondente em °C, utilizando-se das equações que correlacionam estas variáveis conforme o tipo de termopar empregado;
- devido a alta velocidade de conversão da placa AD-03 foi necessário a introdução de um filtro por *software* consistindo de uma média entre uma série de temperaturas medidas para um determinado canal antes da passagem para o próximo canal;
- o armazenamento em discos magnéticos dos dados de sinais de tensão adquiridos e das correspondentes temperaturas em função do tempo<sup>1</sup>;
- o registro gráfico das curvas de resfriamento para as diversas posições monitoradas, incluindo-se funções como: sobreposição de curvas, *zoom*, derivação de curvas, filtragem dos dados e medição de parâmetros da curva.

Ao se conectar o sistema de aquisição de dados a um osciloscópio, identificou-se picos no sinal de tensão quando ocorre a mudança do canal a ser coletado (operação do multiplexador). Devido a este comportamento foi incorporado ao programa de controle do sistema de aquisição de dados uma função que realiza um atraso na coleta de dados enquanto persistir o pico de tensão

As experiências realizadas neste primeiro grupo de experimentos consistiam das seguintes etapas:

- a) montagem dos 3 termopares no molde em forma de cápsula e a conexão dos mesmos, utilizando-se os cabos de compensação, ao sistema de aquisição de dados;
- b) refusão da liga (ferro fundido de composição eutética) no forno de indução;
- c) início do processo de aquisição de dados alguns segundos antes do vazamento da liga;

d) a aquisição continua por alguns segundos após a solidificação do ferro fundido, quando então este processo é encerrado e os dados são tratados.

Para o **segundo grupo** de experimentos foram confeccionados dois tipos de moldes a saber:

- **molde de areia**: produzido pelo processo de moldagem manual de uma mistura consistindo de areia de sílica com 60 a 65 AFS, 7% em peso de bentonita e 4% em peso de água;

- **molde metálico**: fabricado em cobre eletrolítico tenaz (liga UNS c 11000) através da usinagem a partir de uma barra extrudada.

A composição da areia listada acima foi selecionada em função de suas propriedades termofísicas serem tabeladas pela literatura<sup>2</sup>.

Na Figura 5.2 é apresentado um desenho esquemático do formato dos moldes e respectivas dimensões. Nesta Figura também são mostrados as localizações dos pontos de monitoramento de temperatura pelos termopares tanto no metal como no molde. No molde temos o ponto P1 corresponde a interface molde/ambiente, o ponto P2 posicionado na metade da espessura do molde e o ponto P3 a 2 mm da interface metal/molde. No metal temos o ponto P4 a 2 mm da interface metal/molde, o ponto P5 distanciado de  $\frac{1}{4}$  do diâmetro do corpo de prova em relação à esta mesma interface e finalmente o ponto P6 no centro do corpo de prova. Na Figura 5.3 tem-se os moldes utilizados e nas Figuras 5.4 e 5.5 pode-se observar a montagem dos termopares para o moldes de areia e cobre respectivamente

A liga de Cu e Zn utilizada neste grupo de experimentos foi elaborada no mesmo forno de indução utilizado no primeiro grupo porém, foi inserido no mesmo um cadinho de grafite com capacidade nominal para 6 kg de aço carbono. As ligas foram então elaboradas neste cadinho, carga de aproximadamente 2 kg, e vertidas diretamente para os moldes. A carga do forno era constituída de varetas de Cu com pureza comercial (Cu eletrolítico) e de plaquetas de Zn também com pureza comercial (Zn metálico). O monitoramento de temperatura foi realizado de um pirômetro de imersão com termopar tipo K (Chromel-Alumel).

Como sensor de temperatura para este grupo de experimentos foram utilizados termopares tipo K de isolamento mineral na forma de capilares de 1,5 mm, ou seja, os fios de Chromel e Alumel de 0,28 mm de diâmetro são inseridos dentro de um tubo capilar de Inconel com 1,5 mm de diâmetro externo, estando os fios envolvidos e separados por uma camada de pó isolante compactado de óxido de magnésia<sup>3</sup>. Estes termopares apresentam as vantagens de versatilidade, sua boa resistência mecânica e as dimensões reduzidas possibilitam a fácil adaptação e instalação destes termopares nos moldes, e de baixo tempo de resposta (0,24 segundos de acordo com o catálogo do fornecedor<sup>3</sup>) além de um custo relativamente baixo.

Os termopares do tipo K utilizados eram conectados ao sistema de aquisição de dados através dos correspondentes cabos de compensação com isolamento silicone/amianto e blindagem com trança de aço galvanizado na bitola de 16 AWG. A blindagem era necessária para que fosse possível o aterramento dos cabos de modo a se diminuir os ruídos durante a etapa de aquisição dos dados. Cada cabo possuía aproximadamente 7 m de comprimento. Os conectores utilizados também eram do tipo compensado.

Neste grupo de experimentos foi utilizado um novo sistema de aquisição de dados constituído de:

- um conjunto de placas de condicionamento de sinais;
- uma placa conversora de sinais analógicos para digitais (AD);
- um cabo coaxial;
- um programa de aquisição e tratamento de dados;
- um microcomputador PC AT 386 DX 40.

A função das placas de condicionamento de sinais é a de coletar o sinal de tensão gerado pelos termopares (força eletromotriz gerada) e amplificar este sinal para a placa conversora AD eliminando ainda um certo nível de ruído. Foram utilizadas duas destas placas, sendo uma placa calibrada para termopares do tipo K (fundo de escala de 63 mV) e



outra para termopares do tipo S (fundo de escala de 17 mV). Na placa para termopares tipo K são disponíveis 8 canais, sendo o primeiro canal ocupado por um sensor do tipo termistor para a coleta da temperatura ambiente. Já na placa calibrada para termopares tipo S tem-se 8 canais disponíveis. Estas placas são montadas em uma caixa metálica especial que funciona como um gaiola de Faraday<sup>1</sup> dispondo ainda de pontos para aterramento da blindagem dos cabos de compensação dos termopares. Este aterramento evita a contaminação dos sinais de tensão gerados pelos termopares por ruídos, principalmente o ruído de 60 Hz proveniente da rede elétrica.

Os sinais de tensão coletados e amplificados para um fundo de escala de 5 V pelas placas de condicionamento são digitalizados pela placa de conversão AD com uma resolução de 12 bits. Neste segundo conjunto de aquisição de dados utilizado, os canais não são multiplexados, evitando-se assim os picos de tensão quando da mudança do canal de coleta de sinais. Esta placa de conversão AD foi instalada em um *slot* do micro PC AT 386 DX 40 e conectada às placas de condicionamento através de um cabo coaxial. Este conjunto de aquisição de dados é apresentado na Figura 5.6 .

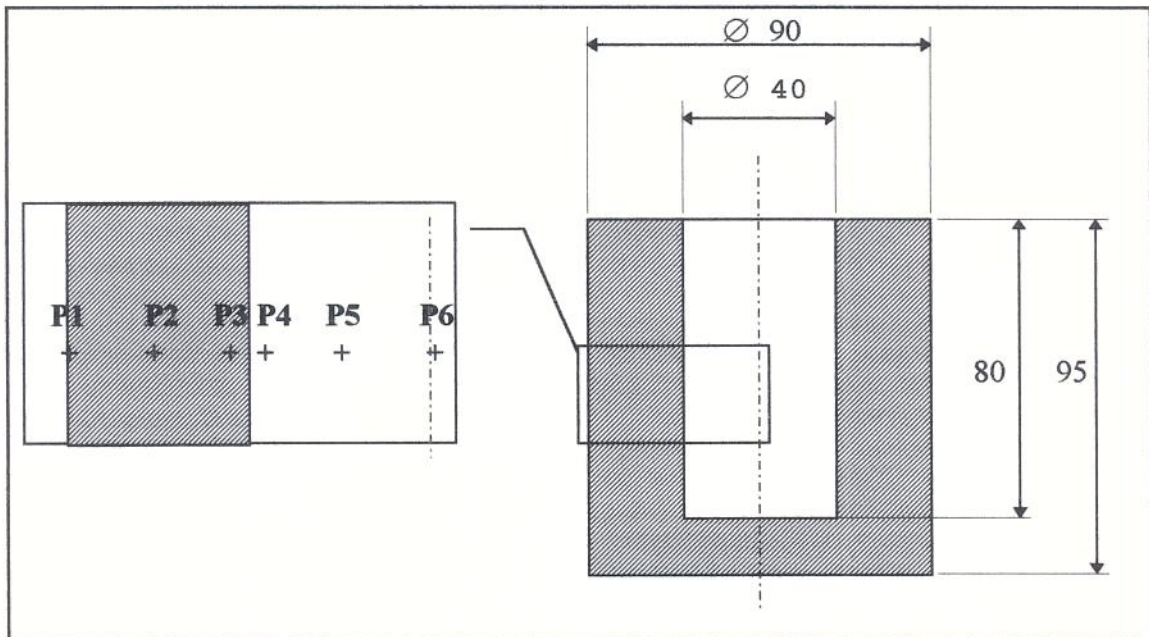


Figura 5.2 - Desenho esquemático dos moldes utilizados no segundo grupo de experimentos

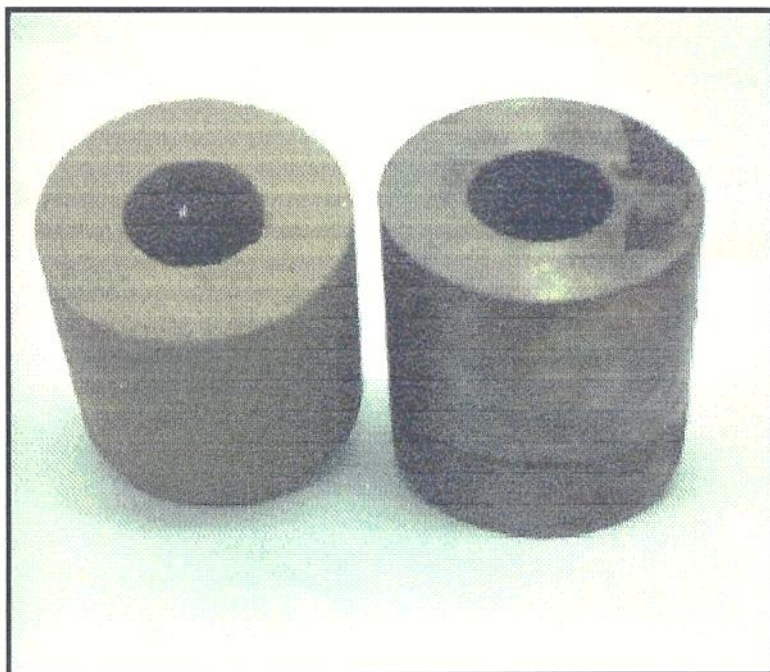


Figura 5.3 - Moldes utilizados no segundo grupo de experimentos.

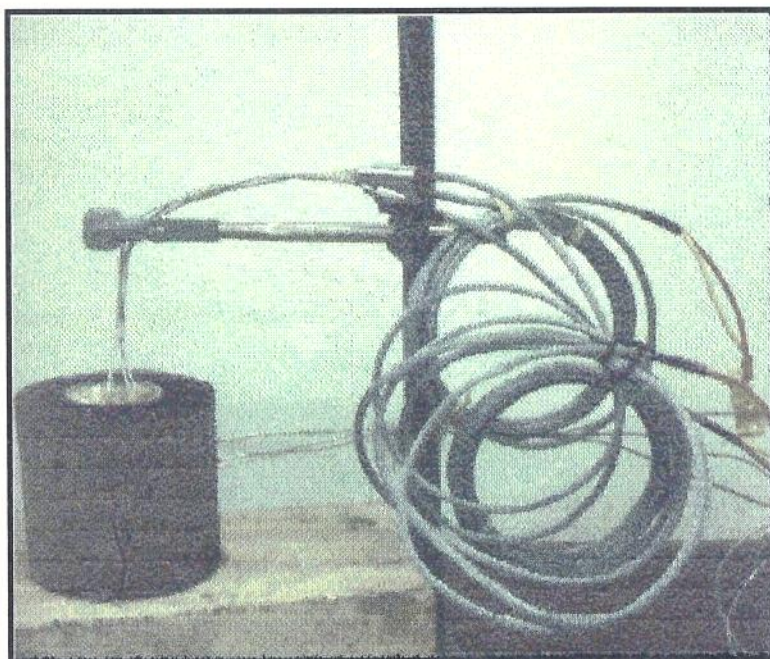


Figura 5.4 - Molde de areia com os termopares após o vazamento.

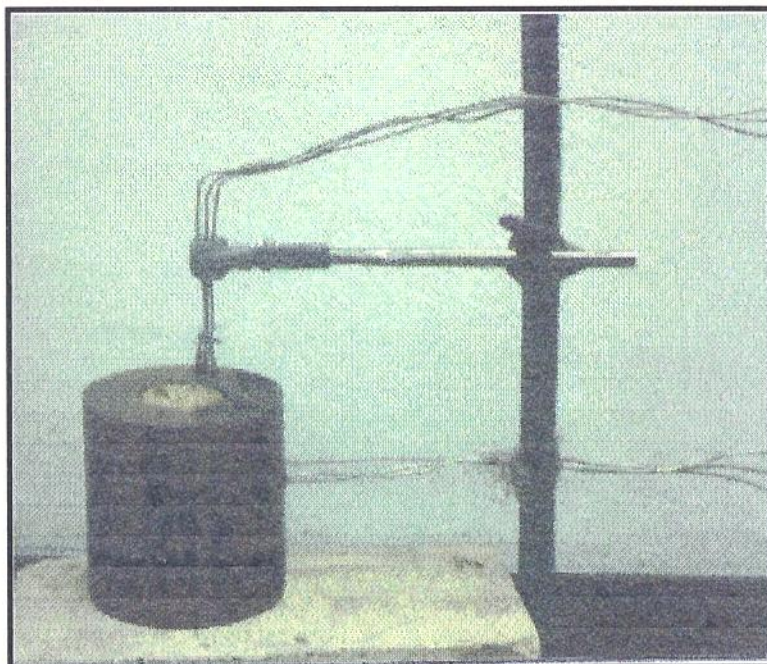


Figura 5.5 - Molde de cobre com os termopares após o vazamento.

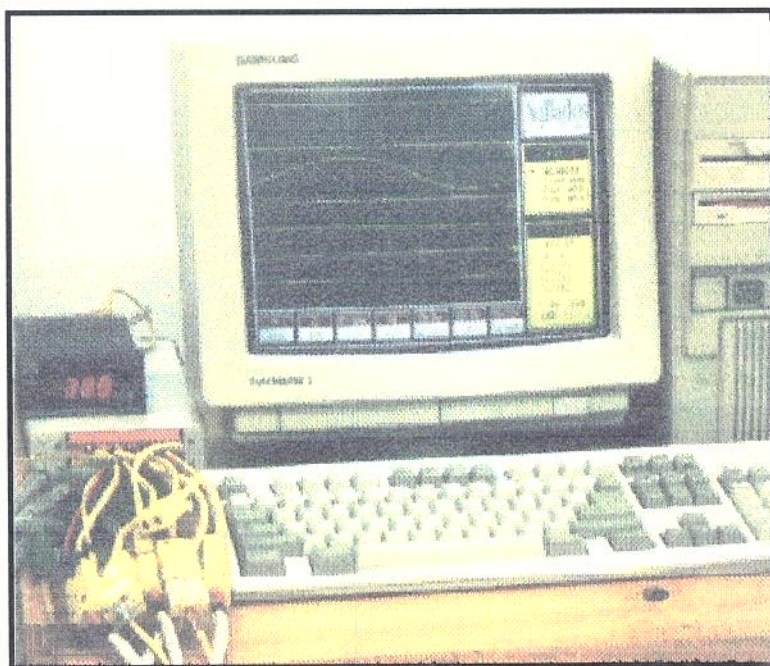


Figura 5.6 - Sistema de aquisição de dados utilizado no segundo grupo de experimentos.

A seqüência de operações utilizada no segundo grupo de experimentos pode ser resumida nas seguintes etapas:

- a) confecção dos moldes e montagem dos termopares no molde e na cavidade correspondente a peça, conforme esquematizado na Figura 5.2 . Foram montados dois moldes por vazamento, sendo um de areia e um metálico, alternando-se o molde a ser monitorado.
- b) elaboração da liga no forno de indução com cadinho de grafite;
- c) início do processo de aquisição de dados alguns segundos antes do vazamento da liga;
- d) vazamento da liga, a partir do próprio cadinho, com um superaquecimento de 120°C medido no cadinho imediatamente antes do vazamento;
- e) aquisição de sinais por 30 minutos com uma freqüência de 4 dados por segundo;
- f) resfriamento ao ar do conjunto corpo de prova/molde e desmoldagem após 2 horas depois de iniciada a aquisição.

Observa-se ainda que não foi utilizado nenhum tipo de recobrimento para os moldes sendo o vazamento realizado com os mesmos à temperatura ambiente.

O **quarto grupo**<sup>1</sup> constou do vazamento do aço rápido M2 em moldes cerâmicos variando-se a condição de resfriamento do metal. A casca cerâmica utilizada foi fabricada segundo o método apresentado no capítulo 1 deste trabalho. A espessura média da casca cerâmica foi de 7 mm com a seguinte constituição das camadas utilizadas:

- a) camada de lama cerâmica primária:
  - refratário: zirconita em pó com granulometria abaixo de 400 mesh;
  - ligante: sílica coloidal;

---

<sup>1</sup> Por uma questão de facilidade de descrição, o quarto grupo de experimentos será apresentado antes do terceiro grupo.

b) camada de revestimento primário:

- refratário: zirconita;

c) camada de lama cerâmica secundária:

- refratário: zirconita em pó com granulometria entre 200 e 400 mesh;
- ligante: sílica coloidal;

d) camada de revestimento secundário:

- refratário: chamote (refratário sílico aluminoso com 60% de  $Al_2O_3$ );
- ligante: sílica coloidal;

A aplicação das camadas (operação conhecida como capeamento) constou de 1 capeamento primário e 4 capeamentos secundários, quando então foi obtida a espessura de 7 mm para a região em análise (superfície inferior da casca cerâmica).

Durante a etapa de fabricação das cascas cerâmicas foram instalados os tubos de quartzo (com 4 mm de diâmetro externo e 2,2 mm de diâmetro interno) nas posições de monitoramento de temperatura no metal. Neste grupo de experimentos foram utilizados termopares do tipo S com fios de 0,5 mm de diâmetro, quando o ponto a ser monitorado correspondia ao metal, e termopares de isolamento mineral do tipo K com 1,5 mm de diâmetro da bainha (iguais aos utilizados no segundo grupo de experimentos), naqueles pontos de monitoramento do molde ou do resfriador utilizado. Os fios de termopares tipo S foram revestido e isolados com miçangas de alumina conforme apresentam as Figuras 5.7 e 5.8 .

Neste grupo de experimentos foram utilizados os mesmos cabos de compensação e conectores para termopares tipo K empregados no segundo grupo de experimentos, acrescidos dos mesmos dispositivos destinados a termopares tipo S. Usou-se também o mesmo sistema de aquisição de dados do segundo grupo de experimentos.

Foram utilizadas três condições de interface metal/molde a saber:

a) metal/molde cerâmico (resfriamento ao ar);

b) metal/resfriador frio de ferro fundido cinzento;

c) metal/coquilha refrigerada de cobre.

Na Figura 5.9 tem-se os moldes cerâmicos empregados e na Figura 5.10 pode-se observar a coquilha refrigerada de cobre e o resfriador de ferro fundido cinzento. Na Figura 5.11 são apresentados esquematicamente as condições de resfriamento empregadas.

O resfriador de ferro fundido, com 50 mm de espessura, foi envolvido por um bloco de isolante cerâmico de modo a garantir que o fluxo de calor ocorre-se preferencialmente na direção perpendicular ao resfriador. A superfície deste resfriador foi polida com lixa de grana 240.

Para o caso da casca cerâmica resfriando ao ar foram empregados 3 termopares tipo S no metal (a 6, 24 e 54 mm a partir da superfície interior da face resfriando ao ar), um termopar tipo K na superfície do molde (interface molde/ambiente), um termopar tipo K no interior da casca cerâmica (localizado na metade da espessura) para a face resfriando ao ar e um termopar na superfície lateral exterior do molde na interface molde/interior do forno na altura do segundo termopar tipo S. Para a condição que emprega o resfriador de ferro fundido cinzento, utilizou-se as mesmas posições para os termopares tipo S e 3 termopares tipo K no resfriador, sendo um na interface resfriador/ambiente, outro na metade do resfriador e o último a 2 mm da interface metal/resfriador. No caso do uso da coquilha refrigerada de cobre, tem-se apenas 2 termopares tipo S no metal posicionado a 16 e 34 mm da interface metal/coquilha.

O aço rápido M2 base foi elaborado em um forno à indução para 25 kg de material com proteção de Argônio. Partiu-se de uma liga mãe elaborada em forno à vácuo com 0,92 % de C que após refusão e análise de C em marcha apresentava 0,77% de C. No intervalo entre a retirada da amostra e resposta da análise de C (8 minutos) o forno foi protegido por uma atmosfera de Argônio. Foi então realizada uma correção com grafite produzindo um teor final de C de 0,89 %. Este material foi lingotado na forma de pequenos cilindros de aproximadamente 1 kg. Foram produzidos aproximadamente 24 kg de liga com a composição apresentada na Tabela 5.1 .

Tabela 5.1 - Composição química do aço rápido M2 base produzido.

C	Cr	W	Mo	V	Mn	Si	P	S	Co	Ni
0,89	4,0	5,9	4,5	1,9	0,30	0,34	-	-	-	-

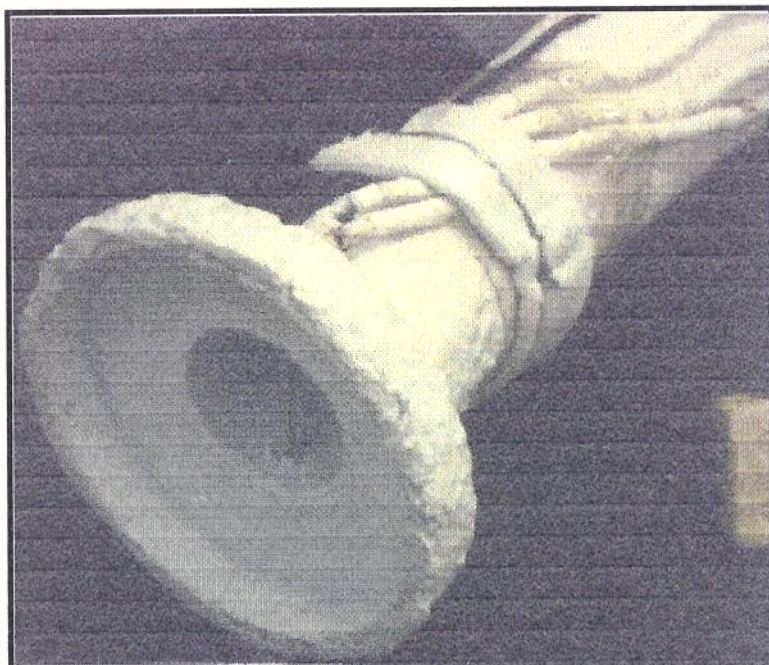


Figura 5.7 - Molde cerâmico utilizado quando do emprego de resfriadores de ferro fundido ou coquilhas refrigerada de cobre. Observa-se as miçangas de alumina utilizadas para isolar os fios dos termopares tipo S e o par de fios dentro do tubo de quartzo.

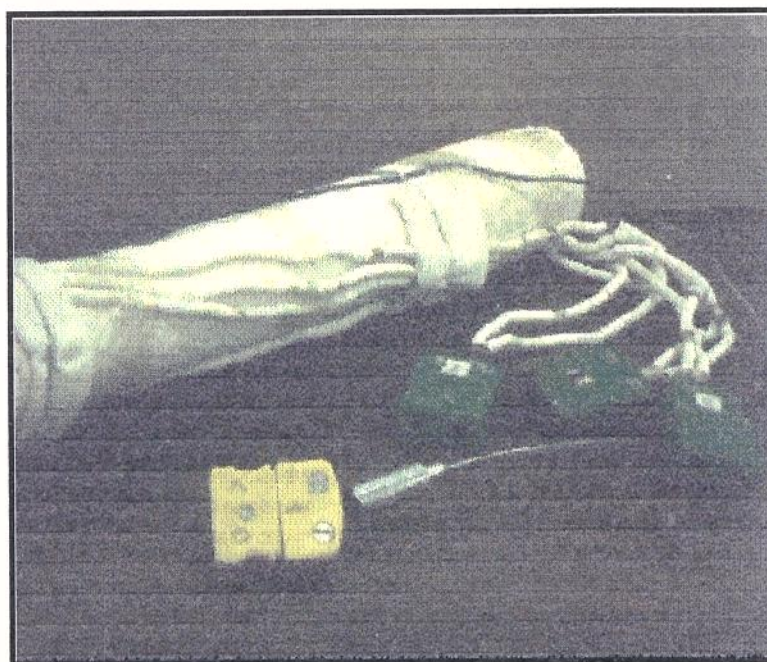


Figura 5.8 - O mesmo molde da figura anterior mostrando um detalhe dos conectores compensados utilizados.

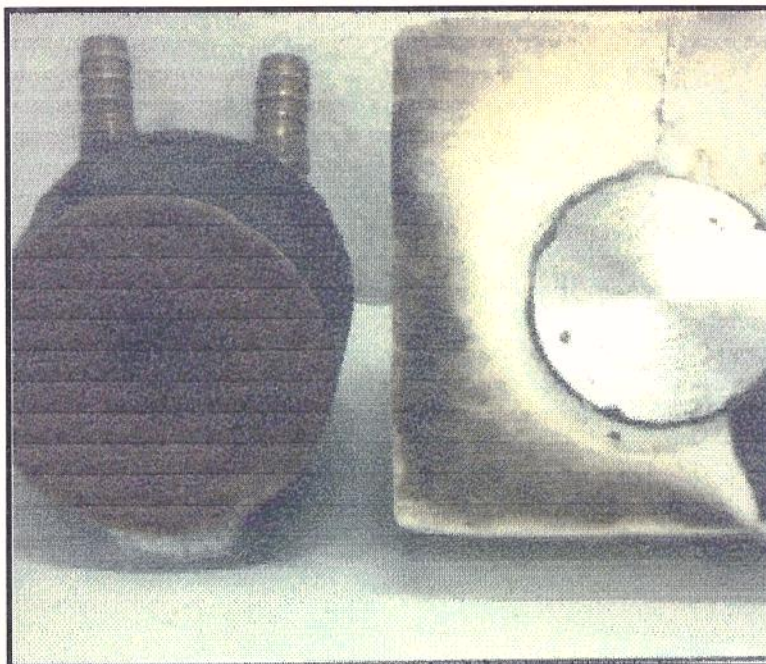


Figura 5.9 - No lado esquerdo tem-se a coquilha refrigerada de cobre e no lado direito o resfriador de ferro fundido com a isolação com placa cerâmica para se ter um fluxo de calor preferencialmente unidirecional.

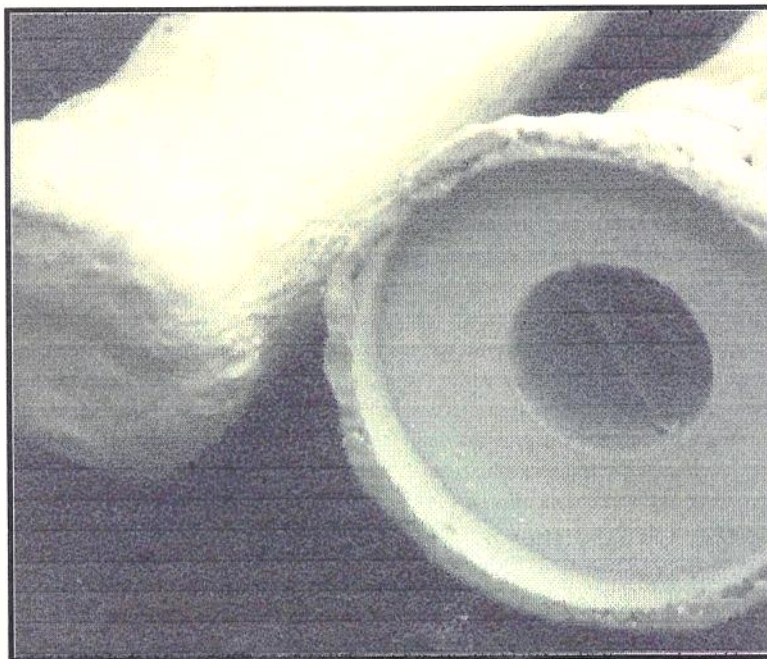


Figura 5.10 - Formas de cascas cerâmicas empregadas. No lado esquerdo a casca para resfriamento ao ar e no lado direito o tipo de casca para o uso de resfriador de ferro fundido e coquilha refrigerada de cobre.



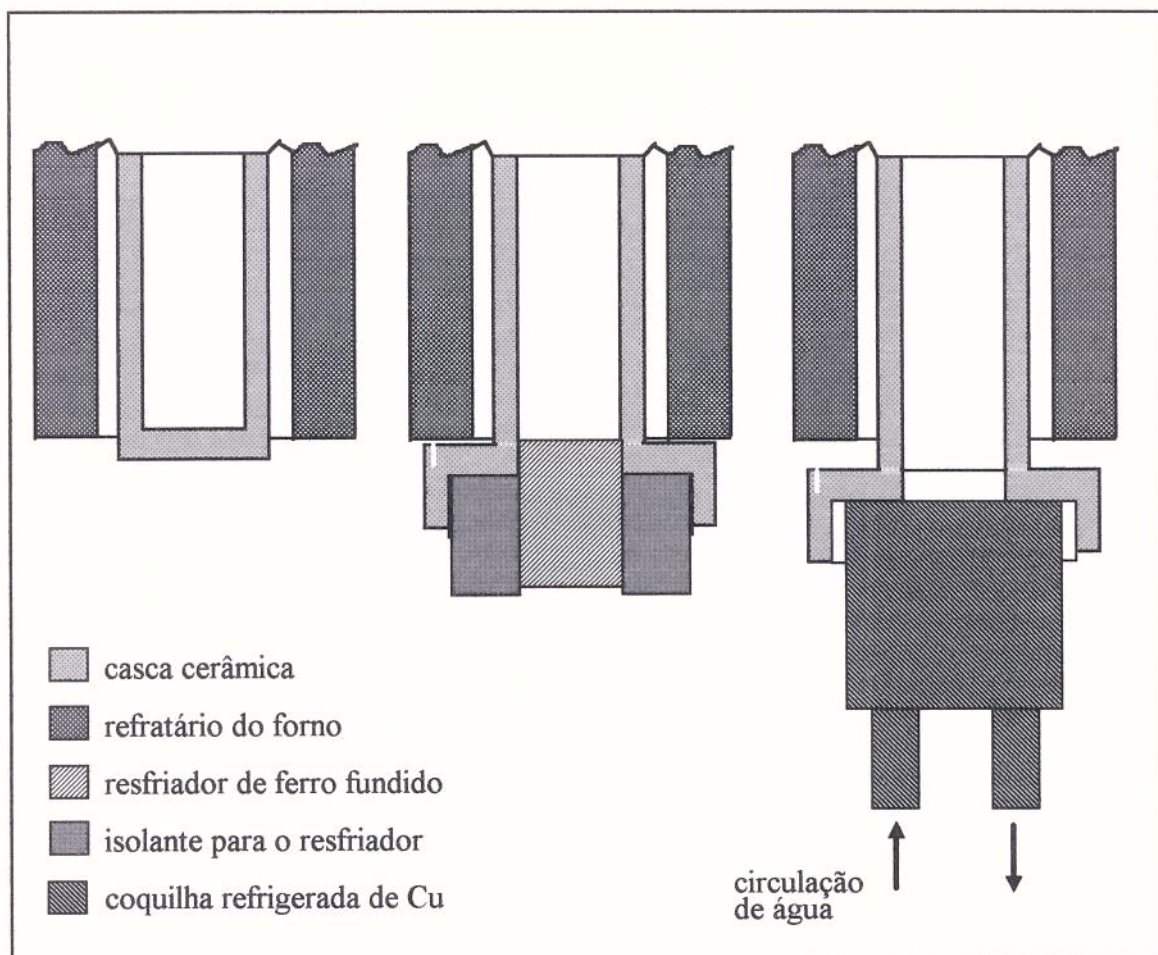


Figura 5.11 - Condições de resfriamento empregadas: a) casca cerâmica resfriando ao ar; b) resfriador de ferro fundido cinzento; c) coquilha refrigerada de cobre.

Os modelos numéricos propostos para o cálculo do coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde ( $h$ ) e para a determinação dos perfis térmicos e parâmetros microestruturais para este grupo de experimentos, consideram o fluxo de calor unidirecional. Para atender tal condição foi projetado e construído um forno à resistência elétrica com temperatura máxima de 1250 °C, alimentado por um controlador programável de temperatura consistindo de um módulo de potência microprocessado. A Figura 5.12 apresenta um desenho do forno construído mostrando ainda uma das cascas cerâmicas utilizadas nos experimentos (no caso a casca utilizada na condição de molde resfriando ao ar) e nas Figuras 5.13 e 5.14 tem-se detalhes do emprego do forno para aquecimento dos moldes.

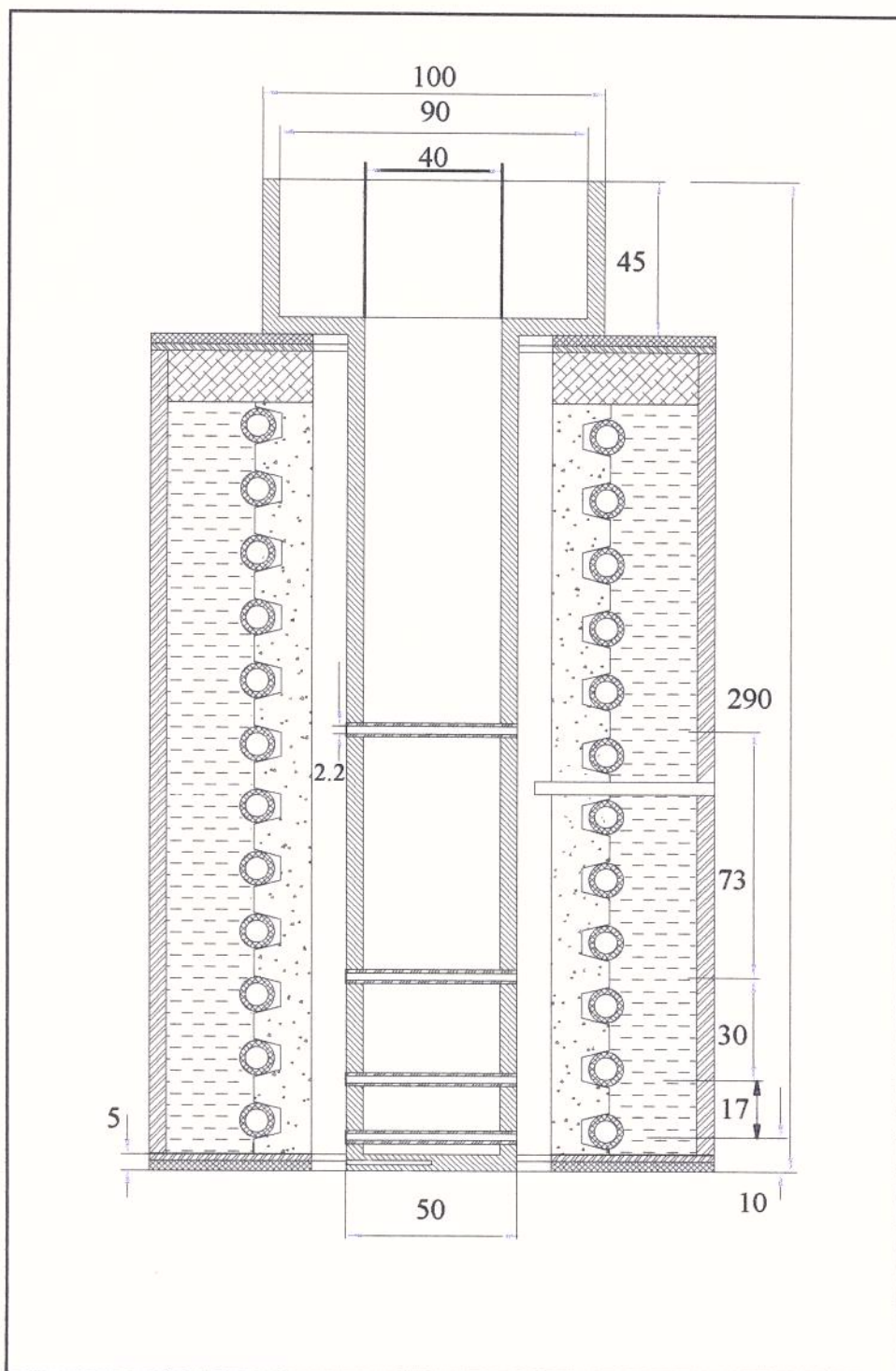


Figura 5.12 - Desenho do forno de aquecimento dos moldes e de uma das cascas cerâmicas empregadas.



Figura 5.13 - Arranjo experimental utilizado. Ao fundo se observa a coquilha refrigerada de cobre.

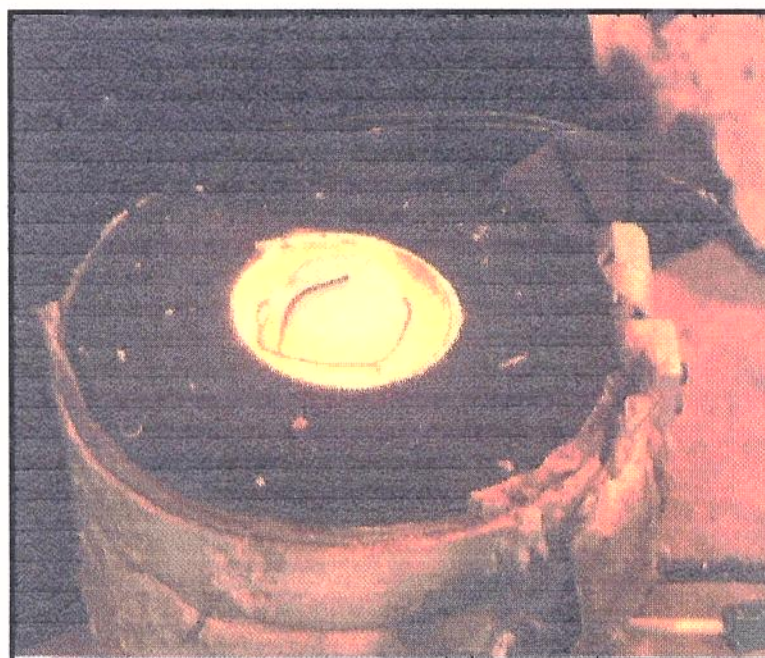


Figura 5.14 - Detalhe do processo de aquecimento das cascas cerâmicas mostrando o termopar posicionado na interface molde/ambiente e as superfícies das paredes laterais interiores do forno.

Para a realização das experiências utilizava-se aproximadamente 2 kg do aço rápido M2 na composição fornecida pela Tabela 5.1 na forma de lingotes cilíndricos. Este material era refundido em um forno à indução com capacidade para 4 kg de metal. O controle de temperatura do metal foi realizado por meio de um pirômetro de imersão digital com termopar do tipo S. As ligas foram vazadas diretamente do forno para o molde com uma temperatura, medida imediatamente antes do vazamento, de 1640 °C .

A realização das experiências relativas a este quarto grupo seguiu, em linhas gerais, as etapas descritas abaixo:

- a) confecção dos moldes (casca cerâmica) inclusive com a instalação dos tubos de quartzo;
- b) montagem dos termopares na casca cerâmica e, se for o caso, no resfriador;
- c) aquecimento do molde no forno até a temperatura de aproximadamente 1000 °C;
- d) refusão do aço rápido M2 e vazamento direto do forno de indução para o molde que permanece dentro do forno de aquecimento das cascas (este forno é desligado imediatamente antes do vazamento);
- e) aquisição de sinais por 30 minutos com uma frequência de 4 dados por segundo, sendo a aquisição iniciada instantes antes do vazamento do metal;
- f) resfriamento ao ar do conjunto forno de aquecimento e molde e desmoldagem após 3 horas ou mais depois de iniciada a aquisição.

No **terceiro grupo** de experimentos foi utilizado o mesmo tipo de arranjo do terceiro grupo para a condição de cascas cerâmicas resfriando ao ar, excetuando que o monitoramento das temperaturas foi efetuado com o emprego de termopares do tipo K para todos os pontos. Para este grupo o metal utilizado foi a liga de latão com 60% de Cu e 40% de Zn elaborada com a mesma metodologia citada para as ligas do segundo grupo de experimentos.

## 5.2 - Ensaaios

São descritos os ensaios aplicados a cada grupo de experimentos, conforme o parâmetro que se deseja caracterizar. Observa-se que para o primeiro grupo de experimentos não era necessário qualquer tipo de ensaio, apenas a análise das curvas de resfriamento.

### 5.2.1 - Análises Químicas:

Para o segundo, terceiro e quarto grupos de experimentos as análises químicas foram realizadas a partir de amostras extraídas dos corpos de prova obtidos. Empregou-se a técnica de espectrometria de emissão ótica para a identificação de Cu e Zn para o segundo e terceiro grupo de experimentos. A mesma técnica foi utilizada na análise das amostras do quarto grupo de experimentos na identificação e quantificação dos elementos Mn, Si, P, Cr, Ni, Mo, V e W, sendo o C analisado por combustão.

### 5.2.2 - Metalografias:

No caso do **segundo grupo** de experimentos o objetivo era a medição dos espaçamentos interdendríticos secundários. Para tanto as amostras eram seccionadas transversalmente na metade da altura e preparadas de acordo com seqüência apresentada abaixo<sup>4</sup>:

- a) preparação das amostras utilizando-se lixas de grana 220, 320, 400, 600 e 1000;
- b) polimento com pasta de diamante de 3  $\mu\text{m}$  de granulometria;
- c) ataque com solução aquosa ácida de  $\text{CrO}_3$  (10 g de  $\text{CrO}_3$ , 100 ml de  $\text{H}_2\text{O}$  e 4 ml de  $\text{HCl}$ ) durante 15 s;
- d) ataque longo (20s) com reagente de Waterbury (20 g de  $\text{CrO}_3$ , 4 g de  $\text{NH}_3\text{Cl}$ , 18 ml de  $\text{HNO}_3$ , 14 ml de  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , completando 500 ml e diluindo 2:1);
- e) repolimento mecânico com pasta de diamante de 3  $\mu\text{m}$  e 1  $\mu\text{m}$  de granulometria;

f) acabamento final com Sílica Coloidal (granulometria  $< 0,25 \mu\text{m}$ ).

As medidas dos espaçamentos interdendrítico secundários foram realizadas em 6 campos com áreas na forma de anéis concêntricos ao longo da seção transversal de posicionamento dos termopares no metal. Na Figura 5.15 tem-se uma representação esquemática destes campos. Cada campo era caracterizado pela distância da circunferência mais interna do anel até a superfície lateral do corpo de prova. Com exceção do campo correspondente à região central, realizaram-se 20 medições de espaçamentos interdendrítico secundário para cada campo em uma mesma amostra, utilizando-se o microscópio ótico com ocular graduada e a metodologia ilustrada na Figura 5.15. Para a região central só era possível a realização de 10 medidas.

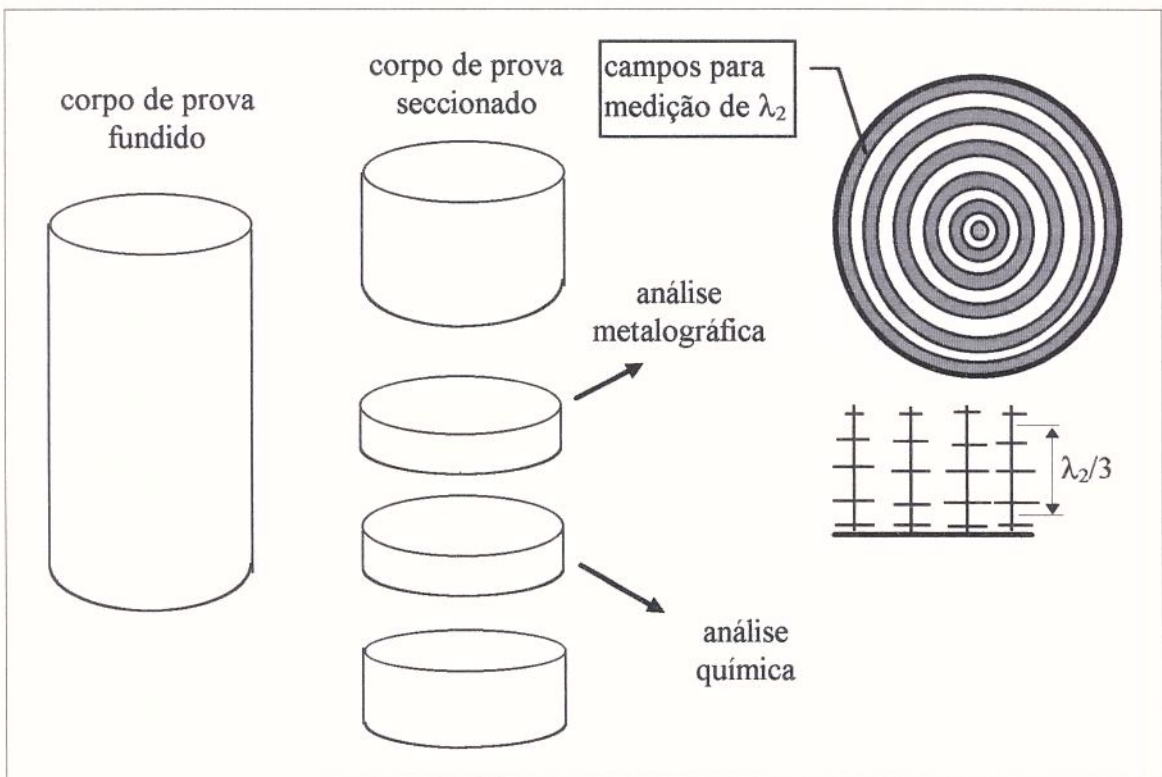


Figura 5.15 - Representação esquemática das regiões do corpo de prova de onde foram retiradas as amostras para análise química e análise metalográfica para o segundo grupo de experimentos, indicando-se também os campos onde foram medidos os espaçamentos interdendríticos secundários.

Para o **terceiro grupo** de experimentos a amostra foi seccionada transversalmente logo acima do terceiro tubo de quartzo e a parte inferior cortada longitudinalmente no

centro numa direção perpendicular aos tubos de quartzo. A seguir a amostra foi preparada para macrografia obedecendo a seqüência de operações apresentada abaixo:

- a) preparação das amostras utilizando-se lixas de grana 220, 320, 400, 600 e 1000;
- b) polimento com pasta de diamante de 3  $\mu\text{m}$  de granulometria;
- c) ataque com solução aquosa ácida de  $\text{CrO}_3$  (10 g de  $\text{CrO}_3$ , 100 ml de  $\text{H}_2\text{O}$  e 4 ml de  $\text{HCl}$ ) durante 15 s;
- d) ataque longo (20s) com reagente de Waterbury (20 g de  $\text{CrO}_3$ , 4 g de  $\text{NH}_3\text{Cl}$ , 18 ml de  $\text{HNO}_3$ , 14 ml de  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , completando 500 ml e diluindo 2:1);
- e) fotografia da macroestrutura utilizando-se uma máquina de 35 mm.

Para o **quarto grupo** de experimentos os corpos de prova foram seccionados transversalmente a aproximadamente 5 mm acima do segundo termopar e a parte inferior do corpo de prova foi cortada longitudinalmente numa direção perpendicular aos 2 tubos de quartzo. Uma das metades foi utilizada para a análise metalográfica e a outra para a análise química. A preparação das amostras para metalografia obedeceu as seguintes etapas:

- a) preparação das amostras utilizando-se lixas de grana 220, 320, 400 e 600;
- b) polimento com pasta de diamante de 6, 3 e 1  $\mu\text{m}$  de granulometria
- c) acabamento final com sílica coloidal;
- d) ataque com Murakam's durante 10 s.
- e) realização da medição dos espaçamentos interdendrítico secundário e respectivas fotografias;
- f) ataque eletrolítico;

g) identificação das morfologias dos carbonetos eutéticos com as correspondentes fotografias.

As operações de medida dos espaçamentos interdendríticos secundários e a identificação da morfologia de carbonetos, foram feitas nos campos indicados na Figura 5.16. Para a demarcação de cada campo foi tomada a distância entre a superfície inferior do corpo de prova e a lateral do campo mais distante desta superfície (distância  $x$  na Figura 5.16).

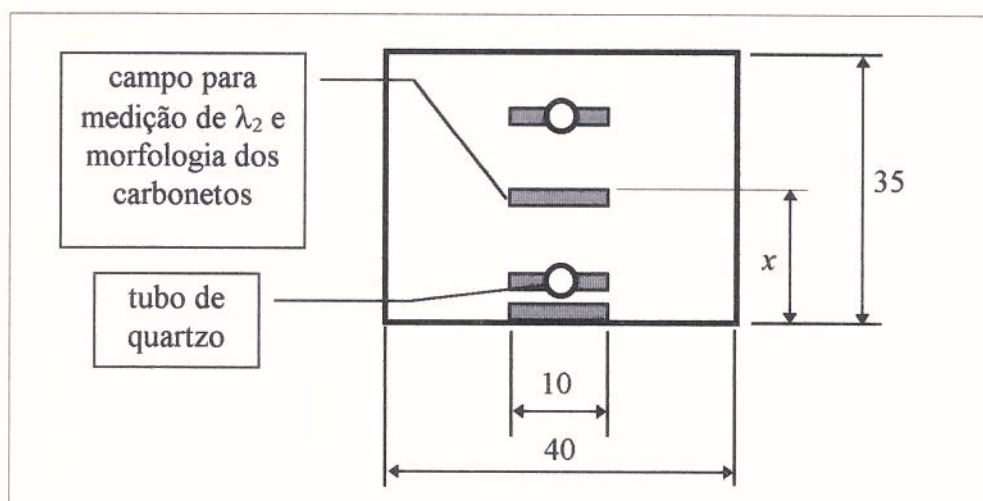


Figura 5.16 - Posições de análise metalográfica para as amostras do segundo grupo de experimentos.

### 5.2.3 - Análise Térmica Diferencial

Foram realizados 2 ensaios de Análise Térmica Diferencial, um para uma amostra de latão correspondente ao segundo grupo de experimentos e outro para uma amostra de aço rápido M2 (quarto grupo). Para os dois casos utilizou-se as partes dos corpos de prova com as quais foram realizadas as análises químicas por emissão ótica.

O aparelho utilizado nestes ensaios foi da marca NETZSCH modelo 404S. As amostras do material em análise eram colocadas dentro de um cadinho de alumina, utilizando-se como referência um outro cadinho de também de alumina, porém vazio. Os dois cadinhos foram posicionados em uma câmara do forno, semelhante a indicada na Figura 5.17, realizando-se o seguinte ciclo térmico:



- aquecimento do forno com a amostra e a referência até 870°C para o latão e 1520°C para o aço M2 (velocidade de aquecimento do forno de 50 K/minuto)<sup>2</sup>;
- permanência no patamar (960 °C para o latão e 1520 °C para o aço M2) durante 5 minutos para ambas amostras;
- resfriamento do forno até 870 °C com velocidade de 10 K/minuto e até 1200 °C com velocidade de 9 K/minuto respectivamente para as amostras de latão e aço M2.

No caso do ensaio para o latão, não foi utilizada qualquer atmosfera protetora no forno. No ensaio do aço rápido M2, devido a problemas de descarbonetação, foi necessário o uso de atmosfera protetora de Argônio puro.

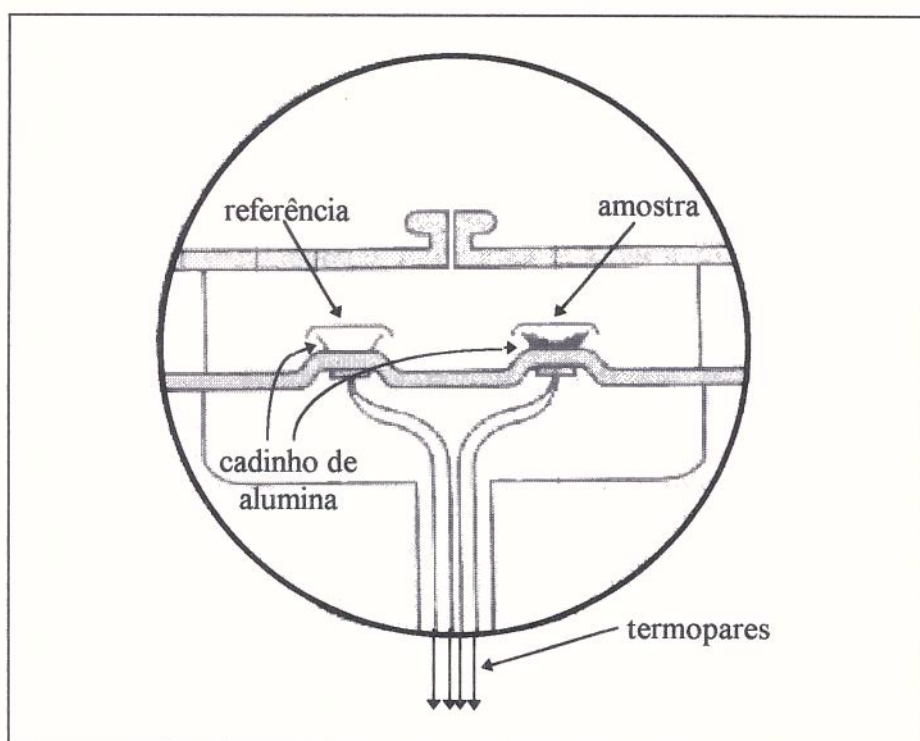


Figura 5.17 - Desenho esquemático de um detalhe da câmara do forno do aparelho de análise térmica diferencial.

<sup>2</sup> no caso do latão foi ainda realizado um aquecimento do forno até 960°C com velocidade de 10 K/min.

### 5.3 - Referências Bibliográficas do Capítulo 5

- 1-HOLMAN, J.P.;GAJDA Jr., W.J. Experimental Methods for Engineers. 5ª McGraw-Hill Book Company, Singapore, 1989.
- 2-PEHLKE, R.D.;JAYARAJAN, A.;WADA, H. Summary of Thermal Properties for Casting Alloys and Mold Materials. Univ. of Michigan, Ann Arbor, MTIS-PB83-211003, dez. 1992.
- 3-ECIL S/A. Pirometria - Catálogo Geral, 1992.
- 4-BOCCALINI Jr., M. Aspectos Macro e Microestruturais de Ligas Cu-Zn Binárias Brutas de Fundição. São Paulo, 1989. 108p. Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, USP..

## 6 - RESULTADOS E DISCUSSÕES

### 6.1 - Primeiro Grupo de Experimentos

Na Figura 6.1 são apresentadas as curvas de temperatura em função do tempo para os três termopares indicados na Figura 5.1. Esta experiência foi repetida por 4 vezes (o segundo ensaio foi perdido por falha no computador), obtendo-se resultados reprodutíveis e semelhantes ao apresentado na Figura 6.1 para uma das experiências. Indica-se assim claramente a influência da presença dos tubos de quartzo na velocidade de resposta destes termopares. Observa-se ainda que esta influência é mais significativa quando se utiliza fios de maior diâmetro na construção do par termoeletrico (os fios utilizados na fabricação do termopares possuem diâmetros de 0,35 mm e 0,062 mm respectivamente para os pares C e A).

Nota-se ainda, pelo exame das curvas da Figura 6.1, que no início do processo de aquisição, a diferença nas temperaturas registradas pelo sistema de aquisição de dados é bem pronunciada (Figura 6.1b). Entretanto, observa-se na Figura 6.1a, que após um certo tempo esta diferença de leitura é reduzida, podendo-se atribuir este comportamento ao aquecimento dos tubos de quartzo, uma vez que nas três experiências realizadas, os canais de aquisição do sinal na placa amplificadora utilizada eram alternados, evitando-se assim a interferência desta variável na conversão do sinal de analógico para digital. O fato dos termopares estarem localizados em posições diferentes no molde, não indicou afetar sensivelmente a resposta.

Os resultados deste grupo de experimentos indicaram a necessidade da utilização dos tubos de quartzo aquecidos para a realização dos experimentos com os moldes cerâmicos listadas no capítulo 5, onde devido as condições de resfriamento impostas (resfriador de ferro fundido ou coquilha refrigerada de cobre), é importante uma resposta rápida e precisa para as temperaturas no metal. Por sua vez a presença do tubo de quartzo permite uma grande economia em termos de termopares ( os termopares do tipo S apresentam um alto custo em relação, por exemplo, aos termopares do tipo K - cerca de 50 vezes), pois, os fios do termopar não são incorporados ao metal quando da solidificação deste, possibilitando assim a sua recuperação. Além do mais, observou-se que em alguns casos pode ocorrer o rompimento da a junta soldada dos fios do par termoeletrico, devido a alta temperatura de vazamento do aço rápido M2 (cerca de 1640 °C).

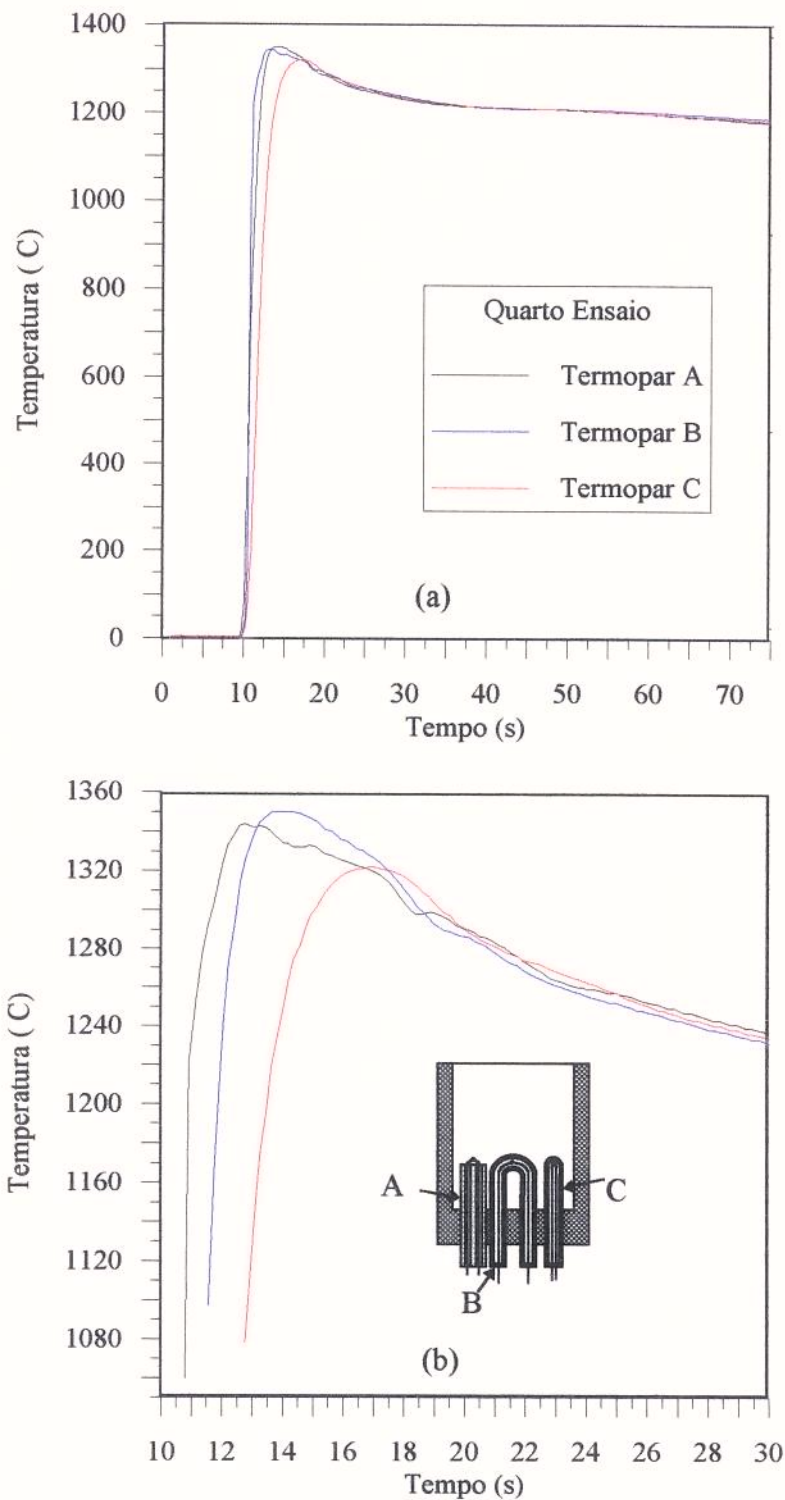


Figura 6.1 - Resultados representativo do primeiro grupo de experiências: a) ciclo completo do experimento; b) detalhe do início do processo de aquisição para salientar a diferença de tempo de resposta .

## 6.2 - Segundo Grupo de Experimentos

As experiências e simulações realizadas para a liga latão 63,5% Cu e 36,5% Zn, tinham como objetivo a validação dos modelos e programas propostos para o cálculo dos seguintes parâmetros: (a) perfis térmicos (b) coeficiente  $h$  e (c) espaçamentos interdendríticos secundários. Esta etapa de validação era importante, pois, a aplicação dos modelos e programas diretamente na simulação da solidificação do aço rápido M2 em moldes cerâmicos com ou sem resfriadores metálicos, apresenta uma série de dificuldades, como por exemplo: trata-se de uma liga com muitos componentes, as propriedades termofísicas do metal e do molde não são disponíveis, não existe na literatura uma equação testada para o cálculo de fração sólida, não existem dados do coeficiente total de transferência de calor do molde para o ambiente e nem de  $h$ . Por sua vez, a liga de cobre utilizada permite, quando adequadamente preparada<sup>1</sup>, uma fácil medição de  $\lambda_2$  e suas propriedades termofísicas são razoavelmente conhecidas<sup>2</sup>, com exceção do calor latente que foi determinado por uma média ponderada em relação à composição da liga e o valor do calor latente dos metais puros<sup>3</sup>.

Nas Figuras 6.2 e 6.3 são apresentados os resultados das experiências realizadas com o vazamento do latão em moldes cilíndricos de areia e moldes de cobre com 20 mm de raio interno. Nestas figuras  $T_a$  significa temperatura ambiente e as curvas de P1a P6 correspondem aos pontos indicados na Figura 5.2, ou seja, P1, P2 e P3 são pontos no molde e P4, P5 e P6 são pontos localizados no metal.

As propriedades termofísicas, utilizadas para as simulações de todos os perfis térmicos e parâmetros microestruturais realizadas neste trabalho, são fornecidas no apêndice 2. Deve-se destacar a importância da utilização de dados de propriedades termofísicas que variam com a temperatura para assegurar a precisão dos cálculos efetuados. Nas Figuras de 6.4 a 6.6 são apresentados gráficos, construídos a partir de dados da literatura<sup>2</sup>, das propriedades calor específico e condutibilidade térmica dos materiais relativos ao segundo grupo de experimentos. Nestas Figuras, as curvas contínuas indicam valores determinados experimentalmente para a propriedade termofísica em questão. As curvas tracejadas, representam uma extrapolação, também fornecida pela literatura, a partir dos valores experimentais para o mesmo material ou a partir de dados de materiais semelhantes. O diagrama de fase Cu-Zn, fornecidos pelas referências 4, 5 e 6, é apresentado na Figura 6.7.

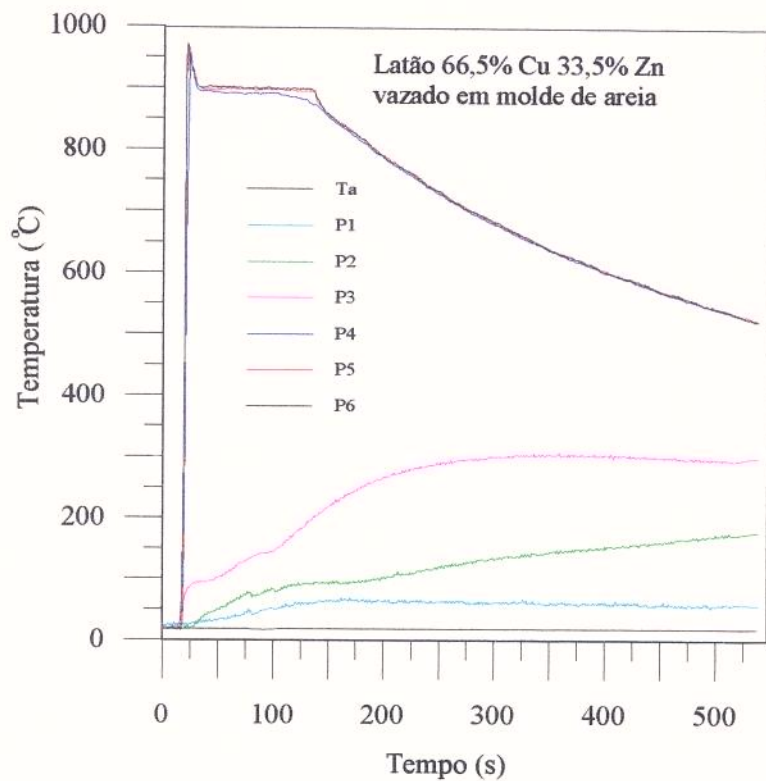


Figura 6.2 - Curvas de resfriamento experimentais no caso de latão/molde de areia.

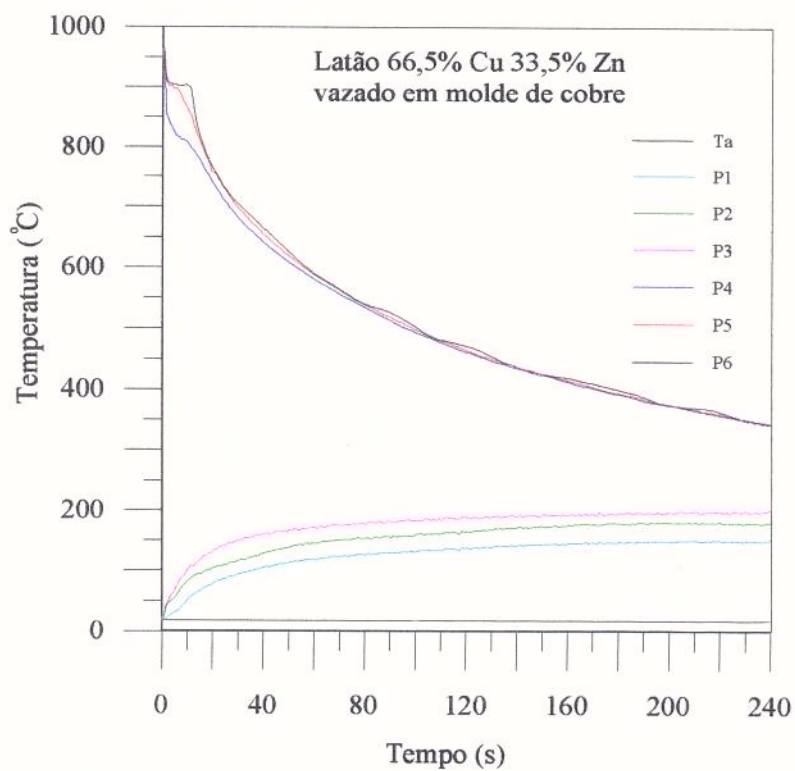


Figura 6.3 - Curvas de resfriamento experimentais no caso de latão/molde de cobre.

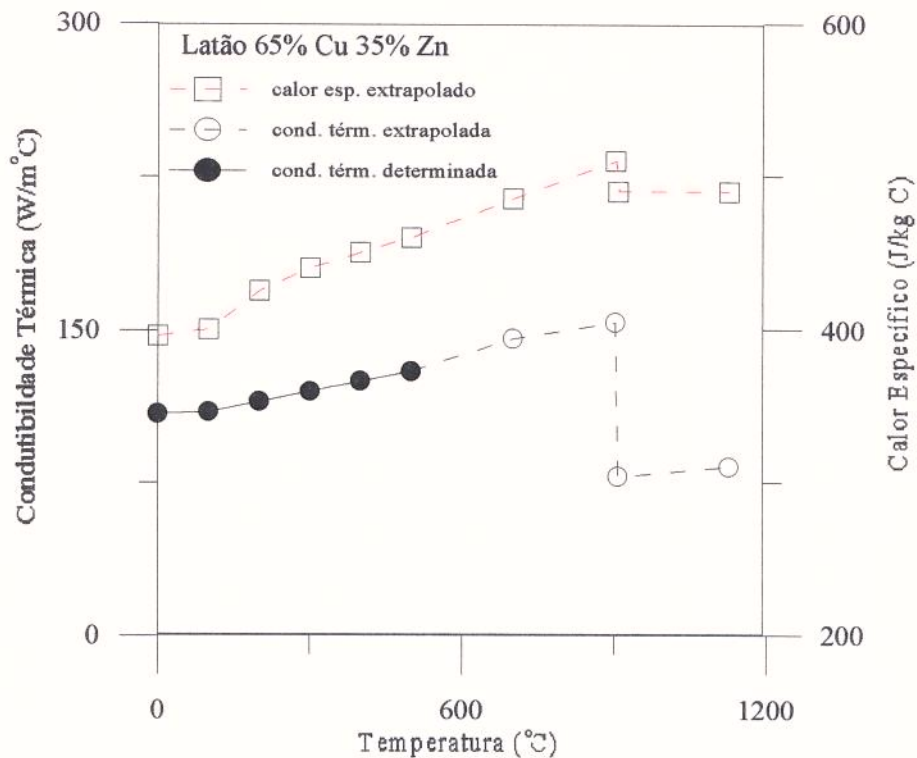


Figura 6.4 - Propriedades termofísicas do latão 65% Cu e 35% Zn.

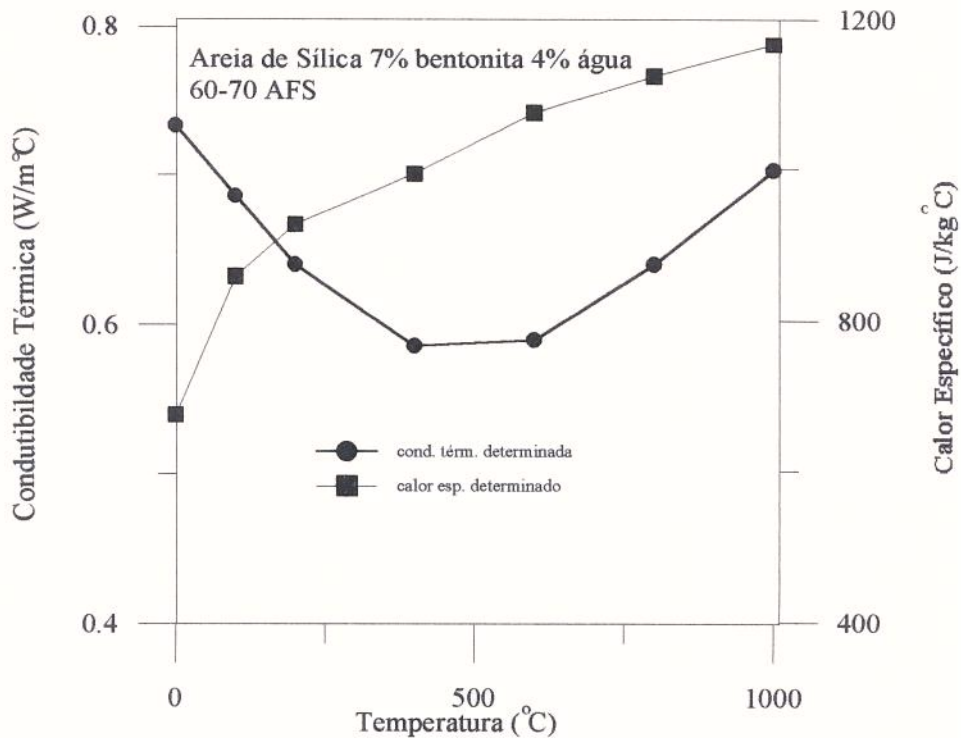


Figura 6.5 - Propriedades termofísicas da areia de moldagem.

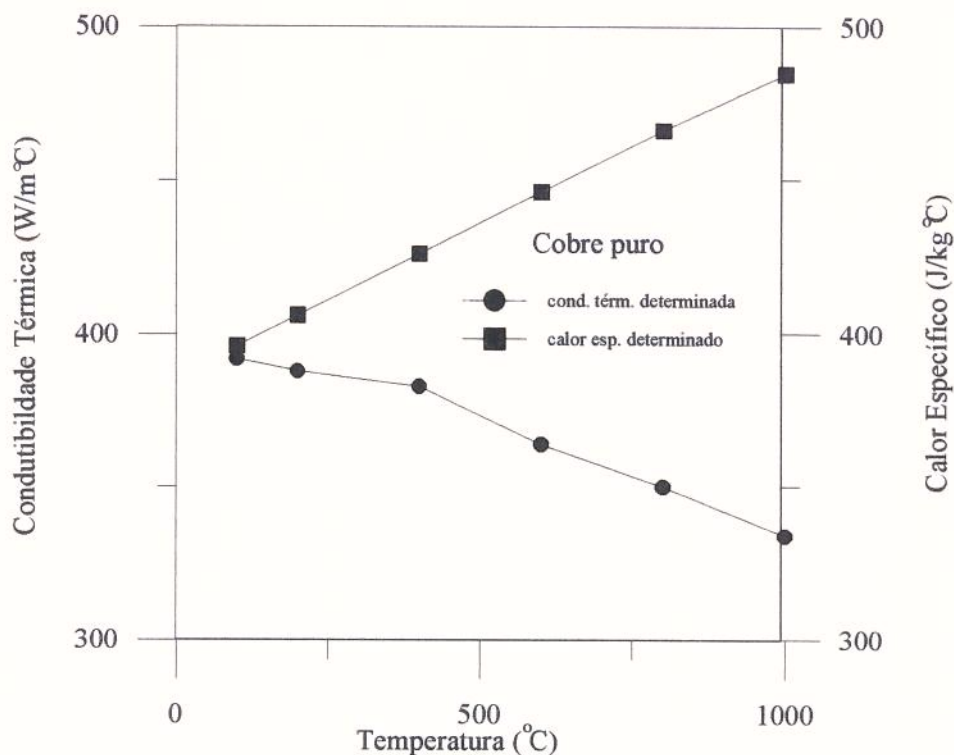


Figura 6.6 - Propriedades termofísicas do cobre puro.

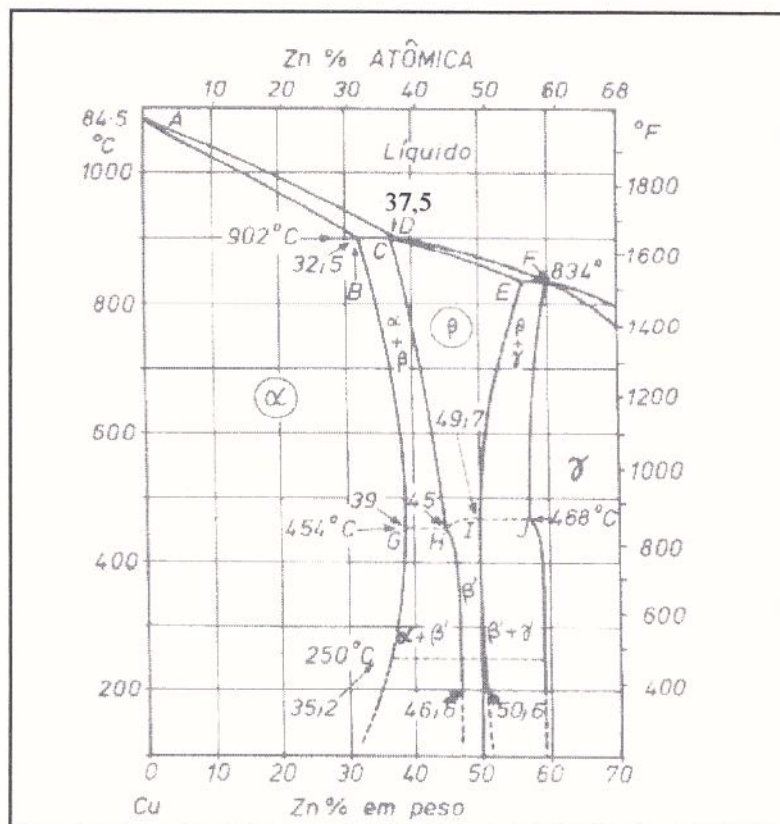


Figura 6.7 - Diagrama de fases cobre-zinco segundo a referência 5.



O ensaio de análise térmica foi realizado com o objetivo de se determinar com precisão as temperaturas das reações de solidificação para a liga 63,5% Cu e 36,5% Zn. A Figura 6.8 apresenta a curva de análise térmica diferencial para a amostra de latão relativa ao segundo grupo de experimentos. Na Figura 6.9 tem-se uma curva de resfriamento construída a partir dos dados fornecidos pelo aparelho de análise térmica diferencial. Observa-se que os dados de temperatura de início da reação líquido  $\Rightarrow \alpha$  e da reação peritética líquido +  $\alpha \Rightarrow \beta$  concordam com os dados da Figura 6.7.

Na Figura 6.10 é apresentada a curva de variação do coeficiente  $h$ , para o caso do molde de cobre, obtida pelo método da comparação de perfis térmicos numéricos e experimentais. Observa-se uma variação brusca no valor de  $h$  durante a etapa de solidificação (de aproximadamente 4000 para cerca de 1250 W/m<sup>2</sup>), demonstrando a importância da correta determinação deste coeficiente na análise por métodos numéricos do processo de solidificação em moldes metálicos. No caso do molde de areia, a maior resistência ao fluxo de calor é oferecida pelas paredes do molde, tendo o valor de  $h$  uma pequena influência no perfil térmico. Sendo assim, não é possível a determinação de uma curva precisa da variação do coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde com o tempo pelo método proposto. Entretanto, é possível a obtenção de um valor médio para  $h$  (em torno de 700 W/m<sup>2</sup>), que pode ser aplicado na simulação sem incorrer em erros significativos.

O formato da curva apresentada na Figura 6.10 concorda com aquele indicado na Figura 2.8, ou seja, o valor de  $h$  decresce consideravelmente no início do processo, tendendo para um valor constante na etapa de resfriamento do metal. Este fenômeno está associado com a formação do *gap* de ar na interface metal/molde (a superfície de contato é lateral), devido contração do metal que solidifica e a expansão do molde ao ser aquecido, conforme discutido no capítulo 2.

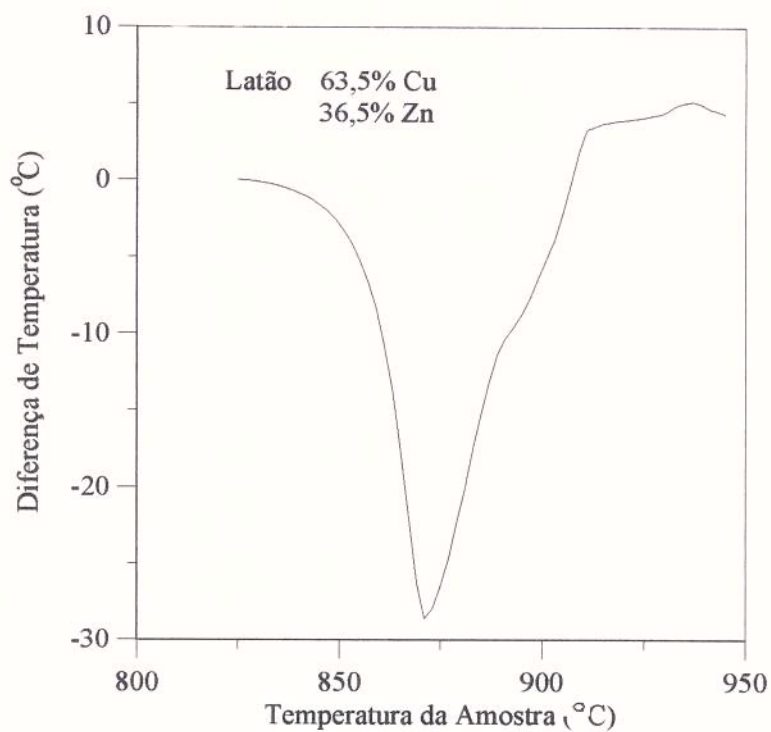


Figura 6.8 - Curva obtida no ensaio de análise térmica Diferencial (ATD) para o latão.

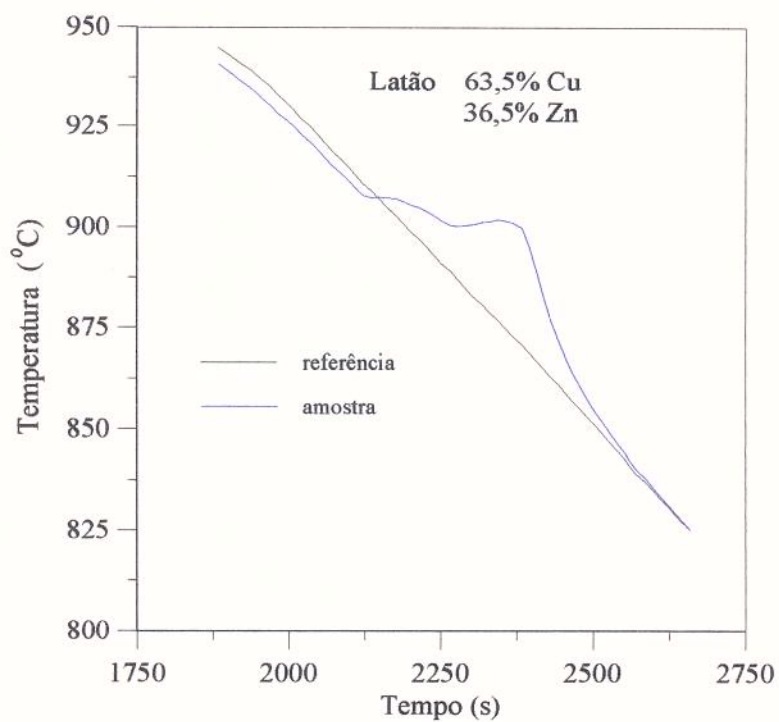


Figura 6.9 - Curvas de resfriamento para a amostra e para a referência construída a partir dos ensaios de ATD.

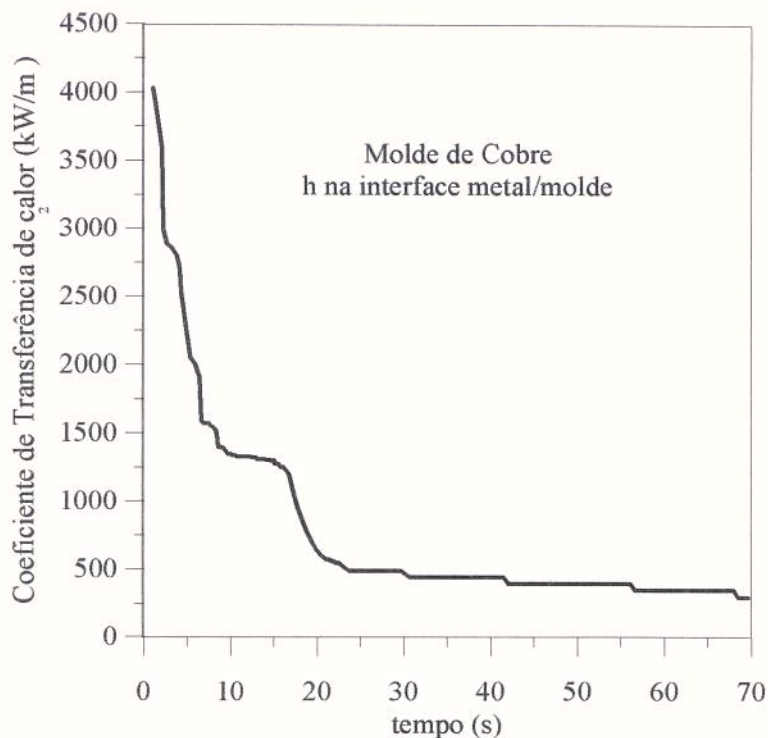


Figura 6.10 - Variação do coeficiente  $h$  com o tempo para o molde de cobre.

Nas Figuras 6.11 e 6.12 são apresentadas as curvas de resfriamento numéricas (obtidas utilizando-se os valores de  $h$  calculados) e experimentais respectivamente para os moldes de areia e de cobre para duas posições: a 2 mm da interface metal/molde e no centro, ambas a meia altura da peça. Nota-se uma boa concordância (diferenças inferiores a 10%) entre os resultados experimentais e numéricos indicando a boa precisão do modelo aplicado, inclusive na previsão dos patamares relativos à reação de líquido  $\rightarrow \alpha$  (908 °C) e a reação peritética: líquido +  $\alpha \rightarrow \beta$  (902 °C).

Nas Figuras 6.13 e 6.14 tem-se as curvas de entalpia x temperatura e entalpia x fração sólida utilizadas no cálculo numérico. Em todas as simulações numéricas apresentadas para o segundo grupo de experimentos, foi utilizada a equação de Brody-Flemings (apêndice 3) para a determinação da evolução de fração sólida durante o processo de solidificação (Figuras de 6.10 a 6.15).

Uma vez confirmada a precisão do método numérico desenvolvido no cálculo da evolução de temperaturas, o mesmo foi estendido para a determinação dos espaçamentos interdendríticos. Na Figura 6.15 são apresentados os valores numéricos e experimentais para

os espaçamentos interdendríticos secundários ( $\lambda_2$ ), calculado pela equação 4.53 com  $Bo = 5,5$  e  $n = 1/3$ , para ambos os moldes.

Nota-se que para o caso do molde de cobre os resultados apresentam uma boa concordância, indicando a precisão do método. No caso do molde de areia, a curva numérica acompanha a tendência de variação de  $\lambda_2$  apresentada pelos resultados experimentais e o deslocamento entre ambas pode ser justificado pela imprecisão dos valores de propriedades termofísicas da areia de moldagem (por não serem disponíveis propriedades exatas para a areia de moldagem empregada, foram adotados valores obtidos na literatura<sup>1</sup> de um material semelhante).

Como no caso do molde de areia é o próprio molde que controla o fluxo de calor, esta imprecisão dos dados pode interferir significativamente nos resultados (Figuras 6.11 e 6.15). Além disso, devido à baixa capacidade de extração de calor característica do molde de areia, uma certa parcela de fluxo axial de calor pode ocorrer (baixa relação altura/diâmetro), o que não é computado pelo método numérico aplicado. Por outro lado, para o molde de cobre são disponíveis propriedades mais confiáveis e o fluxo de calor é essencialmente radial, levando a uma maior precisão dos resultados.

Nas Figuras 6.16 e 6.17 são apresentadas as micrografias relativas a cada campo de medição de valores de  $\lambda_2$  correspondentes aos dados da Figura 6.15. É nítido o maior refinamento da microestrutura relacionada com a peça obtida no molde de cobre.

Adicionalmente, é importante notar a compatibilidade entre os resultados experimentais obtidos e análises teóricas anteriores<sup>2</sup> no que diz respeito ao comportamento de  $\lambda_2$  ao longo da seção transversal, apresentando um valor máximo associado a uma posição entre a interface metal/molde e o centro do metal.

Observa-se ainda um desvio padrão relativamente alto para as medidas do espaçamento interdendrítico secundário. Este comportamento pode ser atribuído ao fato de que ao se realizar o corte da seção transversal da amostra, várias dendritas são seccionadas em diferentes direções espaciais de crescimento. Os dados apresentados na Figura 6.15 se referem a 20 medições em cada campo para cada amostra, com exceção do campo central onde foram realizadas 10 medições, sendo duas amostras para cada condição de resfriamento.

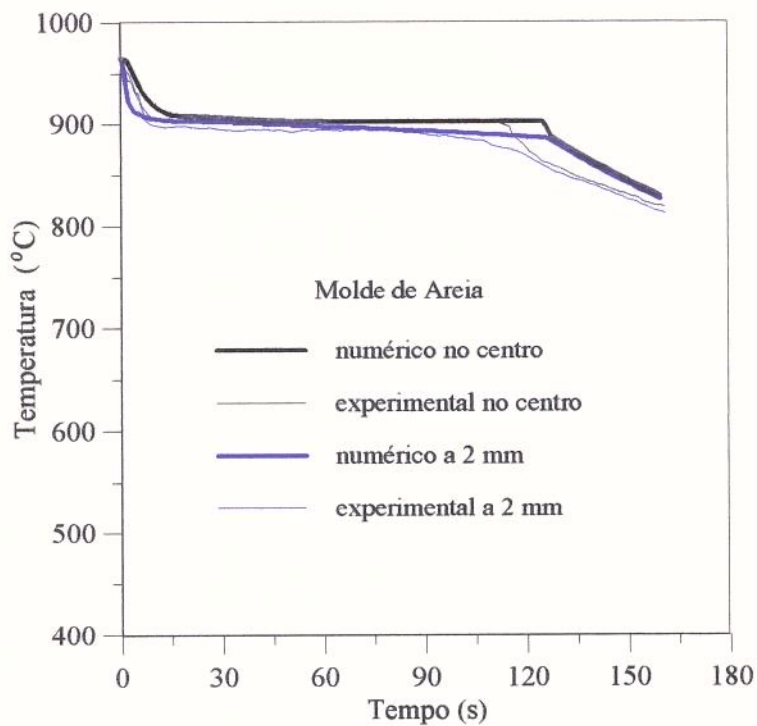


Figura 6.11 - Comparação entre resultados experimentais e numéricos dos perfis de temperatura na liga para o molde de areia.

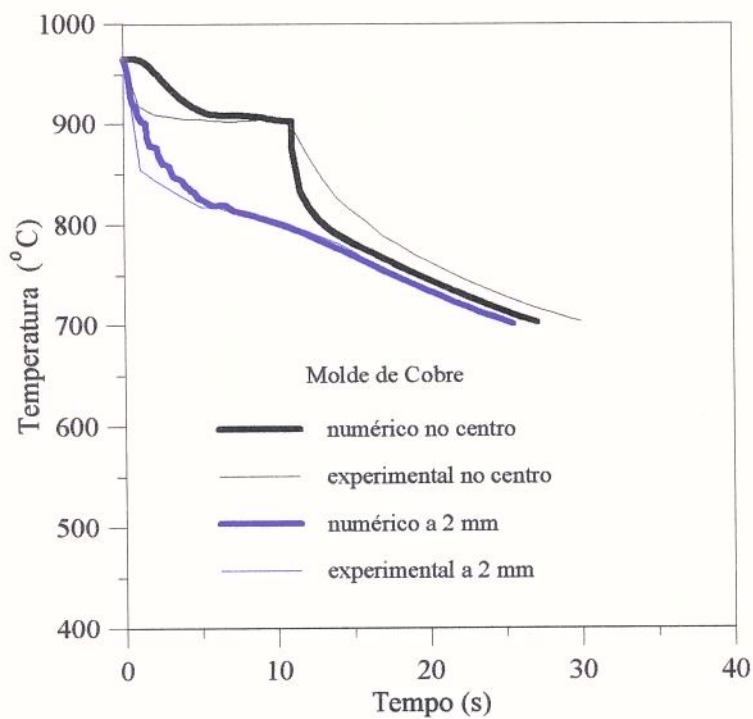


Figura 6.12 - Comparação entre resultados experimentais e numéricos dos perfis de temperatura na liga para o molde de cobre.

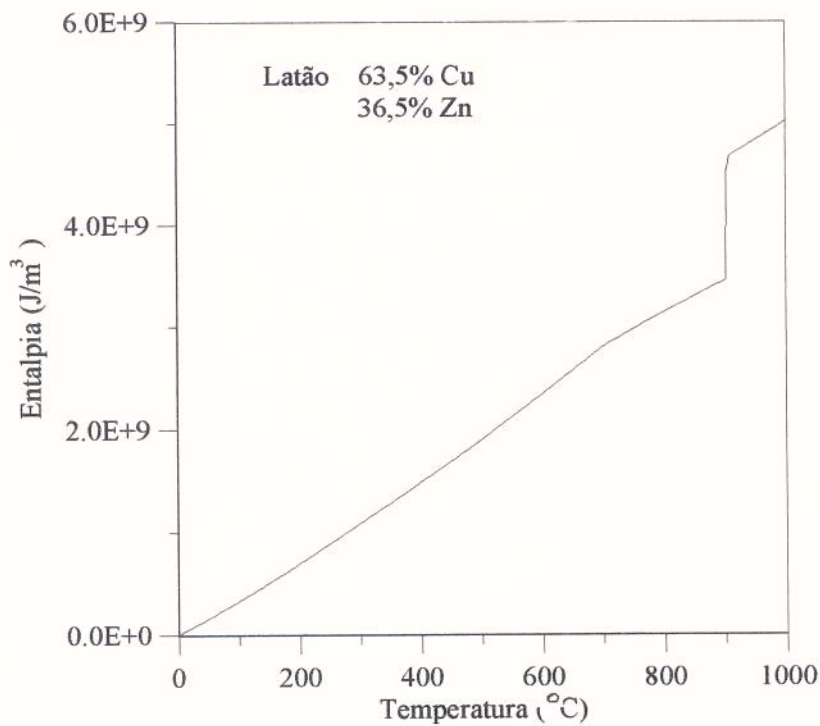


Figura 6.13 - Relação entre entalpia e temperatura calculada numericamente utilizando a equação de Brody-Flemings.

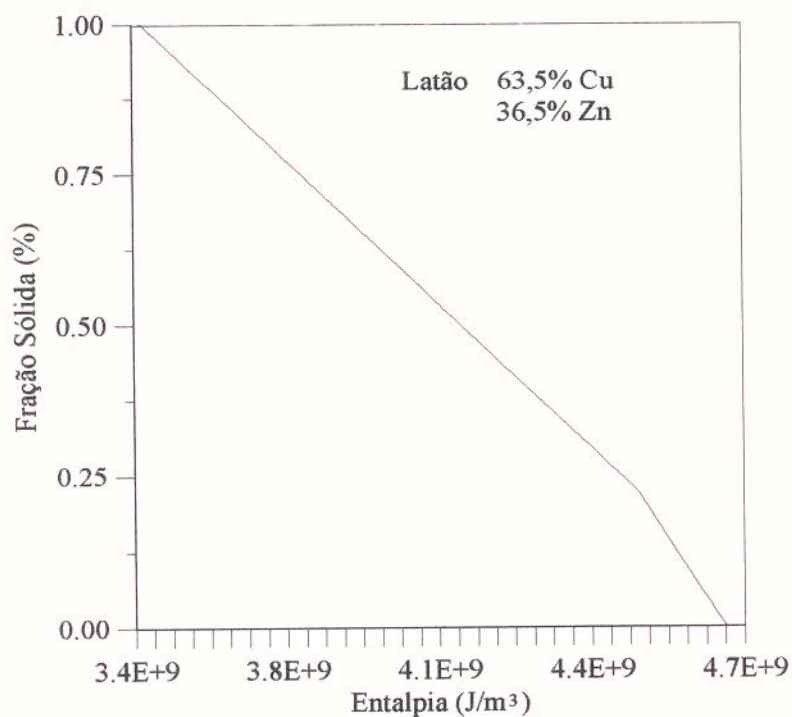


Figura 6.14 - Relação entre e fração sólida e entalpia calculada numericamente utilizando a equação de Brody-Flemings.

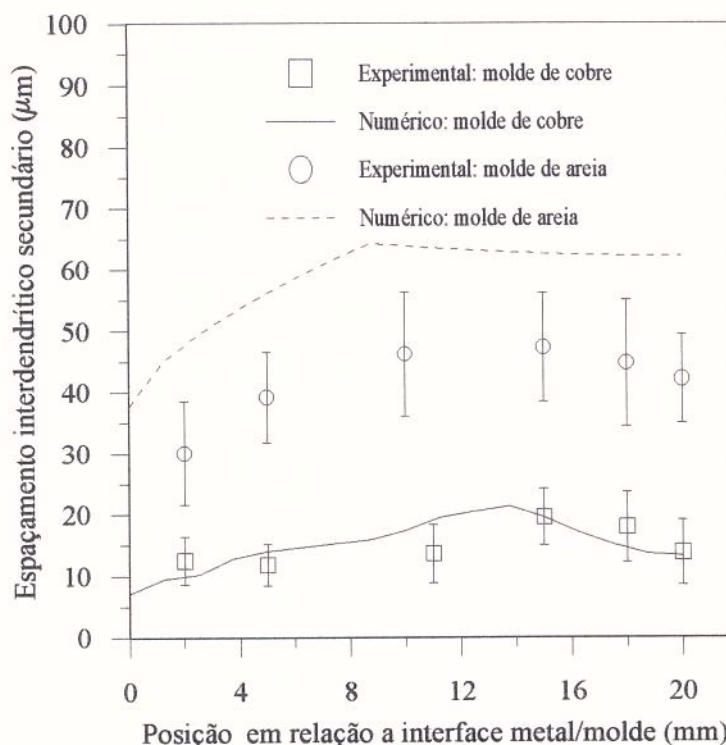


Figura 6.15 - Comparação entre resultados numéricos e experimentais para os espaçamentos interdendríticos secundários.

Na tabela 6.1 são apresentados os resultados dos ensaios de análises química para as amostras do segundo grupo de experimentos. Em cada vazamento foi obtido um corpo de prova instrumentado (termopares) e outro não instrumentado alternadamente em função do tipo de molde.

Tabela 6.1 - Resultados de análises química por emissão ótica das amostras do segundo grupo de experimentos.

Amostra	Cu (% em peso)	Zn (% em peso)
molde de cobre instrumentado	63,7	36,3
molde de cobre não instrumentado	63,6	36,4
molde de areia instrumentado	63,3	36,7
molde de areia não instrumentado	63,4	36,6

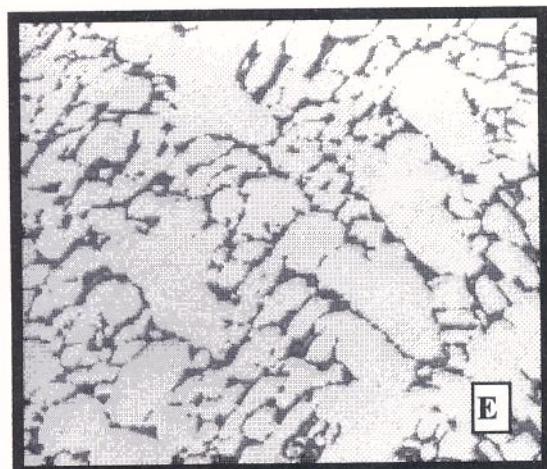
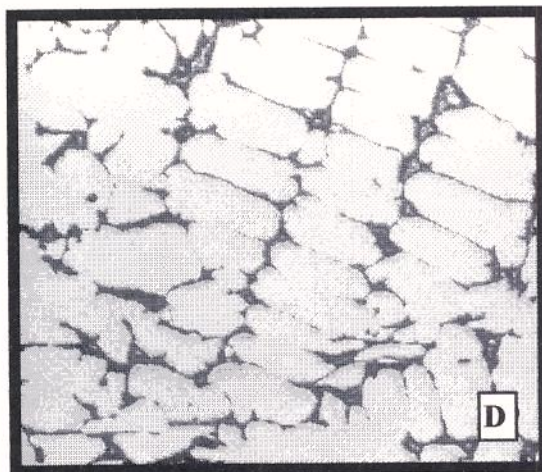
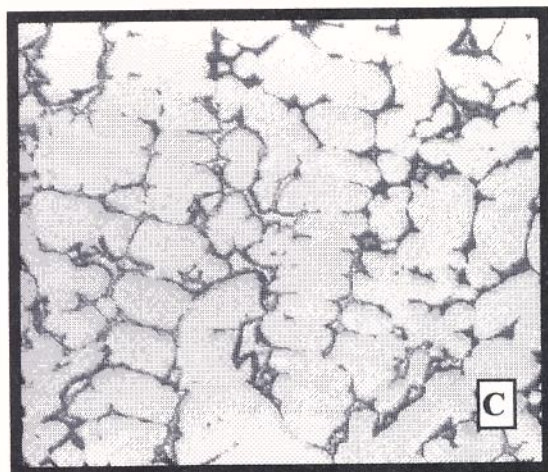
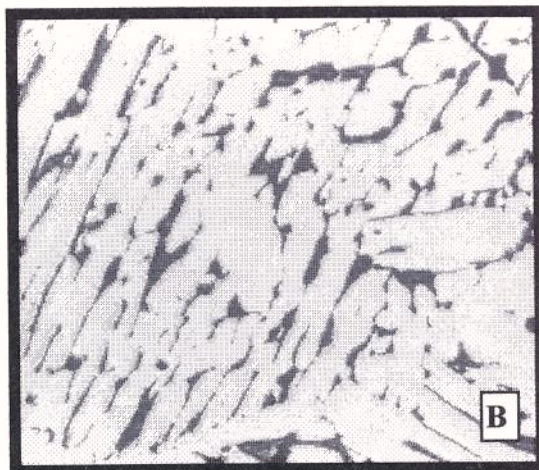


Figura 6.16 - Micrografias da estrutura dendrítica de 5 campos de medição do espaçamento interdendrítico secundário ( $\lambda_2$ ) para o molde de areia : A = 2 mm, B = 5 mm, C = 10 mm, D = 15 mm e E = 20 mm. (aumento de 86x)



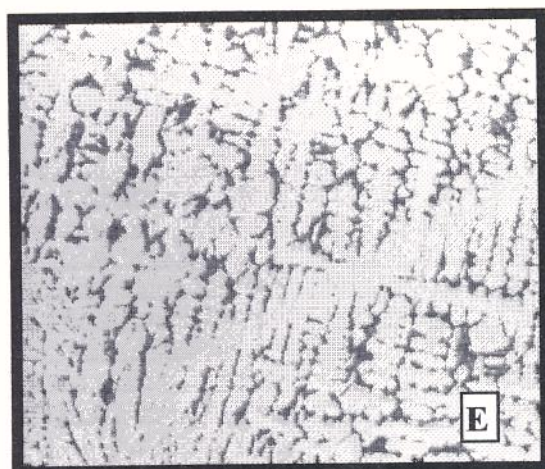
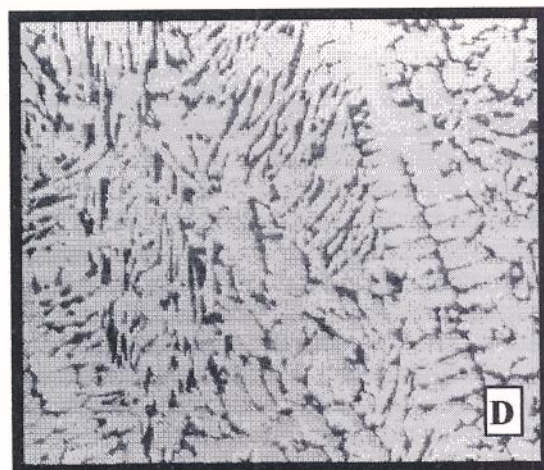
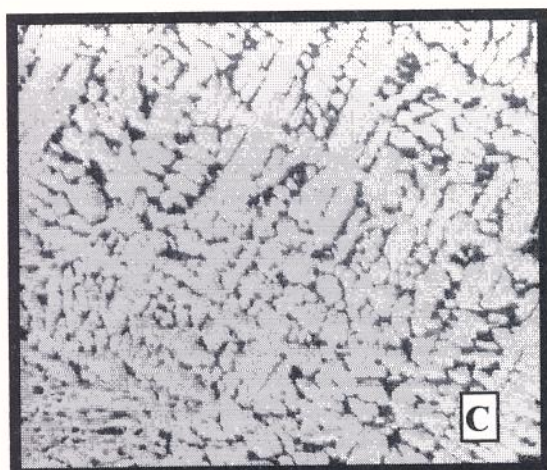
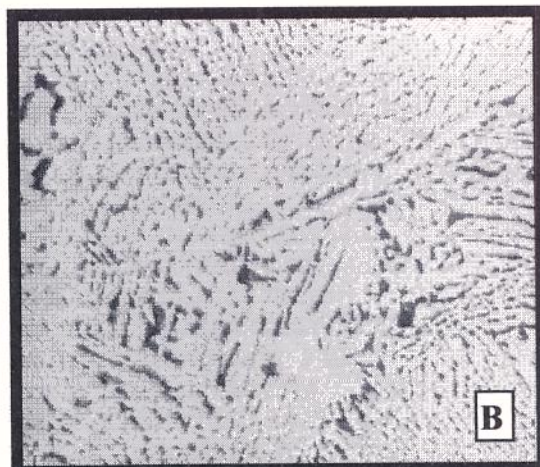
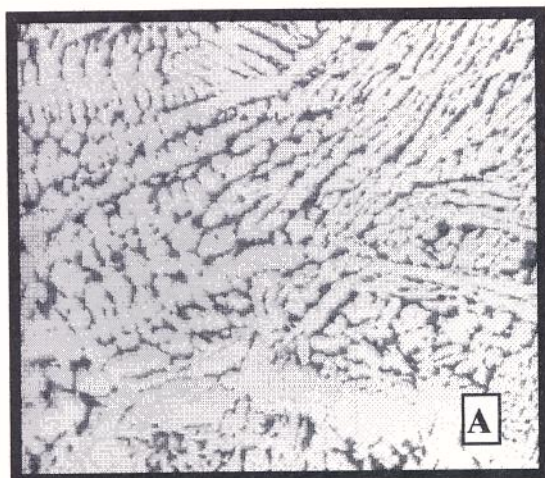


Figura 6.17 - Micrografias da estrutura dendrítica de 5 campos de medição do espaçamento interdendrítico secundário ( $\lambda_2$ ) para o molde de cobre : A = 2 mm, B = 5 mm, C = 10 mm, D = 15 mm e E = 20 mm. (aumento de 86x)

### 6.3 - Terceiro Grupo de Experimentos

O objetivo da experiência relativa a este grupo, era o de verificar se a condição estabelecida no modelo numérico proposto, fluxo de calor preferencialmente unidirecional na região inferior do molde (casca cerâmica), correspondia às condições reais presentes no sistema metal e molde. Para tanto, utilizou-se da liga de latão com 60% de cobre e 40% de zinco, devido à grande tendência de solidificação colunar apresentada por este material<sup>1</sup>. Esta liga foi vazada numa casca cerâmica aquecida até aproximadamente 800 °C no forno apresentado na Figura 5.12. Na análise da macrografia apresentada na Figura 6.18, observa-se um crescimento visivelmente colunar a partir da superfície interna do molde na parede correspondente à interface molde/ambiente. Tal direção e morfologia de crescimento indica claramente um fluxo de calor uniaxial na direção perpendicular à superfície citada. Desta forma, está assegurada a condição assumida de um fluxo de calor preferencialmente unidirecional no resfriamento do sistema metal e molde.

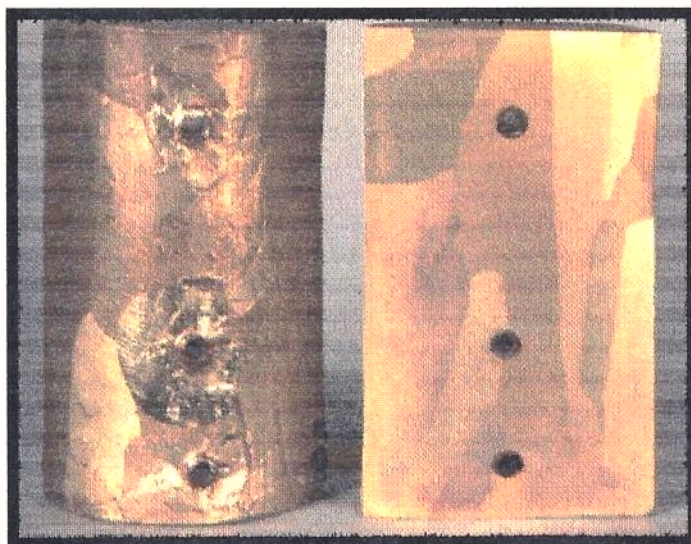


Figura 6.18 - Macrografias do corpo de prova do latão 60% de cobre e 40% de zinco vazado em molde do tipo casca cerâmica. Nesta experiência, foram utilizadas cascas cerâmicas iguais às empregadas nas experiências com o aço rápido M2. O aquecimento e vazamento desta casca foi realizado no mesmo forno utilizado para o caso do aço rápido M2.

## 6.4 - Quarto Grupo de Experimentos

Neste item serão apresentados os resultados relativos ao aço rápido M2 solidificado unidirecionalmente. Serão analisados os seguintes parâmetros para cada condição de resfriamento:

- os perfis térmicos experimentais e numéricos obtidos ao longo do sistema metal e molde;
- os parâmetros térmicos simulados numericamente (gradiente térmico, velocidade de avanço da interface, velocidade de resfriamento) para as interfaces líquido/pastoso e sólido/pastoso;
- os espaçamentos interdendríticos secundários experimentais e aqueles obtidos através da simulação numérica;
- os tipos e morfologias dos carbonetos eutéticos obtidas para determinadas posições no metal e as correspondentes velocidades de resfriamento.

Nas Figuras de 6.19 a 6.21 são apresentadas as curvas de resfriamento obtidas experimentalmente para diversas posições no metal e no metal para as três condições de resfriamento apresentadas na Figura 5.11. Nestes gráficos  $T_a$  representa a temperatura ambiente. As posições correspondentes aos termopares no sistema metal e molde são apresentadas na figuras ao lado de cada gráfico.

Ao todo foram realizadas 15 experiências assim distribuídas:

- 7 experiências com o molde cerâmico resfriando ao ar;
- 4 experiências utilizando-se um resfriador de ferro fundido;
- 4 experiências utilizando-se a coquilha refrigerada de cobre.

Deste ciclo de experiências foram aproveitados dois corpos de prova para cada condição de resfriamento para as quais todos dados poderiam ser considerados válidos (composição química, curvas de resfriamento para todos os termopares, preenchimento do molde). O descarte das experiências restantes ocorreu devido a fatores tais como:

- falha do sistema de aquisição de dados, ocasionada por interferências de ruídos durante a aquisição, falha no próprio programa de aquisição, ou mesmo por falta de energia elétrica no momento da coleta de dados;

- rompimento dos termopares (um ou mais) para determinadas posições no sistema metal e molde, pois, devido a complexidade de instalação destes instrumentos, os mesmos eram susceptíveis a tais falhas;
- não atendimento da composição química especificada;
- trincamento do molde durante o vazamento;

Assim, as curvas de resfriamento apresentadas nas Figuras de 6.19 a 6.21 são aquelas representativas de cada condição de interface metal/molde utilizada.

Na tabela 6.2 são apresentados os resultados dos ensaios de análises química para as amostras do quarto grupo de experimentos. Nota-se que para as duas últimas experiências o teor de carbono está abaixo do especificado pela norma AISI, embora algumas normas admitam até 0,75% de carbono. Observa-se que existe uma grande tendência de perda deste elemento por oxidação principalmente em função dos seguintes motivos:

- aquecimento do metal líquido a altas temperaturas;
- grande tempo de permanência nestas altas temperaturas;
- pequeno volume de metal no cadinho para ser fundido;
- a não utilização de uma atmosfera protetora (argônio por exemplo) no forno durante a elaboração da liga;

Tabela 6.2 - Resultados de análises química por emissão ótica e por combustão (carbono) das amostras do quarto grupo de experimentos.

norma referência e tipo de experiência	Composição Química (% em peso)										
	C	Cr	W	Mo	V	Mn	Si	P	S	Co	Ni
composição do M2 pela norma AISI	0,78-0,88	3,75-4,50	5,50-6,75	4,50-5,50	1,75-2,20	0,15-0,40	0,20-0,45	<0,03	<0,03	-	<0,30
molde cerâmico resfriando ao ar	0,82	4,0	5,9	4,5	1,6	0,30	0,34	-	-	-	-
resfriador de ferro fundido	0,73	3,8	6,0	4,5	1,58	0,15	0,15	0,03	-	-	0,13
coquilha refrigerada de cobre	0,71	3,7	6,1	4,5	1,4	-	0,14	-	-	-	-

Em alguns experimentos ocorreu uma combinação destes fatores levando a uma perda de carbono. Nos casos em que o teor de carbono caiu muito, por exemplo para 0,52%, foi feito o descarte dos corpos de prova obtidos. Entretanto, os teores de carbono apresentados na Tabela 6.2 para as experiências válidas dos dois últimos tipos de ensaios não comprometem as análises realizadas neste trabalho, pois, não ocorre uma alteração significativa das propriedades termofísicas da liga e nem na morfologia dos carbonetos formados devido às pequenas alterações apresentadas.

Com o objetivo de se determinar com precisão as temperaturas de início das reações de solidificação para o aço M2 mencionadas no capítulo 3, foi realizado o ensaio de análise térmica diferencial. A análise pelo diagrama de fases apresentado na Figura 3.1 não permite esta determinação uma vez que se trata de um diagrama pseudobinário. Para a realização deste ensaio, foi utilizada uma amostra do material obtido no experimento de molde cerâmico resfriando ao ar. O ensaio foi feito com uma atmosfera protetora de argônio para evitar uma maior perda de carbono durante a etapa de fusão e resfriamento da liga. A Figura 6.22 apresenta a curva de análise térmica diferencial para a amostra de aço M2 utilizada. Na Figura 6.23 tem-se uma curva de resfriamento construída a partir dos dados fornecidos pelo aparelho de análise térmica diferencial. Pelos resultados apresentados nas Figuras 6.22 e 6.23 podem ser extraídas as seguintes temperaturas para o início de cada reação de solidificação<sup>1</sup>:

- líquido  $\Rightarrow$  ferrita : 1440°C
- reação peritética : 1317°C
- reação eutética : 1248°C

Os valores apresentados acima concordam em linhas gerais com aqueles indicados na literatura empregando a mesma técnica de análise térmica diferencial (ATD)<sup>13</sup> e velocidades de resfriamento de aproximadamente 10 °C/minuto. Durante a realização do ensaio de ATD estava ocorrendo uma queda do teor de carbono da liga, apesar do emprego de atmosfera proteção com argônio. Em função disto foi realizada a análise química da liga (somente a determinação do teor de carbono) após a realização do ATD. A variação no teor de carbono afeta praticamente somente a temperatura *liquidus*, não existindo influência significativa para as temperaturas de início das outras reações de solidificação.

---

<sup>1</sup> A liga apresentou um teor de carbono de 0,75% após o ensaio de análise térmica diferencial.

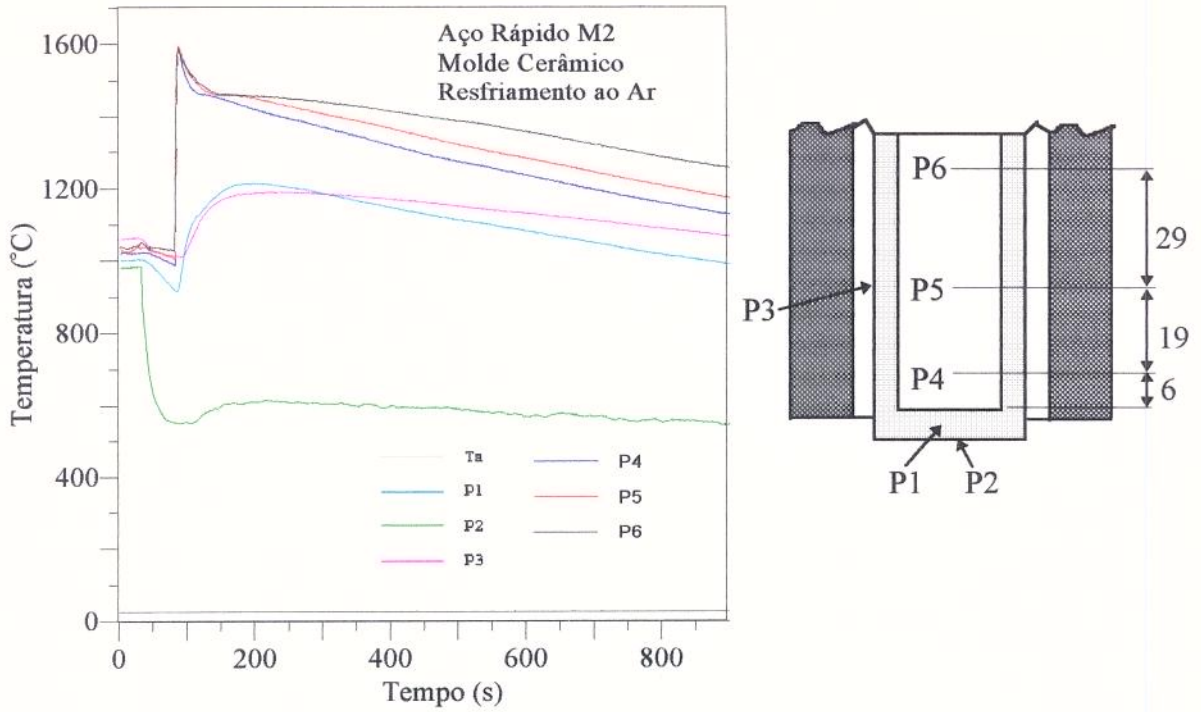


Figura 6.19 - Curvas de resfriamento para determinados pontos no sistema metal e molde com o molde cerâmico resfriando ao ar.

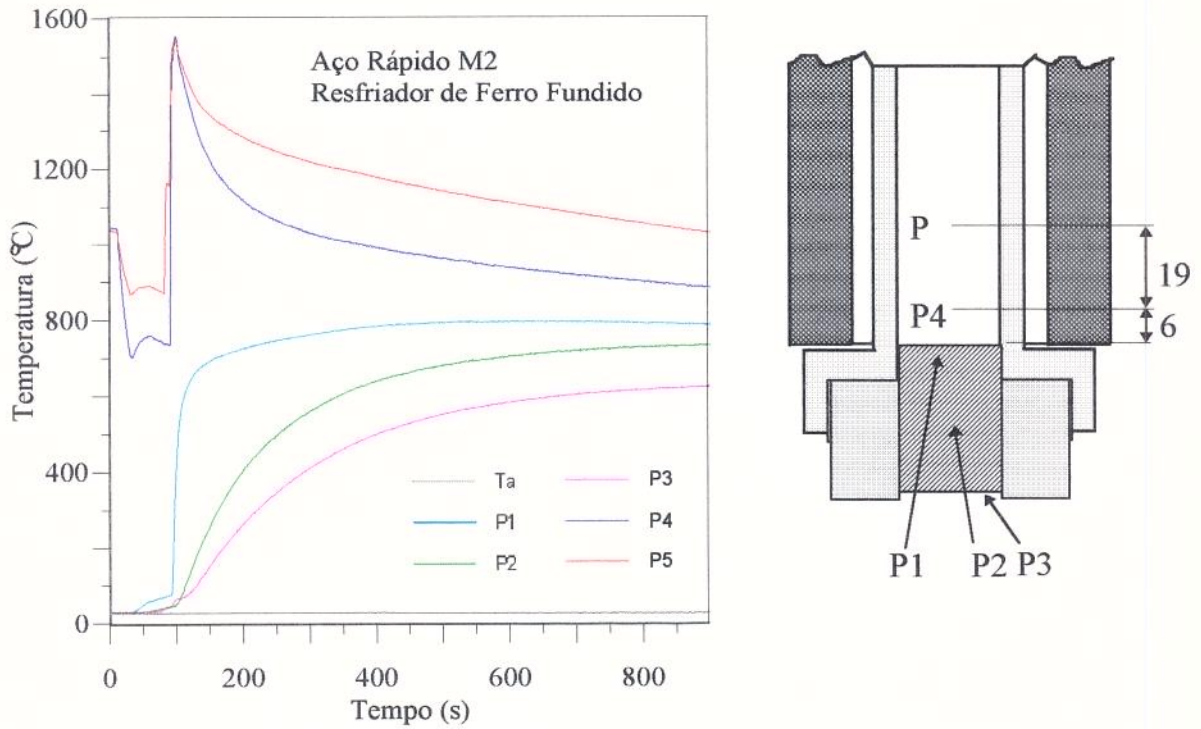


Figura 6.20 - Curvas de resfriamento para determinadas posições no sistema metal e molde para o caso do emprego de um resfriador de ferro fundido.

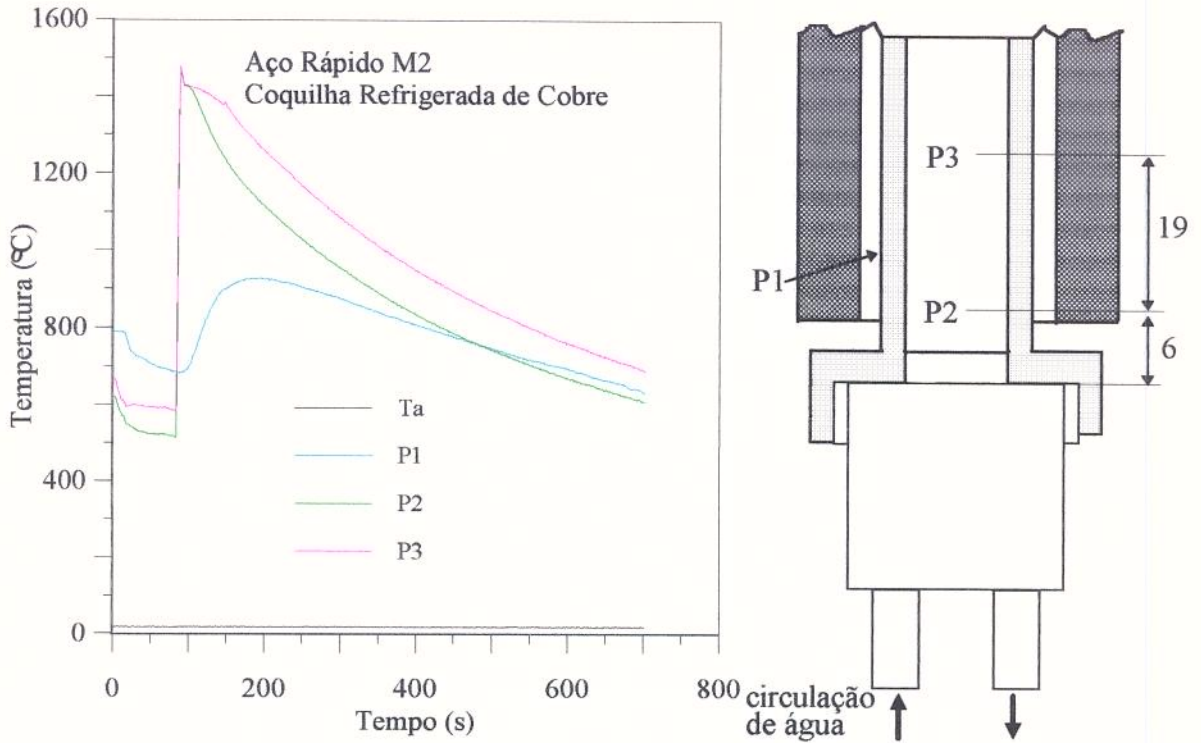


Figura 6.21 - Curvas de resfriamento para determinadas posições no sistema metal e molde para o caso da utilização de uma coquilha refrigerada de cobre.

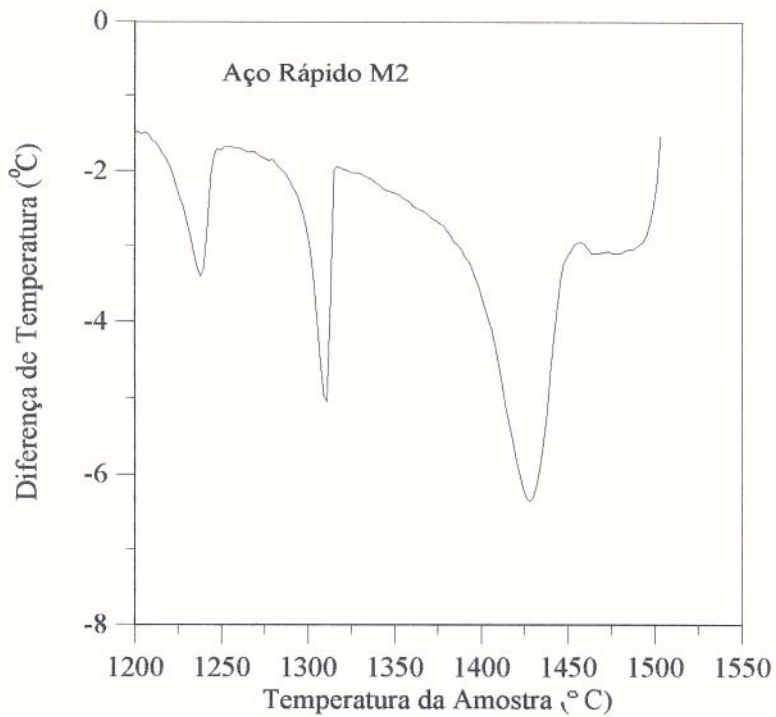


Figura 6.22 - Curva obtida no ensaio de análise térmica Diferencial (ATD) para o aço rápido M2.

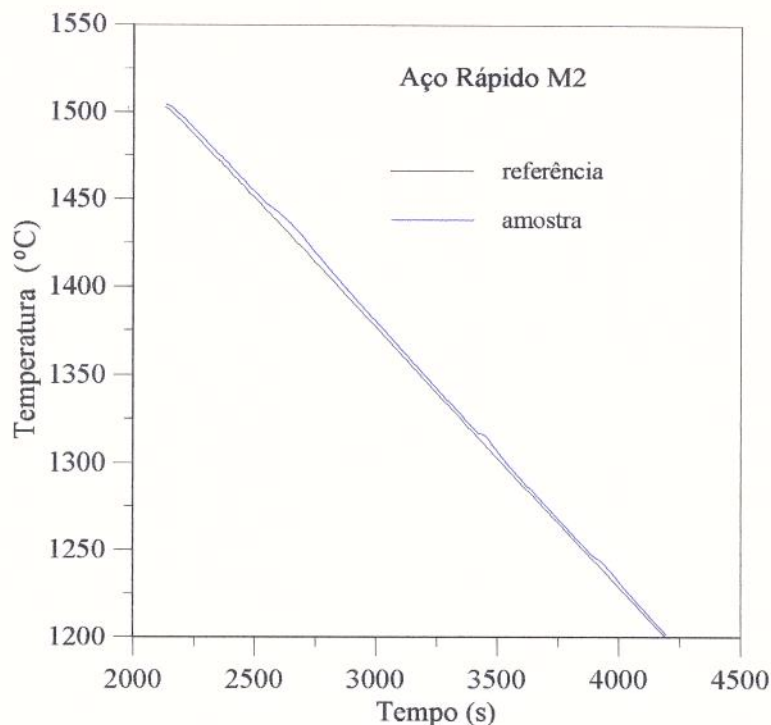


Figura 6.23 - Curvas de resfriamento para a amostra e para a referência construída a partir dos ensaios de ATD para a amostra de aço M2.

Nas Figuras de 6.24 a 6.26 são apresentados gráficos, construídos a partir de dados da literatura<sup>2,8</sup>, das propriedades calor específico e condutibilidade térmica dos materiais relativos ao quarto grupo de experimentos, semelhantes aos gráficos das Figuras de 6.4 a 6.6. Como não são disponíveis propriedades específicas para o aço rápido M2, utilizou-se, nas simulações realizadas neste trabalho, as propriedades do aço rápido T1 de composição e características semelhantes. Entretanto, mesmo para este material, não são disponíveis as propriedades termofísicas no estado líquido. Para contornar este problema, utilizou-se a consideração recomendada por Pehlke<sup>2</sup> para o caso de aços inoxidáveis, ou seja, as propriedades no estado líquido são inferiores cerca de 20% em relação às propriedades pouco abaixo do ponto de início de fusão do material.

Sob o ponto de vista de dados de propriedades termofísicas, o caso do molde cerâmico é o mais crítico, uma vez que a casca cerâmica é composta de várias camadas (capítulo 1 deste trabalho) com composições, granulometrias e espessuras diferentes. Neste trabalho foi utilizada uma compilação de propriedades a partir dos dados fornecidos pelas referências de 9 a 12. Nestas referências, os autores não especificam com exatidão as composições e características físicas dos moldes a que se referem, levando portanto, a uma relativa deficiência nos dados de propriedades para o molde nas simulações realizadas.



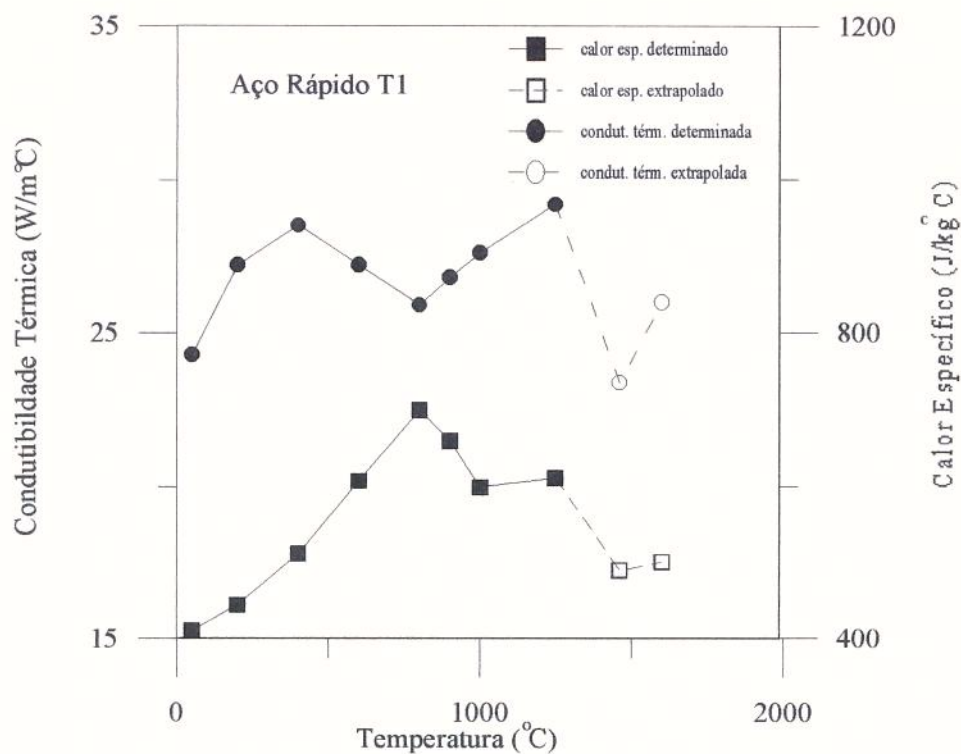


Figura 6.24 - Propriedades termofísicas do aço rápido T1.

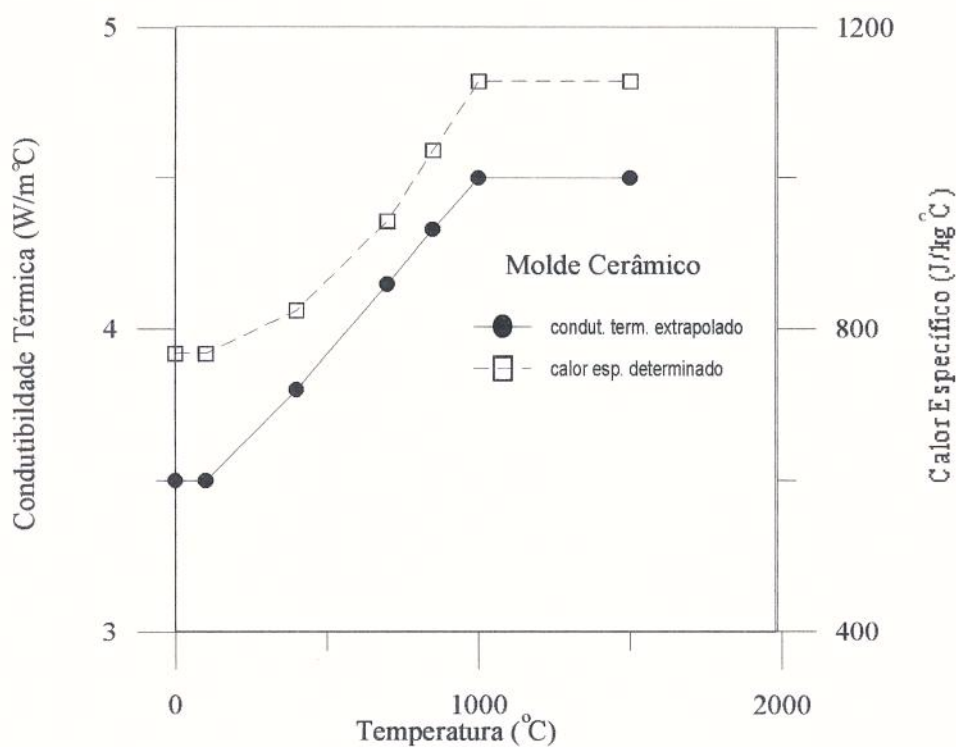


Figura 6.25 - Propriedades termofísicas do molde cerâmico.

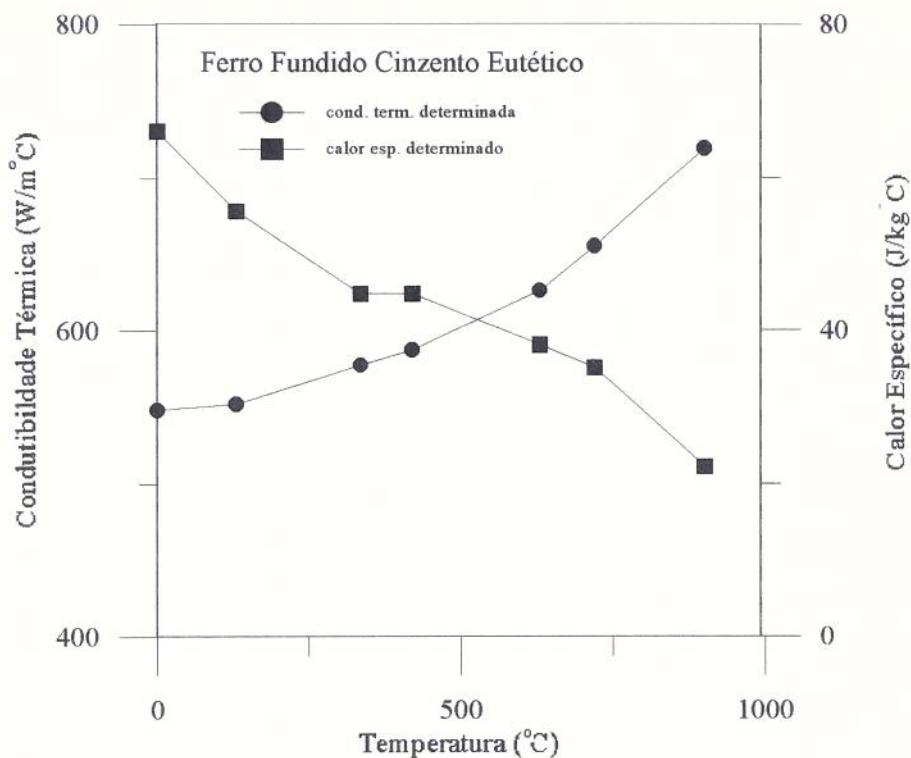


Figura 6.26 - Propriedades termofísicas do ferro fundido cinzento eutético.

Nas Figuras 6.27 e 6.28 tem-se as curvas de entalpia x fração sólida e entalpia x temperatura utilizadas no cálculo numérico. A literatura consultada não apresenta nenhuma equação, específica para o aço M2 ou que já tenha sido testada para este material, que relacione fração sólida com temperatura. Também não é possível a aplicação da regra da alavanca, por não se dispor de uma diagrama de fases adequado. Em função disto, empregou-se a regra linear para correlacionar fração sólida e temperatura nas simulações numéricas realizadas.

As Figuras de 6.29 a 6.31 apresentam os gráficos comparativos dos resultados numéricos e experimentais para as curvas de resfriamento em determinados pontos no sistema metal e molde para as três condições de resfriamento empregadas. Observa-se uma boa concordância entre as curvas numéricas e experimentais. Os pequenos desvios apresentados podem ser atribuídos a diversos fatores, entre os quais podem ser relacionados:

- imprecisão de posicionamento dos termopares;
- a não existência de uma equação confiável para computar a evolução de fração sólida durante a solidificação do aço rápido M2;

- a posição do nó na malha de discretização numérica não coincidir exatamente com a correspondente posição experimental no sistema metal e molde, devido a limitação de memória do computador e da linguagem de programação utilizada;
- a deficiência de dados de propriedades termofísicas para os materiais que constituem o sistema metal e molde, inclusive o calor latente de fusão do aço rápido M2;

Observa-se ainda nas Figuras de 6.29 a 6.31 que as curvas de resfriamento numéricas e experimentais para a posição de comparação destes resultados (a 6 mm da interface metal/molde para as condições de resfriamento ao ar e com a utilização de resfriador de ferro fundido e a 16 mm para o caso de coquilha refrigerada de cobre) existe uma declividade semelhante entre estas curvas, consequentemente indicando valores de velocidades de resfriamento numéricas e experimentais ( $dT/dt$ ) muito próximos. Também são calculados numericamente os valores de velocidade de resfriamento nas interface liquido/pastoso e solido/pastoso são e apresentados mais a frente neste trabalho.

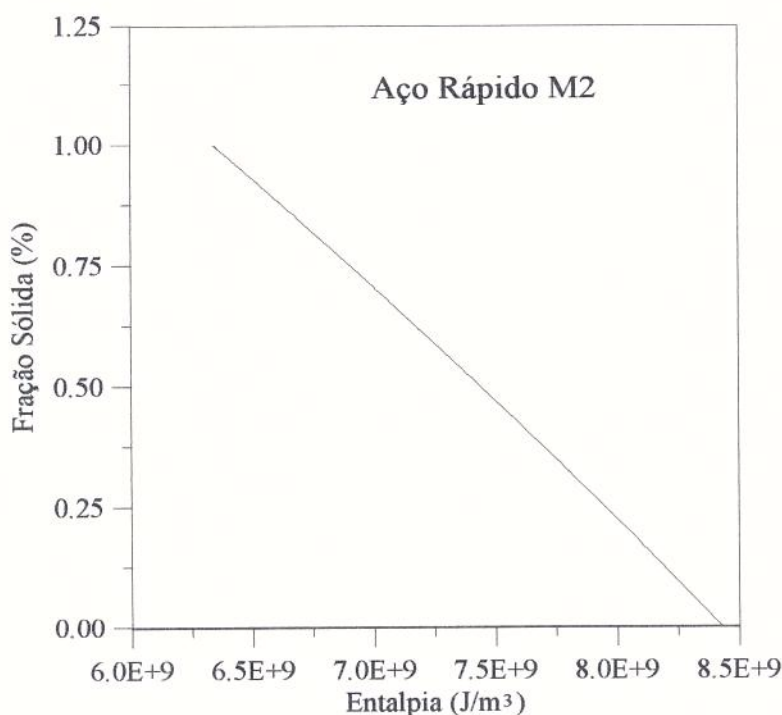


Figura 6.27 - Relação entre fração sólida e entalpia utilizando-se a regra linear.

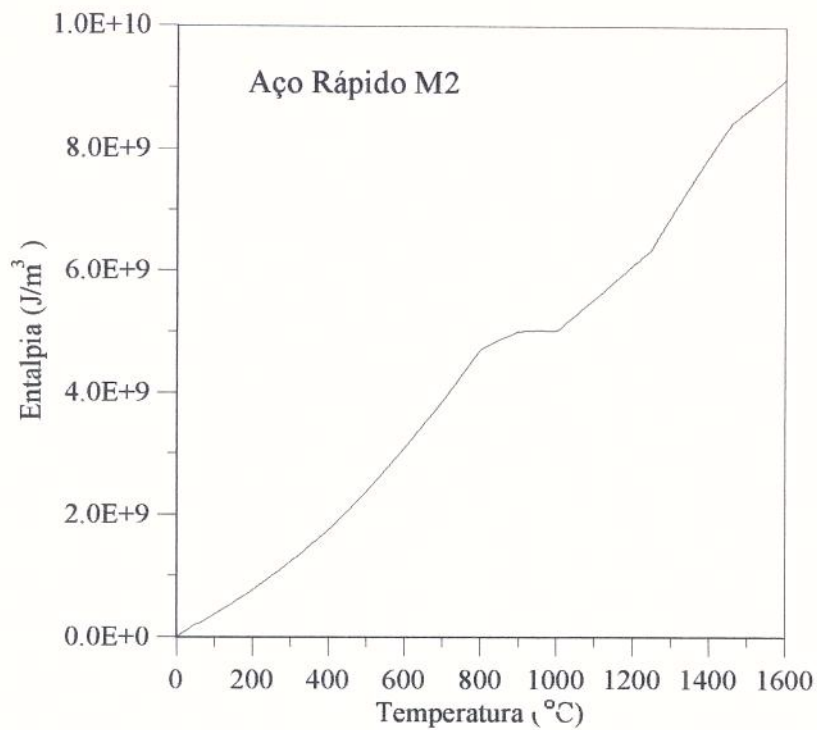


Figura 6.28 - Relação entre entalpia e temperatura utilizando-se a regra linear.

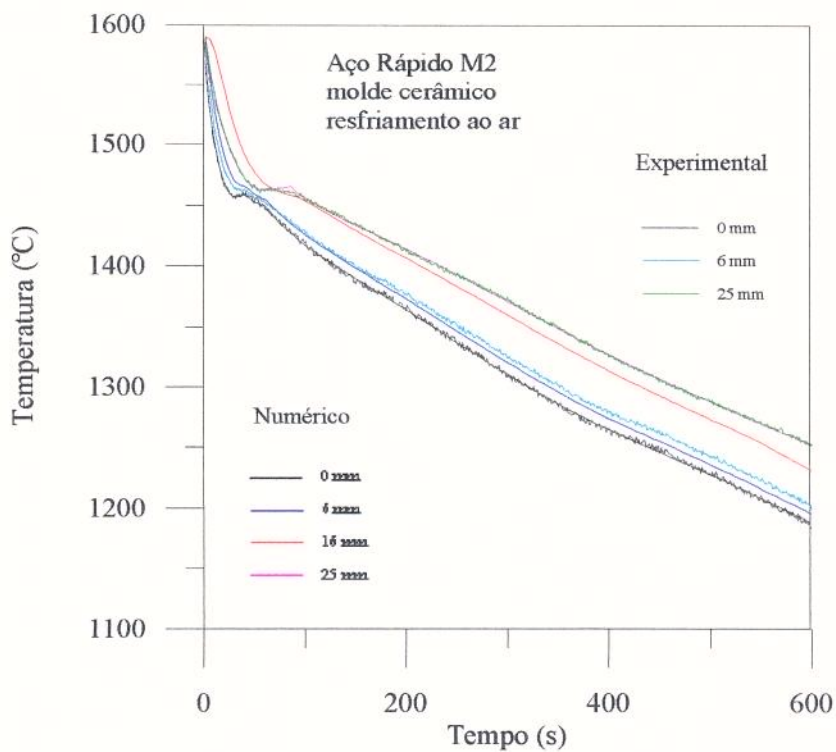


Figura 6.29 - Curvas de resfriamento para o caso de molde cerâmico resfriando ao ar.

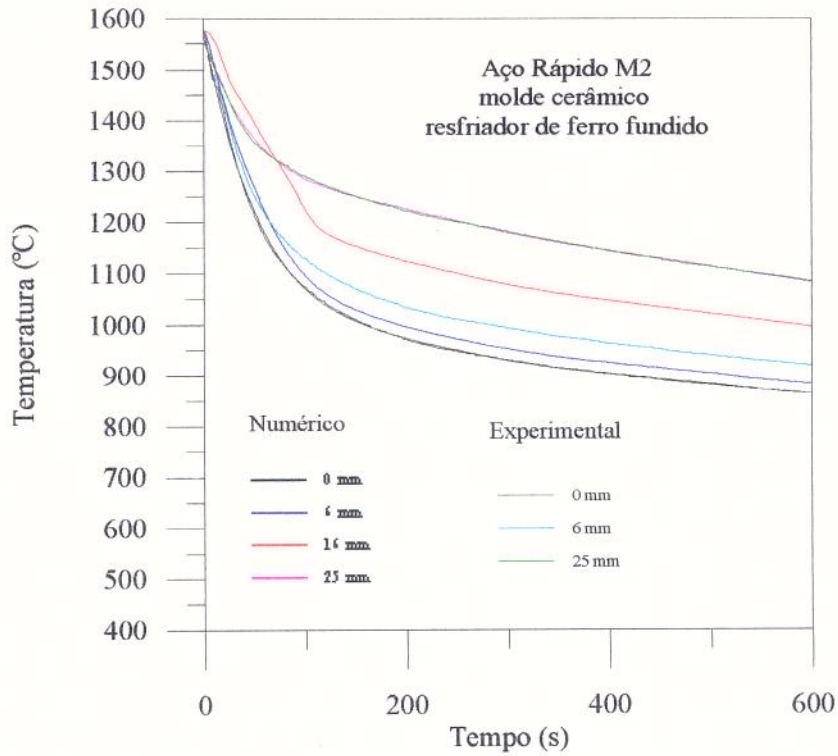


Figura 6.30 - Curvas de resfriamento para o caso de utilização de resfriador de ferro fundido.

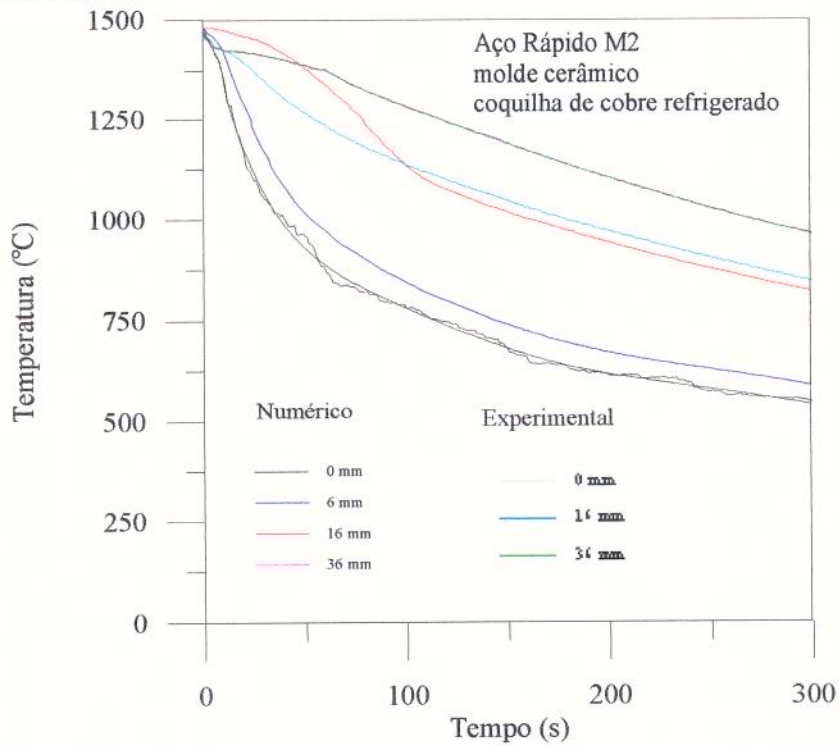


Figura 6.31 - Curvas de resfriamento para o caso de utilização de coquilha refrigerada de cobre.

Nas Figuras de 6.32 a 6.34 são apresentados os gráficos que correlacionam as seguintes variáveis, determinadas numericamente, com a posição para a interface líquido/pastoso: gradientes térmicos, velocidade de avanço da interface e velocidade de resfriamento, para cada condição de resfriamento empregada. As mesmas variáveis são apresentadas para a interface sólido/líquido nas Figuras de 6.35 a 6.37. As posições das interfaces *liquidus* e *solidus*, para as três condições de resfriamento, determinadas numericamente, são apresentadas nas Figuras de 6.38 a 6.40.

A determinação do coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde ( $h$ ) foi feita através da técnica de comparação dos perfis térmicos numéricos e experimentais. Nesta metodologia, um valor para o coeficiente  $h$  era aceito quando a diferença entre as temperaturas medidas e calculadas pelo método numérico, proposto neste trabalho, era menor do que  $0,1\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Nas Figuras de 6.41 a 6.43 são apresentados os gráficos do perfil de  $h$  calculados para cada condição de resfriamento.

Os valores de espaçamento interdendrítico secundário medidos e calculados, utilizando-se a equação 4.55, são apresentados nas Figuras de 6.44 a 6.46. Nas Figuras de 6.47 a 6.49 temos as micrografias correspondentes às posições de medição de  $\lambda_2$  para cada condição de resfriamento.

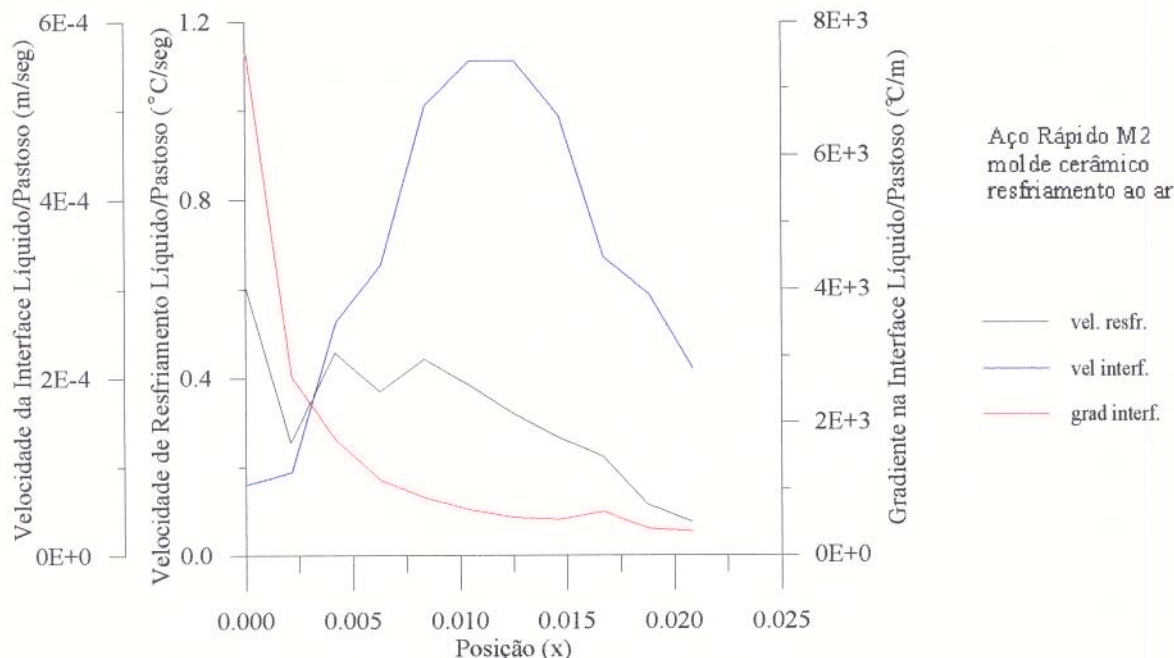


Figura 6.32 - Correlação entre parâmetros térmicos com a posição na interface líquido/pastoso para o caso de molde cerâmico resfriando ao ar.

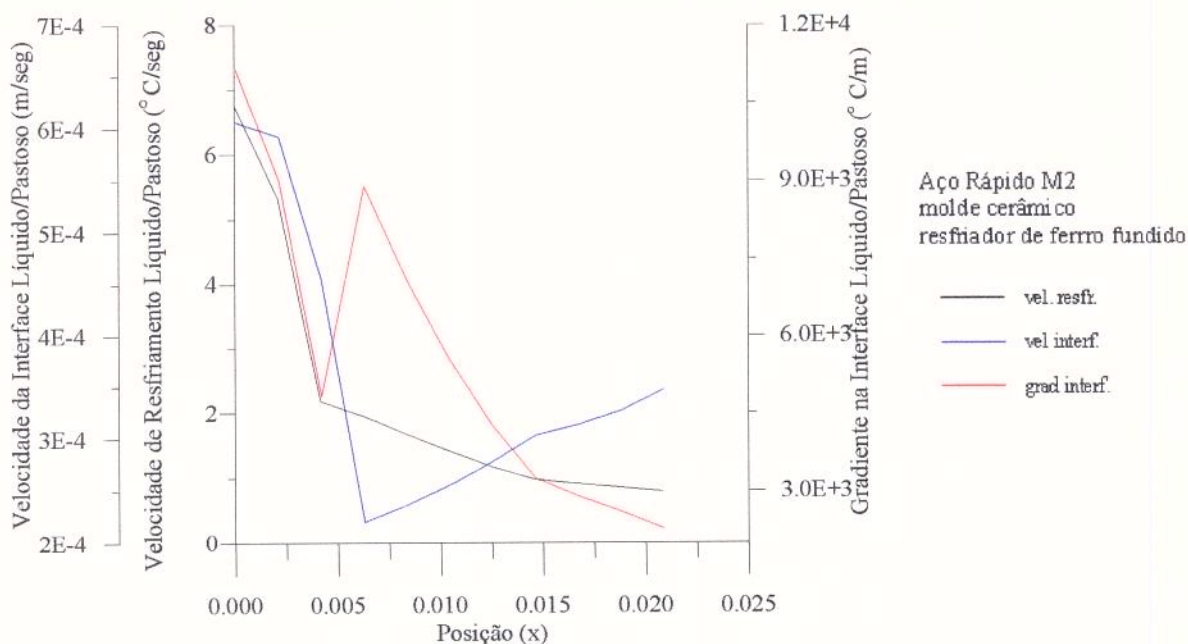


Figura 6.33 - Correlação entre parâmetros térmicos com a posição na interface líquido/pastoso para o caso de utilização de resfriador de ferro fundido cinzento.

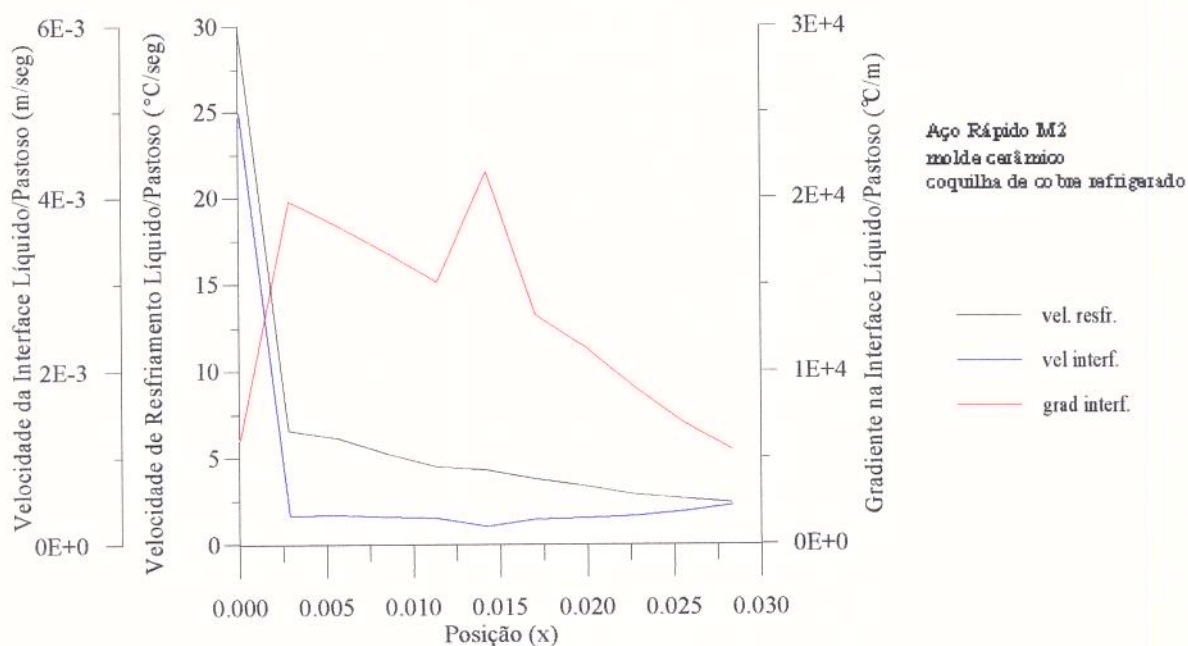


Figura 6.34 - Correlação entre parâmetros térmicos com a posição na interface líquido/pastoso para o caso de utilização de coquilha refrigerada de cobre.

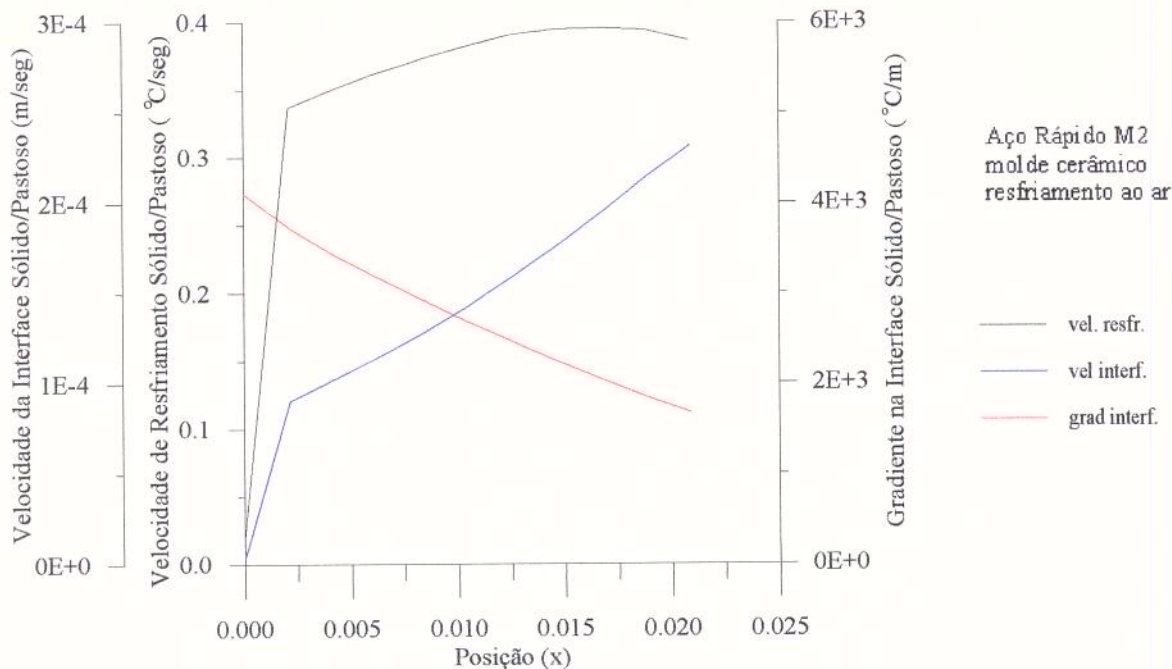


Figura 6.35 - Correlação entre parâmetros térmicos com a posição na interface sólido/pastoso para o caso de molde cerâmico resfriando ao ar.

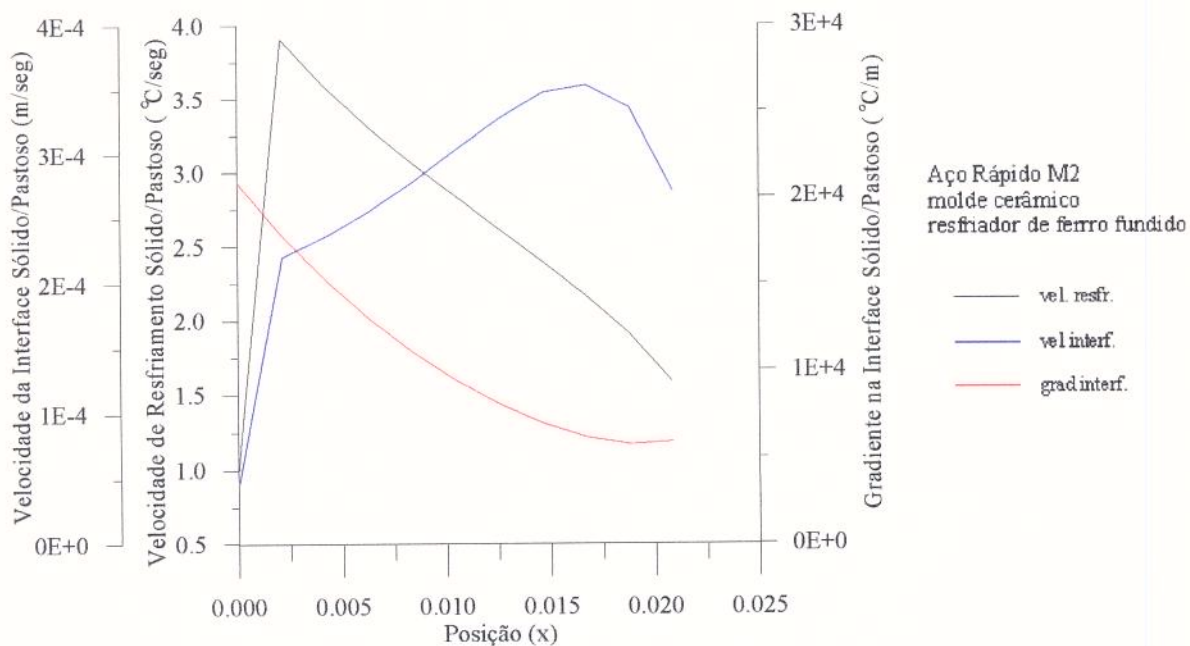


Figura 6.36 - Correlação entre parâmetros térmicos com a posição na interface sólido/pastoso para o caso de utilização de resfriador de ferro fundido cinzento.



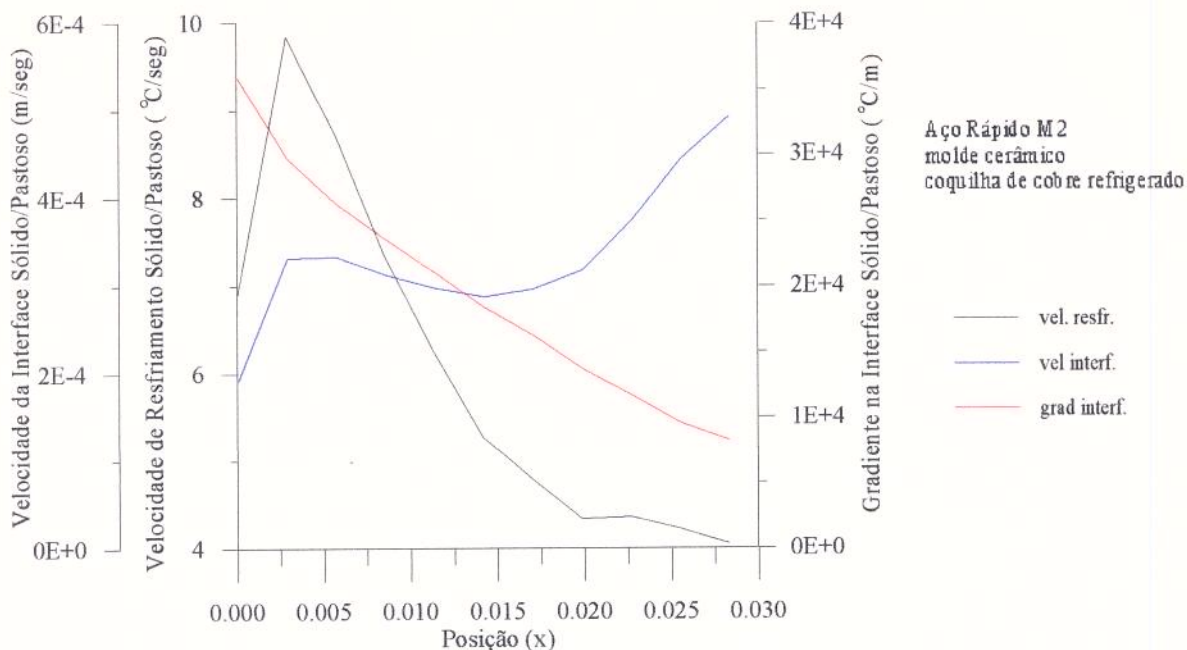


Figura 6.37 - Correlação entre parâmetros térmicos com a posição na interface sólido/pastoso para o caso de utilização de coquilha refrigerada de cobre.

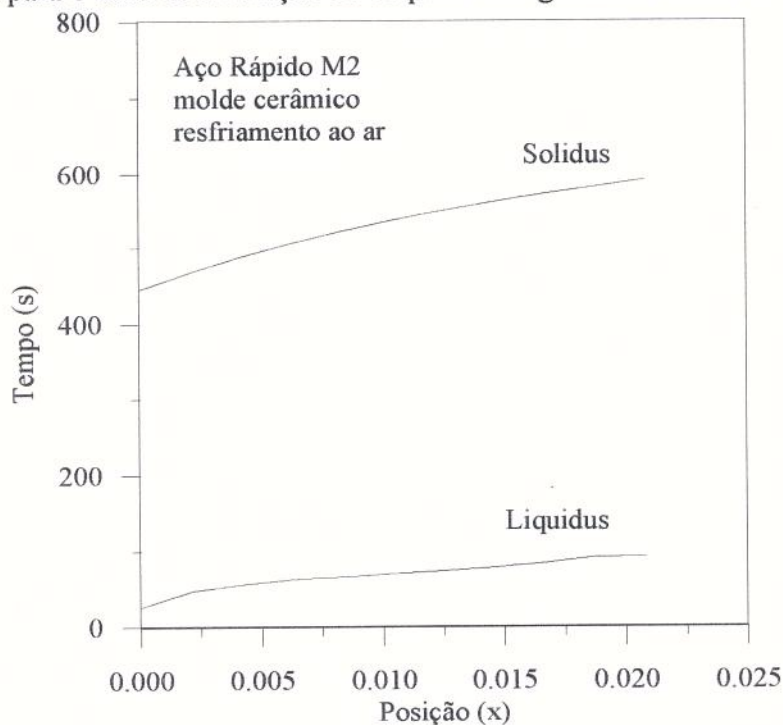


Figura 6.38 - Posição das interfaces *liquidus* e *solidus* para o caso de molde cerâmico resfriando ao ar.

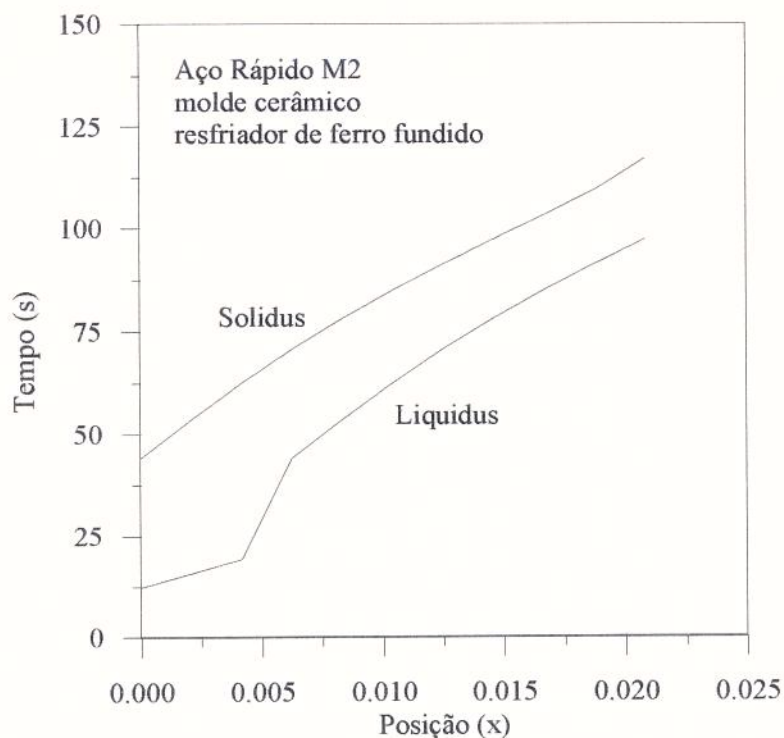


Figura 6.39 - Posição das interfaces *liquidus* e *solidus* para o caso de utilização de resfriador de ferro fundido.

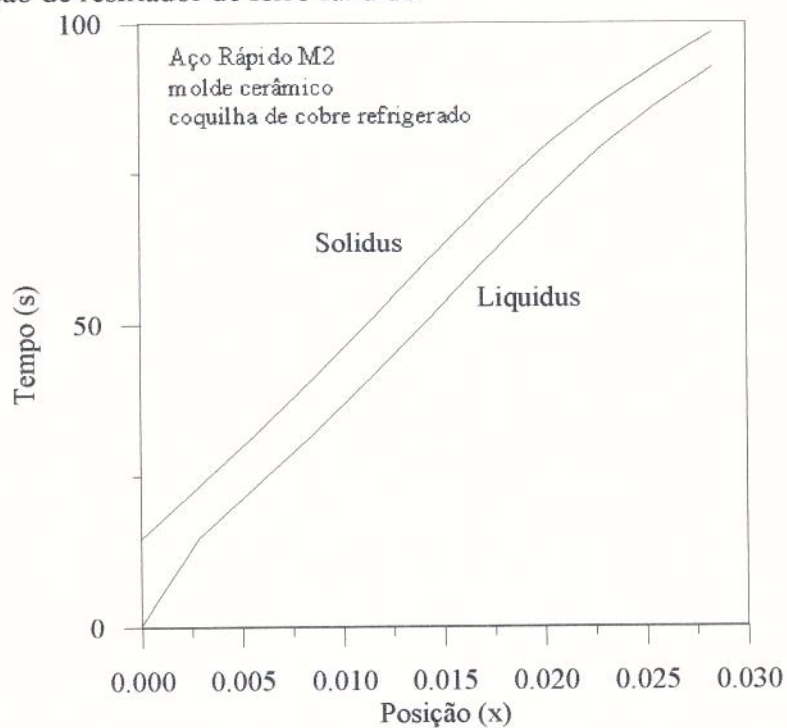


Figura 6.40 - Posição das interfaces *liquidus* e *solidus* para o caso de utilização de coquilha de cobre refrigerada.

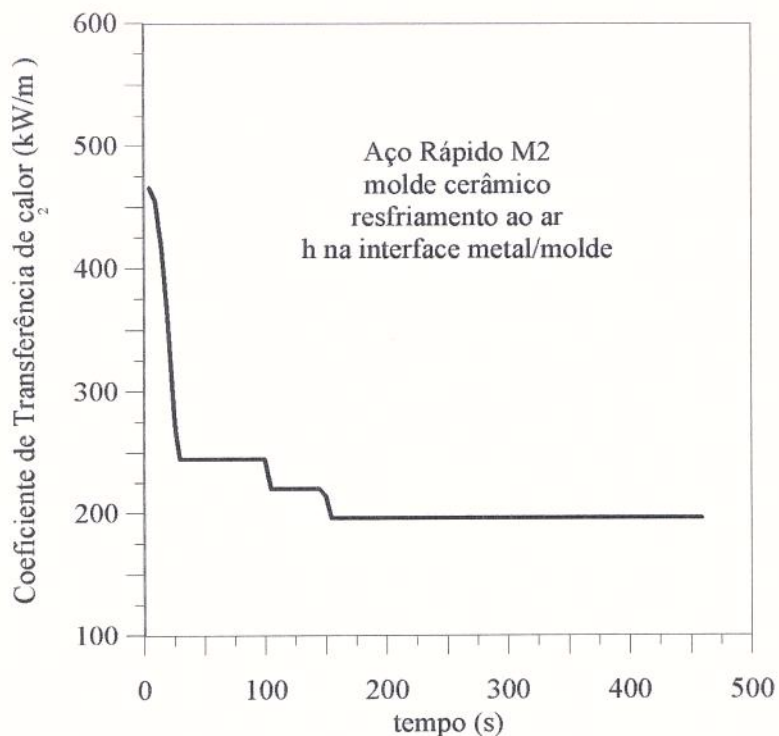


Figura 6.41 -Perfil do coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde para o caso de molde cerâmico resfriando ao ar.

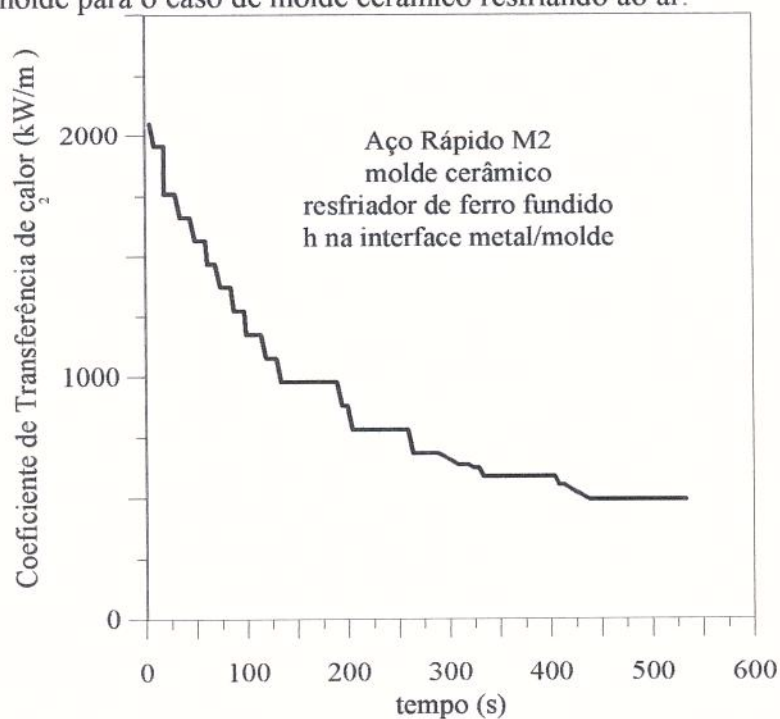


Figura 6.42 -Perfil do coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde para o caso de utilização de resfriador de ferro fundido.

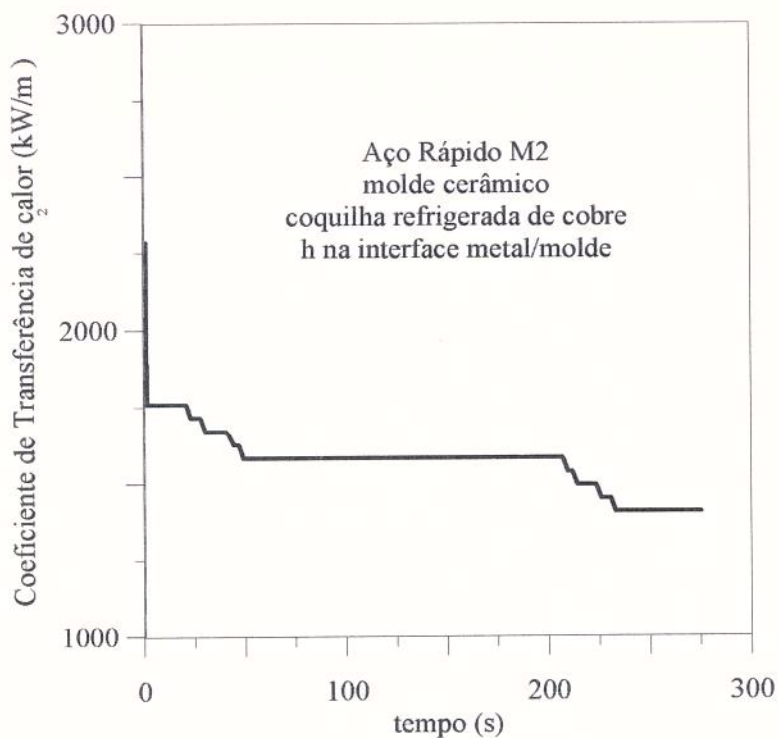


Figura 6.43 -Perfil do coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde para o caso de utilização de coquilha refrigerada de cobre.

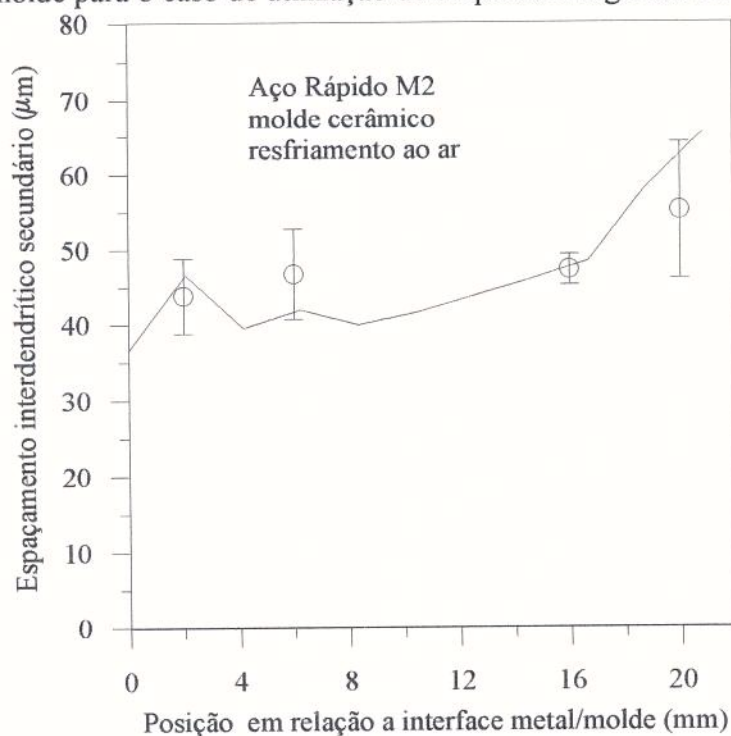


Figura 6.44 - Comparação entre resultados numéricos e experimentais para os espaçamentos interdendríticos secundários para o caso de molde cerâmico resfriando ao ar.

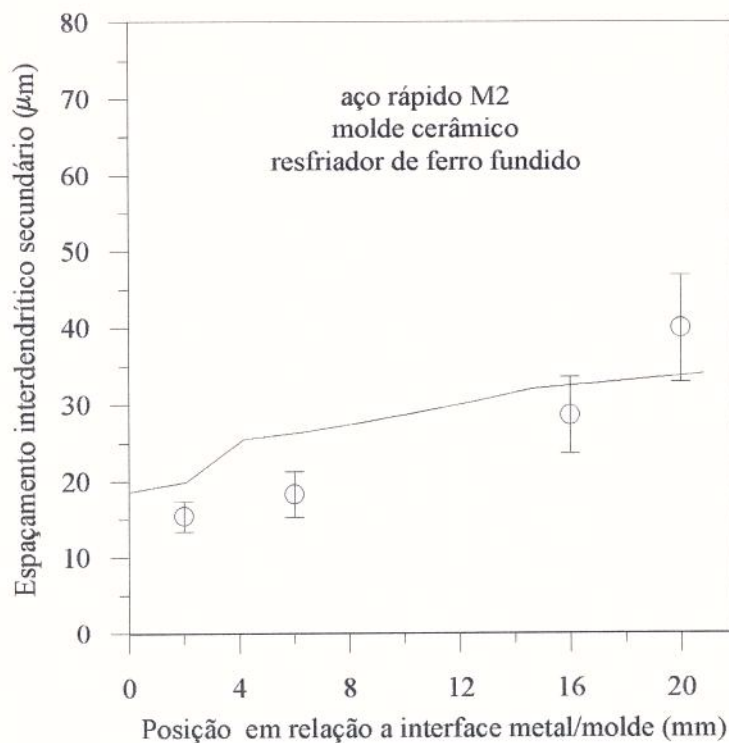


Figura 6.45 -Comparação entre resultados numéricos e experimentais para os espaçamentos interdendríticos secundários para o caso de utilização de resfriador de ferro fundido.

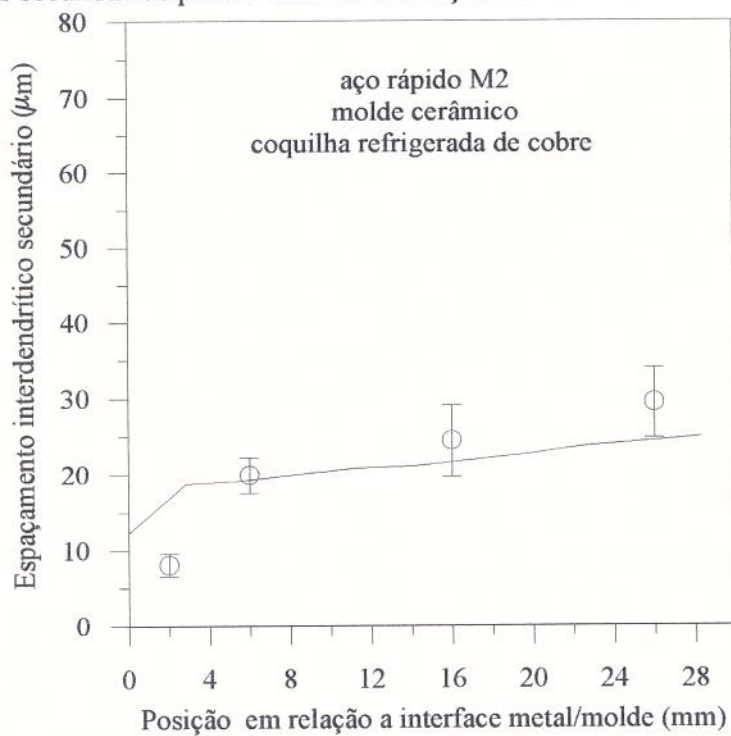


Figura 6.46 -Comparação entre resultados numéricos e experimentais para os espaçamentos interdendríticos secundários para o caso de utilização de coquilha refrigerada de cobre.

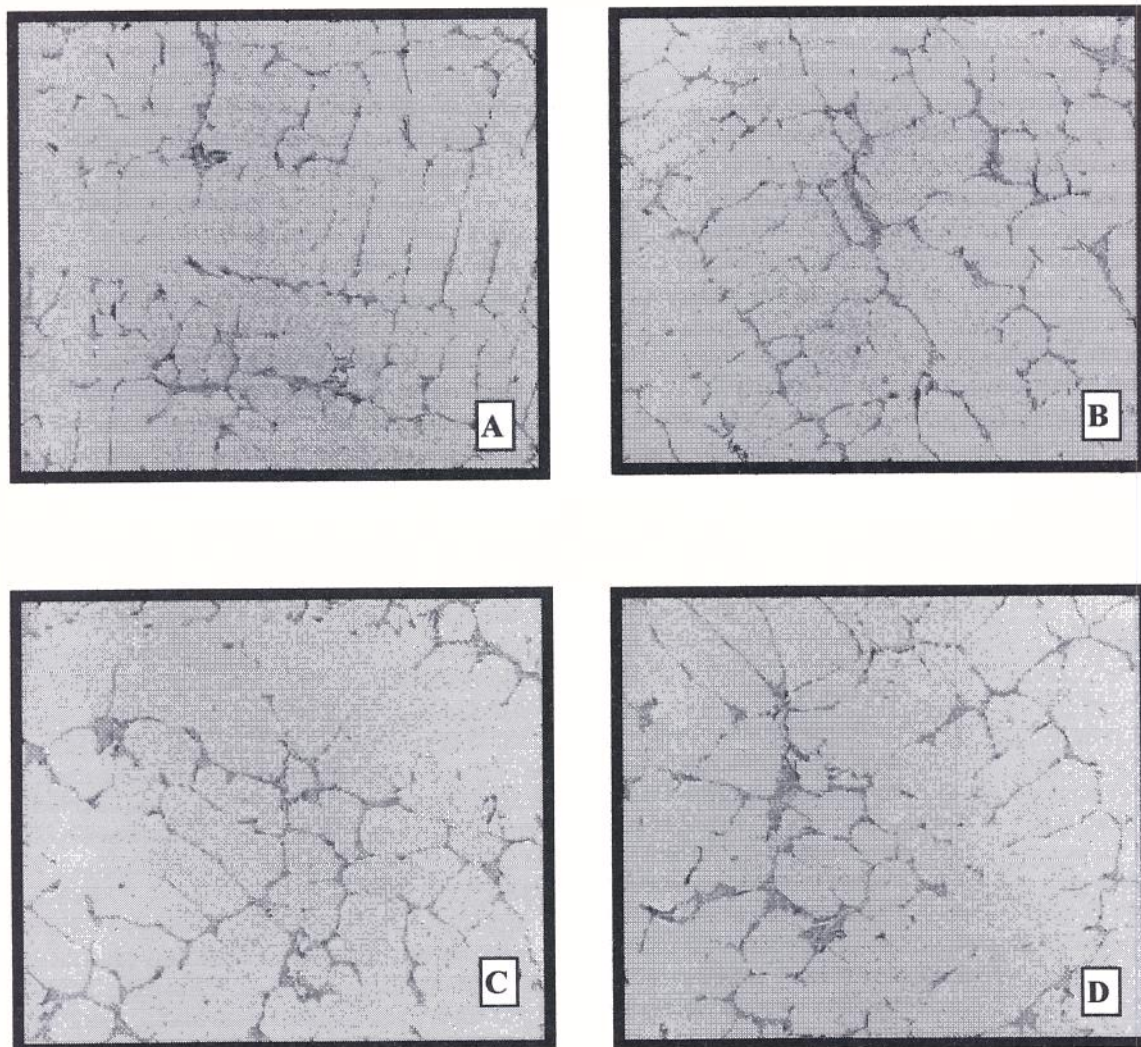


Figura 6.47 - Micrografias da amostra de aço rápido M2 para a condição de molde cerâmico resfriando ao ar. São apresentados 4 campos de medição do espaçamento interdendrítico secundário ( $\lambda_2$ ) : A = 2 mm, B = 6 mm, C = 16 mm, D = 20 mm. (aumento de 86x)

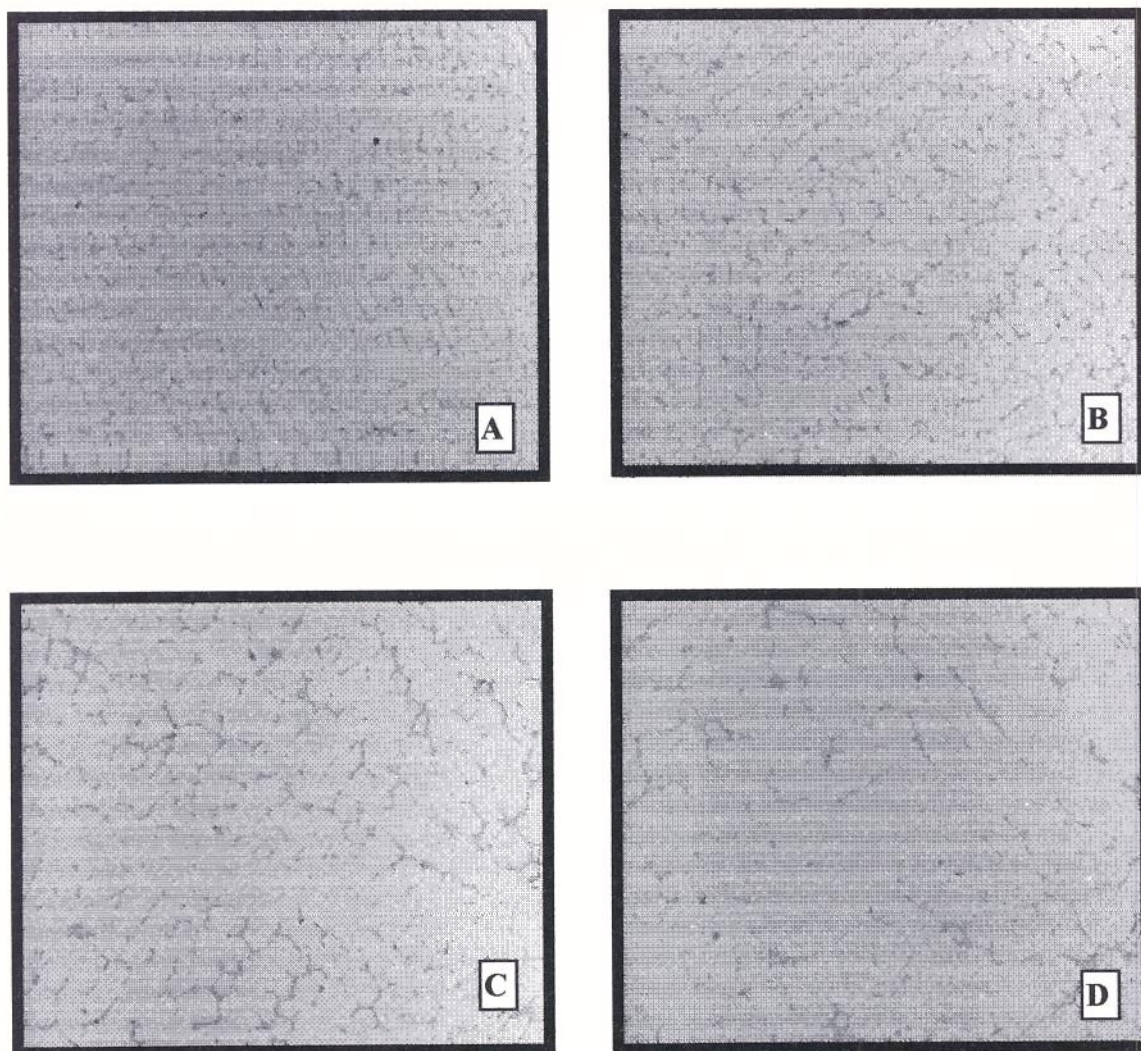


Figura 6.48 - Micrografias da amostra de aço rápido M2 para a condição de utilização de ferro fundido cinzento. São apresentados 4 campos de medição do espaçamento interdendrítico secundário ( $\lambda_2$ ): A = 2 mm, B = 6 mm, C = 16 mm, D = 20 mm. (aumento de 86x)

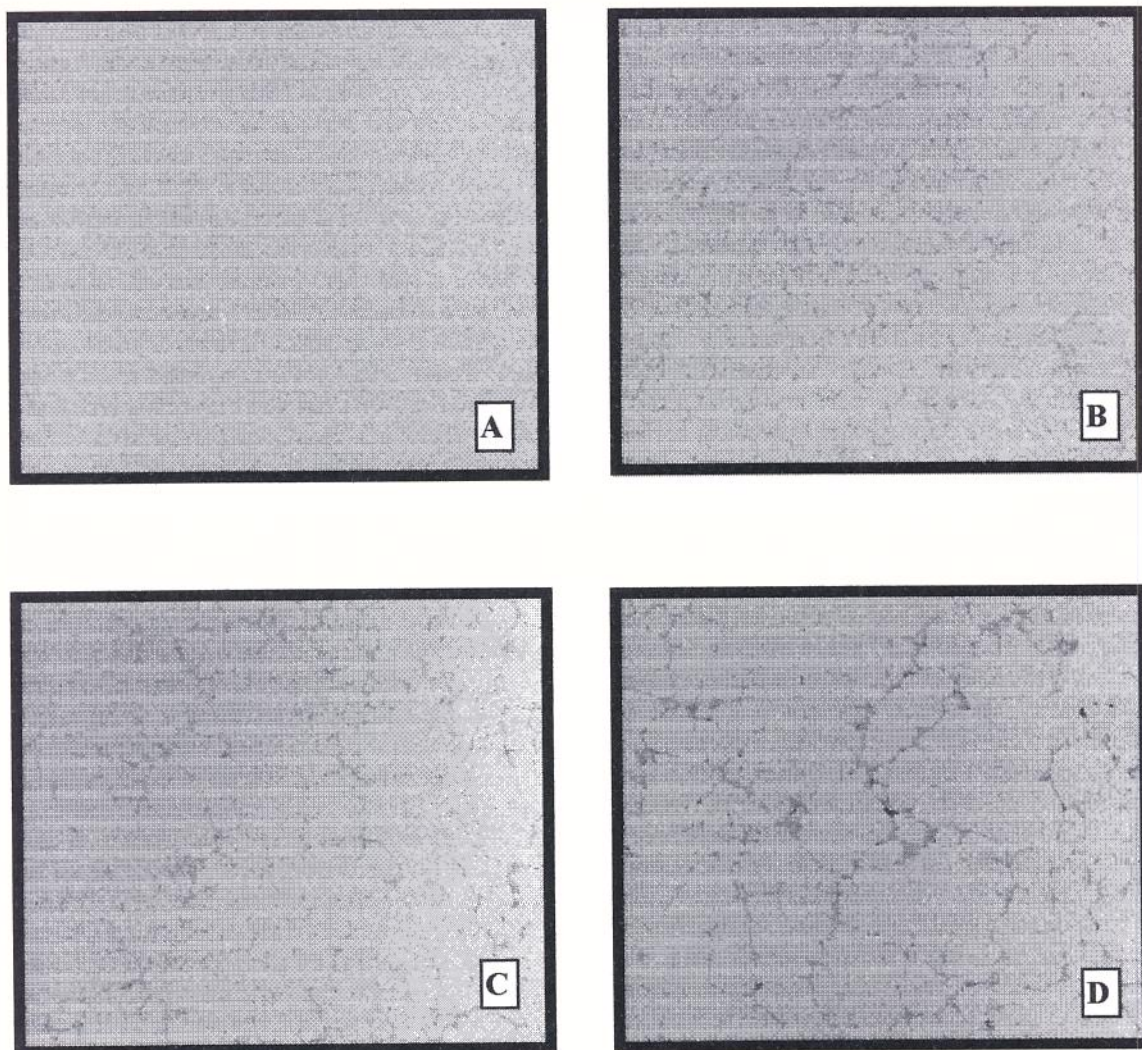


Figura 6.49 - Micrografias da amostra de aço rápido M2 para a condição de utilização coquilha refrigerada de cobre. São apresentados 4 campos de medição do espaçamento interdendrítico secundário ( $\lambda_2$ ): A = 2 mm, B = 6 mm, C = 16 mm, D = 20 mm. (aumento de 86x)



A Figura 6.50 apresenta uma comparação entre os perfis do coeficiente  $h$  determinados pelo método de perfis térmicos numéricos e experimentais para cada condição de resfriamento. Nota-se que os perfis apresentados evidenciam para todos os casos uma queda do inicial do valor de  $h$ , tendendo para valores aproximadamente constantes com o decorrer do processo de solidificação, de forma coerente com o comportamento apresentado na Figura 2.8. Fica também evidenciado na Figura 6.50 a diferença significativa de valores do coeficiente  $h$  para as diferentes condições de resfriamento empregadas.

Na Figura 6.51 tem-se uma comparação das velocidades de resfriamento para a interface líquido/pastoso para cada condição. Observa-se que no caso do molde cerâmico resfriando ao ar, que os resultados de velocidade de resfriamento não variam muito numa região próxima da interface metal/molde (até cerca de 12 mm - Figura 6.32) tendendo a decrescer para distâncias maiores. Com a utilização de resfriador de ferro fundido ou coquilha refrigerada de cobre, observa-se que a velocidade de resfriamento é relativamente alta para as regiões mais próximas da interface, diminuindo drasticamente a seguir e tendendo a um valor aproximadamente constante para regiões mais distantes da interface.

Na Figura 6.52 temos uma comparação entre os resultados de  $\lambda_2$  numéricos e experimentais para as três condições de resfriamento empregadas. Considerando-se todas as limitações de valores de propriedades termofísicas do aço e do molde, cálculo da evolução de fração sólida e o pequeno número de malhas adotado nas simulações realizadas, os resultados obtidos apresentam uma boa concordância. Tais resultados indicam que a equação proposta por Gunji<sup>13</sup> relaciona satisfatoriamente velocidade de resfriamento e espaçamento interdendrítico secundário. Nota-se que existe uma relação inversa entre  $\lambda_2$  e velocidade de resfriamento ( $R$ ).

Na Tabela 6.3 estão relacionados os tipos e morfologias dos carbonetos eutéticos observados em cada campo de medição dos espaçamentos interdendríticos secundários. Apresenta-se também nesta tabela, as respectivas velocidades de resfriamento na interface líquido/pastoso determinadas numericamente. Nas Figuras de 6.53 a 6.55 são apresentadas micrografias típicas de cada morfologia listada na Tabela 6.3.

As morfologias e tipos de carbonetos observados em pontos correspondentes a diferentes velocidades de resfriamento são compatíveis com os resultados obtidos por Fredriksson e Brissing<sup>14</sup>, através de experiências em um forno de solidificação direcional,

utilizando amostras de 1,7 mm de diâmetro, com velocidades de avanço das amostras constantes e iguais a 0,054 , 0,54 e 5,4 cm/min e um gradiente térmico constante para todas as experiências e igual a 100 °C/s. Isto indica a possibilidade de se correlacionar morfologias e tipos de carbonetos com velocidade de resfriamento, mesmo para os casos em que a velocidade de solidificação variável e a peça apresenta maiores dimensões, típicos dos processos de fundição.

Considerando que o modelo numérico desenvolvido permite a previsão da velocidade de resfriamento e a cada velocidade estão associados diferentes tipos e morfologias de carbonetos e valores de espaçamentos interdendríticos secundários, o mesmo pode ser utilizado para a previsão da microestrutura em função das características do molde (material, espessura, temperatura, etc) e das condições das condições da interface metal/molde (diferentes recobrimentos, rugosidade da parede, etc).

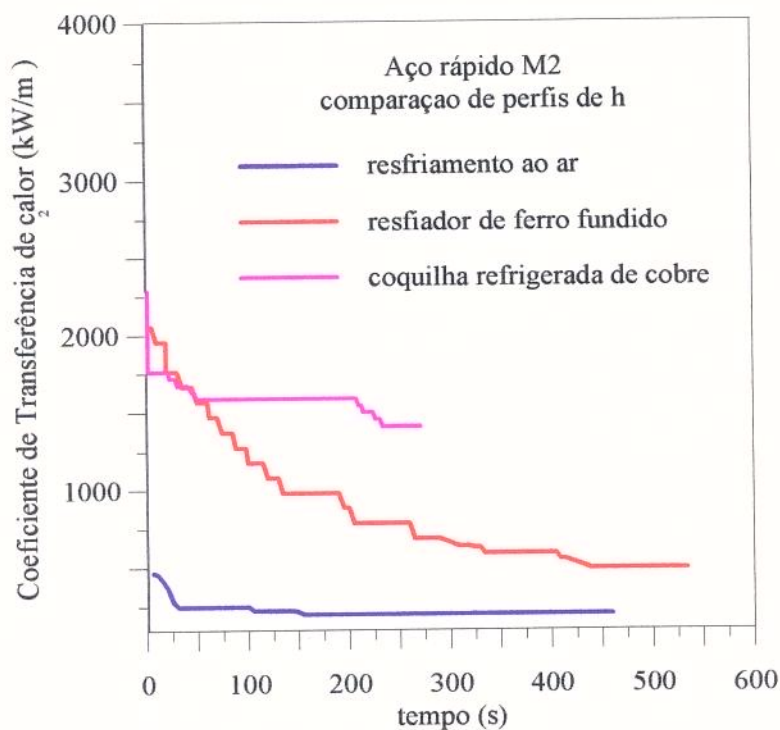


Figura 6.50 - Comparação entre os perfis do coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde para as condições de resfriamento empregadas.

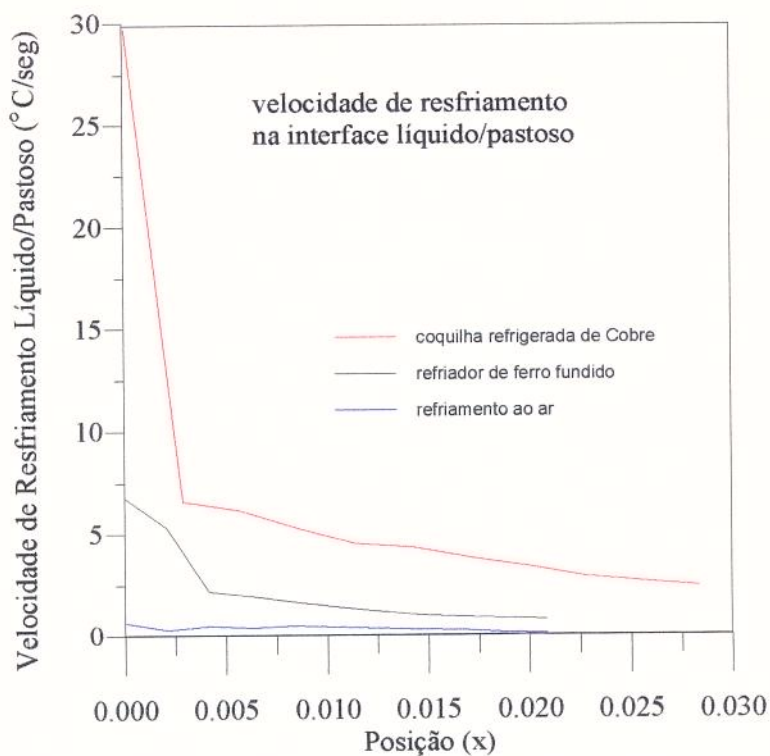


Figura 6.51 - Comparação entre as velocidade de resfriamento na interface líquido/pastoso para cada condição de resfriamento.

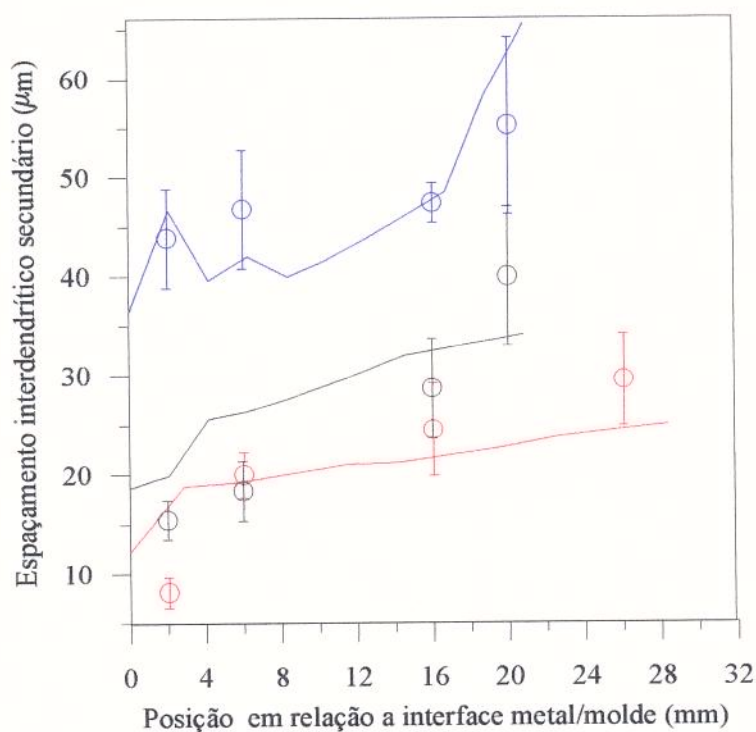


Figura 6.52 - Comparação entre resultados numéricos e experimentais para os espaçamentos interdendríticos secundários para as três condições de resfriamento.

Tabela 6.3 - Tipos e morfologias dos carbonetos eutéticos observados nas posições de análise de  $\lambda_2$  para cada condição de resfriamento empregada.

Distância a Partir da Interface Metal/Molde (mm)	Condição de Resfriamento	Tipo e Morfologia dos Carbonetos Observada	Velocidade de Resfriamento ( $^{\circ}\text{C/s}$ )
2	resfriamento ao ar	$\text{M}_2\text{C}$ leque + MC	0,30
6	resfriamento ao ar	$\text{M}_2\text{C}$ leque + MC	0,40
16	resfriamento ao ar	$\text{M}_2\text{C}$ leque + MC	0,35
25	resfriamento ao ar	$\text{M}_2\text{C}$ leque + MC	-
2	resfriador de ferro fundido	$\text{M}_2\text{C}$ de lamelar para bastonete + MC	5,4
6	resfriador de ferro fundido	$\text{M}_2\text{C}$ de lamelar para bastonete + MC	2,0
16	resfriador de ferro fundido	$\text{M}_2\text{C}$ lamelar + MC	1,0
25	resfriador de ferro fundido	$\text{M}_2\text{C}$ lamelar + $\text{M}_2\text{C}$ leque + MC	-
2	coquilha refrigerada de cobre	$\text{M}_2\text{C}$ de lamelar para bastonete + MC	8,3
6	coquilha refrigerada de cobre	$\text{M}_2\text{C}$ de lamelar para bastonete + MC	6,0
16	coquilha refrigerada de cobre	$\text{M}_2\text{C}$ lamelar + MC	4,2
25	coquilha refrigerada de cobre	$\text{M}_2\text{C}$ lamelar + MC	3,2

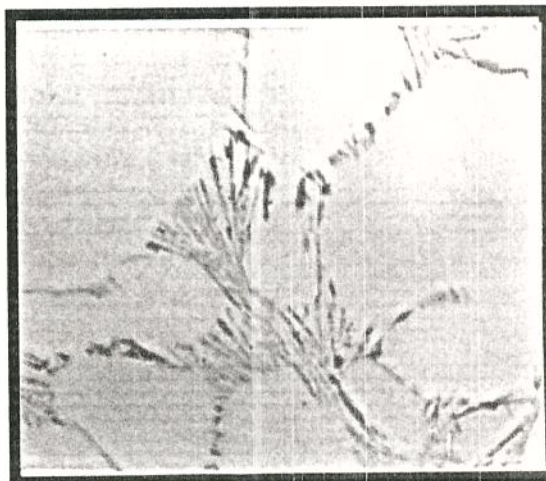
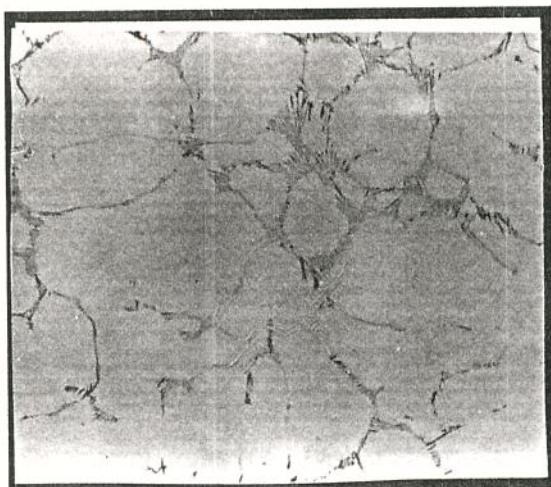


Figura 6.53 - Micrografias da amostra de aço rápido M2 para a posição a 16 mm da interface metal/molde e na condição de utilização resfriamento ao ar. Observa-se a morfologia do tipo leque para o carboneto  $M_2C$  e o carboneto MC na forma de partículas isoladas (mais escuras). (aumento de 86x na foto da esquerda e de 258x na foto da direita)

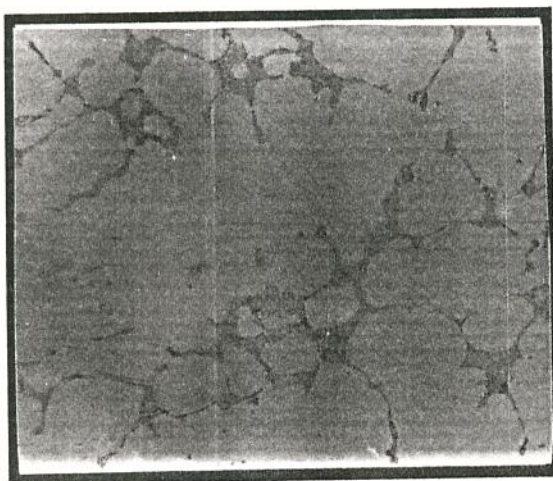


Figura 6.54 - Micrografias da amostra de aço rápido M2 para a posição a 9 mm da interface metal/molde e na condição de utilização resfriador de ferro fundido. Observa-se a morfologia do tipo lamelar para o carboneto  $M_2C$  e o carboneto MC na forma de partículas isoladas (mais escuras). (aumento de 86x na foto da esquerda e de 258x na foto da direita)

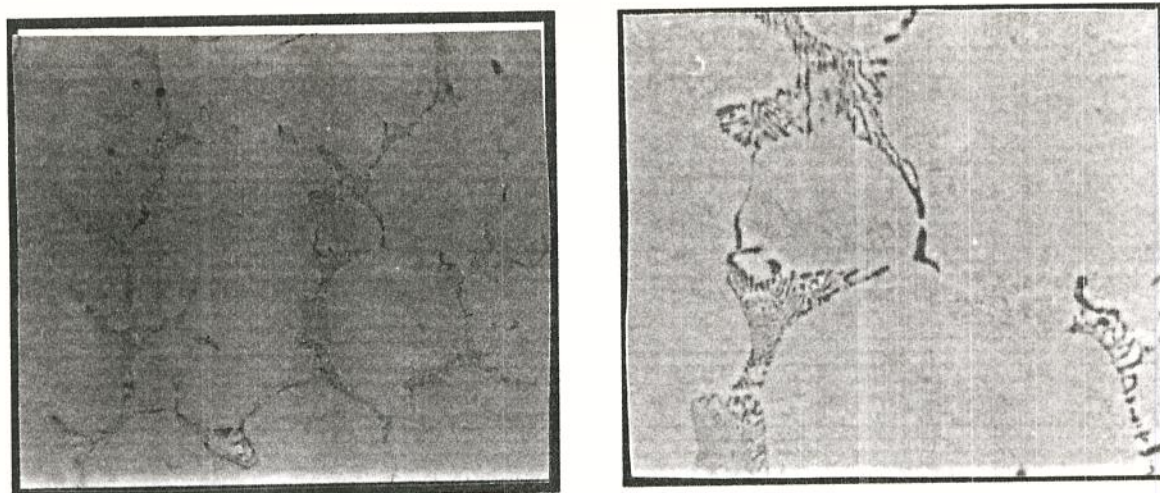


Figura 6.55 - Micrografias da amostra de aço rápido M2 para a posição a 2 mm da interface metal/molde e na condição de utilização coquilha refrigerada de cobre. Observa-se a morfologia do tipo lamelar para bastonete para o carboneto  $M_2C$  e o carboneto MC na forma de partículas isoladas (mais escuras). (aumento de 344x na foto da esquerda e de 1032x na foto da direita)

Analisando os resultados de microestrutura do aço rápido M2 obtidos neste trabalho, para o caso de molde cerâmico resfriando ao ar, que devido a ocorrência de um perfil de velocidade de resfriamento relativamente baixa e uniforme ao longo da peça, o espaçamento interdendrítico secundário e as morfologias e tipos dos carbonetos eutéticos (Figura 6.33 e Tabela 6.3) não variam muito ao longo da peça, o que poderia ser interessante visando determinadas aplicações. No entanto, considerando que os valores de  $\lambda_2$  são relativamente altos e que a morfologia para carboneto  $M_2C$  é do tipo leque, e que a mesma está associada a uma maior fragilidade, esta condição de resfriamento não é a mais adequada para a produção de ferramentas de corte.

Para os casos de utilização de resfriador de ferro fundido e coquilha refrigerada de cobre, verificou-se uma variação nos valores de  $\lambda_2$  ao longo da peça, mas apresentando valores sempre menores do que no caso anterior e um refinamento maior para as regiões próximas à superfície. Quanto à morfologia e tipos de carbonetos, observa-se nas regiões mais próximas da interface metal/molde o MC e o  $M_2C$  na forma de bastonete para lamelar e nas regiões mais distantes o MC e o  $M_2C$  na forma de lamelas. A conjugação destes dois fatores relativos a espaçamentos interdendríticos secundários e morfologia dos carbonetos

observados junto à interface é conveniente sob o ponto de vista da aplicação na fabricação de ferramentas de corte.

Apesar da estrutura apresentar-se um pouco mais refinada no caso da utilização coquilha refrigerada de cobre, do ponto de vista prático a utilização do resfriador de ferro fundido pode ser mais conveniente em função da facilidade de construção e implementação de tais dispositivos, principalmente em se tratando das características do processo de fundição de precisão, ou seja, muitas peças em uma mesma árvore (cacho de peças).

## Referências Bibliográficas do Capítulo 6

- 1-BOCCALINI Jr., M. Aspectos Macro e Microestruturais de Ligas Cu-Zn Binárias Brutas de Fundição. São Paulo, 1989. 108p. Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, USP.
- 2-PEHLKE, R.D.; JAYARAJAN, A.; WADA, H. Summary of Thermal Properties for Casting Alloys and Mold Materials. Univ. of Michigan, Ann Arbor, MTIS-PB83-211003, dez. 1992.
- 3-SAHM, P.R.; HANSEN, P.N. Numerical Simulation and Modeling of Casting and Solidification Process for Foundry and Casthouse. Aachen, Ed. CIATF, 1984.
- 4-BASANT, L.T. Thermodynamic Properties of Aluminum-Base and Cooper-Base Alloys - Metals Handbook - Vol 15 - Casting, 1988, p.56.
- 5-COUTINHO, T.A. Metalografia de Não-Ferrosos - análise e prática, são Paulo, Edgard Blücher, 1980, p.43.
- 6-SMITHELLS, C.J.; BRANDES, E.C. Metals Reference Book 5th Edition, Butterworths, Chichester, 1976, p.597
- 7-MELO, M.L.N.M.; SANTOS, R.G. Simulação da microestrutura de ligas metálicas solidificadas em diferentes geometrias. Anais do 10º CBECIMAT, Águas de Lindóia, 1992.
- 8-Revue de Metallurgie, 1964.
- 9-HUANG, H. et al Thermal conductivity of investment casting ceramics, Cast metals, v.3, 1990, p.23-28.
- 10-PIWONKA, T.S. & JORDAN, C. & BERRY, J.T. Process modeling investment casting: a state of the art asseement, In: Seventh world conference on investment casting, Munich, 1988, p.12.01-12.10.



- 11-CHANDRA, U.; Benchmark problems and testing of a finite element code for solidification in investment castings, International Journal for Numerical Methods in Engineering, v 30, 1990, p.1301-20.
- 12-HAMAR, R.; Numerical simulation in precision castings, International Journal for Numerical Methods in Engineering, v. 24, 1987, p.219-29.
- 13-BOCCALINI Jr., M. Um Estudo Morfológico dos Carbonetos Eutéticos do Aço Rápido AISI M2. São Paulo, 1994. 71 p. Exame de Qualificação (Doutorado). Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, USP.
- 14-GUNJI, K.; KUSAKA, K.; ISHIKAWA, E.; SUDO, K. Solidification Structure of High Speed Tool Steel. Transactions ISIJ, v.14, 1974, p.257-66.
- 15-FREDRIKSSON, H.; BRISING, S. The Formation of Carbides during Solidification of High-speed Steels. Scandinavian J. of Met., v.5, 1976, p. 268-75.

## 7 - CONCLUSÕES

Os resultados obtidos neste trabalho permitem as seguintes conclusões:

- A comparação entre os resultados obtidos com a aplicação do método numérico desenvolvido neste trabalho com resultados experimentais e numéricos apresentados por outros autores, comprova a precisão do mesmo, para análise de processos de solidificação de ligas metálicas.
- O método baseado na comparação de perfis térmicos numéricos e experimentais, mostrou-se adequado para a determinação da variação do coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde ( $h$ ) durante a solidificação.
- A comparação entre os resultados teóricos e os resultados experimentais de variação de temperatura obtidos neste trabalho, mostram que o método numérico desenvolvido é adequado na determinação dos perfis térmicos e parâmetros a eles relacionados para diferentes ligas metálicas.
- A boa concordância entre os espaçamentos interdendríticos secundários medidos e calculados, demonstram que os equacionamentos baseados no tempo local de solidificação, para o caso do latão, e na velocidade de resfriamento, para o caso do aço rápido M2, são adequados.
- As experiências realizadas como o latão 6040 demonstram que o dispositivo desenvolvido para os trabalhos experimentais, permite a solidificação com um fluxo de calor preferencialmente unidirecional.
- A utilização de termopares com proteção com tubos de quartzo pode ser adotada, desde que os mesmos sejam aquecidos previamente, de modo a minimizar o problema de tempo de resposta.
- Para o caso de uma geometria cilíndrica, tanto os resultados obtidos com o modelo numérico quanto os resultados experimentais, comprovam uma inversão no comportamento do espaçamento interdendrítico secundário, que aumenta a partir da superfície metal/molde e decresce na região central.

- No caso específico do aço rápido M2, os resultados confirmaram que a velocidade de resfriamento influencia a morfologia do carboneto eutético do tipo  $M_2C$  formado e nos valores dos espaçamentos interdendríticos secundários.
- A estrutura bruta de fusão do aço rápido M2 (espaçamento interdendrítico secundário e tipo e morfologia dos carbonetos eutéticos) é relativamente uniforme para peças fundidas em moldes cerâmicos resfriados ao ar.
- Do ponto de vista de produção de ferramentas de corte, a utilização de meios que aumentem a velocidade de resfriamento, como a utilização de coquilha refrigerada e de resfriadores metálicos, levam à obtenção de estruturas mais convenientes.
- A utilização de valores confiáveis de propriedades termofísicas dos materiais que constituem o metal e o molde, é condição básica para assegurar a precisão dos resultados de simulações através de métodos numéricos e a não disponibilidade na literatura de tais valores para a maior parte das ligas e materiais de moldes é , ainda, um fator limitante para a aplicação prática mais extensiva dos métodos numéricos.
- O modelo numérico desenvolvido permite a previsão da velocidade de resfriamento e como a cada velocidade estão associados diferentes tipos e morfologias de carbonetos e valores de espaçamentos interdendríticos secundários para o aço rápido M2, o mesmo pode ser utilizado para a previsão da microestrutura em função das características do molde (material, espessura, temperatura, etc) e das condições das condições da interface metal/molde (diferentes recobrimentos, rugosidade da parede, etc), constituindo-se como uma ferramenta interessante na otimização de processos de fundição de precisão deste material e de outros semelhantes.

## APÊNDICE 1 - SIMBOLOGIA

Símbolo	Significado	unidade
$A$	área da seção transversal	$m^2$
$Bi$	número de Biot = $(h\Delta t)/k$	-
$C_0$	concentração inicial	% em peso
$c_c$	calor específico do metal	J/kgK
$C_e$	concentração eutética	% em peso
$C_l$	concentração do líquido	% em peso
$c_m$	calor específico do molde	J/KgK
$C_s$	concentração do sólido	% em peso
$D$	coeficiente de difusão no líquido	$m^2/s$
$\dot{E}$	energia	J
$F_0$	número de Fourier = $(k\Delta t)/\rho c \Delta x^2$	-
$f_l$	fração líquida	-
$f_s$	fração sólida	-
$G$	gradiente de temperatura	$^{\circ}C/m$
$H$	entalpia	$J/m^3$
$h$	coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde	$W/m^2K$
$h_{cm}$	coeficiente de transferência de calor na interface metal/molde	$W/m^2K$
$h_{cme}$	coeficiente de transferência de calor por convecção na interface molde/ambiente	$W/m^2K$
$h_{me}$	coeficiente de transferência de calor interface na molde/ambiente	$W/m^2K$
$h_{rme}$	coeficiente de transferência de calor por radiação na interface molde/ambiente	$W/m^2K$
$H_d$	dureza do sólido mais macio em contato na interface	-
$k$	coeficiente de partição	-
$k_c$	condutibilidade térmica do metal	$W/mK$
$K_g$	condutibilidade térmica do gás presente no <i>gap</i>	$W/mK$
$k_m$	condutibilidade térmica do molde	$W/mK$

$L_f$	calor latente de fusão do metal	$J/m^3$
$m$	massa	kg
$m$	inclinação da linha <i>liquidus</i>	K/ % em peso
$P$	pressão de contato na interface	$N/m^2$
$q$	fluxo de calor	J/s
$\dot{Q}$	fluxo de calor latente	J/s
$R$	velocidade de resfriamento	$^{\circ}C/s$
$r$	raio, posição para o sistema radial	m
$r^*$	raio crítico	m
$S$	posição	m
$S_f$	posição da interface sólido/líquido	m
$S_i$	posição da linha de simetria no metal	m
$t$	tempo	s
$T$	temperatura	$^{\circ}C$
$T_c$	temperatura do metal	$^{\circ}C$
$T_f$	temperatura de fusão do metal	$^{\circ}C$
$T_l$	temperatura <i>liquidus</i>	$^{\circ}C$
$t_{ls}$	tempo local de solidificação	s
$T_m$	temperatura do molde	$^{\circ}C$
$T_s$	temperatura <i>solidus</i>	$^{\circ}C$
$V$	volume	$m^3$
$V$	velocidade de solidificação	m/s
$x$	comprimento, posição para o sistema unidirecional	m
$w$	comprimento de onda da rugosidade	
$\alpha$	difusividade térmica = $k/c\rho$	$m^2/s$
$\propto$	proporcionalidade	-
$\varepsilon$	emissividade	-
$\sigma$	constante de Stefan-Boltzmann = $5,669 \times 10^{-8}$	$W/m^2K^4$
$\Gamma$	coeficiente de Gibbs-Thompson	mK
$\partial$	diferencial parcial	-
$\lambda_1$	espaçamento interdendrítico primário	m
$\lambda_2$	espaçamento interdendrítico secundário	m

$\rho_{cl}$	densidade do metal líquido	$\text{kg/m}^3$
$\rho_{cs}$	densidade do metal sólido	$\text{kg/m}^3$
$\rho_m$	densidade do molde	$\text{kg/m}^3$
$\rho$	densidade	$\text{kg/m}^3$
$\Delta x$	incremento no espaço	m
$\Delta t$	incremento de tempo	s
$\Delta x_g$	espessura do <i>gap</i>	m

### Sub-índices

$c$	metal
$m$	molde
$i$	referente à posição
$l$	referente ao tempo
$l$	líquido
$s$	sólido
$e$	externo

## APÊNDICE 2 - PROPRIEDADES DAS LIGAS

Propriedades	Aço Rápido M2	Al-4,5%Cu	Cu-35%Zn
$C_o$	-	4,5	36,5
$C_e$	-	33,2	37,5
$D$ (m <sup>2</sup> /s)	-	3e-9	1e-8
$\Gamma$ (m <sup>2</sup> K)	-	0,9e-7	1,5e-7
$L_f$ (J/m <sup>3</sup> )	300000	389.315	177.570
$k$	-	0,14	0,86
$m$	-	-3,37	-4,95
$T_e$ (°C)	-	548	902
$T_m$ (°C)	-	660	1085

### APÊNDICE 3 - EQUAÇÃO DE BRODY-FLEMINGS MODIFICADA

Nas etapas de simulação do modelo proposto para a solidificação de ligas metálicas, é necessário a determinação da evolução de fração sólida. Para o caso das ligas: Al-4,5Cu (item 4.6) e do latão 63,5% Cu e 36,5% Zn (segundo grupo de experimentos) foi empregada a equação de Brody-Flemings modificada conhecida também como equação de Clyne-Kurz:

$$f_s = (1 + \alpha_p \cdot k_0) \cdot \left[ 1 - \left( \frac{T_m - T_l}{T_m - T} \right)^{\frac{1}{1-k_0}} \right] \quad (\text{A3.1})$$

onde:

$$\alpha_p = \alpha \cdot \left[ 1 - e^{\frac{1}{\alpha}} \right] \frac{1}{2} \cdot e^{-\frac{1}{\alpha}} \quad (\text{A3.2})$$

$$k_0 = \frac{c_s}{c_l} \quad (\text{A3.3})$$

sendo  $k_0$  conhecido como coeficiente de partição e

$$\alpha = \frac{D_l}{v_s \cdot L} \quad (\text{A3.4})$$

sendo  $D_l$  a difusibilidade no líquido,  $v_s$  a velocidade de avanço da frente de solidificação e  $L$  o comprimento do canal.

Nos cálculos realizados neste texto, assume-se o valor de  $\alpha_p = 1,0$ .