

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA

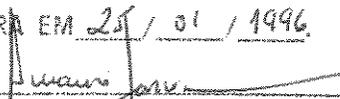
**Aplicação da Modelagem Matemática na
Definição Integral da Solidificação para
Projeto ou Reprogramação de Sistemas de
Fundição**

Autor: **Jaime Alvares Spim Junior**
Orientador: **Amauri Garcia**

01/96

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE A REDAÇÃO FINAL DA
TESE DEFENDIDA POR JAIME ALVARES SPIM JR

E APROVADA PELA
COMISSÃO JULGADORA EM 21 / 01 / 1996.


ORIENTADOR

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL

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

Aplicação da Modelagem Matemática na Definição Integral da Solidificação para Projeto ou Reprogramação de Sistemas de Fundição

Autor: Jaime Alvares Spim Junior
Orientador: Amauri Garcia

Curso: Engenharia Mecânica
Área de Concentração: Engenharia de Materiais

Tese de doutorado apresentada à comissão de Pós Graduação da Faculdade de Engenharia Mecânica, como requisito para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Campinas, 1996
S.P. - Brasil

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

TESE DE DOUTORADO

**Aplicação da Modelagem Matemática na
Definição Integral da Solidificação para
Projeto ou Reprogramação de Sistemas de
Fundição**

Autor: Jaime Alvares Spim Junior

Orientador: Amauri Garcia



Prof. Dr. Amauri Garcia, Presidente

Instituição: Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP - Campinas S.P.



Prof. Dr. Rezende Gomes dos Santos

Instituição: Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP - Campinas S.P.



Profa. Dra. Maria Clara Fillipini Ierardi

Instituição: Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP - Campinas S.P.



Prof. Dr. Claudio Shyinti Kiminami

Instituição: Universidade Federal de São Carlos - UFSCar - São Carlos S.P.



Prof. Dr. Arno Muller

Instituição: Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS - R.S.

Campinas, 25 de janeiro de 1996

Dedicatória:

Dedico todo o esforço deste trabalho aos
meus jovens e amados filhos Marina e João Mario.

Agradecimentos

Este trabalho não poderia ser concluído sem a ajuda de diversas pessoas e entidades às quais presto minha homenagem:

Aos meus pais pelo incentivo em todos os momentos da minha vida;

À FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa de Estado de São Paulo - pela bolsa concedida;

Ao Prof. Amauri Garcia, pela orientação, apoio e amizade ao longo de todo o decorrer deste trabalho;

Ao Eng. Lincoln Freitas Marcos e a FASA - Zinser Industrial S.A. da cidade de Amparo - S.P., pelo apoio técnico prestado ao longo deste trabalho;

Ao Eng. Carlos José Pizzi e a LITEMA - Comércio e Indústria de Ligas Técnicas e Materiais Ltda. da cidade de São Carlos - S.P., pelo apoio técnico prestado ao longo deste trabalho;

Ao amigos José Luiz Lisboa, Claudomiro Alves e Wanderley Aparecido Setto - Técnicos Mecânicos do DEMA e DEF, pelo apoio no desenvolvimento dos experimentos realizados neste trabalho;

Aos amigos João Fidélis Amstalden e Luiz Carlos Vincentin, do DEMA/FEM/UNICAMP pelas colaborações, discussões e conselhos técnicos;

Aos amigos pelo agradável convívio diário e inestimável espírito de solidariedade e companheirismo;

A todos os professores do departamento, que ajudaram de forma direta e indireta na conclusão deste trabalho.

E a todas as pessoas que diretamente ou indiretamente participaram do desenvolvimento deste trabalho.

*A felicidade da vida não esta em se fazer
aquilo que se gosta, mas sim em
gostar daquilo que se faz
(Leonardo da Vinci)*

Sumário

CAPÍTULO 01 - INTRODUÇÃO	14
1.1 Considerações Gerais	14
1.2 Objetivos do Trabalho	16
CAPÍTULO 02 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	19
2.1 Características de Análise de um Sistema Global de Fundição	19
2.1.1 - Interface Molde/Metal:	23
2.1.2 - Formação de Poros:	28
2.1.3 - Mudança de Fase:	33
2.1.3.1. Fração Sólida Versus Temperatura:	35
2.1.3.2. Regra da alavanca:	36
2.1.3.3 Modelo de Scheil [Sheil-1942]:	37
2.1.3.4. Modelo de Brody e Flemings [Brody-1966]:	38
2.1.3.5. Modelo de Clyne e Kurz [Clyne-1981]:	39
2.1.3.6. Modelo de Ohnaka [Ohnaka-1986]:	39
2.2 Microestrutura e Formação de Defeitos	42
2.2.1 - Espaçamento dos Braços Dendríticos (EBD):	42
2.2.2 - Tamanho de Grão (Grãos Equiaxiais):	44

2.2.3 - Microestrutura:	46
2.2.4 - Microsegregação:	50
2.2.5 - Microporosidade:	55
2.2.6 - Fissuras Térmicas:	56
2.2.7 - Mapeamento Morfológico:	57
2.3 Programas Matemáticos de Simulação do Processo de Solidificação	59
CAPÍTULO 03 - O MODELO MATEMÁTICO	62
3.1 Objetivos do Modelo Matemático	62
3.1.1. - A Modelagem de Processos Metalúrgicos:	62
3.1.2. - A Atuação da Modelagem nos Processos Metalúrgicos:	63
3.1.3. - Finalidade dos Modelos Matemáticos:	63
3.2 O Método de Diferenças Finitas Versus o Método de Elementos Finitos	64
3.3 Métodos Numéricos	65
3.3.1 - O Problema da Transferência de calor na solidificação de liga binária:	65
3.3.2 - A Expansão de Taylor para o Método de Diferenças Finitas (MDF):	67
3.3.3 - O Método Implícito das Direções Alternadas (ADI):	71
3.3.4 - O Princípio do ADI [Mampaey-1990]:	72
3.3.5 - Um Exemplo Numérico:	74
3.3.6 - Melhoramentos e Otimizações de Modelo para o Desenvolvimento de Sistemas Tridimensionais:	77
3.3.6.1. Método Implícito das Direções Alternadas:	77
3.3.6.2. Otimização do Método de Diferenças Finitas para o tratamento Unidimensional	79

3.3.6.2.A - Vetorização do sistema tridiagonal:	80
3.3.6.2.B - Solução do sistema vetorizado tridiagonal:	81
i) - Triangularização do sistema:	81
ii) - Solução do sistema triangular superior:	81
3.3.6.3. Aumento de precisão e velocidade ao Método de Diferenças Finitas pelo modelo analógico ao circuito elétrico de resistores e capacitores:	82
3.3.6.3.A Compactação equivalente de pontos da malha nodal:	82
3.3.6.3.B - Expansão equivalente de pontos da malha nodal:	85
3.3.6.3.C - Compactação de pontos na malha nodal para o aumento da velocidade de trabalho em máquina:	86
3.3.6.3.D - Expansão de pontos na malha nodal para o aumento da precisão de modelo:	87
3.4 O Método de Diferenças Finitas Aplicado ao Contorno de Peças de Geometria Complexa	89
3.4.1 - O Tratamento Matemático:	91
3.4.2 - Validação do Acoplamento Entre Malha Grossa e Malha Fina	92
3.5 Resistência de Integração para Sistemas de Contornos Contínuos (Esferas e Cilindros)	97
3.5.1. - Apresentação Numérica:	97
3.5.1.1. Análise Vetorial:	97
3.5.2. - Sistema Cilindrico	99
3.5.2.1. Análise Matemática	99
3.5.2.2. Sistema Experimental:	100
3.5.2.3. Aplicação Prática do Sistema Cilindrico no Método de Diferenças Finitas com a Analogia a Circuitos Elétricos	102
Ensaio 3.1.1	103

Ensaio 3.1.2	105
3.5.3. - Sistema Esférico	107
3.5.3.1. Análise Matemática	107
3.5.3.2. Sistema Experimental	108
3.5.3.3. Aplicação Prática do Sistema Esférico no Método de Diferenças Finitas com a Analogia a Circuitos Elétricos	110
Ensaio 3.2.1	111
Ensaio 3.2.2	113
Ensaio 3.2.3	114
3.6 - Sistemas Complexos - O Acoplamento do Modelo no Método Numérico	115
3.7 Discussão Prática Sobre o Efeito de Erro Numérico nos Modelos Matemáticos	117
3.7.1. - Modo Explícito Versus Modo Implícito	117
3.7.2. - O Modo Misto ou Modo da Média (CRANK-NICHOLSON):	119
3.7.3. - A Utilização do Modo Implícito:	120
3.7.3.1. Sistemas Lineares	120
3.7.3.2. Solução de Sistemas Lineares:	120
Tipo 01) Métodos Diretos:	120
Tipo 02) Métodos Iterativos:	121
3.7.3.3. Condicionamento de um Sistema Linear:	121
3.7.3.4. Velocidade de Solução em Sistemas Lineares:	126

CAPÍTULO 04 - TÉCNICAS PARA ELABORAÇÃO DE PROGRAMAS NUMÉRICOS	129
4.1 Descrições Iniciais	129
4.2 A Engenharia do Projeto de Processo	130
4.2.1. - Formulação do Problema:	130
4.2.2. -Análise do Problema:	132
4.2.3. - Pesquisa:	132
4.2.4. - Decisão:	133
4.2.5. - Especificação da Solução:	134
4.2.6. - Implementação:	134
4.3 Elementos de Trabalho	135
4.4 O Ambiente de Trabalho para o Desenvolvimento de Sistemas	138
4.5 Itens de Especificação de Projeto	139
4.6 Desenvolvimento de Sistema	140
CAPÍTULO 05 - APLICAÇÃO PRÁTICA DO MODELO MATEMÁTICO	142
5.1 Características de Aplicação Prática em Sistemas de Geometria Complexa	142
5.2 O Mapa de Modelo Sobre as Peças de Referência na Aplicação Prática	156
5.2.1 - Ensaio em Laboratório	156
5.2.1.1. Elementos de Ensaio	159
5.2.1.2. Metodologia de Ensaio	161
5.2.1.3. Resultados de Ensaio (Simulação e Experimental)	163
Ensaio A - Material ⇔ Chumbo - Pb	163
Ensaio B - Material ⇔ Liga de Al (7075 - SAE 215)	167

5.2.1.4. Discussão em Respeito a Aferição de Modelo	169
5.2.2 - Ensaio em Peça Industrial (Peça de Referência Número 01)	171
5.2.2.1 Elementos de Ensaio	181
5.2.2.2 Verificação Experimental	182
5.2.2.3 Resultados de Ensaio (Simulação e Experimental)	183
5.2.2.4 Discussão em Respeito a Aferição de Modelo	185
5.2.3 - Ensaio em Peça Industrial (Peça de Referência Número 02)	187
5.2.3.1 Elementos de Ensaio	190
5.2.3.2 Verificação Experimental	193
5.2.3.3 Resultados de Ensaio (Simulação e Experimental)	194
CAPÍTULO 06 - A TÉCNICA PARA A ELABORAÇÃO DE PROJETO QUALIFICADO	197
CAPÍTULO 07 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA PRÓXIMOS TRABALHOS	205
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	207
APÊNDICE 'A' - Relações Dimensionais para o Método de Diferenças Finitas	
APÊNDICE 'B' - Passos para Cálculo da Resistência Elétrica do Forno de Kantal	
APÊNDICE 'C' - Propriedades Termofísicas Utilizadas	
APÊNDICE 'D' - Cálculo da Estimativa Inicial da Espessura Efetiva para os Experimentos com Molde de Areia	
APÊNDICE 'E' - Simbologia Utilizada	

Resumo

SPIM JR., Jaime Alvares, *Aplicação da Modelagem Matemática na Definição Integral da Solidificação para Projeto ou Reprogramação de Sistemas de Fundição*, Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 1996. 241 p. Tese (Doutorado).

Neste trabalho desenvolveu-se um modelo matemático tridimensional que permite a análise integral da solidificação, bem como o respectivo desenvolvimento das ferramentas computacionais referentes às aplicações práticas deste. Aferiu-se o respectivo modelo com resultados experimentais, obtidos nos laboratórios de pesquisa da universidade e em peças de escopo industrial, dentro das quais observou-se resultados satisfatórios com a realidade física dos sistemas estudados. Tais resultados servem como apoio ao desenvolvimento de projetos qualificados dos referidos sistemas bem como permite posteriormente a aplicação do mesmo modelo em peças de qualquer geometria e diferentes tipos de materiais. Posteriormente apresenta-se técnicas para o desenvolvimento de interfaces de programas, dentro das quais expõe-se os princípios fundamentais para elaboração de bons programas de aplicação prática. Os resultados deste trabalho são de importância nos estudos futuros envolvendo técnicas de inteligência artificial, sistemas de controle, aplicações em sistemas de fundição com controle *on-line* via programas de computador e sistemas CAD/CAM.

Palavras Chave

- Modelos Matemáticos, Solidificação, Controle de Processo Industrial, Fundição

Abstract

SPIM JR., Jaime Alvares, *The Application of Mathematical Modeling in the Integral Definition of Solidification for Projects or Remodeling of Foundry Systems*. Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 1996. 241 p. Tese (Doutorado).

In this work a three dimensional mathematical model was developed which permits the integral analysis of the solidification process, as well as the necessary computer tools for practical applications. The model predictions were compared to experimental results obtained in the university laboratories, as well as in foundry industries and a good agreement was observed. Such results enable future applications of the developed model in qualified projects of foundry systems, and in the analysis of solidification of complex shapes and different materials. Finally some techniques which permits optimizations in the development of computer programs are discussed. The results obtained in this work are important for future research activities involving artificial intelligence techniques, control systems, applications of on line control in foundry systems, CAD/CAM, etc.

Key Words

Mathematical Model, Solidification, Industry Control Process, Foundry

Lista de Figuras

Capítulo 1

Figura 1.1 - Fluxo representativo para a aplicação de modelos numéricos na solidificação; Auxílio de projeto e/ou reprogramação de Sistemas de Fundição

Capítulo 2

Figura 2.1 - Tipos de Análises Avaliadas para Modelos de Processos de Solidificação e seus Benefícios [Overfelt-1992]

Figura 2.2 - Esboço do primeiro tipo de experimento de Ho e Pehlke [Ho-1985]

Figura 2.3 - Esboço do segundo tipo de experimento de Ho e Pehlke [Ho-1985]

Figura 2.4 - Resultados para o experimento de referência A [Ho-1985]

Figura 2.5 - Resultados para o experimento de referência B [Ho-1985]

Figura 2.6 - Resultados para o experimento de referência C [Ho-1985]

Figura 2.7 - Resultados para o experimento de referência D [Ho-1985]

Figura 2.8 - Geometria para o fluxo de calor utilizado por Ho e Pehlke para análise da sensibilidade ao tempo local de solidificação

Figura 2.9 - Sensibilidade do tempo de solidificação como função do coeficiente de transferência de calor [Ho-1985]

Figura 2.10 - Equipamento para deslocamento da contração metálica no interior do molde cilíndrico [Nishida-1986]

Figura 2.11 - Coeficiente de transferência de calor comparado com o deslocamento do molde e do metal para a liga Al-13.2%Si em molde cilíndrico [Nishida - 1986]

- Figura 2.12** - Coeficiente de transferência de calor comparado com o deslocamento do molde e do metal para o Al-Puro em molde cilíndrico [Nishida - 1986]
- Figura 2.13** - Representação esquemática dos possíveis mecanismos de alimentação da porosidade [Kubo-1985B]
- Figura 2.14** - Processo de Crescimento da Formação de Porosidade, idealizado por Kubo e Pehlke [Kubo-1985B]
- Figura 2.15** - Posição do líquido para diferentes tempos, no enchimento do molde [Hamar-1987]
- Figura 2.16** - Temperaturas no enchimento do molde para simulação no programa RENE 77, em diferentes fluxos [Hamar-1987]
- Figura 2.17** - Representação esquemática da mudança de estrutura para diferentes taxas de resfriamento [Song - 1990]
- Figura 2.18** - (A) Medida do EBD primário para uma superliga a base de Níquel como função do tempo local de solidificação. (B) Micrografia mostrando as dendritas [Yu-1992A].
- Figura 2.19** - (A) Medida do EBD secundário para uma superliga a base de níquel como função do tempo local de solidificação. (B) Micrografia mostrando os braços dendríticos secundários [Yu-1992A].
- Figura 2.20** - EBD primário para a solidificação direcional de três superligas a base de níquel [McLean-1983]
- Figura 2.21** - Mapeamento da microestrutura e EBD primários para superliga a base de níquel [McLean-1983]
- Figura 2.22** - Mapeamento da microestrutura e EBD secundário para superliga a base de níquel [Bouse-1989]
- Figura 2.23** - Representação física do coeficiente de segregação em ligas binárias
- Figura 2.24** - Esquema ilustrativo da nucleação de poro entre os braços dendríticos:
(A) - Nucleação do poro, (B) - Crescimento do poro, (C) - Destacamento do poro para os braços dendríticos.

Figura 2.25 - Esquema para vários mecanismos de crescimento ocorrendo em uma liga dendrítica com distribuição de temperatura não uniforme [Rappaz - 1993]

Figura 2.26 - Mapeamento Morfológico para a previsão de defeitos como função do raio ' $G.R$ ', no lingotamento de monocristais [Yu-1992]

Figura 2.27 - Condições limites do efeito de transferência de temperatura do sistema térmico para o ambiente

Capítulo 3

Figura 3.1 - Representação Esquemática do MDF Aplicado ao Fenômeno de Transferência de Calor

Figura 3.2 - Individualização das distâncias Finitas para os Elementos Nodais do MDF

Figura 3.3 - Representação esquemática para a solução do ADI

Figura 3.4 - Sistema para o exemplo numérico do ADI

Figura 3.5 - Representação física para a solução do ADI - Otimizado

Figura 3.6 - Mapeamento nodal unidimensional para o M.D.F. analógico a circuitos elétricos

Figura 3.7 - Compactação de pontos nodais formando um nó equivalente

Figura 3.8 - Ponto da malha nodal, sujeito a expansão

Figura 3.9 - Expansão nodal equivalente

Figura 3.10 - Modelo mapeado do M.D.F.

Figura 3.11 - Mapeamento do M.D.F. após a compactação nodal

Figura 3.12 - Mapeamento nodal pelo M.D.F. convencional de superfície limite

Figura 3.13 - Expansão nodal com a elevação da precisão relativa do modelo

Figura 3.14 - (A) Corpo físico mapeado pelo M.D.F.; (B) Erro numérico apresentado nos contornos irregulares

Figura 3.15 - (A) M.D.F. Convencional; (B) M.D.F. Modificado

- Figura 3.16** - Representação de Malha Nodal com Acoplamento entre Malha Fina e Malha Grossa
- Figura 3.17** - Ponto de acoplamento entre malha fina e malha grossa
- Figura 3.18** - Sistema de fundição utilizado nos ensaios de modelo
- Figura 3.19** - (A) M.D.F. Convencional; (B) Refinamento em dois pontos nos elementos de borda; (C) Refinamento em três pontos nos elementos de borda.
- Figura 3.20** - Endereçamento dos pontos de malha reduzida para o sistema 02 e 03
- Figura 3.21** - Evolução térmica do ponto $(i,j) = (1,1)$ com os pontos equivalentes do sistema 2
- Figura 3.22** - Evolução térmica do ponto $(i,j) = (1,1)$ com os pontos equivalentes do sistema 3
- Figura 3.23** - Comparação da evolução térmica no ponto $(i,j) = (2,2)$ dos sistemas 01, 02 e 03
- Figura 3.24** - Sistema de coordenadas espaciais
- Figura 3.25** - Elemento Diferencial Cilíndrico
- Figura 3.26** - Partição de Diferenças Finitas para Elemento de Volume Cilíndrico
- Figura 3.27** - Sistema Elétrico Resistor + Capacitor
- Figura 3.28** - Disco Circular Utilizado no Modelo Numérico
- Figura 3.29** - Mapeamento do Disco Circular no M.D.F. análogo a Circuitos Elétricos
- Figura 3.30** - Evolução da Temperatura ao longo do Raio [Ref. Ensaio 3.1.1]
- Figura 3.31** - Evolução da Casca Sólida no Disco Cilíndrico [Ref. Ensaio 3.1.1]
- Figura 3.32** - Evolução da Temperatura de Superfície no Disco Cilíndrico [Ref. Ensaio 3.1.1]
- Figura 3.33** - Perfil Térmico no Interior do Disco Cilíndrico [Ref. Ensaio 3.1.2]
- Figura 3.34** - Temperatura de Superfície para Variação do Coeficiente de Calor [Ref. Ensaio 3.1.1]
- Figura 3.35** - Evolução da Casca Sólida na Variação do Coeficiente de Calor [Ref. Ensaio 3.1.1]
- Figura 3.36** - Elemento Diferencial Esférico

- Figura 3.37** - Partição de Diferenças Finitas para Elemento de Volume Esférico
- Figura 3.38** - Calota Esférica Utilizada no Modelo Numérico
- Figura 3.39** - Evolução Térmica em Pontos Localizados no Raio da Esfera [Ref. Ensaio 3.2.1]
- Figura 3.40** - Evolução das Isotermas no Interior da Esfera [Ref. Ensaio 3.2.1]
- Figura 3.41** - Perfil Térmico ao Longo do Raio da Esfera [Ref. Ensaio 3.2.1]
- Figura 3.42** - Evolução de Casca Sólida na Esfera para Variação do Coeficiente de Retirada de Calor [Ref. Ensaio 3.2.2]
- Figura 3.43** - Evolução Térmica da Superfície na Variação do Coeficiente de Calor [Ref. Ensaio 3.2.2]
- Figura 3.44** - Evolução da Temperatura de Superfície / Sistema Cilíndrico [Ref. Ensaio 3.2.3]
- Figura 3.45** - Evolução da Casca Sólida / Sistema Cilíndrico [Ref. Ensaio 3.2.3]
- Figura 3.46** - Corpo físico a ser mapeado pelo M.D.F.
- Figura 3.47** - Refino de Malha no Contorno Vazado
- Figura 3.48** - Mapa de Modelo para a Corpo Cilíndrico
- Figura 3.49** - Mapa de Modelo para a Calota Esférica
- Figura 3.50** - Relação entre os Modos de trabalho do Método de Diferenças Finitas
- Figura 3.51** - Erro Numérico apresentado para altos valores de " Δt "
- Figura 3.52** - Condicionamento do Sistema Linear gerado pelo M.D.F. em função da variação do refinamento de malha - Sistema Unidimensional
- Figura 3.53** - Comparação da velocidade de trabalho para os métodos convencionais de solução de sistemas numéricos lineares
- Figura 3.54** - Comparação da velocidade de trabalho entre o método de transformação LU e o método da eliminação de Gauss, otimizado para a solução do M.D.F. unidimensional

Capítulo 4

Figura 4.1 - Procedimento Geral para a Análise de um Problema em Engenharia

Figura 4.2 - Método da "caixa preta" para análise de problemas

Figura 4.3 - Representação de um sistema de solidificação

Figura 4.4 - Partições funcionais do bloco do processo de solidificação

Figura 4.5 - Representação iterativa para o desenvolvimento do projeto global de análise

Figura 4.6 - Representação da possibilidade de atualização de sistemas desenvolvidos

Figura 4.7 - Sistema Proposto como Parte do Ambiente de Trabalho

Figura 4.8 - Etapas para a elaboração e fechamento do programa de trabalho

Capítulo 5

Figura 5.1 - Elementos da rede nodal dispostos ao redor de orifício (ou ressalto) vazado
-Sem Efeito de Escala-

Figura 5.2 - Relação dos eixos de quadrantes para orifício (ou ressalto) de vazado

Figura 5.3 - Mapa do M.D.F. para o conjunto de orifícios (ou ressaltos) dispostos simetricamente *-Sem Efeito de Escala-*

Figura 5.4 - Redução em 2ª Escala para a condição de orifício (ou ressalto) vazado sobre base plana *-Sem Efeito de Escala-*

Figura 5.5 - Mapa para a situação de orifício (ou ressalto) vazado em base circular
- Sem Efeito de Escala -

Figura 5.6 - Mapa do M.D.F. para orifício (ou ressalto) em base circular
-Sem Efeito de Escala-

Figura 5.7 - Figura geométrica para solução de mapa da Figura 5.6.

- Figura 5.8** - Mapa de modelo sobre canto circular concêntrica orifício (ou ressalto) vazado
-Sem Efeito de Escala-
- Figura 5.9** - Erro sobre a borda da peça de referencia nas regiões triangulares
-Sem Efeito de Escala-
- Figura 5.10** - Figura geométrica para solução de mapa da Figura 5.9
- Figura 5.11** - Figura geométrica para solução de mapa da Figura 5.9
- Figura 5.12.A** - Mapa geométrico para o M.D.F. aplicado a região de interface de uma base curva com reta *-Sem Efeito de Escala-*
- Figura 5.12.B** - Aproximação numérica para o tratamento de interface de curva com reta, conforme a Figura 5.12.A
- Figura 5.13** - Representação Física do Sistema Molde/Metal
- Figura 5.14** - Sistema Metálico com a disposição da malha do Método de Diferenças Finitas
- Figura 5.15** - Malha Passiva (Capacitores + Resistores) da região cilíndrica da peça
- Figura 5.16** - Malha Passiva (Capacitores + Resistores) da região esférica da peça
- Figura 5.17** - Sistema de Fundição Experimental para Aferição do Modelo Numérico
- Figura 5.18** - Disposição dos termopares de medida do sistema de aferição para laboratório
- Figura 5.19** - Foto que detalha o molde de aço, a resistência de aquecimento e o cabo de Kantal utilizado para enrolar a resistência
- Figura 5.20** - Curva dos valores da condutividade térmica da massa LDS versus temperatura de trabalho [Ref.: Manual do Fabricante]
- Figura 5.21** - Foto que detalha os termopares utilizados no experimento de laboratório
- Figura 5.22** - Registrador Programável para seis canais e o indicador de temperatura digital
- Figura 5.23** - Aparato experimental para aferição do modelo numérico
- Figura 5.24** - Equipamento experimental utilizado em laboratório para aferição do modelo Numérico

- Figura 5.25** - Comparação entre o sistema experimental para molde cilíndrico/esférico e o modelo proposto (Pontos 01 e 02)
- Figura 5.26** - Comparação entre o sistema experimental para molde cilíndrico/esférico e o modelo proposto (Pontos 03 e 04)
- Figura 5.27** - Evolução da Isotherma Solidus no Interior do Molde [Simulação]
- Figura 5.28** - Comparação entre a evolução de pontos localizados de captura, no sistema experimental (Ref. a Fig. 5.18) e no modelo proposto
- Figura 5.29** - Varredura em aferição para o sistema experimental do molde cilíndrico/esférico para a solidificação do chumbo
- Figura 5.30** - Varredura em aferição para o sistema experimental do molde cilíndrico/esférico para a solidificação da liga de alumínio (7075 - SAE 215)
- Figura 5.31A** - Vista Frontal ⇔ Projeto Peça Usinada
- Figura 5.31B** - Vista Frontal ⇔ Projeto Fundição
- Figura 5.32A** - Vista Superior ⇔ Projeto Peça Usinada
- Figura 5.32B** - Vista Superior ⇔ Projeto Fundição
- Figura 5.33A** - Vista Lateral ⇔ Projeto Peça Usinada
- Figura 5.33B** - Vista Lateral ⇔ Projeto Fundição
- Figura 5.34A** - Corte A-A da Figura 5.33A ⇔ Projeto Peça Usinada
- Figura 5.34B** - Corte A-A da Figura 5.33A ⇔ Projeto Fundição
- Figura 5.35** - Vistas Tridimensionais da Peça de Referência fornecida pela LITEMA - Comércio e Indústria de Ligas Técnicas e Materiais Ltda.
- Figura 5.36** - Pontos de monitorização térmica aplicado a peça de referência fornecida pela LITEMA - Comércio e Indústria de Ligas Técnicas e Materiais Ltda.
- Figura 5.37** - Termopares "Tipo R" utilizados nos experimentos industriais
- Figura 5.38** - Disposição física dos termopares após o fechamento do molde

- Figura 5.39** - Detalhe do momento de vazamento do metal líquido no molde
LITEMA - Comércio e Indústria de Ligas Técnicas e Materiais Ltda.
- Figura 5.40** - Mapa de modelo aplicado à peça de referencia fornecida pela LITEMA -
Comércio e Indústria de Ligas Técnicas e Materiais Ltda.
- Figura 5.41** - Comparação das curvas experimental e modelo do resfriamento da superfície do
metal
- Figura 5.42** - Varredura em aferição para o sistema experimental da peça de referencia
fornecida pela LITEMA - Comércio e Indústria de Ligas Técnicas e Materiais
Ltda.
- Figura 5.43** - Foto representativa do perfil lateral da peça de referência fornecida pela
FASA-Zinser Industrial S.A.
- Figura 5.44** - Foto representativa da lateral da peça de referência, com o ponto respectivo de
localização de um termopar (Tp.01), fornecida pela FASA-Zinser Industrial
S.A.
- Figura 5.45** - Foto representativa da lateral da peça de referência, com o ponto respectivo de
localização de um termopar (Tp. 02), fornecida pela FASA-Zinser Industrial
S.A.
- Figura 5.46** - Foto representativa da lateral da peça de referência, com dois pontos respectivos
de localizações de termopares (Tp. 3 e Tp. 4), fornecida pela FASA-Zinser
Industrial S.A.
- Figura 5.47** - Foto representativa de lateral da peça de referência fornecida pela
FASA-Zinser Industrial S.A.
- Figura 5.48** - Foto representativa do centro interno da peça de referência fornecida pela
FASA-Zinser Industrial S.A.
- Figura 5.49** - Disposição interna do molde com e a indicação da localização dos termopares
- Figura 5.50** - Detalhe que destaca a posição do termopar de número 01
- Figura 5.51** - Detalhe que destaca a posição do termopar de número 03
- Figura 5.52** - Detalhe do lacramento do molde -FASA-Zinser Industrial S.A.
- Figura 5.53** - Vazamento do metal líquido para o enchimento do molde

Figura 5.54 - Disposição dos elementos de registro utilizados no ensaio

Figura 5.55 - Mapa de modelo aplicado a região setorial do termopar número 01 (Ver Ref. Fig. 5.44), na peça de referência fornecida pela FASA-Zinser Industrial S.A.

Figura 5.56 - Esboço representativo da parede que recebe o termopar número 04, referência fornecida pela FASA-Zinser Industrial S.A.

Figura 5.57 - Mapa de modelo aplicado a região setorial do termopar número 05, na peça de referência fornecida pela FASA-Zinser Industrial S.A.

Figura 5.58 - Comparação experimental e teórica para os pontos de monitorização (Trp. 01 e Trp 04), da peça de referência fornecida pela Fasa-Zinser Industrial S.A.

Capítulo 6

Figura 6.1 - Sistema Molde de Fundição

Figura 6.2 - Esquema de uma hélice de Aço Inox, perdida devido ao defeitos de mau enchimento de molde

Figura 6.3 - Eixo com falhas superficiais - Não pode ser usinado, a peça é perdida.

Figura 6.4 - Processo de captura de bolhas internas e superficiais dentro do processo de solidificação

Figura 6.5 - Processo de arraste das bolhas internas e superficiais no processo de solidificação

Figura 6.6 - Fluxograma Interativo para a Elaboração de Projeto Qualificado de um Sistema de Fundição

Lista de Tabelas

Capítulo 2

Tabela 2.1 - Lista dos ensaios realizados por Ho e Pehlke [Ho-1985]

Tabela 2.2- Coeficientes de Segregação para alguns sistema do campo industrial [Battle-1992]

Capítulo 3

Tabela 3.1 - Ensaio de Simulação para a Geometria de Disco Circular

Tabela 3.2 - Ensaio de Simulação para a Geometria de Calota Esférica

Tabela 3.3 - Relação de Peso de Cálculo para Operadores Matemáticos

Capítulo 5

Tabela 5.1 - Propriedades Físicas Típicas da Massa 'LDS'

Capítulo 1

Introdução

1.1 Considerações Gerais

A análise numérica da solidificação de metais e ligas, tem nos dias atuais um papel de importância fundamental, principalmente quando se trata de controlar ou melhorar a produção em termos de qualidade e redução de custos. Muitos modelos matemáticos voltados para a análise da transferência de calor nos processos de Lingotamento e Fundição tem sido documentados e utilizados nos últimos anos. Contudo, relativamente muito pouco destes modelos tem se preocupado com sua efetiva implementação em sistemas de computador, analisando paralelamente a eficiência do modelo na descrição global do sistema físico em conjunto com sua utilização prática em uma máquina, com relação à velocidade de processamento, tempo real de geração de dados e alocação compacta de memória. A necessária observação destes fatores no desenvolvimento de um modelo numérico, representam a sua praticidade de utilização e a maleabilidade dos recursos aplicados. A descrição global da solidificação, em termos numéricos, faz-se necessária visando o acoplamento direto com modelos desenvolvidos, permitindo assim responder as questões primordiais de influência na qualidade dos produtos gerados, além da produtividade e redução dos custos de processo.

No trabalho da atual indústria metalúrgica, principalmente as de pequeno porte e em particular a indústria nacional, a produtividade vale-se apenas da experiência obtida ao longo de sua vida industrial, onde mesmo com as perdas consideráveis, intrínsecas a estas indústrias, a demanda da produção garante a sobrevivência das mesmas. Entretanto com o avanço da tecnologia, a exigência da correta especificação das propriedades físicas e mecânicas dos materiais envolvidos nos diversos setores da engenharia, acarreta a necessidade de um acompanhamento mais sofisticado empregado no processamento destes materiais. A cinética da nucleação e crescimento de grãos, a estrutura formada e todo o efeito morfológico envolvido no processo de solidificação deve ser conhecido, visando o projeto ou a eventual

reprogramação dos atuais sistemas metalúrgicos utilizados. O acompanhamento técnico da formação da microestrutura no processamento destes materiais não pode se valer apenas da experiência empírica, o que conduziria ao colapso a médio prazo das metalúrgicas que assim se comportarem, tendo em vista a tendência de elevada competitividade internacional e a rápida introdução de novas tecnologias.

A condição de um mercado cada vez mais competitivo impõe às indústrias concorrentes a tendência ao isolamento técnico, não sendo possível e nem saudável o compartilhamento de tecnologias ou experiências produtivas. É sob esta perspectiva que se desfavorecem as indústrias de pequeno e médio porte, pois sendo estas restritas em termos de orçamento, ficam impossibilitadas de adquirir novas tecnologias produtivas. As universidades e os centros de pesquisas são extremamente importantes neste contexto, já que podem possibilitar a esta categoria de indústrias o acesso ao avanço tecnológico necessário para que se mantenham competitivas no mercado. Esforços científicos vem sendo desenvolvidos por muitos estudiosos da área, ao redor de todo o mundo, empregando tecnologias de custo minimizado e principalmente acessível a este tipo de indústria. Grande parte destes esforços consiste basicamente no desenvolvimento e aplicação de modelos e métodos numéricos.

A formação de poros durante a solidificação, o cálculo de contração, a distribuição homogênea da microestrutura e finalmente toda a cinética envolvida no processo de solidificação representam alguns dos fatores técnicos desvendados pela utilização dos métodos numéricos aplicados aos sistemas metalúrgicos. A implementação destes modelos em equipamentos de computador, gerando sistemas de controle e simuladores tem sido largamente empregados, apresentando em seus resultados a otimização dos custos de produção com a maximização da qualidade final dos produtos. Por outro lado, apesar da necessidade do conhecimento em múltiplas áreas de trabalho para o desenvolvimento de modelos de solidificação que sejam otimizados e qualificados, vê-se no mercado, e em particular nos produtos importados, empresas que expõem em propaganda a garantia de bons resultados em pacotes numéricos que direcionem a elaboração de projeto qualificados de sistemas de fundição. No entanto estas mesmas empresas não mostram de forma clara, o projeto de seus pacotes numéricos, bem como não apresentam ao cliente o corpo técnico que desenvolveu estes pacotes. Cabe então, as empresas que compreendem a exigência do mercado para a melhoria da qualidade, e que buscam nestes tipos de pacote a solução de seus problemas, a confiança em seus representantes. Muitas vezes, levadas pelos resultados dos pacotes e com custo elevado, algumas empresas remodelam seus sistemas de trabalho e não obtêm a melhoria de qualidade esperada. Isto se deve à inexperiência e falta de um grupo técnico interno, com a competência mínima necessária na manipulação adequada destes pacotes e acabam em geral subutilizando os equipamentos e os sistemas consumidos em seus projetos.

O presente trabalho discute de forma abrangente todos os problemas levantados anteriormente, apresentando ao leitor um raciocínio técnico sobre o desenvolvimento destes tipos de pacotes. Tomando como partida a análise integral da solidificação via os modelos matemáticos de simulação, e passando para uma discussão prática sobre o efeito do erro numérico nestes modelos, ressaltando neste ponto a dificuldade e a importância da precisão no desenvolvimento deste tipo de pacote numérico. Na seqüência expõem-se as técnicas para o projeto e o gerenciamento do desenvolvimento de programas qualificados, bem como o conhecimento sobre a efetiva utilização destes e seus limites de aplicação, seguido das técnicas de aferição utilizadas para a determinação da confiabilidade dos programas gerados.

A análise final sobre o projeto qualificado de um sistema de solidificação, a aplicação destes pacotes na indústria e a solução de problemas, faz-se de forma prática, envolvendo a utilização de sistemas reais em linha de produção, referentes a empresas de fundição de porte médio e pequeno.

1.2. Objetivos do Trabalho

Dentro de um plano de metas mais amplo, que objetiva desenvolvimento de ferramentas matemáticas aplicativas a processos industriais que envolvem o fenômeno da solidificação, pretendeu-se neste projeto ampliar o espectro de análise destas ferramentas a situações industriais complexas sob o ponto de vista dos sistemas de fundição. Para isto estabeleceu-se etapas seqüenciais de trabalho, alcançadas através da cronologia descrita conforme segue:

- ① Revisão crítica e atualizada da literatura no que diz respeito aos modelos e técnicas numéricas empregadas no desenvolvimento de ferramentas de simulação para o conhecimento da física envolvida no processo de solidificação;
- ② Definição de um sistema de fundição, como modelo de referência, e que possa caracterizar toda a complexidade sob ponto de vista do comportamento térmico na solidificação de um caso real/industrial;
- ③ Desenvolvimento de um modelo numérico tridimensional de diferenças finitas, com base em uma analogia elétrica proposta e testada com sucesso dentro de um anterior programa de mestrado, para situações unidimensionais e bidimensionais;
- ④ Identificação de Industriais Nacionais de fundição, de pequeno porte, cujas peças e sistemas de produção pudessem atuar na ancoragem do projeto, dando sustentação prática ao trabalho. Neste sentido, serão identificadas peças em

produção que serão acompanhadas em seus aspectos produtivos, e levantados os problemas de natureza da qualidade através de ensaios físicos. Estes dados servirão para verificar as situações do modelo e propor realimentações ao sistema produtivo;

- ⑤ Verificação da confiabilidade dos modelos experimentais, na indústria e nos laboratórios da universidade, após o que será ampliado seu espectro de atuação permitindo a definição integral da solidificação pelo mapeamento do campo térmico, sugerindo a formação da estrutura solidificada e a localização de defeitos;
- ⑥ Realização de simulações com o modelo de solidificação com o objetivo de propor otimizações na sequência de produção industrial, inclusive identificação de pontos de sensoriamento do processo produtivo e aspectos de controle do processo, objetivando a reprodutibilidade dos resultados;
- ⑦ Desenvolvimento de variações menos complexas do modelo que, embora com prejuízos na precisão, possa dar suporte às indústrias de pequeno porte, na simulação global do processo ou no redirecionamento do processo produtivo, utilizando-se para isto computadores de pequeno porte de flexível utilização.

A Figura 1.1 ilustra as etapas desenvolvidas no projeto proposto.

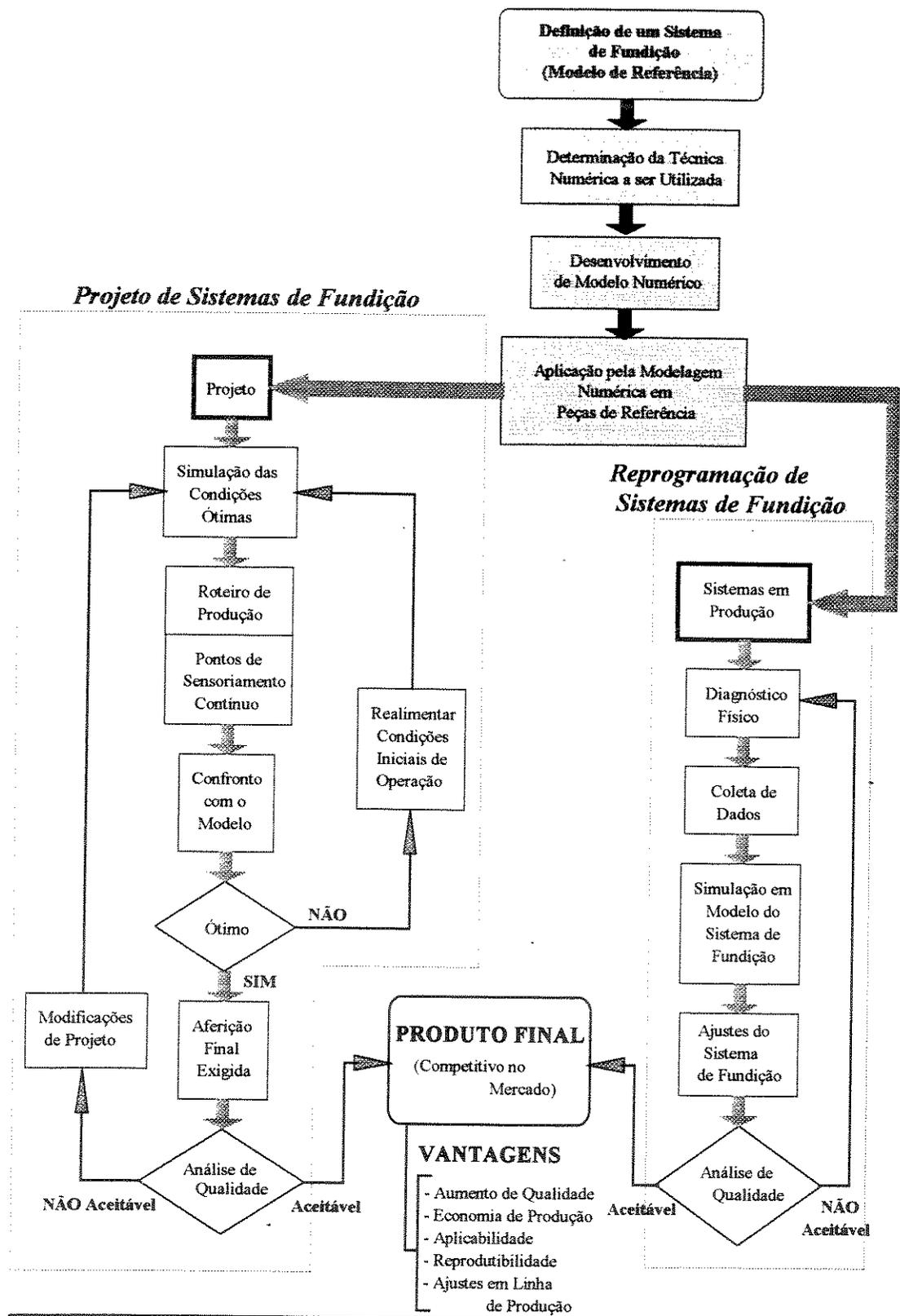


Figura 1.1 - Fluxo representativo para a aplicação de modelos numéricos de solidificação. Auxílio de projeto e/ou reprogramação de sistemas de fundição.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 Características de Análise de um Sistema Global de Fundição

A utilização de computadores nos processos metalúrgicos data de 1940, através da utilização de máquinas analógicas para avaliação do processo. No entanto, antes de 1960, a aplicação de computadores na indústria de fundição era muito rara. A implementação gradativa dos computadores neste tipo de indústria surgiu devido a necessidade de melhoria de qualidade dos produtos manufaturados, exigindo análises complexas em relação aos diversos parâmetros envolvidos nos sistemas globais de fundição. Transientes térmicos, mudanças de fase, crescimento de microestrutura, contração do metal na interface molde/metal e efeitos do transporte de calor e de massa, são alguns dos principais fatores que envolvem todo um complexo de fundição. Tais parâmetros, hoje estudados por diversos autores, objetivam a compreensão física do processo, via uma análise matemática possível de ser implementada em programas computacionais que venham solucionar de forma rápida e eficiente, as melhores condições de trabalho para um determinado sistema de fundição, gerando assim um determinado produto de características ótimas para sua aplicação. A Figura 2.1 [Overfelt-1992] é uma representação esquemática dos tipos fundamentais de análise, requeridos para a descrição completa de um processo de fundição.

O levantamento de todas as características envolvidas em um sistema de solidificação, desde a preparação da liga ou material utilizado até a sua eventual desmoldagem, deve ser minuciosamente acompanhado por uma base teórica, voltada aos principais problemas de efeito final do produto gerado. A quantidade de impurezas indesejáveis na preparação das ligas utilizadas deve ser acompanhada, podendo estas gerar imperfeições superficiais ou em casos mais críticos, núcleos de microtrincas que podem levar a peça à ruptura, se esta estiver sujeita a solicitações de esforços mecânicos cíclicos. O superaquecimento imposto ao metal líquido antes do vazamento é de importância clara, já que temperaturas de vazamento muito próximas a temperatura de solidificação podem gerar defeitos devido ao preenchimento incompleto do molde, uma vez que a queda de temperatura tende a elevar a viscosidade do

metal líquido, e temperaturas de vazamento muito elevadas podem levar a uma solidificação muito lenta, gerando grãos muito grandes, elevando a ductilidade do material, ou conduzindo a um crescimento dendrítico alongado causando um acúmulo excessivo no volume das bolhas internas aos braços dendríticos.

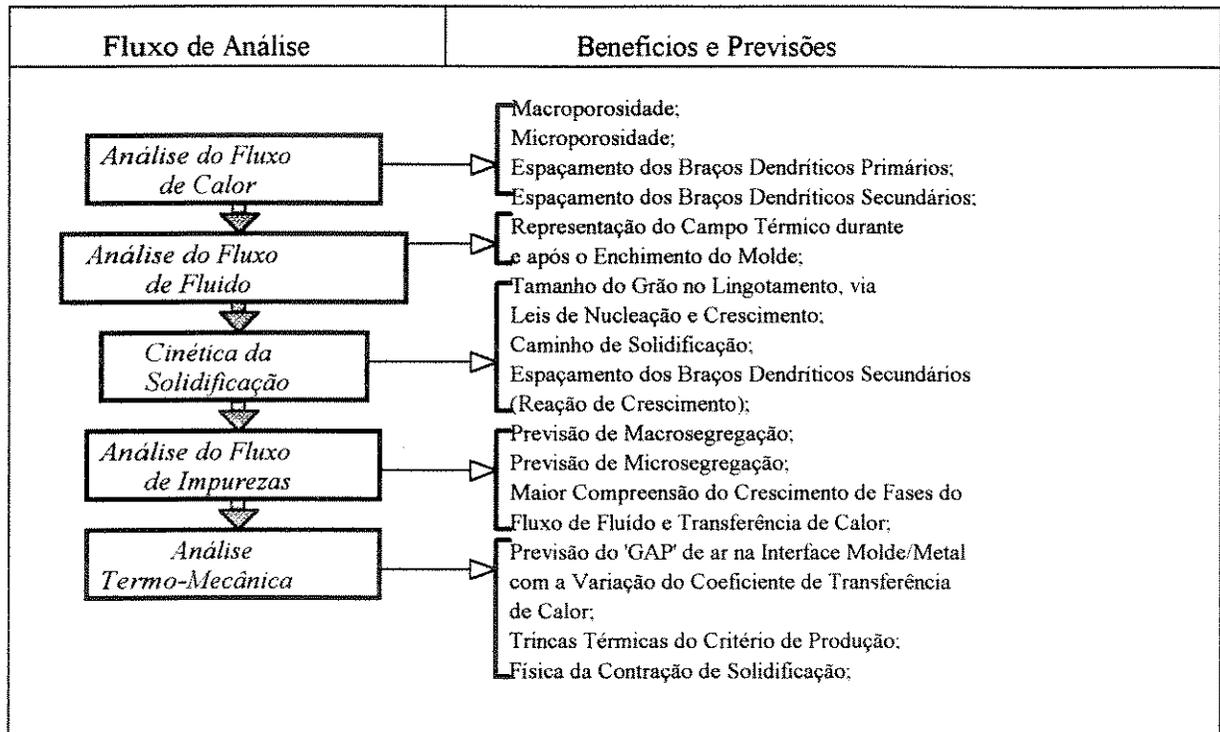


Figura 2.1 - Tipos de Análises Avaliadas para Modelos de Processos de Solidificação e seus Benefícios [Overfelt-1992]

A estrutura física do molde, material utilizado na sua confecção, características de lubrificante e pré-aquecimento antes do vazamento são fatores de importância na análise do processo de transferência de calor na interface metal/molde. Este conhecimento pode evitar imperfeições superficiais nas peças produzidas, bem como toda a análise em relação ao processo de solidificação e o acompanhamento dos fenômenos de transferência de calor nesta interface deve ser realizada visando o conhecimento da microestrutura formada nesta região da peça.

As contrações inerentes ao material durante o processo de solidificação devem ser calculadas em projeto dimensional evitando falhas na peça após a desmoldagem final. Todo o efeito da cinética de solidificação em relação ao desenvolvimento da nucleação, crescimento de grão e microestrutura formada é relacionado com a velocidade de solidificação e os gradientes térmicos envolvidos, podendo ser diretamente examinado por intermédio de modelos de solidificação.

O efeito de rejeição de soluto sobre a previsão da macro e microsegregação é observado em função da análise do fluxo de espécies, onde modelos numéricos permitam não apenas a simulação do efeito de transporte de calor, mas em fator principal o efeito do transporte de massa sob o envolvimento das movimentações térmicas internas ao material. Contudo, um modelo matemático para ser prático deve observar o respeito às leis de desenvolvimento de fases, devendo este acompanhar a morfologia da interface sólido/líquido para materiais de composição simples e das interfaces sólido/intermediário/líquido para a composição de ligas binárias complexas. Todo o conhecimento sobre a formação de defeitos, segregação de soluto e desenvolvimento microestrutural são de importância fundamental para se desenvolver um modelo aplicado. A desmoldagem final também deve ser acompanhada por efeitos de modelo, uma vez que a retirada prematura do molde pode expor à peça a gradientes térmicos elevados, podendo gerar assim situações de empenamento em regiões finas da peça.

Finalmente, o conhecimento e levantamento da análise termo-mecânica, visando as características finais da peça, devem ser avaliadas sobre as previsões micro e macroestruturais do modelo, resultando eventualmente em aumento de qualidade do produto acabado.

Dentro de um escopo integral do sistema de solidificação, pode-se levantar como situações de importância os seguintes efeitos:

A) Efeitos de Ordem Macroestrutural

- Interface Metal/Molde;
- Formação de Poros;
- Mudança de Fase;
- Contração de Solidificação e Rechupe;
- Formação de Bolhas ou Aumento da Viscosidade com a Queda da Temperatura e Retenção de Bolhas Internas;
- Enchimento Completo de Molde;
- Porosidade Central e/ou Localizada em Peças de Geometria Complexa;
- Convecção na Mudança de Fase;
- Propriedades Térmicas do Molde e do Lubrificante;
- Defeitos Macroestruturais sob a Influência de Impurezas de Liga;

- Arraste de Escória;
- Influência do Superaquecimento no Metal Líquido.

B) Efeitos de Ordem Microestrutural

- Tamanho de Grão;
- Microporosidade;
- Morfologia Dendrítica;
- Homogeneização das Propriedades da Liga ao Longo da Peça;
- Redistribuição Homogênea de Solutos;
- Defeitos de Ordem Microestrutural causados sob a Influência de Impurezas;
- Dependência das Propriedades Físicas com a Temperatura;
- Variação do Coeficiente de Microsegregação;
- Efeitos Relacionados à Região Intermediária ou Zona Pastosa em Ligas Binárias;
- Influência do Superaquecimento na Microestrutura da Peça.

Tais efeitos constituem de forma integrada os principais problemas associados à solidificação de ligas metálicas. Na literatura especializada encontram-se narrativas técnicas abordando cada um dos itens expostos anteriormente, mapeando os efeitos físicos sobre formulações matemáticas que representem um conhecimento global de análise. O plano final consiste em conduzir toda esta análise da solidificação ao desenvolvimento de algoritmos e programas numéricos que caracterizem simulações dentro de representações adequadas aos sistemas físicos do processo de fundição. É importante destacar que a interação entre os efeitos isolados podem ocorrer de forma conjugada, gerando ao longo de um processo situações de mapeamento crítico e de complexa solução numérica. Contudo uma análise coerente sobre os diversos fatores envolvidos acoplado ao conhecimento técnico da liga de trabalho utilizada, deve resultar em sistemas de equações numéricas facilmente solúveis por um computador digital, levando a resultados de simulação que venham ser utilizados como base de uma pré-implementação física do sistema de fundição, reduzindo custos de projeto e eventualmente elevando a qualidade do produto acabado.

2.1.1 - Interface Molde/Metal:

Um importante fenômeno a ser analisado em um sistema de fundição, objetivando sua modelagem e eventual controle, é o processo de transferência de calor na interface molde/metal. Ho e Pehlke [Ho-1985], desenvolvem em seu trabalho uma análise geral do comportamento da transferência de calor na interface do molde com o metal ao longo da dinâmica de solidificação. Na primeira parte deste trabalho observam a formação do 'gap' gerado entre o molde e o metal sob a influência do efeito gravitacional, onde utilizam dois sistemas de fundição, sendo o primeiro com uma chapa fria de cobre colocada no topo de um molde cilíndrico e, o segundo com a chapa fria colocada na base do molde. Utilizam-se de técnicas de transdutores de deslocamento, onde mostram a dependência do 'gap' como função do tempo local de solidificação e a variação do coeficiente de transferência de calor na interface. Os experimentos utilizados por Ho e Pehlke são apresentados nas Figuras 2.2 e 2.3 respectivamente. Aplicam como metal de fundição Alumínio puro e uma liga de cobre com 5% de Alumínio, onde comparam quatro combinações experimentais conforme apresentados pela Tabela 2.1.

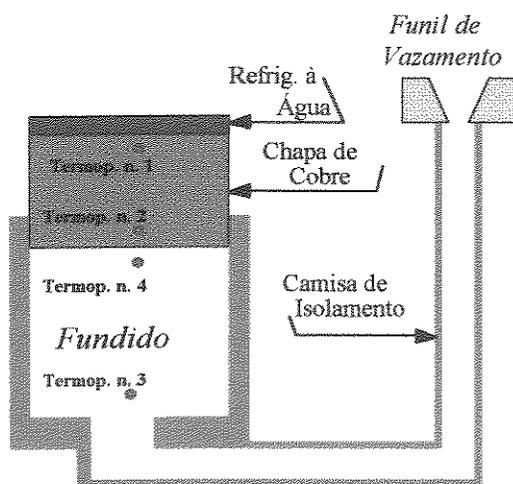


Figura 2.2 - Esboço do primeiro tipo de experimento de Ho e Pehlke [Ho-1985]

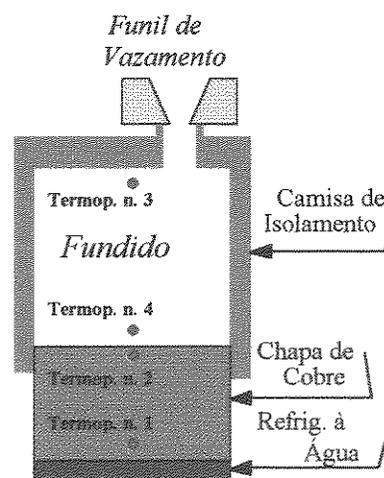


Figura 2.3 - Esboço do segundo tipo de experimento de Ho e Pehlke [Ho-1985]

Tabela 2.1 - Lista dos ensaios realizados por Ho e Pehlke [Ho-1985]

Referência de Experimento	Tipo do Metal Fundido	Tipo de Experimento Utilizado	Referência a Figura de Resultados
A	Alumínio	Primeiro Tipo	Figura 2.4
B	Alumínio	Segundo Tipo	Figura 2.5
C	Cu - 5%Al	Primeiro Tipo	Figura 2.6
D	Cu - 5%Al	Segundo Tipo	Figura 2.7

Os resultados obtidos por estes pesquisadores representam considerações fundamentais, sendo que as curvas referentes aos valores experimentais são comparadas com valores de cálculo numérico do método de diferenças finitas. Tais resultados expostos nas Figuras 2.4, 2.5, 2.6 e 2.7, são interessantes no estudo da variação do 'gap' formado na interface metal/molde e do tempo local de solidificação.

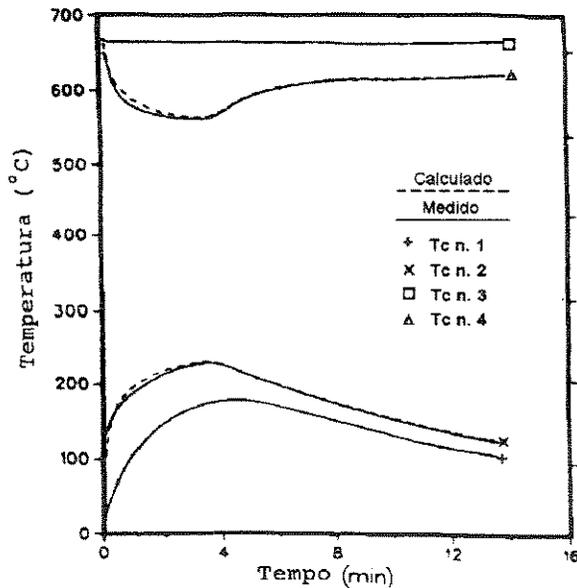


Figura 2.4 - Resultados para o experimento de referência A [Ho-1985]

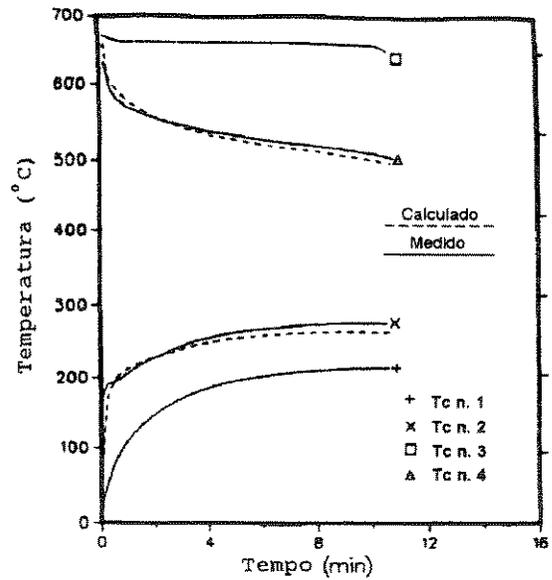


Figura 2.5 - Resultados para o experimento de referência B [Ho-1985]

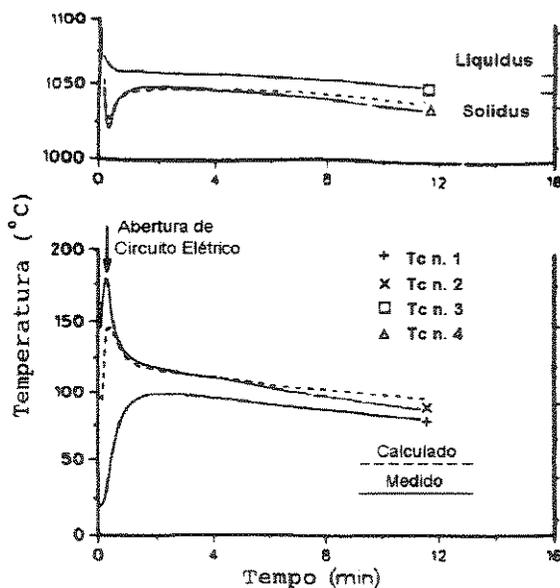


Figura 2.6 - Resultados para o experimento de referência C [Ho-1985]

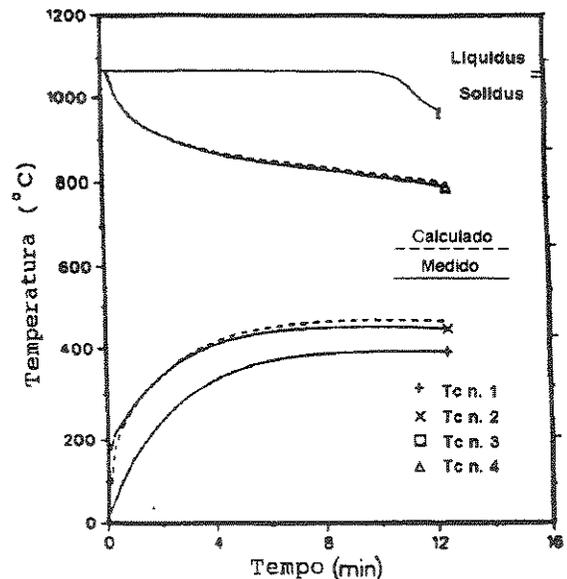


Figura 2.7 - Resultados para o experimento de referência D [Ho-1985]

A queda da taxa de retirada de calor com a evolução do 'gap' é observada de forma abrupta nas Figuras 2.4 e 2.6, pois nesta situação (primeiro experimento) ocorrem mudanças de conformidade interfacial causada pelas distorções do metal solidificado na superfície refrigerada. As diferenças do tempo em que ocorrem as quedas desta taxa para ambos os ensaios é justificada pelas diferenças nas temperaturas de vazamento, sendo o alumínio vazado a 660 °C e a liga a 1060 °C, assim o gradiente térmico de contato do metal fundido com a chapa fria é muito maior para a liga do que para o alumínio, acelerando neste caso o tempo local de solidificação e conseqüentemente o avanço do 'gap'. Para o segundo tipo de experimento a queda da taxa de retirada de calor devido a formação do 'gap' é praticamente nula, pois o efeito da gravidade terrestre reforça o contato sólido/molde na interface com a chapa refrigerada, isto pode ser observado pela evolução das curvas apresentadas nas Figuras 2.5 e 2.7.

Na segunda parte deste trabalho os pesquisadores investigaram a sensibilidade do tempo de solidificação local com relação a variação do coeficiente de transferência de calor na interface molde/metal. Utilizam um exemplo puramente computacional, onde consideram o tempo de solidificação requerido para resfriar unidirecionalmente 3 cm de Alumínio, conforme Figura 2.8. Ensaia três tipos de moldes: Cobre, Aço de baixo carbono e Areia e utilizam o Alumínio como metal base. Consideram para efeito de cálculo que o coeficiente de transferência de calor na interface molde/metal assume um valor constante.

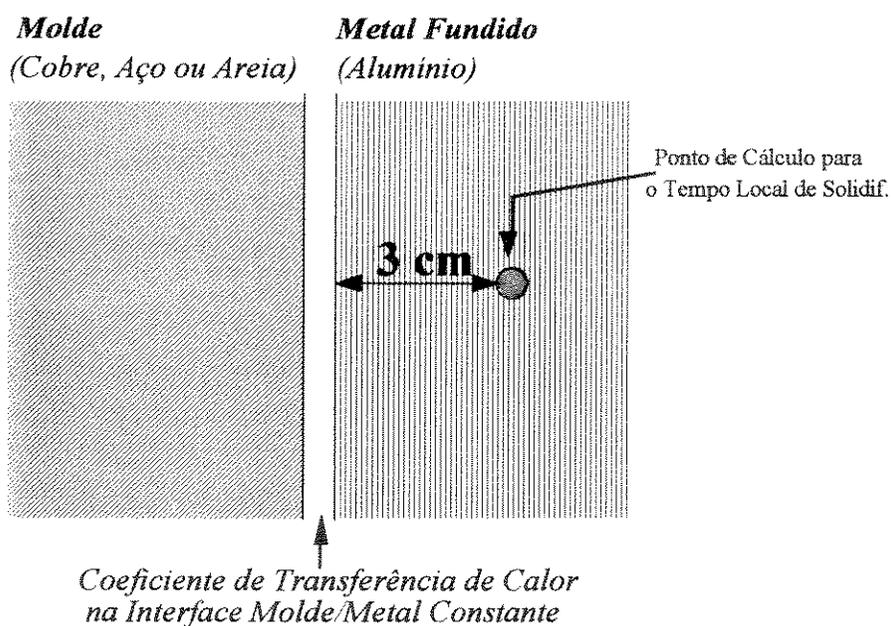


Figura 2.8 - Geometria para o fluxo de calor utilizado por Ho e Pehlke para análise da sensibilidade ao tempo local de solidificação

Observaram que o tempo de solidificação local para moldes metálicos é substancialmente menor que para moldes de areia, concluindo-se que nestes casos a taxa de solidificação é fortemente controlada pelo efeito de retirada de calor na interface molde/metal. Ho e Pehlke concluem que o tempo local de solidificação torna-se gradativamente independente da variação do coeficiente de transferência de calor na interface, conforme este valor cresce. Quantitativamente definem uma relação da sensibilidade relativa do Tempo de solidificação com Coeficiente de transferência de calor, dada por:

$$S = \frac{\frac{\Delta t}{t}}{\frac{\Delta h}{h}} \cong \frac{\partial[\ln(t)]}{\partial[\ln(h)]} \quad (2.1)$$

onde: S = Sensibilidade do tempo local de solidificação com o coeficiente de transferência de calor;

t = Tempo local de solidificação;

e h = Coeficiente de transferência de calor na interface;

A Figura 2.9 apresenta quantitativamente a relação exposta na Equação 2.1, podendo-se observar que moldes de areia possuem alguma sensibilidade para valores baixos de 'h' (\approx até $1000 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$), e com o aumento deste valor a sensibilidade anula-se totalmente. Moldes que permitem uma maior retirada de calor do sistema mantêm-se sensíveis para valores de 'h' bem maiores ($\approx 100.000 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$). Ho e Pehlke advertem em seu trabalho, sobre as relações obtidas, que sistemas que envolvem taxas de solidificação maiores, exigem precisões numéricas de ordem bem mais elevadas que os sistemas que apresentarem taxas menores, devido à maior velocidade de solidificação.

O efeito da interface molde/metal, em um modelo numérico para um programa de controle, deve ser estruturado de modo a acompanhar a evolução da resistência a transferência de calor com o aumento do 'gap'

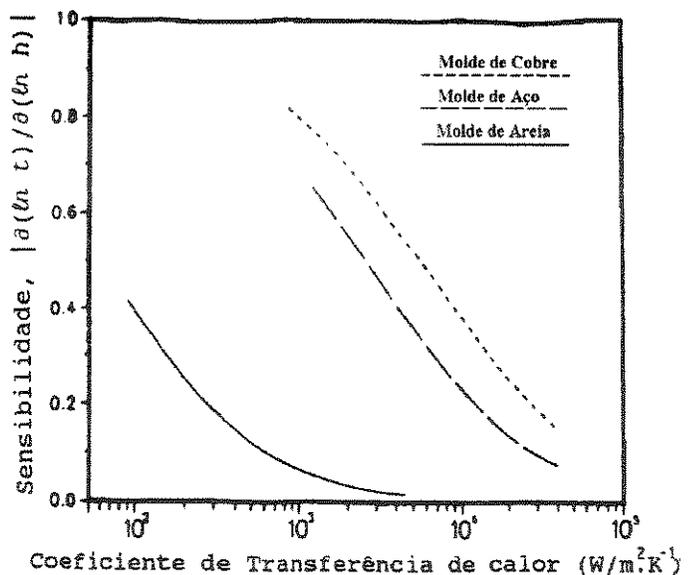


Figura 2.9 - Sensibilidade do tempo de solidificação como função do coeficiente de transferência de calor [Ho-1985]

causado pela solidificação do metal. O perfeito casamento do material de molde com o metal solidificado deve ser observado com o objetivo de evitar velocidades de solidificação muito altas na interface, podendo-se deste modo exercer um controle mais elaborado sobre a evolução do 'gap' de interface e conseqüentemente sobre o sistema de solidificação.

Um ano após a publicação do trabalho de Ho e Pehlke, Nishida, Droste e Engler [Nishida-1986] apresentam um artigo onde conseguem resultados muito semelhantes aos primeiros. Estes assumem o coeficiente de transferência de calor como uma função do tempo, obtendo sua variação relativa com medidas experimentais utilizando-se do equipamento apresentado na Figura 2.10. O modelo computacional é desenvolvido pelo método de diferenças finitas no modo explícito de trabalho. Nishida et alli utilizam uma liga Al-13.2% de Si e comparam esta com Al - Puro, obtendo medidas de temperatura em termopares de 1mm de diâmetro disposto a 2 mm da interface, e um medidor de deslocamento acoplado a uma ponta de quartzo para a medida do 'gap'. As Figuras 2.11 e 2.12 representam alguns dos resultados obtidos por estes estudiosos.

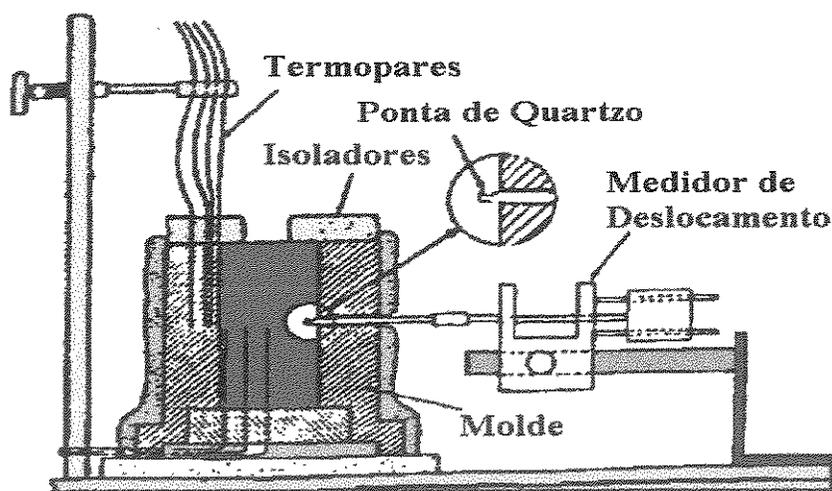


Figura 2.10 - Equipamento para deslocamento da contração metálica no interior do molde cilíndrico [Nishida-1986]

Observe que com o aumento do 'GAP' na interface metal/molde o valor do coeficiente de transferência de calor cai da ordem de $3 \times 10^3 \text{ (J / m}^2 \cdot \text{s} \cdot ^\circ\text{C)}$ para $5 \times 10^2 \text{ (J / m}^2 \cdot \text{s} \cdot ^\circ\text{C)}$ tanto para a liga quanto para o Al - puro. Contudo devido ao efeito de uma maior contração no Al - puro do que na liga, um 'gap' mais relevante tende a reduzir mais rapidamente o coeficiente de transferência de calor para este material, produzindo uma queda mais acentuada deste coeficiente na interface molde/metal para o Al - puro do que para a liga, conforme observado nas Figuras 2.11 e 2.12. Com estes resultados enfatizamos que um modelo numérico para ser eficiente deve englobar esta variação, podendo refletir erros numéricos de ordens bastante

elevadas no caso dos modelos que assumem este parâmetro (coeficiente de transferência de calor - h_0) como um valor constante.

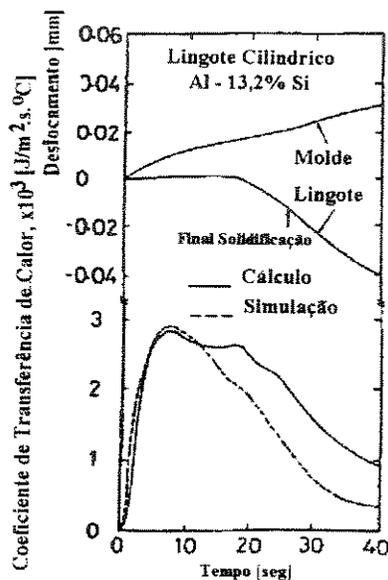


Figura 2.11 - Coeficiente de transferência de calor comparado com o deslocamento do molde e do metal para a liga Al-13,2%Si em molde cilíndrico [Nishida - 1986]

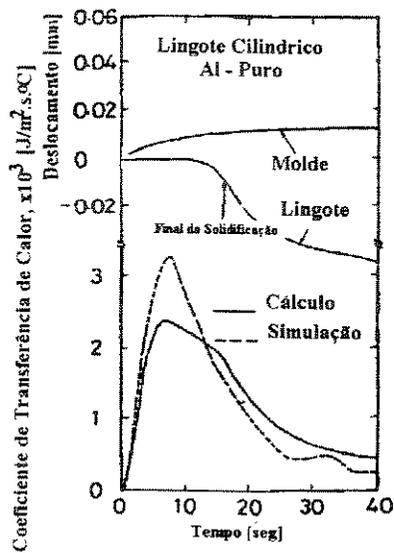


Figura 2.12 - Coeficiente de transferência de calor comparado com o deslocamento do molde e do metal para o Al-Puro em molde cilíndrico [Nishida - 1986]

2.1.2 - Formação de Poros:

Para muitas ligas a densidade da fase sólida é maior que a densidade da fase líquida. Assim sendo, estas ligas contraem-se ao se solidificar. Desta forma a quantidade de metal líquido, o qual diminui com a quantidade de metal solidificado, é utilizado para suprir o efeito de contração no interior do lingote. Se o metal líquido faltar em alguma região que esteja se contraindo, devido a algum tipo de reação que esteja ocorrendo na solidificação da liga, então poderão se formar poros nestas regiões do lingote.

Chiou e Tsai [Chiou-1990] em seus estudos, analisam condições para a porosidade de contração, onde consideram a formação de poros quando a pressão na região pastosa (intermediário) é maior que a pressão ativa na solidificação, isto é:

$$P_A \leq \Delta P \tag{2.2}$$

sendo ' P_A ' a pressão ativa ou externa e ' ΔP ' a variação de pressão na interface da região pastosa, onde ' P_A ' inclui a pressão metalostática e a pressão atmosférica.

Estes autores desenvolvem um modelo para prever a formação da porosidade como função da contração induzida no fluxo de fluido interdendrítico, baseado no Método de Diferenças Finitas. Analisam a formação da porosidade sob a influência de alguns parâmetros críticos nos processos de solidificação, como: ① Comprimento do lingote, ② Material do fundido, ③ Material do molde, ④ Temperatura inicial do molde e ⑤ Localização de refrigeradores.

Kubo e Pehlke [Kubo-1985B] também desenvolvem um estudo da modelagem matemática da formação de porosidade na solidificação de ligas metálicas. Estes trabalham com ligas de Al-4,5%Cu, e apresentam estudos sobre uma peça de geometria simples de aplicação em laboratório.

Neste artigo comentam os conceitos técnicos que levam a formação da porosidade, concentrando-se em uma representação esquemática dada por Campbell, dos possíveis mecanismos de alimentação de porosidade, conforme ilustra a Figura 2.13.

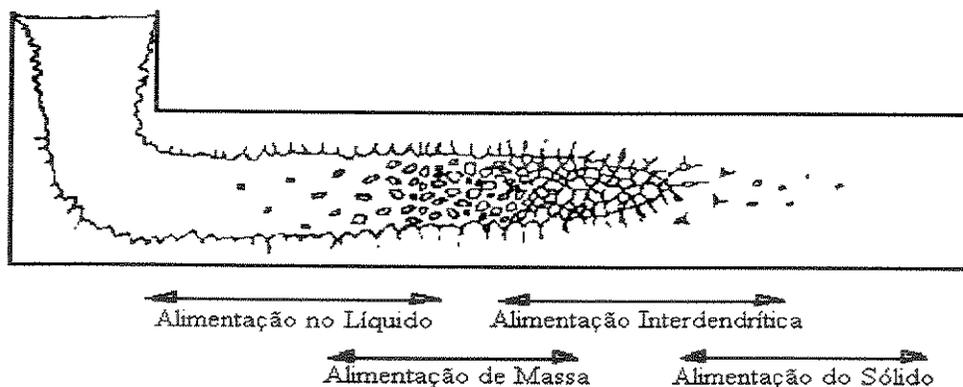


Figura 2.13 - Representação esquemática dos possíveis mecanismos de alimentação da porosidade [Kubo-1985B]

Os defeitos de porosidade são gerados dentro dos limites destes mecanismos, e por considerarem a região de alimentação dendrítica como a mais importante para a formação da porosidade, concentram seu trabalho na análise desta região. Tomam como referência o crescimento de poros na região de crescimento dendrítico conforme ilustrado na Figura 2.14, sendo que a equação básica de trabalho é dada pela equação da mudança de energia livre na superfície da bolha de gás, conforme a Equação 2.3.

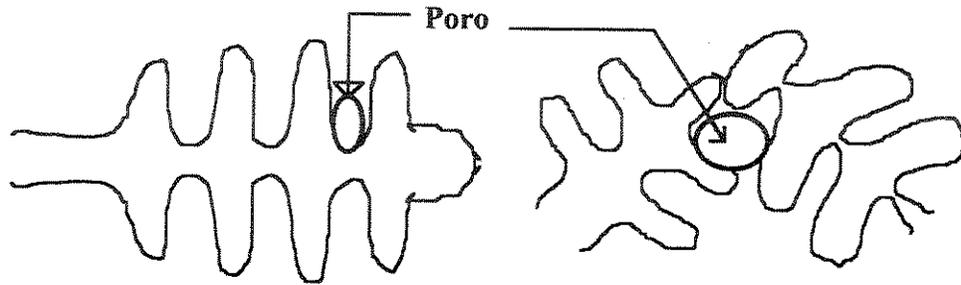


Figura 2.14 - Processo de Crescimento da Formação de Porosidade, idealizado por Kubo e Pehlke [Kubo-1985B]

A mudança da energia livre na formação da porosidade é dada por:

$$\Delta G = V \cdot (P_g - P) + A_1 \cdot \sigma_{sg} + A_2 \cdot \sigma_{lg} - A_1 \cdot \sigma_{sl} \quad (2.3)$$

onde:

V = Volume de Poros

P_g = Pressão de Gás

P = Pressão do Metal

A_1 = Área do gás no sólido

A_2 = Área da Interface gás líquido

σ_{sg} = Energia interfacial sólido - gás

σ_{lg} = Energia interfacial líquido - gás

σ_{sl} = Energia interfacial sólido - líquido

observando que para o equilíbrio, na formação de poros $\Delta G = 0$.

O primeiro termo do lado direito da Equação 2.3 representa a mudança da energia livre do líquido em direção ao poro de gás, os outros termos representam o excesso de energia livre necessária a formação da superfície do poro.

Kubo e Pehlke, concluem que a formação de poros no interior de uma liga metálica solidificada, pode ser modelada numericamente, desde que se estabeleçam as relações entre a evolução do gás interno ao poro com o fluxo do crescimento dendrítico no metal.

Sigworth e Wang [Sigworth-1993] também estudam a formação de poros em peças de geometria simplificada, contudo estabelecem relações da formação de poros com o fenômeno da contração térmica do metal. Estes utilizam ligas de aço com baixo teor de carbono, e

suas análises são mais relacionadas a estrutura geométrica de solidificação do que os efeitos físicos internos ao material. Estabelecem relações entre seu modelo e a Lei de Darcy para o cálculo dos gradientes de pressão das peças de análise. Por outro lado Minakawa, Samarasekera e Weinberg [Minakawa-1985] são mais posicionais em relação a formação de poros no interior do metal solidificado, analisando a formação da porosidade central na solidificação de placas. Estes geram um modelo numérico com base no método de diferenças finitas, para estabelecer as temperaturas internas do metal durante a solidificação. Estes associam a porcentagem de poros no centro da placa, com a velocidade de solidificação, comprimento útil e espessura da placa.

O material apresentado por Kubo e Pehlke, Sigworth e Wang, Minakawa, Samarasekera e Weinberg, sobre o efeito da formação de poros no interior de ligas metálicas solidificadas, corresponde a importante elemento de estudo para o tema em questão.

Huang, Suri e outros [Huang-1993] também geram um modelo para a previsão da porosidade, contudo estes vertem seus estudos para a distribuição do contato térmico do metal com o molde e os efeitos associados às mudanças de fase no material. Estes geram um modelo bidimensional de trabalho, e apresentam resultados comparativos aos critérios dos gradientes térmicos envolvidos na peça, bem como toda a taxa de refrigeração associada ao molde do sistema.

Hamar [Hamar-1987] em seu trabalho, concentra-se na análise da microporosidade, associada durante a fundição de pequenas peças, onde mostra um modelo numérico que se associa com a dinâmica de enchimento do molde. Trabalha com o Método de Diferenças Finitas em conjunto com o Método do Volume Finito sobre a região de estudo da peça. Este mostra que o cálculo da localização das microporosidades pode ser estimado durante a solidificação da peça. Trabalha com ligas à base de Níquel sobre moldes de areia, sendo que seus resultados, apesar de puramente teóricos, correspondem a importantes conceitos para a teoria de modelos na análise da solidificação. Apenas como esboço representativo do trabalho desenvolvido por este pesquisador, apresentamos uma figura que ilustra a característica da dinâmica de enchimento do molde, onde mostra o efeito de resfriamento térmico com o molde ainda em enchimento, conforme Figura 2.15. Observe nesta figura a posição do metal líquido em relação as temperaturas geradas no modelo. A Figura 2.16 apresenta um elemento semelhante para um programa numérico utilizado pelo autor (RENE 77), para um molde cerâmico pré-aquecido a 930° C, para diferentes fluxos de enchimento iniciais.

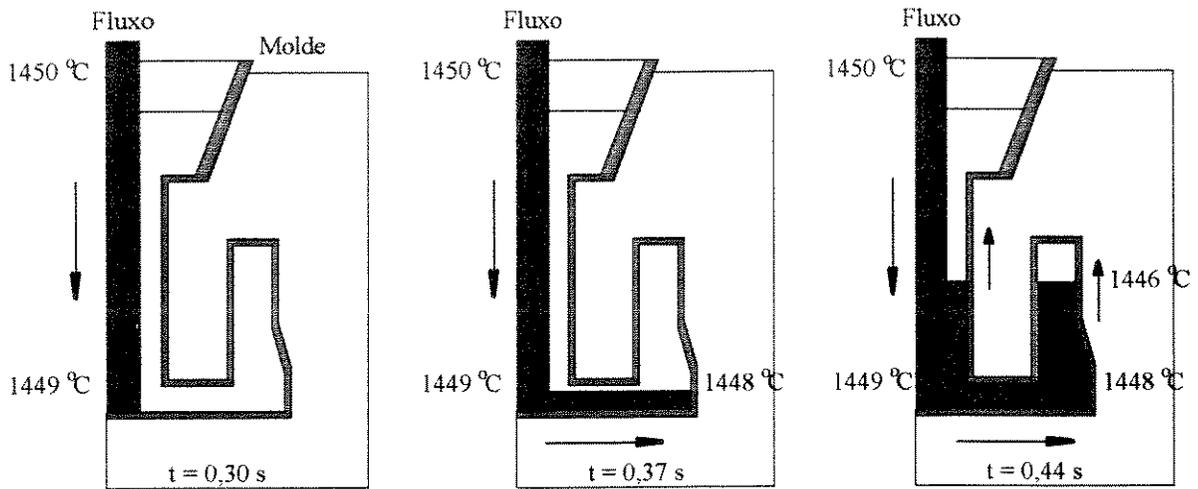


Figura 2.15 - Posição do líquido para diferentes tempos, no enchimento do molde [Hamar-1987]

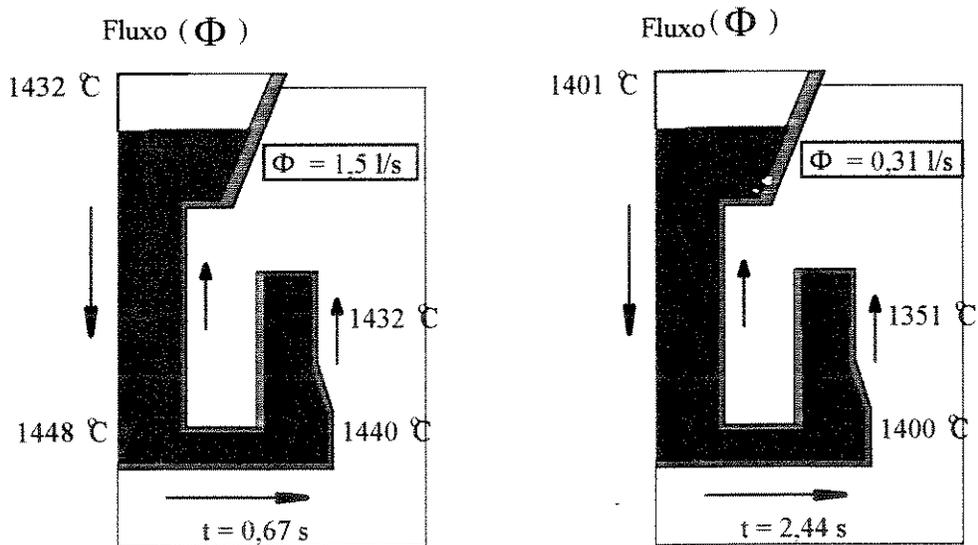


Figura 2.16 - Temperaturas no enchimento do molde para simulação no programa RENE 77, em diferentes fluxos [Hamar-1987]

Hamar em seu trabalho conclui que os cálculos de processo necessitam apenas de alguma experiência técnica para uma entrada correta do lote de variáveis no programa em questão, podendo este avaliar as possibilidades de mudanças em algum parâmetro que sofra algum tipo de alteração ao longo do processo. O uso de sistemas CAD/CAM é definido sobre um emaranhado das partes complexas, e a corrida de processamento é gerada automaticamente sobre um efeito computacional.

2.1.3 - Mudança de Fase:

A modelagem numérica da transferência de calor com mudança de fase, é um dos maiores problemas no contexto de complexidade de cálculo, devido a condições de contorno não-lineares e a liberação contínua de calor latente, e a dependência das propriedades físicas do material como função da temperatura. Inúmeros autores tem se preocupado com a simulação numérica do problema das transformações metalúrgicas, buscando a minimização do erro matemático envolvido, com simplificações compatíveis aos sistemas analisados. Na seqüência apresentam-se algumas destas simplificações que permitem uma modelagem eficiente do problema envolvido.

Partindo de um exemplo genérico de uma liga binária e um sistema de solidificação, inicia-se a abordagem matemática utilizando a equação geral da condução de calor, dada por:

$$\rho \cdot c \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k(y) \cdot \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k(z) \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) + q \quad (2.4)$$

onde ' ρ ' é a densidade, ' c ' o calor específico e ' k ' a condutividade térmica do material. A liga binária é um bom exemplo de partida para o desenvolvimento do modelo porque contém duas fases características (sólido e líquido) separadas por uma fase mista ou intermediário definida entre a '*temperatura solidus* (T_s)' até a '*temperatura liquidus* (T_l)' da liga. Em geral esta fase é denominada de '*fase pastosa*'.

Voller e Swaminathan [Voller-1991] apresentam em seu trabalho a variação da condutividade térmica (k) e do calor específico (c) da liga, dentro da região pastosa dado por uma 'mistura' ponderada das constantes sólida e líquida:

$$k_p = (1 - g) \cdot k_s + g \cdot k_l \quad (2.5)$$

$$c_p = (1 - g) \cdot c_s + g \cdot c_l \quad (2.6)$$

onde os subscritos \square_s , \square_l e \square_p representam as fases sólida, líquida e pastosa respectivamente, e ' g ' corresponde ao volume de fração líquida local. Consideram a variação da densidade (ρ) desprezível na mudança de fase.

As Equações 2.5 e 2.6 equivalem a uma situação específica da equação geral apresentada por Song, Dhatt e Cheikh, onde para o caso de uma liga composta por ' η ' constituintes (fases metalúrgicas) as propriedades variantes serão dadas por:

$$\chi = \sum_{i=1}^{\eta} \mu_i \cdot \chi_i \quad \text{com} \quad \sum \mu_i = 1 \quad (2.7)$$

onde ' μ_i ' é a fração volumétrica do i-ésimo constituinte da liga e ' χ ' a propriedade variante.

As simplificações introduzidas por Voller e Song objetivam uma marcante flexibilidade de trabalho na equação geral da condução de calor (Equação 2.4) para a análise numérica de fenômenos que envolvem a transformação de fase.

Na Equação 2.4 ' q ' equívale ao termo geral da geração de calor na mudança de fase dado por:

$$\overset{o}{q} = -\delta H \cdot \frac{\partial g}{\partial t} \quad (2.8)$$

onde assumindo que a temperatura de referência é igual a zero, tem-se que:

$$\delta H = \rho \cdot (c_l - c_s) \cdot T + \rho \cdot L \quad (2.9)$$

onde: H = Entalpia do processo;

T = Temperatura de trabalho [°C];

L = Calor Latente de fusão da liga envolvida;

$\frac{\partial g}{\partial t}$ = Variação da fração líquida local, envolvida no tempo;

A fração volumétrica do constituinte é melhor representado pela fração sólida dada por:

$$f_s = 1 - g \quad (2.10)$$

Assumindo que o valor absoluto do calor específico no sólido e no líquido para a liga de trabalho, equívalem a valores bastante próximos, pode-se aproximar com resultados bastante satisfatórios que:

$$\delta H \cong \rho \cdot L \quad (2.11)$$

Assim aplicando as Equações 2.11 e 2.10 em 2.8, tem-se como boa aproximação de cálculo que:

$$\dot{q} = \rho \cdot L \cdot \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (2.12)$$

Em geral a entalpia pode ser função de um número de variáveis, como temperatura, concentração, taxa de resfriamento, etc.. No entanto em muitos modelos de solidificação, a entalpia na região pastosa pode ser assumida como função apenas da temperatura, onde:

$$H = \int_0^T c \cdot \partial T + L \cdot (1 - f_s) \quad (2.13)$$

Multiplicando a Equação 2.13 por $\frac{\partial T}{\partial t}$, tem-se:

$$\frac{\partial H}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = c \cdot \frac{\partial T}{\partial t} - L \cdot \frac{\partial f_s}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.14)$$

ou:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = c \cdot \frac{\partial T}{\partial t} - L \cdot \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (2.15)$$

Aplicando a Equação 2.12 na Equação 2.4, chega-se em:

$$\rho \cdot \left(c \cdot \frac{\partial T}{\partial t} - L \cdot \frac{\partial f_s}{\partial t} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k(y) \cdot \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k(z) \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (2.16)$$

Aplicando a Equação 2.15 na Equação 2.16, chega-se em:

$$\rho \cdot \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k(y) \cdot \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k(z) \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (2.17)$$

A Equação 2.17 equivale a equação geral de condução de calor expressa em termos de entalpia. Alguns modelos desenvolvidos trabalham em termos desta equação e não da relação em temperatura.

2.1.3.1. Fração Sólida Versus Temperatura:

A fração sólida formada pode ser função de uma série de parâmetros envolvidos na sistema de fundição. No entanto em inúmeros casos é razoável assumir a variação da fração sólida como função apenas da temperatura, isto é:

$$f_s = F(T) \quad \text{para} \quad T_S < T < T_L \quad (2.18)$$

A formulação correta de $F(T)$ consiste na dependência dos constituintes internos da liga e da forma com que interagem na solidificação do sistema. As formulações mais importantes são dadas por:

- 1- Regra da Alavanca
- 2- Modelo de Scheil
- 3- Modelo de Brody e Flemings
- 4- Modelo de Clyne e Kurz
- 5- Modelo de Onaka

2.1.3.2. Regra da alavanca:

Quando se considera que o sistema está em equilíbrio termodinâmico, ou seja, que a composição química permanece uniforme dentro de cada fase onde há completa difusão de soluto tanto na fase sólida quanto na fase líquida, o comportamento da solidificação pode ser descrito pela clássica regra da alavanca, dada pela forma:

$$f_s = \left(\frac{1}{1 - k'} \right) \cdot \left[\frac{T_1 - T}{T_f - T} \right] \quad (2.19)$$

onde: f_s = Fração Sólida em peso;

T_1 = Temperatura Liquidus;

T_f = Temperatura de fusão do metal base (solvente);

k' = Coeficiente de redistribuição do soluto ou coeficiente de partição no equilíbrio;

Segundo Voller [Voller-1991], para um sistema eutético a equação linear acima pode ser melhor representada por:

$$f_s = \left(\frac{1}{1 - k'} \right) \cdot \left[\frac{(1 - f_s) \cdot T_1 + f_s \cdot T - T_e}{T_1 - T_e} \right] \quad (2.20)$$

sendo ' T_e ' é a temperatura de eutético.

A regra da Alavanca é bem aplicada a sistemas de Fe-C, onde a alta mobilidade dos átomos de carbono na rede do ferro assegura uma boa aproximação com o equilíbrio termodinâmico.

Em termos de composição a Equação 2.19 é dada por:

$$C_s = k' \cdot C_o \cdot [1 - (1 - k') \cdot f_s]^{-1} \quad (2.21)$$

sendo: C_s = Composição do Sólido;

C_o = Composição Nominal da Liga;

2.1.3.3 Modelo de Scheil [Scheil-1942]:

As condições de solidificação verificadas na prática não conduzem a situações de equilíbrio termodinâmico em todo sistema metálico. Para situações em que a difusão do soluto no sólido pode ser desprezada e que a ação da convecção no metal líquido assegura completa mistura do soluto, o tratamento clássico de 'Scheil' é melhor utilizado para a representação do comportamento da solidificação, sendo que para a análise da microsegregação, Scheil foi o primeiro a apresentar uma formulação analítica, dada por:

$$f_s = 1 - \left(\frac{T_f - T}{T_f - T_l} \right)^{-\beta} \quad (2.22)$$

onde: $\beta = \left(\frac{1}{1 - k'} \right) \quad (2.23)$

O tratamento de Scheil conduz a resultados muito próximos de situações práticas que conduzem a solidificação dendrítica, onde analisa a condição de segregação máxima. No entanto, ao assumir a ausência de difusão no sólido formado, faz com que esta abordagem seja melhor utilizada em casos de solução sólida substitucional. Por exemplo, ligas do sistema Alumínio-Cobre são bem representados pelo modelo de Scheil.

Em termos de composição a Equação 2.22 é dada por:

$$C_s = k' \cdot C_o \cdot (1 - f_s)^{k'-1} \quad (2.24)$$

onde: C_s = Composição do sólido na interface sólido-líquido;

2.1.3.4. Modelo de Brody e Flemings [Brody-1966]:

A hipótese de ausência de difusão de soluto no estado sólido é certamente uma restrição muito forte quando são abordados casos com solução sólida intersticial. Nesses casos, devido a elevada mobilidade atômica do soluto intersticial, é preciso que sejam também quantificadas as modificações no perfil de concentração de soluto em cada instante, levando-se em conta também a difusão de retorno que ocorre pela migração do soluto em direção ao sólido formado. Brody e Flemings propuseram duas soluções que levam em consideração a difusão no estado sólido, representadas pelas seguintes expressões:

(A). Crescimento com velocidade constante da ramificação dendrítica na direção perpendicular à direção de deslocamento da interface sólido/líquido:

$$f_s = (1 + \alpha \cdot k') \cdot \left[1 - \left(\frac{T_f - T}{T_f - T_l} \right) \right]^{-\beta} \quad (2.25)$$

(B). Crescimento com velocidade parabólica da ramificação dendrítica na direção perpendicular à direção de deslocamento da interface sólido/líquido:

$$f_s = \gamma \cdot \left[1 - \left(\frac{T_f - T}{T_f - T_l} \right) \right]^{-\beta/\gamma} \quad (2.26)$$

sendo: $\alpha = \frac{4 \cdot D_s \cdot t_{s1}}{\lambda^2} \quad (2.27)$

e $\gamma = \frac{1}{1 - 2 \cdot \alpha \cdot k'} \quad (2.28)$

onde: D_s = Difusividade do soluto no sólido;

t_{s1} = Tempo local de solidificação;

λ = Espaçamento dendrítico local;

Se ' α ' na Equação 2.25 tende a zero, esta aproxima-se da equação de Scheil, por outro lado quando a difusão no sólido é completa, com ' α ' tendendo ao infinito, a composição de soluto no sólido deve se aproximar da equação de equilíbrio pela Equação 2.26. Contudo a equação de Brody-Flemings (2.26) coincide com a equação de equilíbrio quando ' $\alpha = 1/2$ ', e

onde ' $\alpha > 1$ ' esta perde seu significado fisico. Conseqüentemente, quando a diferença de soluto na fase sólida é elevada, a Equação 2.26 não fornece resultados confiáveis.

2.1.3.5. Modelo de Clyne e Kurz [Clyne-1981]:

A observação de que o modelo de Brody e Flemings conduz a resultados precisos somente em uma faixa de valores de ' α ', apresentando resultados que contrariam as condições de solidificação à medida que os valores de ' α ' se tornam elevados, levou a uma modificação no modelo de Brody e Flemings que pudesse quantificar o efeito da difusão de retorno em toda a faixa de valores de ' α ' ($0 \rightarrow \infty$). Esta modificação proposta por Clyne e Kurz conduziu às seguintes expressões:

$$f_s = \gamma' \cdot \left[1 - \left(\frac{T_f - T}{T_f - T_l} \right) \right]^{-\beta/\gamma'} \quad (2.29)$$

sendo:
$$\gamma' = \frac{1}{1 - 2 \cdot \Omega \cdot k'} \quad (2.30)$$

e
$$\Omega = \alpha \cdot \left(1 - e^{-1/\alpha} \right) - \frac{1}{2} \cdot e^{-1/(2\alpha)} \quad (2.31)$$

Em termos de composição a Equação 2.29 é dada por:

$$C_s = k' \cdot C_o \cdot \left[1 - (1 - \Omega \cdot k') \cdot f_s \right]^{(k'-1)/(1-\Omega \cdot k')} \quad (2.32)$$

2.1.3.6. Modelo de Ohnaka [Ohnaka-1986]:

Outra proposta que modifica a equação original de Brody-Flemings, foi formulada por Ohnaka, e é baseada na solução da equação de difusão através do método do perfil integral, admitindo-se para tanto que a distribuição de soluto no sólido formado seja representada por uma expressão quadrática.

A solução obtida pelo autor difere da análise de Brody-Flemings através da definição de um novo parâmetro ' α_c ' que deve substituir ' Ω ' na expressão de Clyne-Kurz, e é dado por:

$$\alpha_c = \frac{1}{(1 + 2.\alpha)} \quad (2.33)$$

Tanto a equação de Clyne-Kurz como a de Ohnaka aproximam-se da equação de Scheil ou da equação de equilíbrio quando ' α ' tende a zero ou a infinito respectivamente. Portanto, elas apresentam consistência física nas condições limites.

Outros Modelos:

O efeito das transformações de fase no produto final solidificado, representa um fator de importância elevada nos processos metalúrgicos. Comini et alli [Comini - 1990], apresentam um algoritmo multidimensional para o problema da mudança de fase. Utilizam o método de Elementos Finitos e mostram alguns resultados teóricos sobre geometria cilíndrica. Apesar do modelo de Comini et alli não apresentar nenhuma novidade relevante de modelo, o carácter didático do mesmo não é descartado.

Contudo Leblond e Devaux [Leblond - 1984] propõem um modelo cinético para as transformações metalúrgicas anisotérmicas e transformações martensíticas para os casos de n-fases, possuindo este trabalho um grande interesse prático de estudo ao tema. Neste, equacionam o efeito da influência entre as fases constituintes, em transformações assimétricas, onde as proporções das fases formadas, são diferentes das fases geradoras. Por exemplo, para o caso de duas fases, 1 e 2, descrevem a seguinte equação para a relação de transformação da fase 1 para a fase 2:

$$p_2 = \frac{p_{2_{eq}}^{12}(T) - p_2}{\tau^{12}(T)} \quad (2.34)$$

e para a transformação da fase 2 para a fase 1:

$$p_1 = \frac{p_{1_{eq}}^{21}(T) - p_1}{\tau^{21}(T)} \quad (2.35)$$

onde $p_{2_{eq}}^{12}(T)$ e $\tau^{12}(T)$ representam o equilíbrio proporcional da fase 2 para a transformação de $1 \rightarrow 2$ e o tempo característico de transformação respectivamente, e $p_{1_{eq}}^{21}(T)$ e $\tau^{21}(T)$ representam o equilíbrio proporcional da fase 1 para a transformação $2 \rightarrow 1$ e o tempo característico de transformação. Vale lembrar que $p_1 + p_2 = 1$ e que

$p_{2_{eq}}^{12}(T) + p_{1_{eq}}^{21}(T) = 1$, entretanto $\tau^{12}(T) \neq \tau^{21}(T)$ mostrando a assimetria da transformação.

Song, Dhatt e Cheikh [Song - 1990], desenvolvem um modelo de elementos finitos, trabalhando com as curvas energéticas da entalpia, apresentando neste modelo a importância do mapeamento da região de mudança de fase. Discutem a evolução da composição metalúrgica no interior de um volume de controle, mostrando ser esta dependente da evolução térmica no interior da liga. Assumindo que a solidificação dos materiais utilizados, a transformação tem início na fase austenítica, mostram que as transformações podem ser austenita para perlita, austenita para martensita, dependendo da evolução térmica no resfriamento da mesma. A Figura 2.17 mostra as possibilidades de transformação estudadas por Song et alli, acrescentando neste ponto a necessidade de um modelo eficiente, que possa perceber e simular a aleatoriedade das formações estruturais.

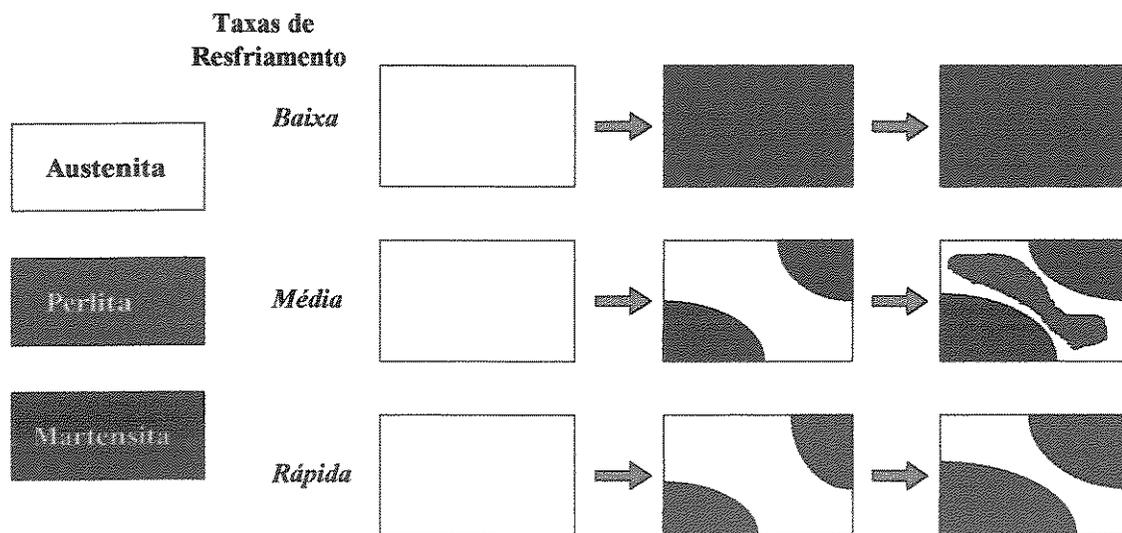


Figura 2.17 - Representação esquemática da mudança de estrutura para diferentes taxas de resfriamento [Song - 1990]

2.2 Microestrutura e Formação de Defeitos

A integridade final do produto solidificado depende fundamentalmente da microestrutura formada, tão bem como dos defeitos inerentes, os quais são determinados durante a solidificação. O tratamento numérico dado à previsão da microestrutura e à formação de defeitos durante a solidificação é a análise mais complicada de um sistema de fundição, pois para cada tipo de liga incorrem efeitos muito particulares. No entanto uma série de autores desenvolveram modelos que podem ser aplicados a sistemas globais de fundição. Parâmetros como: ① Tamanho de grão; ② Espaçamento dos braços interdendríticos secundários e espaçamento eutético; ③ Características do tamanho de poros e distribuição de porosidades; ④ Microporosidade devido ao fluxo de fluido interdendrítico e ⑤ Mapeamento morfológico ao longo da solidificação, são apresentados neste item do trabalho relacionando as causas e os modelos de solução.

2.2.1 - Espaçamento dos Braços Dendríticos (EBD):

Em geral a proporção do EBD é diretamente relacionada com o tempo local de solidificação ou média da taxa de resfriamento durante a solidificação. Altas taxas de resfriamento ou baixos tempos de solidificação local, representam pequenos EBD além de reduzido grau de microsegregação associada.

Yu et alli [Yu-1992] mostram medidas de EBD primários e secundários como função do tempo local de solidificação, para superligas a base de níquel, calculados em um modelo de elementos finitos, conforme visto nas Figuras 2.18 e 2.19, apresentando nestas a micrografia das estruturas formadas.

Overfelt [Overfelt-1992] relata trabalhos de Kurz e Fisher onde prevêem o espaçamento dos braços dendríticos primários (λ_1) dado por:

$$\lambda_1 = K \cdot V^{-0,25} \cdot G^{-0,5} \quad (2.36)$$

onde: K = Constante dependente do material da liga;

V = Velocidade da isoterma liquidus;

G = Gradiente térmico à frente da isoterma liquidus;

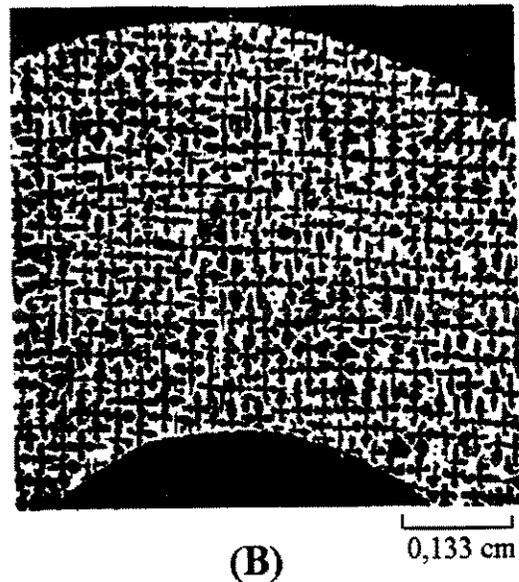
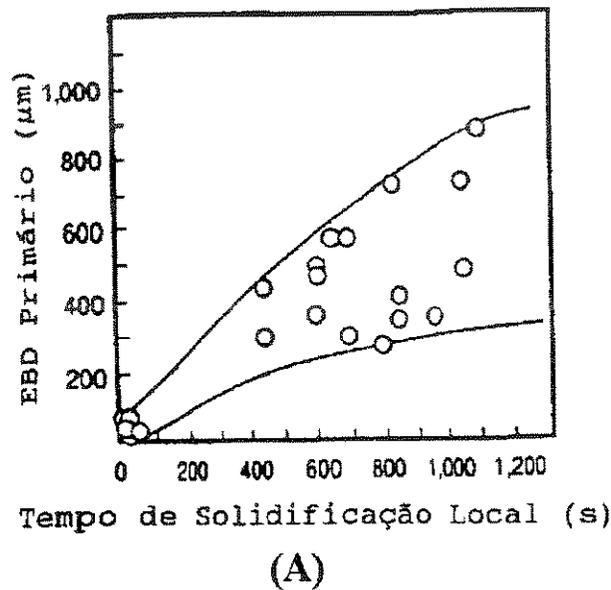


Figura 2.18 - (A) Medida do EBD primário para uma superliga a base de Níquel como função do tempo local de solidificação. (B) Micrografia mostrando as dendritas [Yu-1992A].

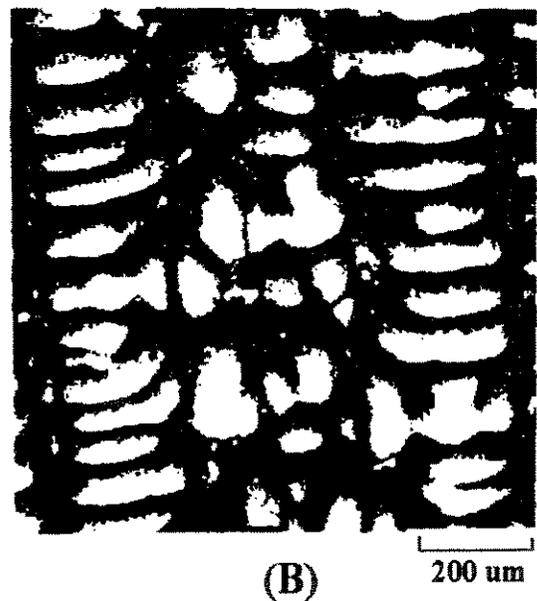
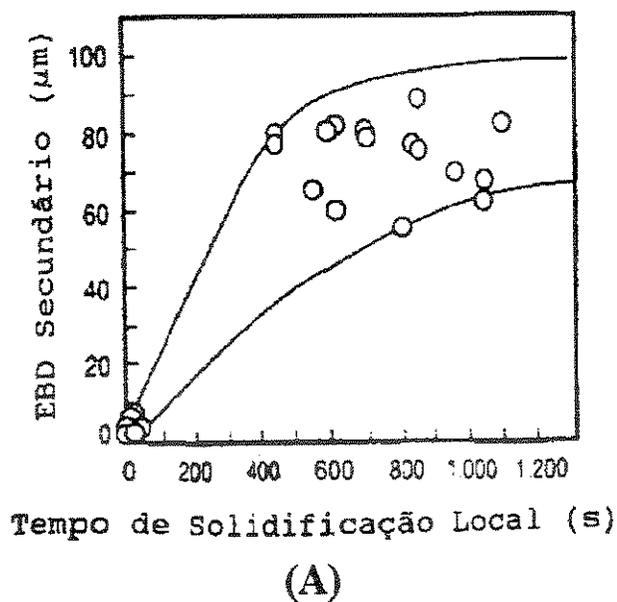


Figura 2.19 - (A) Medida do EBD secundário para uma superliga a base de níquel como função do tempo local de solidificação. (B) Micrografia mostrando os braços dendríticos secundários [Yu-1992A].

McLean [McLean-1983] apresenta dados para três tipos de superligas a base de níquel como função do parâmetro $V^{-0,25} \cdot G^{-0,5}$, conforme mostra a Figura 2.20.

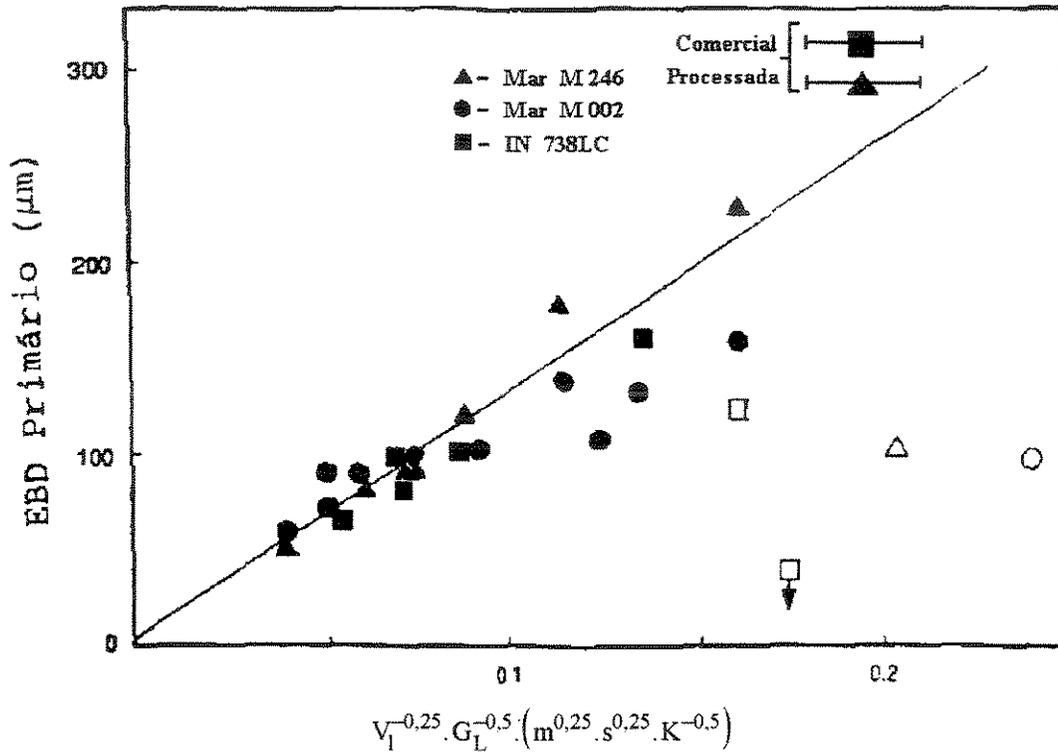


Figura 2.20 - EBD primário para a solidificação direcional de três superligas a base de níquel [McLean-1983]

experimentalmente ' λ_2 ' é dado por:

$$\lambda_2 = C \cdot (G \cdot V)^{-n} \quad (2.37.A)$$

ou
$$\lambda_2 = C \cdot (t_{sl})^n \quad (2.37.B)$$

onde: λ_2 = Espaçamento dos Braços Dendríticos Secundários;

t_{sl} = Tempo local de solidificação;

C = Constante dependente da liga;

e
$$\frac{1}{3} < n < \frac{1}{2} \quad (2.38)$$

A constante de proporcionalidade 'C' e o valor do expoente 'n' devem ser determinados experimentalmente para um sistema de interesse.

2.2.2 - Tamanho de Grão (Grãos Equiaxiais):

O tamanho de grão é determinado pela medida do tempo requerido para o resfriamento da temperatura de vazamento da liga até a temperatura onde as pontas dendríticas tocam umas

nas outras (Temperatura Crítica de Nucleação). Previsões para formações equiaxiais são mais complicadas que para estruturas colunares simples. Orverfelt relata que a taxa de nucleação da solidificação de uma liga, pode ser representada por uma simples função de Delta Dirac, dada por:

$$\frac{dN}{dT} = N_s \cdot \delta(T - T_N) \quad (2.39)$$

onde 'N' é o número de núcleos, 'N_s' é o número de substratos ativos, 'T' é a temperatura e 'T_N' é a temperatura crítica de nucleação para o substrato ativo. Se mais de um tipo de inoculante é ativo para temperaturas ligeiramente diferentes, a taxa de nucleação combinada pode ser encontrada pelo efeito linear de superposição. O parâmetro 'N_s' pode ser determinado experimentalmente por uma equação parabólica descrita como:

$$N_s = K_3 + K_4 \cdot \left(\frac{dT}{dt} \right)^2 \quad (2.40)$$

onde as constantes 'K₃' e 'K₄' e a temperatura crítica de nucleação 'T_N' podem ser determinadas experimentalmente para uma dada liga, usando uma variedade de taxas de resfriamento.

A velocidade (V) da nucleação de grãos é proporcional ao quadrado do super-resfriamento:

$$V = \mu \cdot (\Delta T)^2 \quad (2.41)$$

onde a constante de proporcionalidade 'μ' é dependente da liga.

Overfelt apresenta em seu trabalho os resultados de McLean, Bouse e Mihahisin sobre o mapeamento da microestrutura formada e o EBD para a relação entre o gradiente térmico (G) e a velocidade de crescimento (V) em superligas a base de níquel, conforme as Figuras 2.21 e 2.22.

Para grãos equiaxiais, o volume de fração solidificada como função da evolução dos grãos pode ser determinada. De acordo com Rappaz et alli [Rappaz-1989], a variação da fração sólida no tempo (Δf_s(t)), é dada por:

$$\Delta f_s = n(t) \cdot \left[4 \cdot \pi \cdot r^2(t) \cdot \Delta r(t) \cdot f_i(t) + \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3(t) \cdot \Delta f_i(t) \right] \quad (2.42)$$

sendo n(t) é a densidade de grãos, r(t) é o raio do envolvimento esférico do grão equiaxial, e f_i(t) é a porcentagem da fração sólida interna.

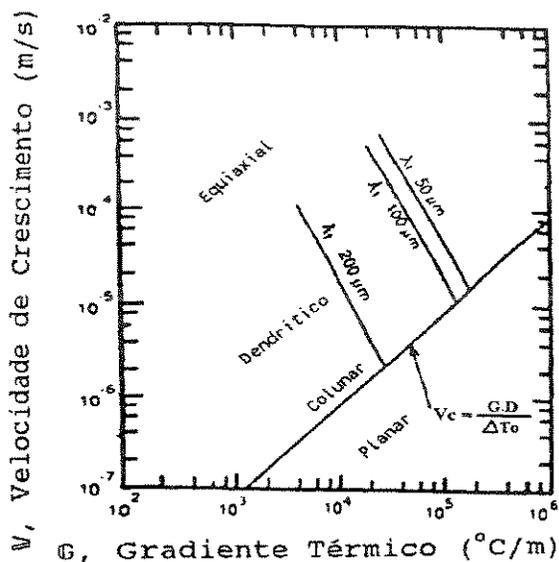


Figura 2.21 - Mapeamento da microestrutura e EBD primários para superliga a base de níquel [McLean-1983]

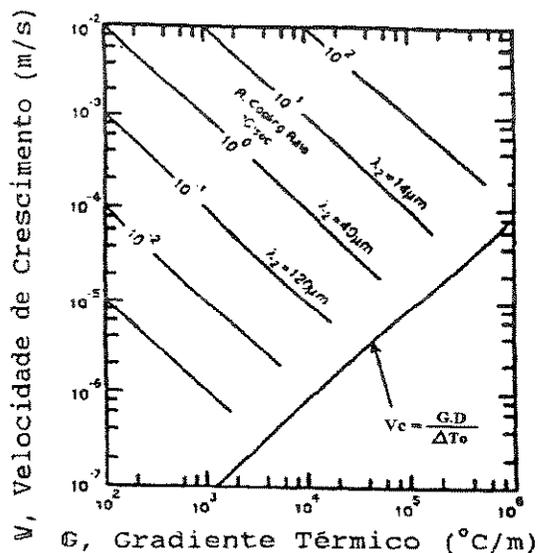


Figura 2.22 - Mapeamento da microestrutura e EBD secundário para superliga a base de níquel [Bouse-1989]

2.2.3 - Microestrutura:

Os fatores de maior influência na perda dos produtos gerados nos processos de solidificação consistem nos efeitos de segregação e o tipo de estrutura formada internamente. Em relação ao tipo de estrutura formada, as condições e causas do crescimento dendrítico são mais estudadas, cujas discussões seguem abaixo.

As formas das dendritas são fortemente influenciadas pelas condições locais de crescimento. Em uma liga, o crescimento dendrítico com gradiente de temperatura imposto, tende a produzir uma estrutura chamada "celular dendrítica", quando o gradiente torna-se razoavelmente íngreme (excessivo). Por outro lado o crescimento dendrítico "livre" é conduzido a formação de estruturas "colunar dendrítica" em ligas. No crescimento dendrítico livre, a taxa de avanço dos pontos (ou núcleos) em crescimento é determinado apenas pela temperatura local (e composição das ligas dendríticas).

A compreensão de uma quantidade dos fenômenos de solidificação, pode ser conseguida por consideração dos fenômenos que ocorrem sobre a formação das pontas dendríticas, quando ignoramos os detalhes morfológicos sobre estas pontas. Assim o efeito devido a curvatura das pontas dendríticas são usualmente insignificantes para muitos processos de solidificação, exceto talvez, para processos de solidificação rápida. Observações nas dendritas de materiais orgânicos (NC-CH₂-CN) mostram claramente que a região das pontas dendríticas

são sólidos de revolução muito semelhantes a uma parábola. Fechando em uma secção de ponta circular a curva total da ponta é dada por:

$$\frac{2}{r_t} \quad (3.43)$$

onde 'r_t' é o raio medido na ponta da dendrita [LAXMANAN - 1985A].

O processo de solidificação realizado dentro dos sistemas de fundição, sobre as características das taxas de transporte de calor, tem influência relevante em pelo menos duas importantes características dimensionais da estrutura metalográfica:

- O Tamanho de Grão e
- Os Espaçamentos Interdendríticos

Esta segunda característica estrutural parece ter mais influência sobre as propriedades mecânicas do que a primeira, e é muito mais dependente da taxa de resfriamento. O aumento da taxa de resfriamento leva a espaçamentos interdendríticos menores, mas o tamanho de grão pode eventualmente não ser alterado significativamente, sendo este mais dependente da história do metal.

Ziv e Weinberg [Ziv-1989] investigam a Transição Colunar-Equiaxial em ligas de Al-3%Cu solidificadas unidirecionalmente, onde associam a transição com as taxas de retirada de calor no interior do metal bem como o número de elementos de nucleação (Nucleantes) compostos na liga. Contudo apesar de não ser comum nos processos metalúrgicos a Transição Colunar-Equiaxial devido ao efeito da evolução do coeficiente de transmissão de calor na interface, os estudos acima mostram esta possibilidade, onde caso ocorra produzirá severas alterações nas propriedades mecânicas da peça produzida.

Nos estudos de Ziv e Weinberg, consideram a relação do modelo para a Transição Colunar-Equiaxial proposta por Hunt, onde:

$$G_L < 0.617 \cdot N_0^{1/3} \cdot \left[1 - \frac{(\Delta T_N)^3}{(\Delta T_C)^3} \right] \cdot \Delta T_C \quad (2.44)$$

sendo: G_L = Gradiente de Temperatura do Fundido;

N_0 = Densidade de Pontos de Nucleação;

ΔT_N = Super-resfriamento Efetivo para os Pontos de Nucleação;

ΔT_C = Super-resfriamento para a Ponta Dendrítica;

onde:
$$\Delta T_C = \left(\frac{V \cdot C_o}{A} \right)^{1/2} \quad (2.45)$$

sendo: V = Velocidade da Ponta da Dendrítica Colunar;

C_o = Composição da Liga em Porcentagem de Peso;

A = Constante Baseada em Dados Experimento ($300 \mu\text{m/s/wt pct/K}^{-2}$);

Sendo a Equação 2.45 a condição máxima do gradiente de temperatura para que ocorra o crescimento equiaxial. Ziv e Weinberg determinam que a Transição Colunar-Equiaxial ocorre quando o gradiente de temperatura no fundido (líquido) é suficiente baixo para permitir que os núcleos a frente da ponta da dendrítica colunar cresçam em tamanho suficiente para parar o avanço da dendrítica.

Um trabalho interessante apresentado por Spittle e Brown [Spittle-1989] sobre a simulação do efeito das variáveis de liga na estrutura do grão foi posteriormente estudado. Spittle e Brown utilizam a técnica numérica de Monte Carlos para desenvolver um modelo capaz de simular o processo de solidificação em peças de laboratório, sendo que o mais importante efeito do modelo é a representação do aspecto da microestrutura. Relatam a microestrutura adquirida na simulação para a influência dos efeitos de:

- 1- Superaquecimento e Temperatura de Molde (Realidade Experimental);
- 2- Composição da Liga (C_o) (Realidade Experimental);
- 3- Coeficiente de Microsegregação (k_o) (Teórico);
- 4- Inclinação da Linha Liquidus no Diagrama de Fase (m) (Teórico);

onde observam estruturas mais finas para:

- 1- Menores Temperaturas de Superaquecimento e Temperatura de Molde (Efeito de Coquilha);
- 2- Composição da Liga (C_o) maiores - Número de núcleos maiores conforme observado por Overfelt;
- 3- Coeficiente de Segregação (k') menores - Maior números de núcleos dispersos no líquido;

- 4- Inclinação da linha liquidus (m) maiores - Taxas de resfriamento baixas sob composição maiores de soluto no líquido;

Spittle e Brown analisam a relação com o parâmetro de super-resfriamento constitucional, onde observam redução do tamanho de grão para o aumento deste parâmetro, onde a curva atinge um valor de tamanho de grão aproximadamente constante após um determinado valor para o super-resfriamento constitucional. Os estudos de Spittle e Brown comparados com as observações de Overfelt e as análises de Yu, Nichols e Robinson formam uma base consistente para a relação das condições de refrigeração sobre a microestrutura final desejada onde paralelamente pode-se determinar as condições mecânicas da peça produzida.

Por outro lado Anderson, Srolovitz, Grest e Sahni [Anderson-1984] se utilizam do método de Monte Carlos para a aplicação no estudo da cinética do crescimento de grão. Discutem os esforços realizados por diversos estudiosos no objetivo de desenvolverem as regras do crescimento de grão em função do tempo. Analisam dois tipos de modelo:

- 1º) Condição de continuidade no espaço de grão com o tamanho e tempo;
- 2º) Cinética do tamanho de grão (R) pela utilização de propriedades invariantes no tempo na totalidade do grão.

Para as simulações em computador assume-se que cada grão seja descrito por um único parâmetro 'R', sendo este o raio equivalente a uma esfera. Em seus cálculos tomam a energia superficial e a mobilidade como isotrópicas. Assumem a força direcional do crescimento como sendo proporcional a diferença de pressão entre os grãos onde:

$$\Delta p_{ij} = 2 \cdot \gamma \cdot (1/R_i - 1/R_j) \quad (2.46)$$

desconsideram em seu modelo a orientação preferencial dos grãos, a segregação de impurezas e a presença de outras fases, pois:

- 1- A orientação preferencial introduz uma anisotropia na mobilidade e energia da superfície;
- 2- A segregação de impurezas influencia fortemente a mobilidade superficial e podem introduzir uma dependência de orientação;
- 3- Outras fases reduzem a força direcional do crescimento de grão.

2.2.4 - Microsegregação:

Outro grande problema que deve ser analisado no efeito da solidificação consiste na microsegregação. A homogeneidade das características finais obtidas depende fundamentalmente deste fator, e a distribuição do soluto no sólido e no líquido em função das condições de solidificação e a cinética de crescimento da liga envolvida devem ser estudados na garantia de gerar produtos de qualidade aceitável.

Os parâmetros de influência crítica no efeito da microsegregação, são:

- Coeficiente do Equilíbrio de Partição;
- Taxa de Resfriamento;
- Difusividade do Solute no Sólido;

O coeficiente de partição de soluto no equilíbrio é definido como a relação entre a composição do soluto no sólido e no líquido, durante a solidificação. Isto pode ser derivado diretamente do diagrama de fase ou dos vários parâmetros termodinâmicos [Battle-1989]. O coeficiente de partição é uma expressão para a afinidade relativa de um soluto na fase solvente. Coeficiente de partição no equilíbrio também é chamado de coeficiente de segregação, onde sua representação física é dada pela Figura 2.23.

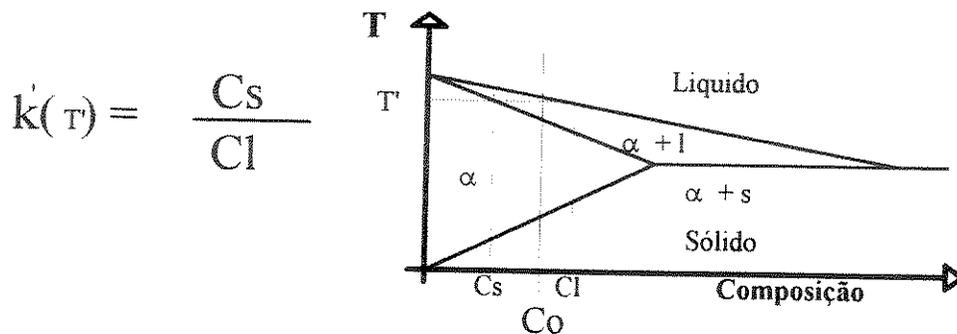


Figura 2.23 - Representação física do coeficiente de segregação em ligas binárias

Alguns valores típicos do coeficiente de segregação para alguns sistemas principais são listados na Tabela 2.2 [Battle-1992].

Tabela 2.2- Coeficientes de Segregação para alguns sistemas metálicos de aplicação industrial [Battle-1992]

Sistema Solvente/soluto	Fase Sólida	Coeficiente de Segregação	Difusividade ($\times 10^{-9} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$)	
			Líquido	Sólido
Fe-C	δ	0.24	7.9	5.8
Fe-Ni	γ	0.90	4.8	0.0002
Fe-Si	δ	0.86	3.8	0.024
Fe-S	γ	0.014	4.5	0.16
Fe-C-Si	γ	$k_{Si} = 1.4$	6.4	0.03
Fe-Ni-S	γ	$k_{Ni} = 1.2$	-----	8×10^{-5}
Al-Cu	α	0.145	4.9	0.005
Cu-Ni	α	2.7	3.5	0.002

Kurz, Giovanola e Trivedi [Kurz-1986] apresentam um modelo teórico para descrever o comportamento do crescimento colunar dendrítico (direcional) na solidificação rápida, em sistemas Ag-Cu. Kurz et alli, discutem o efeito de Microsegregação Livre no Cristal (MLC) e o refino da microestrutura, onde consideram dois mecanismos para a MLC:

- 1- O crescimento planar estável com a partição de equilíbrio para baixas taxas de crescimento e gradiente de temperatura positivo;
- 2- Solidificação para taxas de crescimento acima do limite de estabilidade absoluta;

Prevêem a microestrutura em ligas com "cobre-soluto" no efeito do "Trapping" ou seja a captura do átomo de cobre pela frente de solidificação do solvente, em função da velocidade. Para o desenvolvimento do modelo consideram a dependência entre:

① Coeficiente de difusão com a temperatura:

$$D = D_0 \cdot \exp\left[\frac{-Q}{R_g \cdot T}\right] \quad (2.47)$$

onde: D_0 = Constante de proporcionalidade;

Q = Energia de ativação;

R_g = Constante do gás;

② Coeficiente de segregação com a velocidade:

$$k' = \frac{k_0 + \left(\frac{a_0 \cdot V}{D}\right)}{1 + \left(\frac{a_0 \cdot V}{D}\right)} \quad (2.48)$$

onde: k_0 = Coeficiente de segregação no equilíbrio;

a_0 = Comprimento de escala relatado para a distância interatômica, estimado entre 0.5 - 5.0 ηm , dado para " $D/a_0 \rightarrow 400 \text{ à } 40 \text{ cm/s}$ " respectivamente;

Estes autores apresentam curva com a relação " $V \times R$ " (R = Raio da Ponta da Dendrita) mostrando o limite absoluto da estabilidade em ' V_a ' (Velocidade de Estabilidade) para uma frente plana \Rightarrow Nesta curva " $G = 10^5 \text{ K/cm para Ag-5wt\%Cu}$ ", observam três valores distintos de V_a :

- 1- V_a para $D(t)$ e $k(V)$ $\cong 30 \text{ cm/s}$
- 2- V_a para $k_0 = \text{cte}$, com $D(t)$ $\cong 200 \text{ cm/s}$
- 3- V_a para D e $k_0 = \text{cte}$ $\cong 300 \text{ cm/s}$

Mostram neste trabalho o efeito do diagrama de fase e a dependência de k_0 como função da temperatura. Apresentam também uma curva teórica e uma discussão entre a velocidade (V) e a concentração de soluto no sólido (C_s^*) onde o aumento da velocidade de solidificação leva ao aumento da concentração de soluto no sólido \Rightarrow "*Trapping do Cobre*".

O interesse deste artigo está nas relações estabelecidas pelos autores, da influência gerada em modelo das aproximação por valores constantes versus a variação clássica dos principais parâmetros de liga, nos resultados finais como: Difusão, Segregação, Inclinação da linha liquidus, Segregação no equilíbrio.

Battle e Pehlke [Battle-1990], também analisam o efeito da microsegregação no processo da solidificação binária, onde desenvolvem um modelo utilizando a técnica matemática do método das linhas combinadas com o acoplamento invariante (MOL/II), combinando transporte de massa e calor durante e após a solidificação. Realizam uma ótima discussão sobre os modelos utilizados no cálculo da microsegregação, dentre os quais:

- Regra da Alavanca;
- Scheil [citado em Battle-1990];
- Brody e Flemings [citado em Battle-1990];
- Clyne e Kurz [citado em Battle-1990];
- Solari e Biloni [citado em Battle-1990];
- Basaran [citado em Battle-1990];

além de que analisam os parâmetros que afetam a microsegregação, sendo os principais:

- Coeficiente de partição (ou microsegregação) $\Rightarrow k'$;
- Taxa de resfriamento;
- Difusividade do soluto no sólido;

Observam que os modelos utilizados no cálculo da microsegregação são baseados no balanço de massa na interface sólido/líquido. São baseados (Exceto Scheil) em redes dendríticas simplificadas. A equação de Scheil assume como base algumas importantes condições, como:

- 1- Não existe fluxo de soluto através do volume de controle;
- 2- Difusão completa no líquido;
- 3- Não ocorre difusão no sólido;
- 4- Regiões de tamanho constante (espaçamento dos braços dendríticos são ignorados);
- 5- Transporte de calor muito rápido quando comparado com o transporte de massa;
- 6- Propriedades físicas constantes;
- 7- Efeitos de convecção e contração da solidificação são insignificantes;

O modelo de Brody-Flemings inclui um termo na equação do balanço de massa de acordo com a difusão no interior da fase sólida, como resultado de um gradiente de concentração local. Assumem que a velocidade da interface sólido/líquido é conhecida para

todo o tempo. Este modelo é criticado por ser de natureza artificial. Na seqüência discutem o modelo apresentado por Clyne e Kurz, Solari e Biloni, e os trabalhos de Burden e Hunt, Laxmanam, Kattamis, Kirkwood, Kurz e Fisher e finalmente Basaran. Encerram este item do trabalho com uma discussão geral sobre os melhoramentos desenvolvidos nos modelos de microsegregação.

Battle e Pehlke em trabalhos anteriores [Battle-1989] analisaram também o erro obtido no coeficiente de microsegregação (k') com a variação da temperatura e a concentração relativa do soluto, em ligas a base de ferro. Em geral este importante parâmetro, utilizado em todas as teorias de microsegregação, é assumido como um fator constante. Entretanto neste trabalho, Battle e Pehlke mostram que tal fator pode assumir erros consideráveis dentro de um sistema de solidificação. Para duas fases, uma sólida (s) e uma líquida (l), por exemplo, o coeficiente de microsegregação (k') para a espécie "i" é definido como segue:

$$k'_i = \frac{x_i^s}{x_i^l} \quad (2.49)$$

onde: x_i^s e x_i^l são as frações molares de soluto no sólido e no líquido respectivamente, quando as duas fases estão em equilíbrio a uma dada temperatura. Trabalham com um rigor matemático onde consideram a expressão do potencial químico na fase 'l' $\Rightarrow S(G_i^s)$, obtendo a atividade química como um produto do coeficiente de atividade química (γ_i^s) e a concentração (x_i^s):

$$G_i^s = G_i^{0,s} + R \cdot T' \cdot \ln(\gamma_i^s \cdot x_i^s) \quad (2.50)$$

assim pela equação do potencial químico 'i' para as duas fases e resolvendo o coeficiente de microsegregação, tem-se que:

$$k'_i = \frac{\gamma_i^l}{\gamma_i^s} \cdot \exp \left[\frac{(G_i^{0,s} - G_i^{0,l})}{R \cdot T} \right] \quad (2.51)$$

sendo que esta equação indica que o coeficiente de microsegregação (k'_i) é uma função da relação entre os coeficientes de atividade química (γ_i^l/γ_i^s) no elemento 'i' das fases, bem como a diferença entre as energias livres padrão aplicada em cada fase ($G_i^{0,s} - G_i^{0,l}$), e principalmente a temperatura relativa ao processo. Esta equação pode ser aplicada para um sistema de muitos componentes e atualmente vem sendo utilizada por muitos estudiosos para o cálculo do coeficiente de microsegregação em sistemas de alta ordem.

2.2.5 - Microporosidade:

As microporosidades formam-se próximo ao final da solidificação nas regiões dendríticas. A relação ' $G.R$ ' (G = gradiente térmico e R = Taxa de solidificação) controla a formação da microporosidade para uma dada temperatura. Baixos valores de ' $G.R$ ' correspondem a alta tendência a formação de microporosidade. Entretanto, segundo Yu et alli [Yu-1990] a relação ' $G.R$ ' para a temperatura solidus é usada para determinar a microporosidade nos casos de solidificação unidirecional, e de crescimento de monocristais devido a análise do crescimento paralelo dos braços dendríticos.

Shivkumar et alli [Shivkumar-1990], trabalhando com ligas de alumínio, mostram a dependência da formação da microporosidade com as pressões de trabalho de solidificação. Analisando a nucleação de poros em conceitos semelhantes à nucleação de grãos, discutem a formação de microporos em localizações heterogêneas do material. Chamando ' P_g ' a pressão para a nucleação de poro, mostram que:

$$P_g = P_{atm} + P_{diret} + P_{contrac} + P_{sup} \quad (2.52)$$

onde: P_{atm} = Pressão atmosférica;

P_{diret} = Pressão devido a direção metalostática;

$P_{contrac}$ = Pressão negativa devido ao volume de contração durante a solidificação;

P_{sup} = Pressão devido a energia superficial, dada por:

$$P_{sup} = \frac{2 \cdot \sigma}{r} \quad (2.53)$$

sendo: σ = Energia de superfície; e

r = Raio do poro;

Um poro com alto raio de curvatura ou baixa energia de superfície pode ser formado sob pressões moderadas, desde que a combinação das forças superficiais sejam relativamente pequenas (r aumenta ou σ diminui $\rightarrow P_{sup}$ diminui). Poros com alto raio de curvatura podem ser formados nas bases dos braços dendríticos, sendo este o efeito para uma nucleação heterogênea, conforme visto na Figura 2.24.

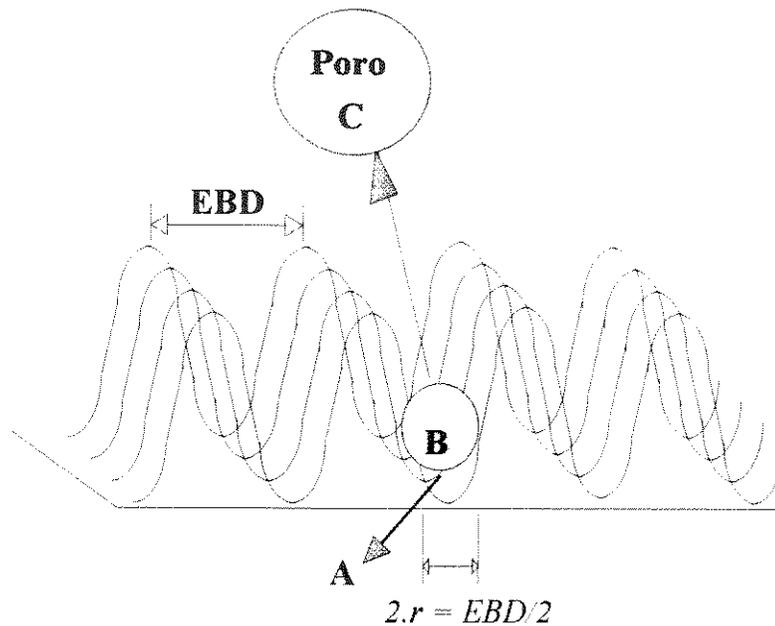


Figura 2.24 - Esquema ilustrativo da nucleação de poro entre os braços dendríticos: **(A)** - Nucleação do poro, **(B)** - Crescimento do poro, **(C)** - Destacamento do poro para os braços dendríticos.

Shivkumar et alli, assumem o raio do poro, como sendo proporcional ao EBD secundário:

$$r = \frac{EBD}{2} \quad (2.54)$$

assumem também que a densidade de poros ' n_{poro} ' é proporcional a densidade de grãos ' $n_{grão}$ ':

$$n_{poro} = A_p \cdot n_{grão} \quad (2.55)$$

onde ' A_p ' é uma constante empírica a qual inclui os efeitos de inclusão e composição da liga.

2.2.6 - Fissuras Térmicas:

Ocorrem próximo ao final da solidificação. A tendência a fissuras térmicas é descrita por vários autores como efeito das tensões térmicas. Altos gradientes de temperatura resultam em altos níveis de tensões térmicas e tendência à formação de fissuras térmicas. Deste modo, as fissuras térmicas podem ser previstas pelo cálculo da taxa de esforço, relatada para a contração da peça, experimentalmente medida em vários pontos distribuídos no interior da peça.

2.2.7 - Mapeamento Morfológico:

Na maioria dos casos práticos as estruturas dendríticas são mais frequentes, sendo necessário o mapeamento deste tipo de crescimento, principalmente nas situações onde ocorrem distribuições não-uniformes de temperatura no interior do corpo líquido. Este tipo de situação (não muito rara) leva a uma distribuição microestrutural totalmente aleatória, conforme mostra a Figura 2.25.

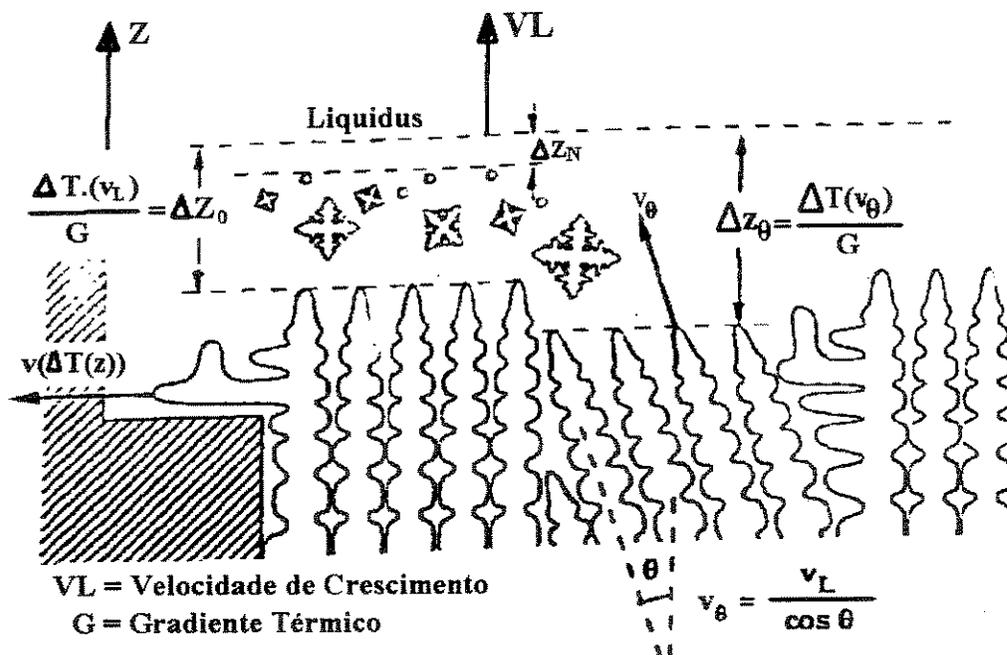


Figura 2.25 - Esquema para vários mecanismos de crescimento ocorrendo em uma liga dendrítica com distribuição de temperatura não uniforme [Rappaz - 1993]

Rappaz e Gandin [Rappaz - 1993] sugerem um modelo que prevê a formação da estrutura de grãos no processo de solidificação, incluindo os mecanismos de nucleação heterogênea e crescimento de grão.

O modelo de Rappaz e Gandin consiste de duas partes: A primeira em escala macroscópica, usando o método de elementos finitos e em alguns casos o método de diferenças finitas, realiza o cálculo da transferência de calor e massa em geometrias complexas bi e tridimensionais, considerando as situações transientes e estacionárias do processo.

A segunda parte do modelo é desenvolvida de acordo com os mecanismos de nucleação e crescimento de grãos em ligas de formação microestrutural eutética ou dendrítica equiaxial. Esta parte do modelo é aplicada entre os limites da transformação de fase (T_s - Temperatura solidus e T_l - Temperatura liquidus). Este modelo é baseado em técnicas determinísticas, onde

os autores adaptam para o caso da solidificação, o método de Monte Carlo, desenvolvido por Srolovitz et alli [Anderson - 1984].

O método de Monte Carlo aplicado a problemas de transferência de calor, também foi utilizado por Maltby e Burns [Maltby - 1991]. Neste trabalho abordam a aplicação teórica e computacional deste método ao problema de transmissões e trocas térmicas pelo efeito da radiação. Entretanto por se tratar de um método que trabalha sobre a coleta randomica de resultados e simulação probabilística, descartamos inicialmente, um maior envolvimento deste método para o projeto em questão, nos interessando por modelos mais sólidos e de aplicações imediatas aos problemas já existentes, como por exemplo a modelagem de geometrias complexas.

Usando a relação ' $G.R$ ', vista anteriormente para a previsão da formação de microporosidades, pode-se mapear a morfologia formada na solidificação. Construindo-se curvas de ' G versus R ' para cada liga em estudo. Yu et alli [Yu-1992] apresentam em seu trabalho um exemplo de mapa morfológico para a solidificação de monocristais, como dado na Figura 2.26.

Observe a semelhança das regiões morfológicas entre a Figura 2.26 e a Figura 2.21, relacionado velocidade de crescimento dendrítico com a taxa de solidificação.

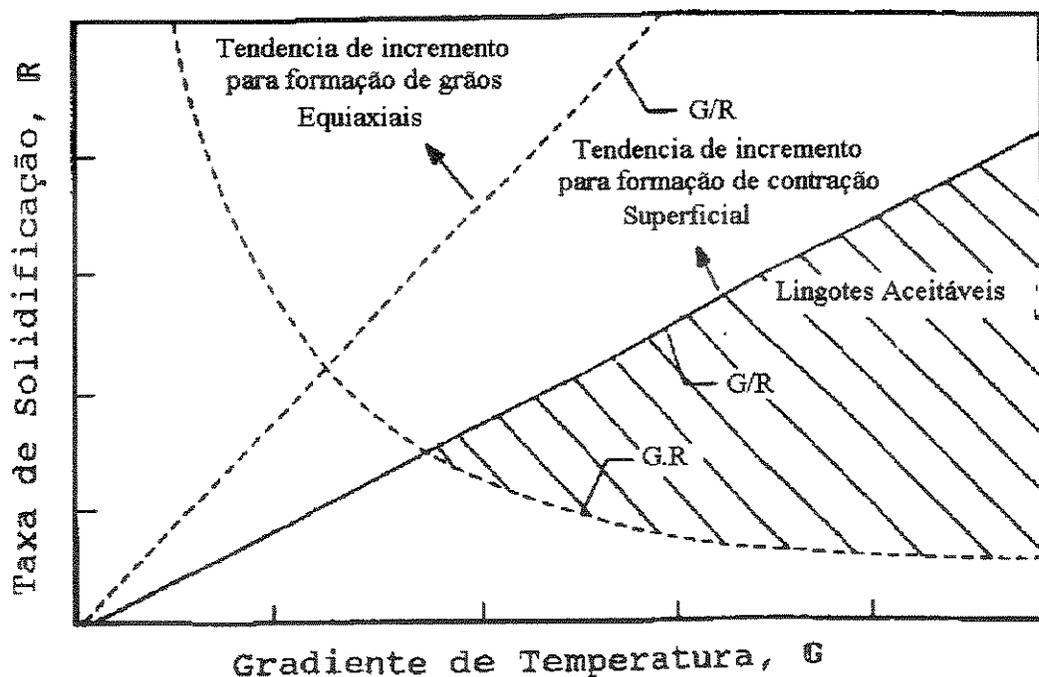


Figura 2.26 - Mapeamento Morfológico para a previsão de defeitos como função do raio ' $G.R$ ', no lingotamento de monocristais [Yu-1992]

2.3 Programas Matemáticos de Simulação do Processo de Solidificação

Um levantamento coerente da bibliografia existente sobre o tema da aplicação de modelos numéricos e equipamentos de computador na indústria de fundição é parte essencial ao desenvolvimento deste trabalho.

Dentro de um artigo sobre o projeto de sistemas de fundição auxiliado por computador, Berry e Pehlke [Berry-1980], desenvolvem uma análise sobre os pontos e elementos contidos dentro da elaboração de programas de computador voltados à indústria de fundição. Berry e Pehlke, também comparam os pontos principais sobre os possíveis métodos numéricos utilizados na modelagem dos sistemas envolvidos (MEF, MDF) e apresentam alguns programas gerados dentro do ambiente acadêmico. Estes autores concordam que as dificuldades na elaboração dos programas de computador concentram-se na geometria da peça envolvida, na previsão das características do transporte térmico, no problema da dinâmica de enchimento do molde, associado com as porosidades envolvidas no lingote, o modelo coerente da interface metal/molde, a correta descrição do erro envolvido e finalmente as características econômicas do sistema de trabalho.

Berry e Pehlke são claros ao declarar que na moderna indústria de fundição, tem-se envolvido uma série de variedades em passos de especializações que envolvem:

- ① - As considerações sobre a eficiência de fabricação e projeto dos produtos envolvidos;
- ② - As considerações de mau aproveitamento entre os objetivos do projeto de produto sobre a real eficiência de fabricação;
- ③ - O projeto das técnicas de moldagem para a incorporação das características desejadas ao produto;
- ④ - O projeto coerente que interligue características específicas a uma produção prática, incluindo a incorporação de resfriadores, melhoramento de estrutura e/ou microestrutura, acoplamento de novos sistemas ou peças de máquina, etc.

Sabe-se que um projeto mal elaborado pode levar a uma grande variedade de gastos e custos desnecessários, além de, em certos casos deteriorar as próprias características de componentes do processo, bem como alguns tipos de defeito podem levar até mesmo a rejeição total da peça fabricada. Como exemplo declaram que um projeto de molde mau elaborado sobre as condições de retirada de calor do sistema metálico, certamente levarão a

condições excessivas de porosidades com a deterioração total da peça. Na discussão geral sobre o desenvolvimento de programas numéricos que representem a realidade destes sistemas, Berry e Pehlke expõem didaticamente os passos necessários à produção de programas qualificados e principalmente as limitações encontradas nestes, dentro da indústria metalúrgica.

Outros autores que também desenvolvem trabalhos voltados ao estudo dos programas numéricos aplicados a indústria de fundição são Svensson e Lundback [Svensson-1986]. Estes são menos genéricos que os anteriores, focalizando seus estudos nas formações de geometrias complexas, discutindo as aplicações de sistemas de CAD/CAM ("Computer Aided Design/Computer Aided Manufacture") e otimizações para sistemas de elementos tridimensionais. Cruz, Chevrier e outros [Cruz-1986] expõem em seu trabalho uma discussão direcional sobre os programas numéricos que gerem as soluções das Equações a Diferenciais Parciais (EDP) - como o Método de Diferenças Finitas e o Método de Elementos Finitos. Analisam programas industriais, e comparam seus resultados em função de máquinas distintas de trabalho, contudo é interessante observar que estes apresentam algumas das necessidades que estes programas devem conter, como por exemplo a análise individual das condições limites, do efeito de transferência de calor do molde para o ambiente, vistos de forma caracterizada como por exemplo: as resistências de contato térmico nas interfaces complexas do metal com o molde e os efeitos da transferência por convecção e radiação nas superfícies da peça. A Figura 2.27 ilustra a individualidade e caracterização de cada efeito. Concordam que os resultados apresentados devem se concentrar nas evoluções de temperatura dentro do molde e no interior do metal, em setores localizados da peça.

Magalhães e Barbedo [Magalhães-1986] também são claros nas discussões que caracterizam a análise independente dos efeitos associados à solidificação dos materiais, onde comentam sobre os três aspectos fundamentais para o modelo de sistemas de solidificação:

1• - O primeiro efeito é caracterizado como a dinâmica da transferência de calor interna ao metal, e os fenômenos de importância básica nas frentes de solidificação;

2• - O segundo efeito são as relações sobre a retirada de calor do metal através do molde considerando neste ponto as contrações naturais do metal durante a solidificação e o casamento dos efeitos relacionados com interface metal/molde;

3• - O terceiro e último aspecto de análise consiste nas características de retirada de calor do molde para o meio ambiente levando-se em conta as considerações do efeito convectivo nas paredes do molde.

Magalhães e Barbedo também comparam dois programas numéricos desenvolvidos dentro de centros de pesquisa, além de discutirem sobre a importância clara sobre o conhecimento das características das ligas envolvidas para o desenvolvimento de um algoritmo coerente e representativo.

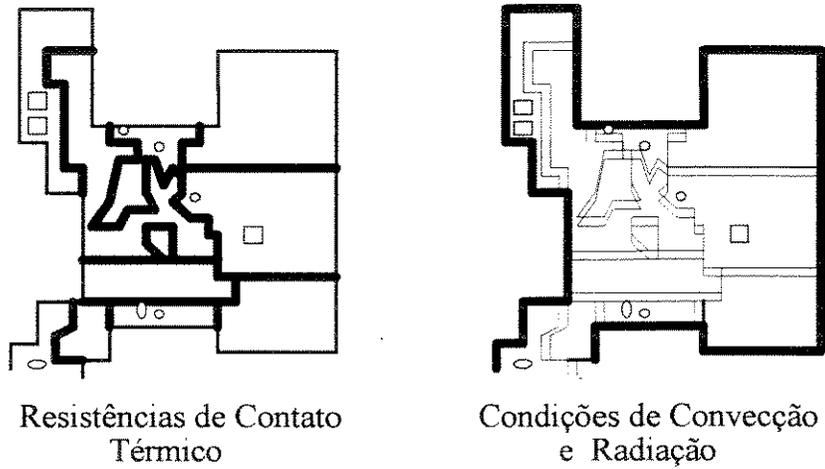


Figura 2.27 - Condições limites do efeito de transferência de temperatura do sistema térmico para o ambiente

Capítulo 3

Modelo Matemático

3.1 Objetivos do Modelo Matemático

3.1.1. - A Modelagem de Processos Metalúrgicos:

Passos de Atuação

- Levantamento do Problema;
- Campo de Atuação do Problema;
- Conhecimento das Condições de Contorno;
- Levantamento das Equações Diferenciais que Regem o Processo Físico;
- Determinação do Método Numérico que será empregado no Desenvolvimento de Modelo;
- Desenvolvimento do Modelo Matemático sobre as Equações Diferenciais do Processo;
- Desenvolvimento do Programa Numérico de Simulação sobre o Modelo Matemático Desenvolvido;
- Aferição do Programa Numérico com Resultados Reais de Processo;
- Restruturação Técnica do programa Numérico, observando Resultados de Aferição e Parâmetros da Máquina (Computador) de Trabalho;
- Simulação Prática de Ensaio;
- Levantamento da Documentação Técnica de Desenvolvimento do Programa Numérico para Treinamento de Usuários e Atualização de Programa;
- Fechamento do Aplicativo Técnico;

3.1.2. - A Atuação da Modelagem nos Processos Metalúrgicos:

- ⇒ Utilizam-se de técnicas numéricas empregadas na solução de equações diferenciais;
- ⇒ São utilizados na simulação de processos, que em geral envolvem complexidade na dinâmica do problema, como:
 - ★ Condições de Contorno Não Constantes;
 - ★ Equações Diferenciais de Difícil Solução;
 - ★ Processos Sujeitos a Instabilidades Geradas por Agentes Externos;
 - ★ Acréscimo de Efeitos Intrínsecos à Dinâmica do Processo;
- ⇒ São consistentes em sua estrutura funcional permitindo a elaboração de programas numéricos solúveis em computadores;

3.1.3. - Finalidade dos Modelos Matemáticos:

- ⇒ Os fenômenos físicos encontrados em problemas de engenharia podem ser descritos em termos de Equações Diferenciais que envolvem mais de uma variável ⇒ "Equações a Diferenciais Parciais (EDP)";
- ⇒ A coleção representativa de EDP sobre um determinado problema de engenharia corresponde ao mapa numérico do problema;
- ⇒ O tratamento do mapeamento numérico por meio de técnicas matemáticas, corresponde ao modelo numérico do problema físico;
- ⇒ A solução do modelo corresponde a solução do problema representado na forma matemática;
- ⇒ A interpretação do resultado matemático em termos físicos, corresponde a solução do problema de engenharia;
- ❖ Os modelos numéricos desenvolvidos sobre técnicas matemáticas, equivalem a uma forte ferramenta para a solução dos mais diversos tipos de problemas em engenharia;

3.2 O Método de Diferenças Finitas Versus o Método de Elementos Finitos

Nos casos particulares de problemas envolvendo a variação das condições de contorno, a utilização dos diversos métodos torna-se limitada devido a necessidade de uma nova programação a cada vez que se variam estas condições, exigindo muito tempo de cálculo. Nos problemas que envolvem fluxo de calor através de interfaces entre diferentes materiais ou fases distintas, tem-se o acréscimo de efeitos que podem dificultar sobremaneira a utilização de um método aplicado à manipulação das equações físicas do processo. As influências dos fenômenos de condução, convecção e radiação que regem o processo de solidificação, podem variar ao longo do processo, bem como em alguns casos variações das propriedades térmicas dos materiais em função da temperatura e a geração interna de calor em uma liga, variando no tempo e espaço, acrescem dificuldades ao modelo de trabalho.

Dos inúmeros métodos existentes na literatura técnica, os mais utilizados e amplamente estudados para o desenvolvimento de modelos numéricos que simulem de forma eficiente o processo de transferência de calor na solidificação de metais são o Método de Diferenças Finitas (M.D.F.) e o Método de Elementos Finitos (M.E.F.). Ambos respondem de forma clara e comprovadamente eficiente às dificuldades expostas anteriormente sobre o processo em questão. Contudo a flexibilidade e aplicabilidade de um método também devem consistir em elementos de análise, bem como a velocidade de processamento em máquina e implementação em programas numéricos, são pontos de garantia à boa utilização de um modelo desenvolvido para a simulação do processo. A decisão da escolha do método utilizado deve ser feita por intermédio das necessidades fundamentais contidas dentro do processo base.

A aplicação em sistemas UNI, BI e Tridimensionais, bem como a subdivisão do corpo físico em nós, módulos e/ou elementos, não será discutida pois ambos os métodos são bem utilizáveis sobre estas questões. Contudo a discussão sobre a facilidade de manipulação das equações numéricas, além da justificativa de mapeamento único e direto do corpo físico são pontos que favorecem imensamente a utilização do M.D.F., sendo que o M.E.F. deve possuir iteração em experimento para ajuste da malha, sendo também de equacionamento bem mais complexo que o M.D.F..

A referência em relação à dificuldade de aplicação das malhas do M.D.F. em corpos de geometria complexa, consiste no argumento mais evidente em relação à não utilização deste método para sistemas de fundição em geometria não regular. No entanto na seqüência deste capítulo apresentamos todo um equacionamento derrubando este argumento, e comprovando definitivamente a utilização do M.D.F. neste tipo de sistema. Assim sendo, na comparação da preparação das malhas para o M.D.F. e M.E.F. observa-se que o M.D.F. é muito mais simples e mais direto que o M.E.F., pois como citado anteriormente este deve ser ajustado

iterativamente ao corpo físico, buscando a melhor condição de malha e equacionamento. O M.D.F. não apresenta tais inconvenientes, conforme mostramos na seqüência deste capítulo.

Paradoxalmente, o M.D.F. apresenta mapeamento muito mais natural, o que possibilita a elaboração de programas numéricos de fácil implementação em computadores de pequeno porte, onde em contrapartida, dependendo da complexidade do corpo físico, um modelo elaborado sobre o M.E.F., tem a necessidade de utilização de computadores de grande porte além de programas de velocidade realizáveis. Só este argumento já seria o suficiente para encerrarmos esta discussão e justificar a utilização do M.D.F.. Entretanto quando se trata de um método numérico, a principal pergunta que deve ser esclarecida é sobre qual método é mais preciso em termos dos resultados gerados. Contudo é importante notar que ambos os métodos são amplamente utilizados, gerando ambos resultados favoráveis, mas um estudo mais profundo sobre qual método é mais eficiente em termos de precisão não corresponde ao escopo deste trabalho, onde nos propomos a escolher um entre dois métodos aplicáveis e de eficiência comprovada, para a continuidade do projeto.

Não apenas as argumentações citadas, elevando as vantagens do M.D.F sobre o M.E.F., mas também a impossibilidade inicial da aplicação direta de programas numéricos para o funcionamento em computadores mono-usuários de pequeno porte, descarta totalmente a possibilidade de se trabalhar, mesmo que em paralelo com o M.E.F..

3.3 Métodos Numéricos

3.3.1 - O Problema da Transferência de calor na solidificação de ligas binárias:

A equação diferencial de grande interesse no fenômeno de solidificação unidirecional, é conhecida como "Equação Geral da Condução de Calor em Regime Transitório" dada por:

$$\rho \cdot c \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[k(x) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right] + q \quad (3.1)$$

sendo:

ρ = Densidade do material condutor [kg/m³];

c = Calor específico do material condutor [J/kg.K];

k = Condutibilidade térmica do material ao longo da linha de condução [W/m.K];

\dot{q} = Representa o termo de geração interna de calor, associado a transformações de fases com a liberação do calor latente para casos particulares da solidificação e transferência de calor nos materiais;

$\frac{\partial T}{\partial x}$ = Gradiente térmico entre os pontos fixos da linha de condução;

$\frac{\partial T}{\partial t}$ = Taxa de resfriamento ou aquecimento do material condutor;

A Equação 3.1 pode ser rescrita genericamente como uma equação de balanço de energia em um elemento finito genérico 'i' do material condutor, onde:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Energia} \\ \text{Acumulada} \\ \text{no Ponto 'i'} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Energias} \\ \text{que Chegam e} \\ \text{Saem do Ponto 'i'} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{Energia} \\ \text{Gerada Internamente} \\ \text{ao Ponto 'i'} \end{array} \right] \quad (3.2)$$

Para a maioria dos materiais encontrados nos problemas de engenharia, vale como uma boa aproximação a consideração de uma média isotrópica das propriedades físicas do material, sendo assim, é interessante considerar na Equação 3.1:

$$k(x) = k_{cte} = k \quad (3.3)$$

sendo 'k_{cte}' a condutividade térmica média do material, constante ao longo da linha de condução.

O termo de geração interna de calor (\dot{q}) é dado pela literatura como uma boa aproximação para o caso da solidificação de ligas binárias, em função do efeito da taxa de fração solidificada, por:

$$\dot{q} = \rho \cdot H \cdot \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (3.4)$$

sendo que 'H' equivale ao calor latente de fusão do material e $\left(\frac{\partial f_s}{\partial t} \right)$ a taxa de fração solidificada.

Aplicando (3.3) e (3.4) em (3.1), chega-se em:

$$\rho \cdot c \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = k \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \rho \cdot H \cdot \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (3.5)$$

matematicamente pode-se aproximar $\left(\frac{\partial fs}{\partial t}\right)$ por:

$$\frac{\partial fs}{\partial t} = \frac{\partial fs}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.6)$$

onde a Equação 3.5 transforma-se em:

$$\rho \cdot c' \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = k \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (3.7)$$

sendo:
$$c' = \left(c - H \cdot \frac{\partial fs}{\partial T} \right) \quad (3.8)$$

O termo $\left(H \cdot \frac{\partial fs}{\partial T} \right)$ na Equação 3.8, pode ser entendido como um pseudo calor específico, onde a velocidade de solidificação é controlada pela relação entre o pseudo calor específico que representa a liberação do calor latente do material na transformação de fase e o calor específico do material. O calor específico aparente do material representado por c' , toma a generalidade de incluir o efeito da liberação do calor gerado internamente.

A Equação 3.7 representa a equação geral da condução de calor considerando o efeito da taxa de fração solidificada com a liberação do calor latente do material na transformação de fase líquido/sólido ao longo da solidificação de uma liga binária.

3.3.2 - A Expansão de Taylor para o Método de Diferenças Finitas (MDF):

Admitindo-se a função $T = T(x_i)$ contínua e suficientemente derivável em relação ao ponto x_i , pode-se expandi-la para os pontos (x_i) e $(x_i + \Delta x)$:

$$T(x_i + \Delta x) = T(x_i) + \Delta x \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i^2} + \dots + \frac{\Delta x^{N-1}}{(N-1)!} \frac{\partial^{N-1} T}{\partial x_i^{N-1}} + E(\Delta x^N)$$

(3.9)

ou nos pontos (x_i) e $(x_i - \Delta x)$:

$$T(x_i - \Delta x) = T(x_i) - \Delta x \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i^2} - \dots + (-1)^{N-1} \cdot \frac{\Delta x^{N-1}}{(N-1)!} \frac{\partial^{N-1} T}{\partial x_i^{N-1}} + E(\Delta x^N)$$

(3.10)

onde $E(\Delta x^N)$ corresponde ao termo de truncamento da série no n-ésimo termo.

Somando as Equações 3.9 e 3.10, truncadas no termo de 3º Grau, obtêm-se:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T(x_i + \Delta x) - 2 \cdot T(x_i) + T(x_i - \Delta x)}{\Delta x^2} + E(\Delta x^3) \quad (3.11)$$

Truncando a série da Equação 3.9 no termo de 2º Grau obtêm-se:

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T(x_i + \Delta x) - T(x_i)}{\Delta x} + E(\Delta x^2) \quad (3.12.A)$$

Truncando a série da Equação 3.10 no termo de 2º Grau obtêm-se:

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T(x_i) - T(x_i - \Delta x)}{\Delta x} + E(\Delta x^2) \quad (3.12.B)$$

A Equação 3.11 é chamada de Diferença Finita Central a 3 pontos e a Equação 3.12.A é chamada de Diferença Finita de avanço do ponto 'i' e a Equação 3.12.B é chamada Diferença Finita de retorno do ponto 'i'.

O erro de truncamento pode ser minimizado ou $E(\Delta x^N) \rightarrow 0$ se $\Delta x \rightarrow 0$.

Pode-se aproximar os termos da Equação 3.7 pelos termos a Diferenças Finitas, supondo $E(\Delta x^N) \cong 0$, assim:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} \quad (3.13)$$

$$e \quad \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1}^n - 2 \cdot T_i^n + T_{i-1}^n}{\Delta x^2} \quad (3.14)$$

onde:

$$T_i^{n+1} = T(t_i + \Delta t, x_i) \quad (3.15)$$

$$T_i^n = T(t_i, x_i) \quad (3.16)$$

$$T_{i+1}^n = T(t_i, x_i + \Delta x) \quad (3.17)$$

$$T_{i-1}^n = T(t_i, x_i - \Delta x) \quad (3.18)$$

Sendo t_i e x_i a representação do tempo e espaço instantâneo.

Substituindo (3.11) e (3.12.A) em (3.7), esta transforma-se em:

$$\rho \cdot c \cdot \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = k \cdot \frac{T_{i+1}^n - 2 \cdot T_i^n + T_{i-1}^n}{\Delta x^2} \quad (3.19)$$

Multiplicando a Equação 3.19 por ' $A_t \cdot \Delta x$ ' onde A_t é a área de passagem do fluxo térmico dado pela área finita $\Delta y \cdot \Delta z$, conforme a Figura 3.1, chega-se em:

$$A_t \cdot \Delta x \cdot \rho \cdot c \cdot \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = A_t \cdot k \cdot \frac{(T_{i+1}^n - T_i^n) + (T_{i-1}^n - T_i^n)}{\Delta x} \quad (3.20)$$

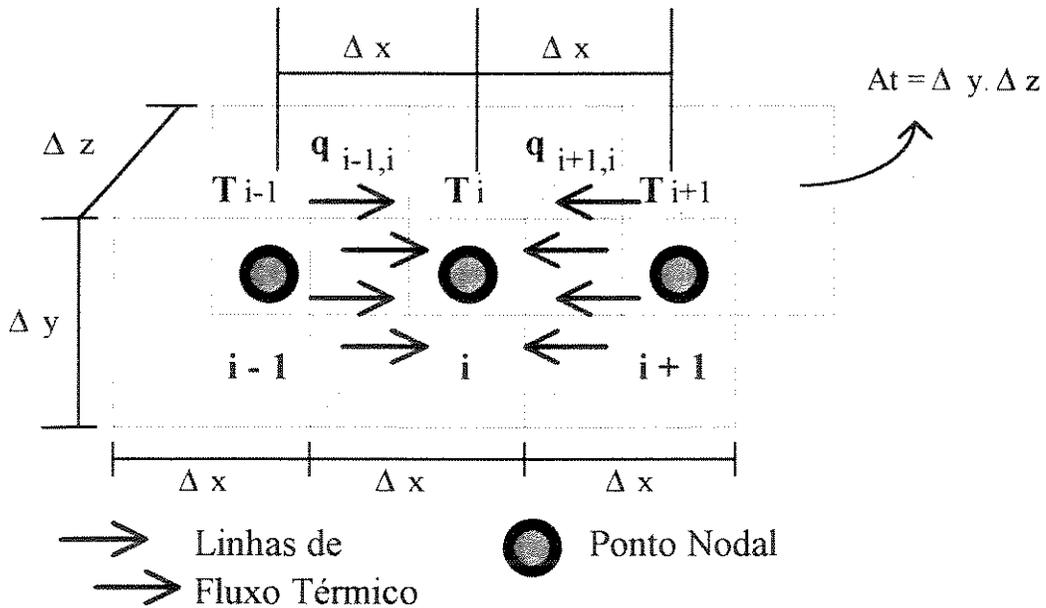


Figura 3.1 - Representação Esquemática do MDF Aplicado ao Fenômeno de Transferência de Calor

O acúmulo de energia do elemento finito 'i' é caracterizado pela sua capacidade térmica, dado pela relação:

$$C_{ii} = A_t \cdot \Delta x_i \cdot \rho_i \cdot c_i \quad (3.21)$$

onde $A_t \cdot \Delta x_i$ equivale ao volume finito do elemento 'i', e C_{ii} é a capacidade térmica do elemento.

O fluxo térmico entre os pontos centrais dos elementos finitos, tem como resistência de passagem um valor representado pelo inverso da condutividade térmica, dado por:

$$R_t = \frac{\Delta x}{k \cdot A_t} \quad (3.22)$$

onde Δx equivale à distância percorrida pelo fluxo entre os pontos centrais. A resistência térmica pode ser especificada para o intervalo interior a cada semi-distância de elementos finitos individuais ($i, i-1$ e $i+1$) para diferentes distâncias finitas na direção 'x' ($\Delta x_i, \Delta x_{i-1}, \Delta x_{i+1}$), conforme Figura 3.2.

Desta forma a resistência térmica no interior de cada elemento até a interface com o elemento adjacente é dada por:

$$R_{t_{i-1}} = \frac{\Delta x_{i-1}}{2 \cdot k_{i-1} \cdot A_t} \quad (3.23)$$

$$R_{t_i} = \frac{\Delta x_i}{2 \cdot k_i \cdot A_t} \quad (3.24)$$

$$R_{t_{i+1}} = \frac{\Delta x_{i+1}}{2 \cdot k_{i+1} \cdot A_t} \quad (3.25)$$

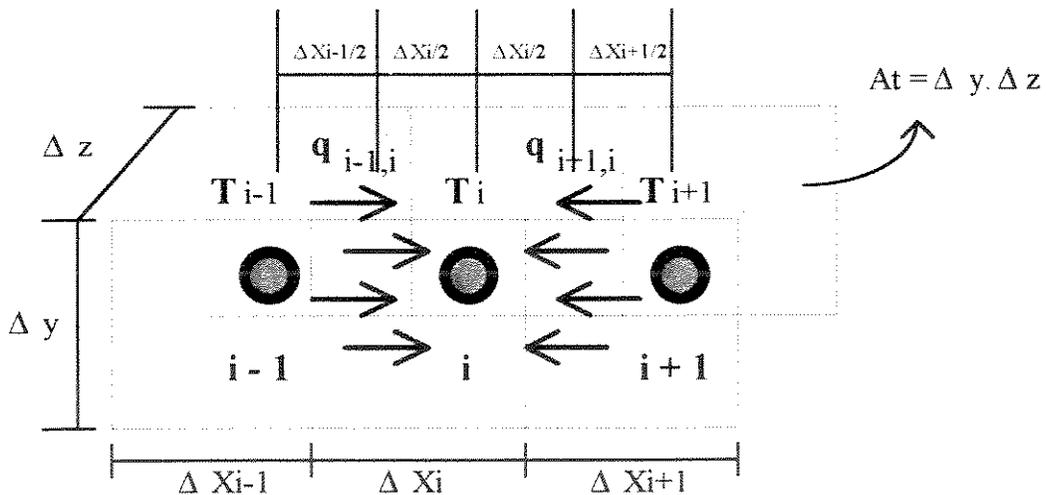


Figura 3.2 - Individualização das distâncias Finitas para os Elementos Nodais do MDF

Generalizando a Equação 3.20 com a substituição de (3.25), (3.24), (3.23) e (3.21), chega-se em:

$$T_i^{n+1} = \frac{\Delta t}{C_t} \cdot \left(\frac{T_{i-1}^n}{R_{t_{i-1}} + R_{t_i}} + \frac{T_{i+1}^n}{R_{t_i} + R_{t_{i+1}}} \right) + \left[1 - \frac{\Delta t}{C_t} \cdot \left(\frac{1}{R_{t_{i-1}} + R_{t_i}} + \frac{1}{R_{t_i} + R_{t_{i+1}}} \right) \right] \cdot T_i^n \quad (3.26)$$

a Equação 3.26 pode ser escrita de forma simplificada por:

$$T_i^{n+1} = \frac{\Delta t}{\tau_{di}} \cdot T_{i-1}^n + \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_{dqi}}\right) \cdot T_i^n + \frac{\Delta t}{\tau_{qi}} \cdot T_{i+1}^n \quad (3.27.A)$$

A Equação 3.27.A corresponde a equação de solução do M.D.F. na forma explícita de trabalho, e é estável para valores de $\Delta t \leq \tau_{dqi}$, sendo este o critério de estabilidade do M.D.F.. A substituição da derivada de 1ª ordem pela diferença de retorno do ponto 'i' (Equação 3.12.B) leva a Equação 3.7 para a forma:

$$T_i^n = -\frac{\Delta t}{\tau_{di}} \cdot T_{i-1}^{n+1} + \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_{dqi}}\right) \cdot T_i^{n+1} - \frac{\Delta t}{\tau_{qi}} \cdot T_{i+1}^{n+1} \quad (3.27.B)$$

A Equação 3.27.B corresponde a equação de solução do M.D.F. na forma implícita de trabalho, e esta não possui critério de estabilidade, sendo estável para qualquer Δt , contudo sua solução só pode ser obtida por métodos numéricos aplicados a sistemas lineares.

Para as Equações 3.27.A e 3.27.B, tem-se que:

$$\tau_{di} = C_{t_i} \cdot (R_{t_{i-1}} + R_{t_i}) \quad (3.28)$$

$$\tau_{qi} = C_{t_i} \cdot (R_{t_i} + R_{t_{i+1}}) \quad (3.29)$$

$$\tau_{dqi} = \frac{\tau_{di} \cdot \tau_{qi}}{\tau_{di} + \tau_{qi}} \quad (3.30)$$

3.3.3 - O Método Implícito das Direções Alternadas (ADI):

Considerando a forma tridimensional para a Equação 3.7, tem-se:

$$\rho \cdot c' \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = k \cdot \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \quad (3.31)$$

Aplicando o MDF, no modo explícito de trabalho, em (3.31), chega-se em:

$$T_{i,j,k}^{n+1} = \lambda \cdot (T_{i-1,j,k}^n + T_{i+1,j,k}^n + T_{i,j-1,k}^n + T_{i,j+1,k}^n + T_{i,j,k-1}^n + T_{i,j,k+1}^n) + (1 - 6 \cdot \lambda) \cdot T_{i,j,k}^n \quad (3.32)$$

onde:

$$\lambda = \frac{\alpha \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \rightarrow \Delta t \leq \frac{p \cdot \Delta x^2}{\alpha} \Rightarrow p = \text{Número de Fourier} \quad (3.33)$$

e $\alpha = \frac{k}{\rho \cdot c} \Rightarrow \text{Difusividade térmica do material [m}^2/\text{s]} \quad (3.34)$

a Equação 3.33 representa o critério de estabilidade da Equação 3.32, sendo:

$$p = 1/2 \rightarrow \text{para sistema Unidimensional}$$

$$p = 1/4 \rightarrow \text{para sistema Bidimensional}$$

$$p = 1/6 \rightarrow \text{para sistema Tridimensional}$$

Aplicando o MDF, no modo implícito de trabalho, em 3.31, chega-se em:

$$T_{i,j,k}^n = -\lambda \cdot (T_{i-1,j,k}^{n+1} + T_{i+1,j,k}^{n+1} + T_{i,j-1,k}^{n+1} + T_{i,j+1,k}^{n+1} + T_{i,j,k-1}^{n+1} + T_{i,j,k+1}^{n+1}) + (1 + 6 \cdot \lambda) \cdot T_{i,j,k}^{n+1} \quad (3.35)$$

Para a forma Unidimensional a Equação 3.35 é facilmente solúvel por um **sistema tridiagonal**. No entanto para modelos Bi e Tridimensionais, os sistemas gerados tornam-se complicados, resultando em matrizes de bandas diagonais de solução mais delicadas, sendo que para um número de pontos necessários as situações práticas (Tipicamente, poucas centenas ou mais), a solução simultânea requer muita memória de máquina e velocidade de CPU (Central de Processamento Unitária).

O Método Implícito das Direções Alternadas (ADI), combina a vantagem de gerar sistemas tridiagonais, sem o critério de estabilidade no incremento do tempo (Δt), para as malhas Bi e Tridimensionais.

3.3.4 - O Princípio do ADI [Mampaey-1990]:

Para o problema Bidimensional o ADI resolve a Equação 3.31 pela subdivisão de cada passo de tempo (Δt) em duas partes iguais. O espaço derivado nesta equação é aproximadamente implícito na direção X e explícito na direção Y sobre o primeiro meio intervalo de tempo:

$$T_{i,j}^* - T_{i,j}^n = \frac{\Delta t}{2} \cdot \alpha \cdot (\delta_x^2 T_{i,j}^* + \delta_y^2 T_{i,j}^n) \quad (3.36)$$

O procedimento é reverso para o segundo meio intervalo:

$$T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^* = \frac{\Delta t}{2} \cdot \alpha \cdot (\delta_x^2 T_{i,j}^* + \delta_y^2 T_{i,j}^{n+1}) \quad (3.37)$$

T^* representa a temperatura intermediária computada para o final do meio intervalo de tempo ($= n + 1/2$) e ' δ ' o operador de diferença central:

$$\delta_x^2 T_{i,j}^n = \frac{T_{i-1,j}^n - 2 \cdot T_{i,j}^n + T_{i+1,j}^n}{\Delta x^2} \quad (3.38)$$

$$\delta_y^2 T_{i,j}^n = \frac{T_{i,j-1}^n - 2 \cdot T_{i,j}^n + T_{i,j+1}^n}{\Delta y^2} \quad (3.39)$$

Substituindo a Equação 3.38 e 3.39 na Equação 3.36 e 3.37, chega-se em:

$$-\lambda_x \cdot T_{i-1,j}^* + (1 + 2 \cdot \lambda_x) \cdot T_{i,j}^* - \lambda_x \cdot T_{i+1,j}^* = \lambda_y \cdot T_{i,j-1}^n + (1 + 2 \cdot \lambda_y) \cdot T_{i,j}^n + \lambda_y \cdot T_{i,j+1}^n \quad (3.40)$$

$$-\lambda_y \cdot T_{i,j-1}^{n+1} + (1 + 2 \cdot \lambda_y) \cdot T_{i,j}^{n+1} - \lambda_y \cdot T_{i,j+1}^{n+1} = \lambda_x \cdot T_{i-1,j}^* + (1 + 2 \cdot \lambda_x) \cdot T_{i,j}^* + \lambda_x \cdot T_{i+1,j}^* \quad (3.41)$$

onde:
$$\lambda_x = \alpha \cdot \frac{\Delta t}{2 \cdot \Delta x^2} \quad \text{e} \quad \lambda_y = \alpha \cdot \frac{\Delta t}{2 \cdot \Delta y^2} \quad (3.42)$$

Este procedimento resulta em sistemas tridiagonais para cada meio intervalo do passo de tempo.

O primeiro passo é solucionado com o cálculo explícito. Para cada elemento da Linha AA (Figura 3.3), um novo valor de temperatura é calculado com base nas antigas temperaturas dos três elementos vizinhos (Figura 3.3.A). Este procedimento corresponde ao lado direito das Equações 3.40 e 3.41. Finalmente todas as temperaturas da linha AA são resolvidas simultaneamente usando um sistema tridiagonal (Figura 3.3.B).

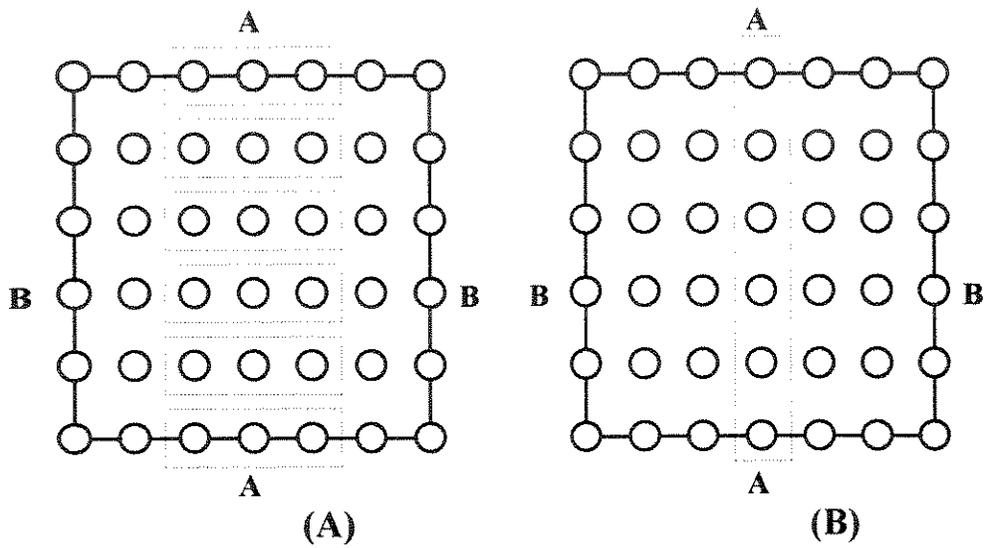


Figura 3.3 - Representação esquemática para a solução do ADI

3.3.5 - Um Exemplo Numérico:

Suponha o sistema apresentado na Figura 3.4, os passos para a solução deste sistema pelo ADI, são apresentados a seguir:

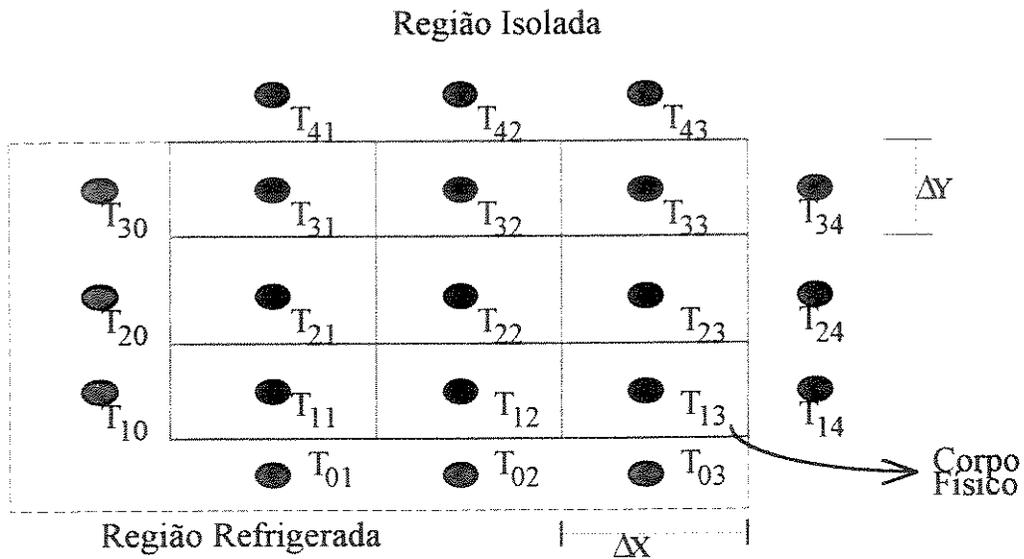


Figura 3.4 - Sistema para o exemplo numérico do ADI

PARTE A

Passo 1 ⇨ Solução no modo Explícito na direção 'x', para meio intervalo de tempo (coluna 1):

$$T_{11}^{*n} = \lambda_y \cdot T_{10}^n + (1 - 2 \cdot \lambda_y) \cdot T_{11}^n + \lambda_y \cdot T_{12}^n$$

$$T_{21}^{*n} = \lambda_y \cdot T_{20}^n + (1 - 2 \cdot \lambda_y) \cdot T_{21}^n + \lambda_y \cdot T_{22}^n$$

$$T_{31}^{*n} = \lambda_y \cdot T_{30}^n + (1 - 2 \cdot \lambda_y) \cdot T_{31}^n + \lambda_y \cdot T_{32}^n$$

Passo 2 ⇨ Solução no modo Implícito na direção 'y', para meio intervalo de tempo (coluna 1) (AJUSTE do Passo 1)

$$- \lambda_x \cdot T_{01}^* + (1 + 2 \cdot \lambda_x) \cdot T_{11}^* - \lambda_x \cdot T_{21}^* = T_{11}^{*n}$$

$$- \lambda_x \cdot T_{11}^* + (1 + 2 \cdot \lambda_x) \cdot T_{21}^* - \lambda_x \cdot T_{31}^* = T_{21}^{*n}$$

$$- \lambda_x \cdot T_{21}^* + (1 + 2 \cdot \lambda_x) \cdot T_{31}^* - \lambda_x \cdot T_{41}^* = T_{31}^{*n}$$

Após estes passos tem-se os valores de T^* para a coluna 1.

Algoritmo da Parte A:

Para $j = 1$ até 3, faça: {

Para $i = 1$ até 3, faça: {

$$T_{i,j}^{*n} = \lambda_y \cdot T_{i,j-1}^n + (1 - 2 \cdot \lambda_y) \cdot T_{i,j}^n + \lambda_y \cdot T_{i,j+1}^n \quad /* \text{PASSO 1} */$$

}

Montar sistema Implícito /* PASSO 2 */

$$\text{a) } [A] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda_x & (1 + 2 \cdot \lambda_x) & -\lambda_x & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda_x & (1 + 2 \cdot \lambda_x) & -\lambda_x & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda_x & (1 + 2 \cdot \lambda_x) & -\lambda_x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

b) Solucionar o Sistema " $[A] \cdot \{T_{i,j}^*\} = \{T_{i,j}^{*n}\}$ "

c) Armazenar Resultados de $\{T_{i,j}^*\}$ para a coluna 'j'

}

Após esta parte do algoritmo, tem-se todos os valores de $T_{i,j}^*$ da malha armazenados.

PARTE B

Passo 1 \Rightarrow Solução no modo Explícito na direção 'x', para meio intervalo de tempo (linha 1):

$$T_{11}^{*(n+1)} = \lambda_x \cdot T_{01}^* + (1 - 2 \cdot \lambda_x) \cdot T_{11}^* + \lambda_x \cdot T_{21}^*$$

$$T_{12}^{*(n+1)} = \lambda_x \cdot T_{02}^* + (1 - 2 \cdot \lambda_x) \cdot T_{12}^* + \lambda_x \cdot T_{22}^*$$

$$T_{13}^{*(n+1)} = \lambda_x \cdot T_{03}^* + (1 - 2 \cdot \lambda_x) \cdot T_{13}^* + \lambda_x \cdot T_{23}^*$$

Passo 2 \Rightarrow Solução no modo Implícito na direção 'y', para meio intervalo de tempo (linha 1)
(AJUSTE do Passo 1)

$$-\lambda_y \cdot T_{10}^{(n+1)} + (1 + 2 \cdot \lambda_y) \cdot T_{11}^{(n+1)} - \lambda_y \cdot T_{12}^{(n+1)} = T_{11}^{*(n+1)}$$

$$-\lambda_y \cdot T_{11}^{(n+1)} + (1 + 2 \cdot \lambda_y) \cdot T_{12}^{(n+1)} - \lambda_y \cdot T_{13}^{(n+1)} = T_{12}^{*(n+1)}$$

$$-\lambda_y \cdot T_{12}^{(n+1)} + (1 + 2 \cdot \lambda_y) \cdot T_{13}^{(n+1)} - \lambda_y \cdot T_{14}^{(n+1)} = T_{13}^{*(n+1)}$$

Após estes passos tem-se os valores de $T^{(n+1)}$ para a linha 1.

Algoritmo da Parte B:

Para $i = 1$ até 3, faça: {

Lê valores de $T_{i,j}^*$ para a linha 'i', 'i-1' e 'i+1'

Para $j = 1$ até 3, faça: {

$$T_{i,j}^{(n+1)n} = \lambda_x \cdot T_{i-1,j}^* + (1 - 2 \cdot \lambda_x) \cdot T_{i,j}^* + \lambda_x \cdot T_{i+1,j}^* \text{ /* PASSO 1 */}$$

}

Montar sistema Implícito /* PASSO 2 */

$$a) [A] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda_y & (1+2.\lambda_y) & -\lambda_y & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda_y & (1+2.\lambda_y) & -\lambda_y & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda_y & (1+2.\lambda_y) & -\lambda_y \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

b) Solucionar o Sistema " $[A].\{T_{i,j}^{(n+1)}\} = \{T_{i,j}^{(n+1)_n}\}$ "

c) Armazenar Resultados de $\{T_{i,j}^*\}$ para a linha 'i'

}

Após este algoritmo tem-se a solução para todos os valores de $T_{i,j}^{(n+1)}$ em 't + Δt '. Iteragindo este algoritmo pode-se varrer os valores de $T_{i,j}$ até o tempo máximo desejado.

3.3.6 - Melhoramentos e Otimizações de Modelo para o Desenvolvimento de Sistemas Tridimensionais:

3.3.6.1. Método Implícito das Direções Alternadas:

Uma otimização prática dada ao método implícito das direções alternadas (ADI), consiste na aplicação da analogia de sistemas térmicos com circuitos elétricos de resistores e capacitores, estudada pelo autor deste projeto em sua dissertação de mestrado [Tese-Spim Jr. - 1993]. Isto vem facilitar a visualização das equações apresentadas pelo ADI em função do sistema físico de trabalho.

Assim modifica-se a Equação 3.40 para:

$$-\frac{\Delta t}{2.\tau_{(i,j),(i-1,j)}}T_{i-1,j}^* + \left(1 + \frac{\Delta t}{2.\tau_{(i,j),(i,j)}}\right)T_{i,j}^* - \frac{\Delta t}{2.\tau_{(i,j),(i+1,j)}}T_{i+1,j}^* = \frac{\Delta t}{2.\tau_{(i,j),(i,j-1)}}T_{i,j-1}^n + \left(1 - \frac{\Delta t}{2.\tau_{(i,j),(i,j)}}\right)T_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{2.\tau_{(i,j),(i,j+1)}}T_{i,j+1}^n \quad (3.43)$$

e a Equação 3.41 para:

$$-\frac{\Delta t}{2 \cdot \tau_{(i,j),(i,j-1)}} T_{i,j-1}^{n+1} + \left(1 + \frac{\Delta t}{2 \cdot \tau_{(i,j),(i,j)}}\right) T_{i,j}^{n+1} - \frac{\Delta t}{2 \cdot \tau_{(i,j),(i,j+1)}} T_{i,j+1}^{n+1} = \frac{\Delta t}{2 \cdot \tau_{(i,j),(i-1,j)}} T_{i-1,j}^* + \left(1 - \frac{\Delta t}{2 \cdot \tau_{(i,j),(i,j)}}\right) T_{i,j}^* + \frac{\Delta t}{2 \cdot \tau_{(i,j),(i+1,j)}} T_{i+1,j}^* \quad (3.44)$$

onde:

$$\tau_{(i,j),(i-1,j)} = Ct_{i,j} \cdot (Rt_{(i,j)h} + Rt_{(i-1,j)h}) \quad (3.45)$$

$$\tau_{(i,j),(i,j-1)} = Ct_{i,j} \cdot (Rt_{(i,j)v} + Rt_{(i,j-1)v}) \quad (3.46)$$

$$\tau_{(i,j),(i+1,j)} = Ct_{i,j} \cdot (Rt_{(i,j)h} + Rt_{(i+1,j)h}) \quad (3.47)$$

$$\tau_{(i,j),(i,j+1)} = Ct_{i,j} \cdot (Rt_{(i,j)v} + Rt_{(i,j+1)v}) \quad (3.48)$$

$$\frac{1}{\tau_{(i,j),(i,j)}} = \frac{1}{\tau_{(i,j),(i-1,j)}} + \frac{1}{\tau_{(i,j),(i+1,j)}} + \frac{1}{\tau_{(i,j),(i,j-1)}} + \frac{1}{\tau_{(i,j),(i,j+1)}} \quad (3.49)$$

Em termos físicos, os elementos do lado direito das Equações 3.45, 3.46, 3.47, 3.48 e 3.49 podem ser vistos na Figura 3.5, onde:

$$Ct_{i,j} = \rho_{i,j} \cdot c_{i,j} \cdot \Delta x_i \cdot \Delta y_j \cdot \Delta z \quad (3.50)$$

$$Rt_{(i,j)h} = \frac{\Delta x_i}{2 \cdot k_{i,j} \cdot \Delta y_j \cdot \Delta z} \quad (3.51)$$

$$Rt_{(i-1,j)h} = \frac{\Delta x_{i-1}}{2 \cdot k_{i-1,j} \cdot \Delta y_j \cdot \Delta z} \quad (3.52)$$

$$Rt_{(i+1,j)h} = \frac{\Delta x_{i+1}}{2 \cdot k_{i+1,j} \cdot \Delta y_j \cdot \Delta z} \quad (3.53)$$

$$Rt_{(i,j)v} = \frac{\Delta y_j}{2 \cdot k_{i,j} \cdot \Delta x_i \cdot \Delta z} \quad (3.54)$$

$$Rt_{(i,j-1)v} = \frac{\Delta y_{j-1}}{2 \cdot k_{i,j-1} \cdot \Delta x_i \cdot \Delta z} \quad (3.55)$$

$$R_{t(i,j+1)v} = \frac{\Delta y_{j+1}}{2 \cdot k_{i,j+1} \cdot \Delta x_i \cdot \Delta z} \quad (3.56)$$

sendo $k_{i,j}$, $\rho_{i,j}$ e $c_{i,j}$ os valores da condutividade térmica, a densidade e o calor específico respectivamente, para o ponto i,j .

3.3.6.2. Otimização do Método de Diferenças Finitas para o tratamento Unidimensional

Pode-se otimizar o sistema linear de trabalho do M.D.F. para o modo Implícito considerando que este, na sua forma unidimensional, gera sistemas clássicos tridiagonais. A vetorização da matriz gerada, equivale a uma economia de memória, na implementação em máquina, da ordem de 70% da alocação utilizada para a solução convencional. Um valor bastante expressivo, quando um dos problemas da aplicação de métodos numéricos consiste justamente no excesso de memória utilizada pelos diversos modelos.

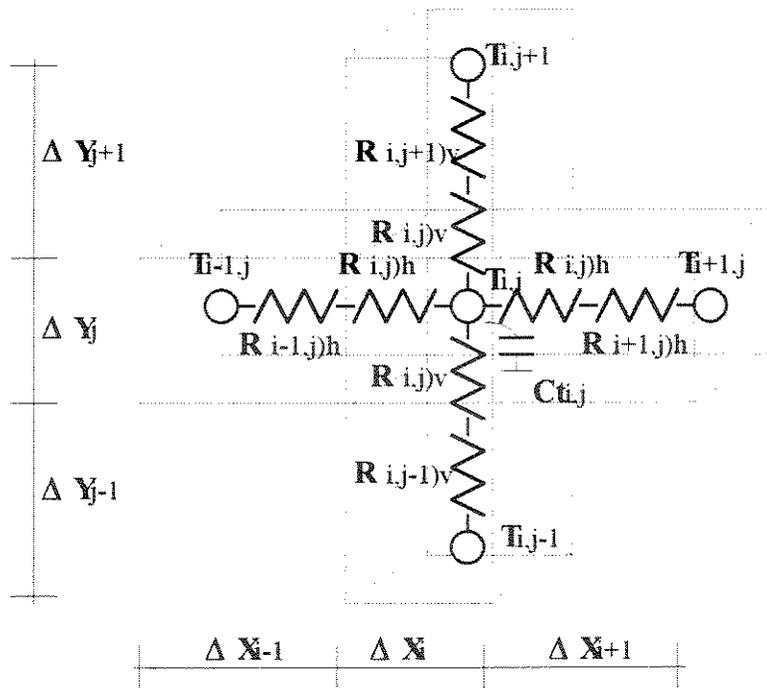


Figura 3.5 - Representação física para a solução do ADI - Otimizado

Após a vetorização do sistema linear, apresentamos sua solução, trabalhando com o Método de Gauss, por ser este um método confiável e de fácil aplicação. Trabalhando com um sistema característico e eventualmente vetorizado, apresentamos as equações básicas modificadas para a solução geral do sistema.

3.3.6.2.A - Vetorização do sistema tridiagonal:

O modelo do M.D.F. , na sua forma unidimensional gera sistemas tridiagonais da forma:

$$\begin{bmatrix}
 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\
 A_{21} & A_{22} & A_{23} & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\
 0 & A_{32} & A_{33} & A_{34} & 0 & \dots & \dots & 0 \\
 0 & 0 & A_{43} & A_{44} & A_{45} & \dots & \dots & 0 \\
 \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & A_{N-1,N-2} & A_{N-1,N-1} & A_{N-1,N} \\
 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 1
 \end{bmatrix}_{N \times N} * \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{bmatrix}_{N \times 1} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ \vdots \\ b_{N-1} \\ b_N \end{bmatrix}_{N \times 1}$$

(3.57)

Pode-se vetorizar a Matriz $A_{N \times N}$, utilizando o seguinte algoritmo:

```

Para (i,j) = (1,1) ⇒ A1 = 1
Para i = 2 até N-1 {
    Para j = i - 1 até j = i + 1 {
        Ai,j = A[2.i + j - 3]
    }
}
Para (i,j) = (N,N) ⇒ A[3.N - 4]
    
```

Por exemplo, suponha um sistema de ordem igual a '5', os elementos da matriz estarão dispostos em um vetor ($A_n \Leftrightarrow n =$ endereço do vetor) conforme a numeração vista na matriz abaixo:

$$\begin{bmatrix}
 A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 A_2 & A_3 & A_4 & 0 & 0 \\
 0 & A_5 & A_6 & A_7 & 0 \\
 0 & 0 & A_8 & A_9 & A_{10} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & A_{11}
 \end{bmatrix}$$

O número de elementos do vetor será de: $3.N - 4$. Observe que o vetor é preenchido continuamente apenas para elementos válidos da matriz tridiagonal, ou seja os elementos dispostos na diagonal principal, e as duas vizinhas. Dessa forma a matriz: $A_{N,N}$ que possui $(N*N)$ elementos cabe em um vetor de $(3.N - 4)$ elementos. Por exemplo, um sistema unidimensional com 10 pontos distribuídos na malha nodal ocupariam um espaço de memória igual a 100 elementos para a alocação da matriz, no entanto ocupará apenas 26 elementos para a alocação do vetor.

3.3.6.2.B - Solução do sistema vetorizado tridiagonal:

i) - Triangularização do sistema:

$N = n^\circ$ de elementos no sistema unidimensional,

Para $i = 3$ até $N-1$:

$$A_{i,i} = A_{i,i} - \frac{A_{i,i-1}}{A_{i-1,i-1}} \cdot A_{i-1,i} \quad (3.58)$$

Para $i = 2$ até $N-1$:

$$b_i = b_i - \left(\frac{A_{i,i-1}}{A_{i-1,i-1}} \right) \cdot b_{i-1} \quad (3.59)$$

ii) - Solução do sistema triangular superior:

$$y_n = b_n \quad e \quad y_1 = b_1 \quad (3.60)$$

Para $i = N-1$ até 2:

$$y_i = \frac{b_i - (A_{i,i+1} \cdot y_{i+1})}{A_{i,i}} \quad (3.61)$$

Após estes passos, tem-se a resposta do sistema (3.57), contida no vetor $\{y\}$.

3.3.6.3. Aumento de precisão e velocidade do Método de Diferenças Finitas pelo modelo análogo ao circuito elétrico de resistores e capacitores:

Vale lembrar que tais otimizações no trabalho numérico do M.D.F. apresentadas a seguir, só foram possíveis serem visualizadas através da utilização do modelo analógico de resistores e capacitores, apresentado inicialmente na tese de mestrado do autor [Tese-Spim-1993]. As otimizações são apresentadas sobre sistemas unidimensionais por facilitar a compreensão com um análise equacional mais simples. Contudo a solução para sistemas Bi e Tridimensionais é análoga.

3.3.6.3.A Compactação equivalente de pontos da malha nodal:

A compactação de pontos na malha nodal do M.D.F. consiste na junção de dois ou mais pontos da malha de trabalho, formando um único ponto sem que com isto perca-se a equivalência matemática ao longo do processo de simulação. Este efeito é utilizado para o aumento da velocidade iterativa do método. Suponha um mapeamento unidimensional que possui a situação apresentada na Figura 3.6:

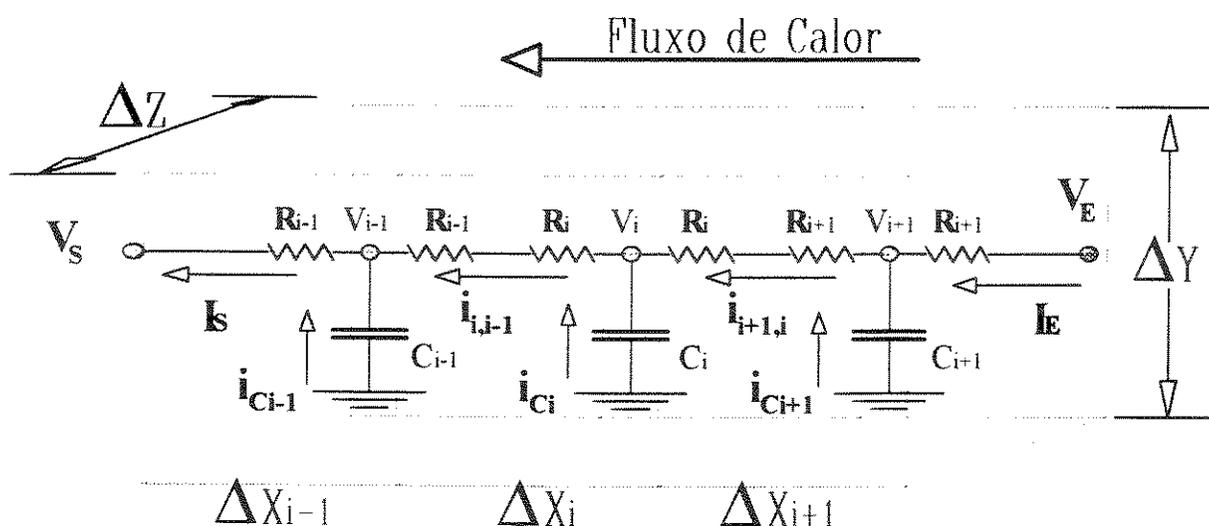


Figura 3.6 - Mapeamento nodal unidimensional para o M.D.F. analógico a circuitos elétricos

Pode-se compactar os três pontos internos vistos acima em um único ponto nodal equivalente, conforme dado na Figura 3.7:

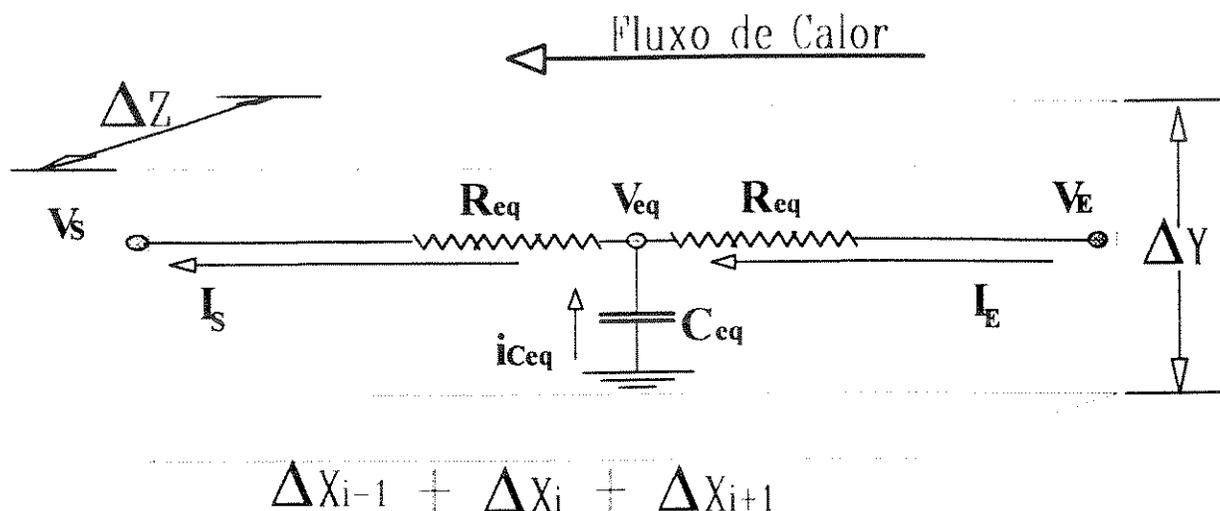


Figura 3.7- Compactação de pontos nodais formando um nó equivalente

Observe: Em particular as Figuras 3.6 e 3.7, a simbologia é dada conforme segue:

V - Tensão Elétrica [volts];

i - Corrente Elétrica [ampere];

C - Capacitor Elétrico [Farad];

R - Resistência Elétrica [Ohm];

Subscritos:

S - Elemento de Saída;

E - Elemento de Entrada;

i, i-1, i+1 - Endereço dos Pontos de Malha;

eq - Equivalente;

Pelo equilíbrio de correntes no circuito da Figura 3.6, tem-se que:

$$i_S = i_{C_{i-1}} + i_{i,i-1} \quad (3.62)$$

$$i_{i,i-1} = i_{C_i} + i_{i+1,i} \quad (3.63)$$

$$i_{i+1,i} = i_{C_{i+1}} + i_E \quad (3.64)$$

Substituindo (3.64) em (3.63) e em (3.62):

$$i_S = i_{C_{i-1}} + i_{C_i} + i_{C_{i+1}} + i_E \quad (3.65)$$

Para a Figura 3.7 o equilíbrio é dado por:

$$i_S = i_{Ceq} + i_E \quad (3.66)$$

Relacionando (3.66) com (3.65):

$$i_{Ceq} = i_{Ci-1} + i_{Ci} + i_{Ci+1} \quad (3.67)$$

sendo:

$$i_C = C \cdot \frac{\partial v_c}{\partial t} \quad (3.68)$$

Aplicando (3.68) em (3.67):

$$C_{eq} \frac{\partial v_{eq}}{\partial t} = C_{i-1} \frac{\partial v_{i-1}}{\partial t} + C_i \frac{\partial v_i}{\partial t} + C_{i+1} \frac{\partial v_{i+1}}{\partial t} \quad (3.69)$$

Integrando a Equação 3.69 de '0' até os equivalentes máximos, chega-se em::

$$C_{eq} \cdot V_{eq} = C_{i-1} \cdot V_{i-1} + C_i \cdot V_i + C_{i+1} \cdot V_{i+1} \quad (3.70)$$

Em termos de equivalência com temperatura, tem-se que:

$$C_{t_{eq}} \cdot T_{eq} = C_{t_{i-1}} \cdot T_{i-1} + C_{t_i} \cdot T_i + C_{t_{i+1}} \cdot T_{i+1} \quad (3.71)$$

sendo que as temperaturas pontuais (T_{i-1} , T_i e T_{i+1}) e os capacitores (C_{ti-1} , C_{ti} e C_{ti+1}) são conhecidos, a Equação 3.71, pode ser escrita na forma:

$$C_{t_{eq}} (T_{eq}) = \frac{CTE}{T_{eq}} \quad (3.72)$$

A Equação 3.72 reflete um problema de solução deste sistema, pois $C_{t_{eq}}$ é uma função da temperatura equivalente (T_{eq}) obtida no nó compacto. Se os nós a serem compactados se encontrarem no mesmo estado (sólido ou líquido) a solução é direta, pois os parâmetros físicos como condutividade térmica (k), calor específico (c) e densidade (ρ) são aproximados para constantes no estado do material. Assim é encontrado $C_{t_{eq}}$ e finalmente T_{eq} . Entretanto se compactarmos pontos com estados distintos, a Equação 3.72 deve ser solucionada de forma iterativa, por tentativa e erro, no objetivo de se encontrar a solução exata para a compactação destes pontos.

3.3.6.3 B - Expansão equivalente de pontos da malha nodal:

A expansão de pontos na malha nodal do M.D.F. consiste na explosão de um único ponto da malha em dois ou mais pontos, sem que com isto perca-se a equivalência matemática ao longo do processo de simulação. Este efeito é utilizado para o aumento de precisão do método numérico. Suponha o ponto nodal da Figura 3.8:

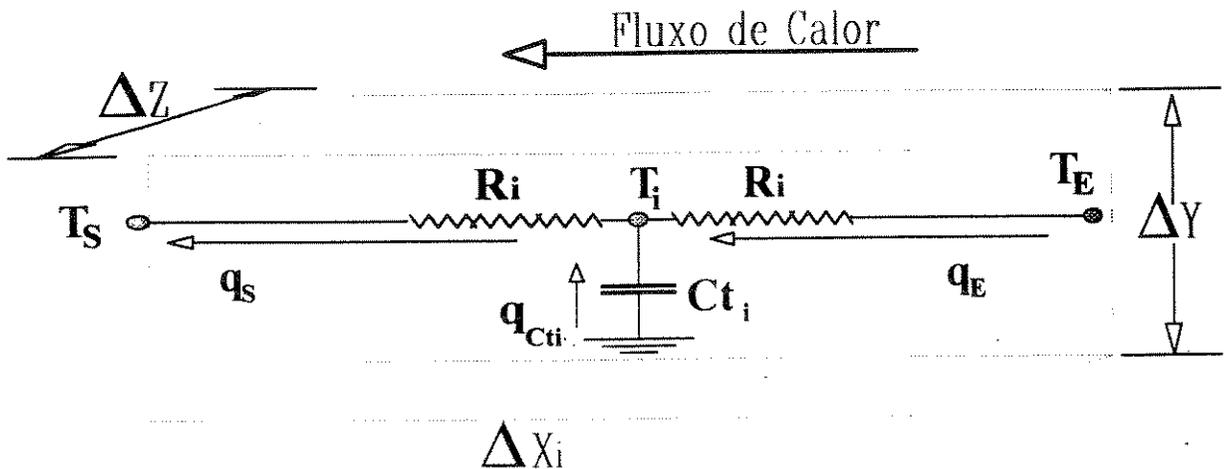


Figura 3.8 - Ponto da malha nodal, sujeito a expansão

O ponto da Figura 3.8 pode ser subdividido em dois ou mais pontos, conforme mostra a Figura 3.9 para uma expansão de três pontos:

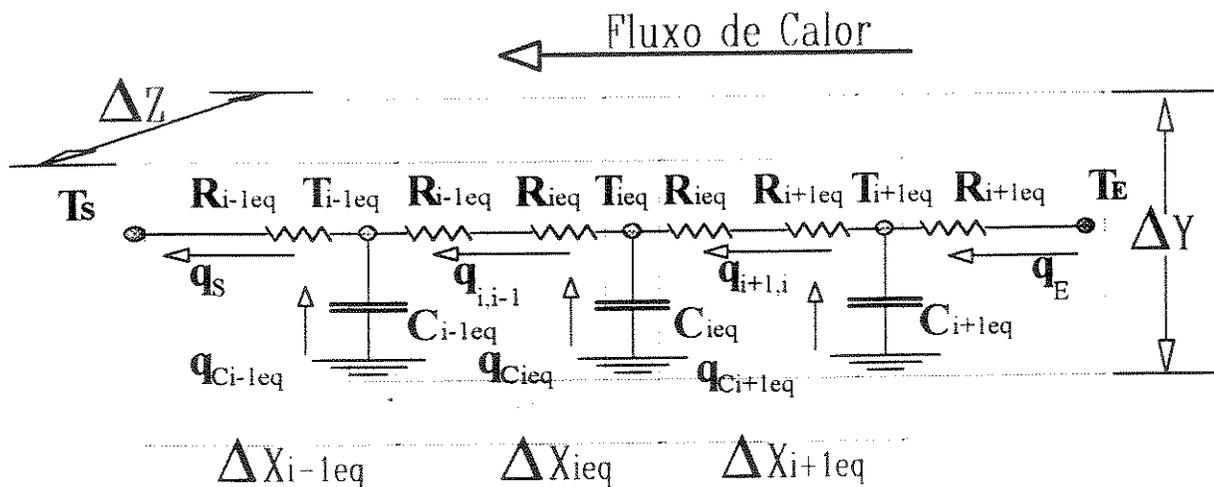


Figura 3.9 -Expansão nodal equivalente

Para este caso pode-se afirmar que:

$$T_{i-l_{eq}} = T_{i_{eq}} = T_{i+l_{eq}} = T_i \quad (3.73)$$

pois uma modificação numérica não pode afetar as temperaturas de um elemento da malha do M.D.F., desta forma em equivalência a Equação 3.71, teremos:

$$Ct_i \cdot T_i = Ct_{i-l_{eq}} \cdot T_{i-l_{eq}} + Ct_{i_{eq}} \cdot T_{i_{eq}} + Ct_{i+l_{eq}} \cdot T_{i+l_{eq}} \quad (3.74)$$

Aplicando (3.73) em (3.74):

$$Ct_i = Ct_{i-l_{eq}} + Ct_{i_{eq}} + Ct_{i+l_{eq}} \quad (3.75)$$

Sabendo que:

$$Ct_i = \rho(T_i) \cdot c(T_i) \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta x_i \quad (3.76)$$

então (3.76) em (3.75):

$$\Delta x_i = \Delta x_{i-l_{eq}} + \Delta x_{i_{eq}} + \Delta x_{i+l_{eq}} \quad (3.77)$$

A Equação 3.77 é óbvia, entretanto esta comprova a validade da movimentação matemática realizada para sua obtenção. Pode-se observar que a expansão é mais simples e direta que a compactação nodal.

3.3.6.3.C - Compactação de pontos na malha nodal para o aumento da velocidade de trabalho em máquina:

Suponha uma região de um corpo físico, a qual foi inicialmente mapeada com os pontos nodais das Diferenças Finitas, para uma simulação numérica de um processo de transferência de calor, conforme mostra a Figura 3.10. Suponha que a região mapeada, já tenha ao longo da simulação numérica, sofrido todas as mudanças de fase e fenômenos térmicos de análise ao modelo, e agora se encontra em estado de resfriamento simples, sem que a temperatura dos pontos mapeados individualmente possa fornecer alguma informação importante ao restante da simulação. Desse modo será interessante reduzir a quantidade de pontos nodais nesta região do corpo físico, com o objetivo de reduzir a utilização desnecessária de memória de máquina, e conseqüentemente aumentar a velocidade de trabalho da simulação realizada. Este efeito pode ser visualizado na Figura 3.11.

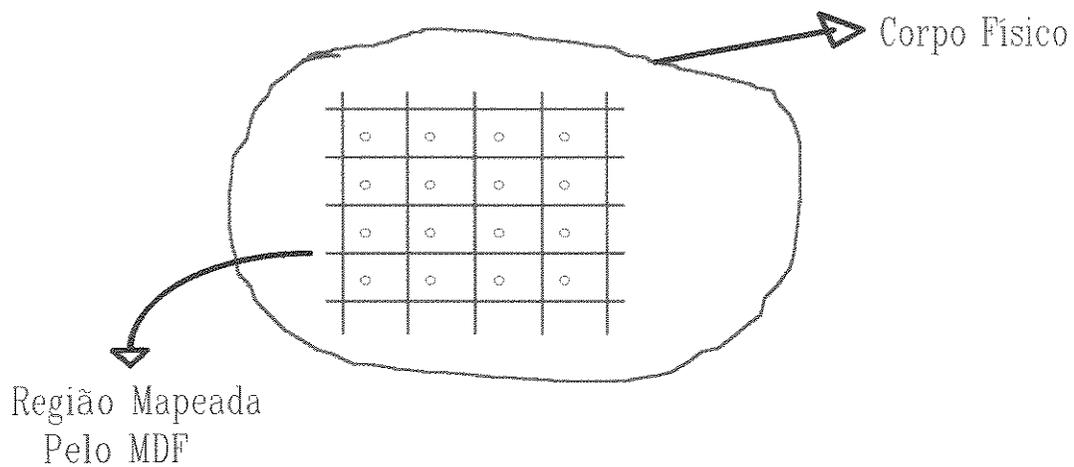


Figura 3.10 - Modelo mapeado do M.D.F.

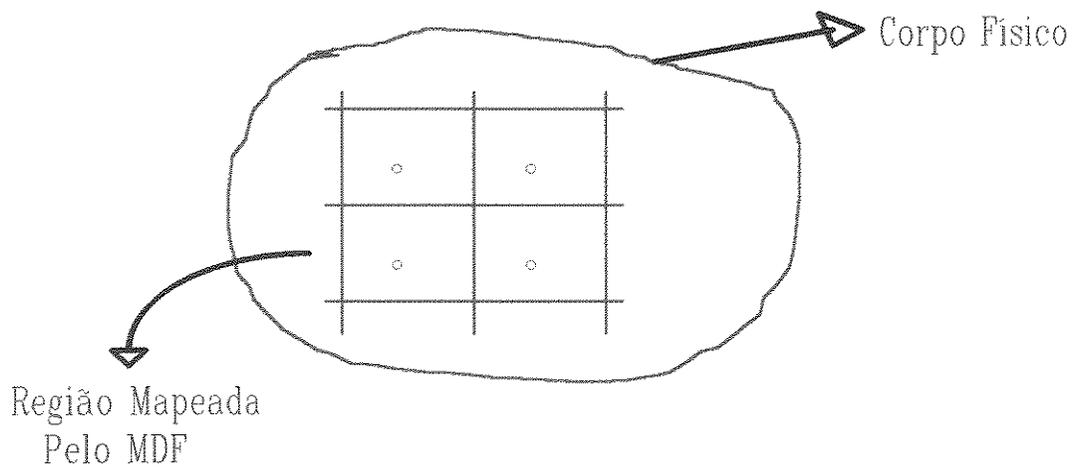


Figura 3.11 - Mapeamento do M.D.F. após a compactação nodal

Observar que enquanto a Figura 3.10 apresenta uma quantidade de pontos igual a 16, a Figura 3.11 apresenta apenas 4, para a mesma região do corpo físico.

3.3.6.3.D - Expansão de pontos na malha nodal para o aumento da precisão de modelo:

Suponha o contorno de um corpo físico, o qual foi inicialmente mapeado com os pontos nodais das Diferenças Finitas, conforme mostra a Figura 3.12.A:

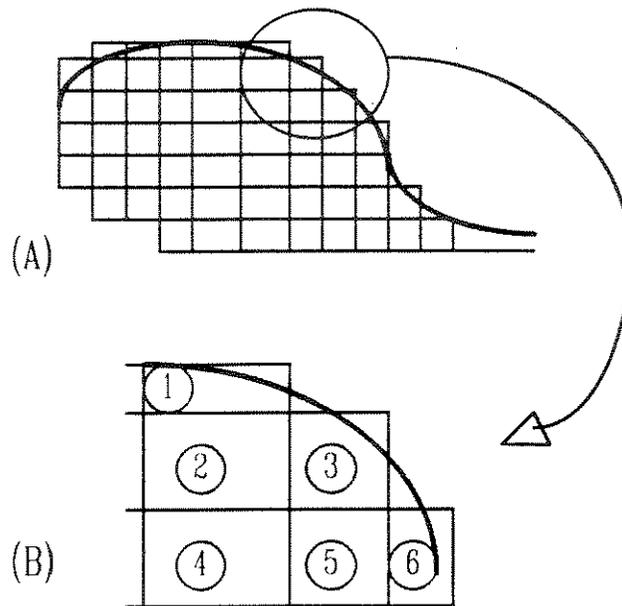


Figura 3.12 - Mapeamento nodal pelo M.D.F. convencional de superfície limite

A Figura 3.12.B apresenta uma região de interface no mapeamento nodal do contorno físico. A precisão relativa do mapeamento nodal nesta interface pode ser aumentada, pela expansão dos pontos (1), (3) e (6), conforme mostra a Figura 3.13:

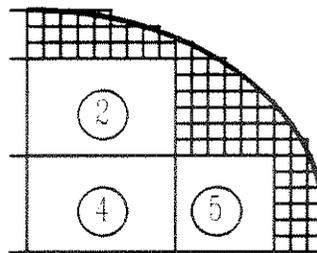


Figura 3.13 - Expansão nodal com a elevação da precisão relativa do modelo

A Figura 3.13 mostra a expansão dos pontos nodais da interface da figura mapeada. Observe que a expansão pode ser feita recursivamente até que uma precisão pré-determinada no modelo seja atingida.

3.4 O Método de Diferenças Finitas Aplicado ao Contorno de Peças de Geometria Complexa

O Método de Diferenças Finitas, é melhor desenvolvido e aplicado em peças de geometria simples, como por exemplo o Lingotamento Contínuo com moldes retangulares ou quadrados. Isto devido ao fato de que em sua essência numérica o M.D.F. trabalha com malhas, de elementos em diferenças finitas, regulares, com área de passagem de fluxo de calor equivalentes entre os elementos, além de que os elementos em diferenças finitas são representados por peças retangulares e/ou quadradas. Isto traz para as aplicações deste em geometrias de contornos irregulares um elevado erro de simulação numérica, conforme pode ser visto na Figura 3.14.

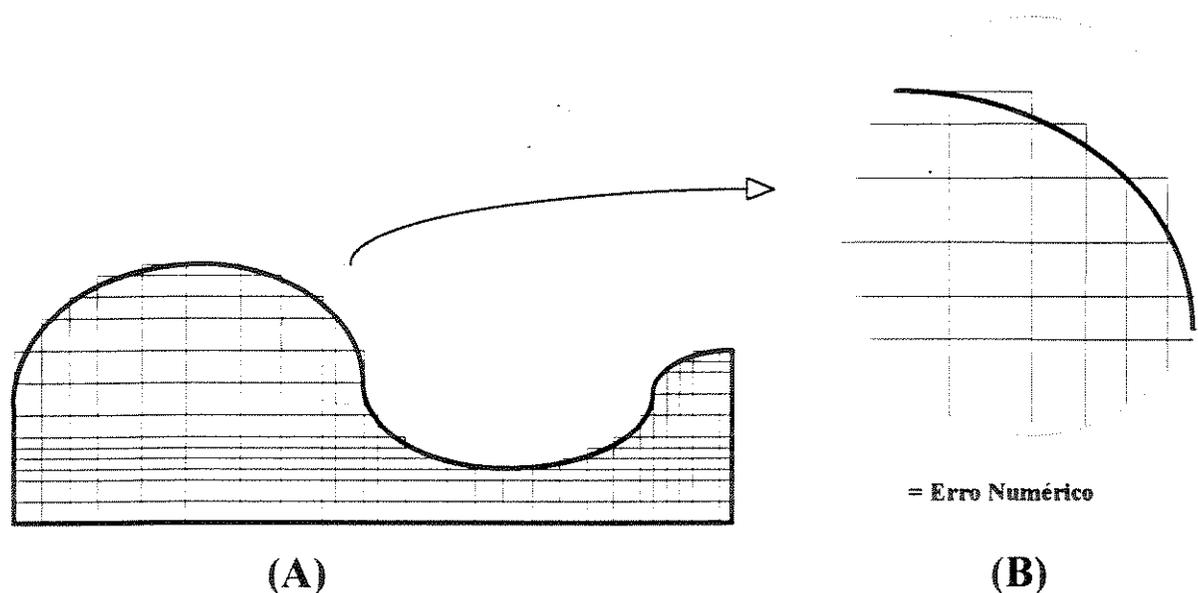


Figura 3.14 - (A) Corpo físico mapeado pelo M.D.F.; (B) Erro numérico apresentado nos contornos irregulares

Entretanto uma analogia do M.D.F. a sistemas térmicos com redes elétricas passivas (formada de resistores e capacitores) adapta uma maleabilidade em termos de manipulação das malhas nodais, permitindo uma reestruturação destas a nível de mapeamento total de um sistema físico com contornos complexos, aumentando assim a precisão numérica do mesmo. A Figura 3.15 mostra um exemplo da acomodação da malha modificada para o contorno do corpo físico apresentado na Figura 3.14.

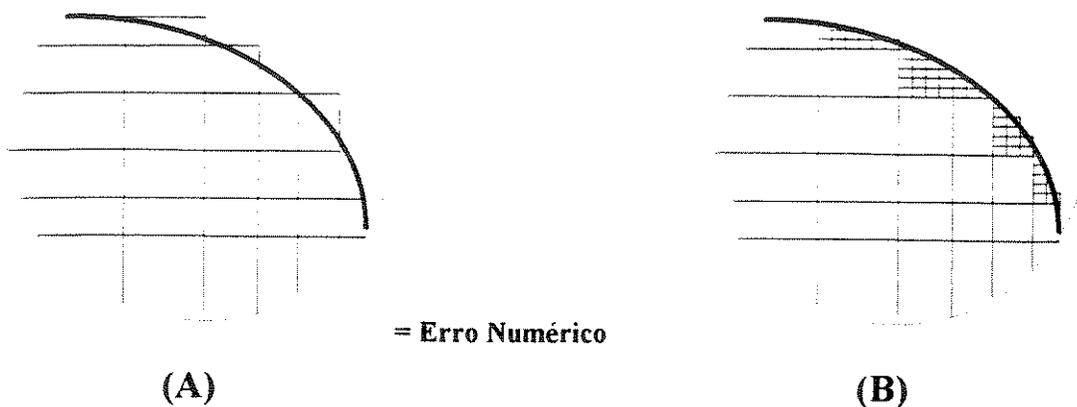


Figura 3.15 - (A) M.D.F. Convencional; (B) M.D.F. Modificado

Como pode ser observado na Figura 3.15, a modificação de malha convencional em uma malha reduzida nos contornos da peça permitiu um mapeamento mais conciso nesta região do corpo complexo. Entretanto com o M.D.F. convencional, tal modificação equivale a uma dificuldade de manipulação numérica, devido a área de passagem do fluxo térmico entre os elementos da malha grossa com os elementos da malha fina, serem diferentes. A teoria elétrica simplifica este problema através de um acoplamento único entre resistores de dimensões distintas. Por exemplo, observe na Figura 3.16 um elemento da malha grossa acoplado a três elementos interfaciais da malha fina no M.D.F.

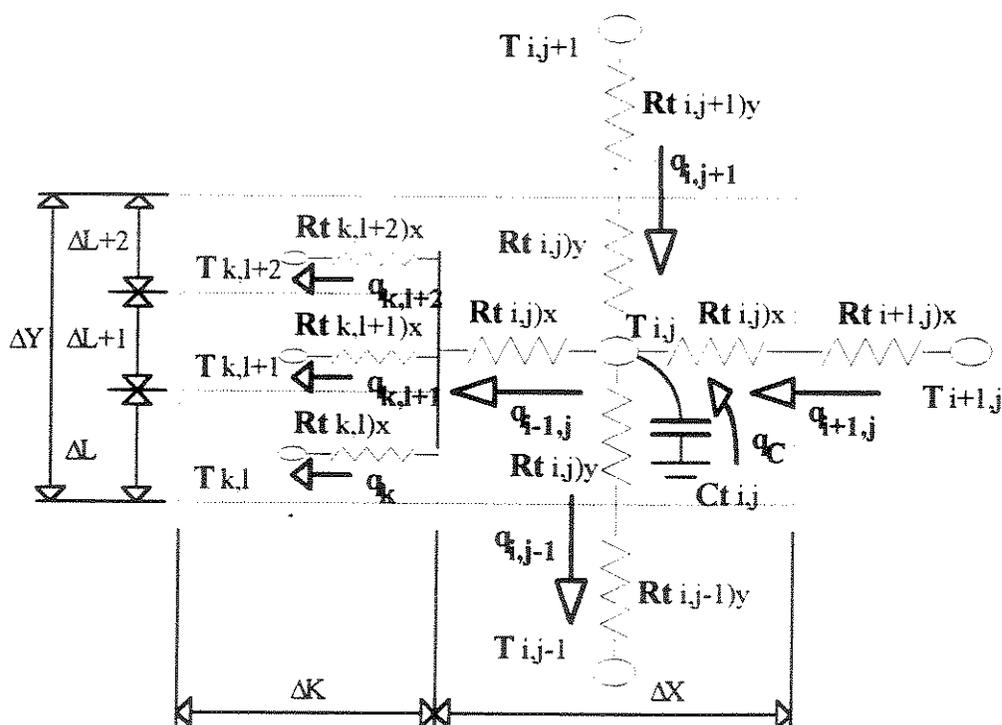


Figura 3.16 - Representação de Malha Nodal com Acoplamento entre Malha Fina e Malha Grossa

3.4.1 - O Tratamento Matemático:

O tratamento matemático é equivalente ao M.D.F. convencional, onde:

$$\sum \text{Fluxos } (q) \text{ que chegam ao ponto } (i, j) = \sum \text{Fluxos } (q) \text{ que saem do ponto } (i, j) \quad (3.78)$$

Entretanto a dificuldade deste tratamento se encontra na determinação do fluxo $q_{i-1,j}$, conforme mostra a Figura 3.16, onde pela relação elétrica tem-se que :

$$q_{i-1,j} = q_{k,l} + q_{k,l+1} + q_{k,l+2} \quad (3.79)$$

Supondo um nó de temperatura " T_p " que acopla as resistências da malha fina com a resistência da malha grossa, conforme Figura 3.17:

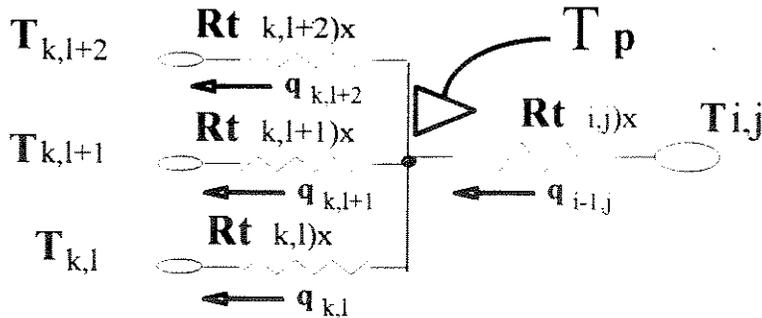


Figura 3.17 - Ponto de acoplamento entre malha fina e malha grossa

O equacionamento dos fluxos é dado por:

$$q_{i-1,j} = \frac{T_{i,j}^n - T_p}{Rt_{i,j)x} \quad (3.80) \quad q_{k,l} = \frac{T_p - T_{k,l}^n}{Rt_{k,l)x} \quad (3.81)$$

$$q_{k,l+1} = \frac{T_p - T_{k,l+1}^n}{Rt_{k,l+1)x} \quad (3.82) \quad q_{k,l+2} = \frac{T_p - T_{k,l+2}^n}{Rt_{k,l+2)x} \quad (3.83)$$

Aplicando (3.80), (3.81), (3.82) e (3.83) em (3.79), chega-se em:

$$T_p = R_p \cdot \left(\frac{T_{i,j}^n}{Rt_{i,j)x} + \frac{T_{k,l}^n}{Rt_{k,l)x} + \frac{T_{k,l+1}^n}{Rt_{k,l+1)x} + \frac{T_{k,l+2}^n}{Rt_{k,l+2)x} \right) \quad (3.84)$$

onde:

$$R_p = Rt_{i,j)x // Rt_{k,l)x // Rt_{k,l+1)x // Rt_{k,l+2)x} \quad (3.85)$$

Deste modo aplicando (3.84) em (3.85), tem-se a relação do fluxo " $q_{i-1,j}$ " dado por:

$$q_{i-1,j} = \frac{T_{i,j}^n}{Rt_{i,j)x}} - \frac{R_p}{Rt_{i,j)x} \cdot \left(\frac{T_{i,j}^n}{Rt_{i,j)x} + \frac{T_{k,l}^n}{Rt_{k,l)x} + \frac{T_{k,l+1}^n}{Rt_{k,l+1)x} + \frac{T_{k,l+2}^n}{Rt_{k,l+2)x} \right)} \quad (3.86)$$

Para um elemento da malha grossa acoplado a 'n' elementos de malha fina a equação geral é dada por:

$$q_{i-1,j} = \frac{T_{i,j}^n}{Rt_{i,j)x} - \frac{R_p^G}{Rt_{i,j)x} \cdot \left(\frac{T_{i,j}^n}{Rt_{i,j)x} + \sum_{l=1}^n \frac{T_{k,l}^n}{Rt_{k,l)x} \right)} \quad (3.87)$$

onde:
$$\frac{1}{R_p^G} = \frac{1}{Rt_{i,j)x} + \sum_{l=1}^n \frac{1}{Rt_{k,l)x}} \quad (3.88)$$

Assim a Equação completa para a solução de qualquer ponto da malha de elementos nodais que mapeia o corpo físico é representada por:

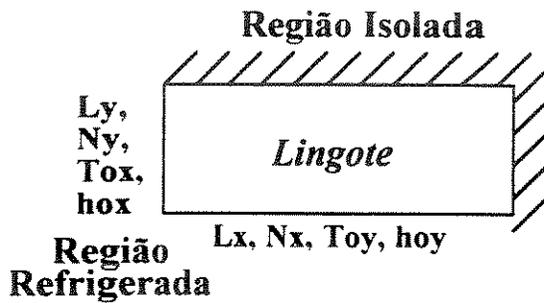
$$T_{i,j}^{n+1} = \frac{\Delta t}{Ct_{i,j}} \cdot (q_{i-1,j} - q_{i+1,j} + q_{i,j-1} - q_{i,j+1}) + T_{i,j}^n \quad (3.89)$$

Sendo a estabilidade mantida para:
$$\Delta t \leq \frac{4}{(Ct_{i,j} \cdot Rt_{i,j})} \quad (3.90)$$

onde $Ct_{i,j}$ e $Rt_{i,j}$ devem ser representados para o menor ponto da malha fina.

3.4.2 - Validação do Acoplamento Entre Malha Grossa e Malha Fina

Para a validação do equacionamento desenvolvido no item anterior, não é necessário lançar mão de uma geometria complexa, já que a comprovação do efeito de acoplamento entre elementos da malha nodal formada pelo M.D.F., com áreas de transferência de calor distintas é o bastante para mostrar a validade deste efeito, sendo sua eventual aplicação relativa a cada corpo mapeado. Assim tomamos como referência um lingote retangular, refrigerado em duas direções e isolado nas duas direções opostas, conforme visto na Figura 3.18.



Sendo:

L_x e L_y - Comprimento das faces [m];

N_x e N_y - Número de divisões de malha nas direções X e Y respectivamente;

T_{ox} e T_{oy} - Temperaturas de refrigeração nas direções X e Y respectivamente [$^{\circ}C$];

h_{ox} e h_{oy} - Coeficientes de transferência de calor nas direções X e Y [$W/m^2.K$]

Figura 3.18 - Sistema de fundição utilizado nos ensaios de modelo

Utilizou-se como material aplicado ao modelo aço de baixo teor de carbono ($< 0.1\% C$). Aplicando-se o M.D.F. convencional no mapeamento do lingote da Figura 3.18 e, refinando-se a malha em 2 (dois) e 3 (três) pontos de dimensão linear nos pontos de borda, conforme visto na Figura 3.19, pode-se levantar resultados satisfatórios a aplicação do equacionamento desenvolvido anteriormente.

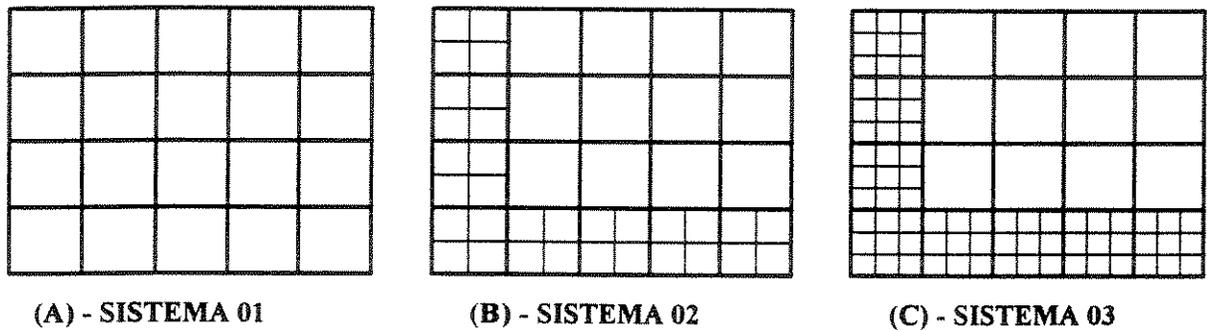


Figura 3.19 - (A) M.D.F. Convencional; (B) Refinamento em dois pontos nos elementos de borda; (C) Refinamento em três pontos nos elementos de borda.

Os ensaios que se seguem foram desenvolvidos por um programa numérico, o qual foi colocado em funcionamento em um computador mono-usuário 486DX4-100MHz com 16Mb de memória RAM disponível, sendo todo o programa montado em linguagem 'C'. O endereçamento dos pontos da malha reduzida são dados conforme mostra a Figura 3.20.

O endereçamento dos elementos dos blocos reduzidos é dado pelo par ordenado (k,l) , onde:

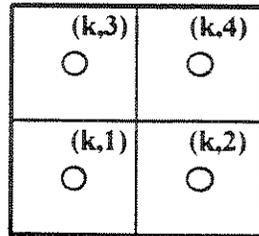
Se $(j = 1)$ então $k = i$; Senão { Se $(i = 1)$ então $k = N_x + j - 1$; }

para: $N_x = N^{\circ}$ de elementos na direção 'x' ;

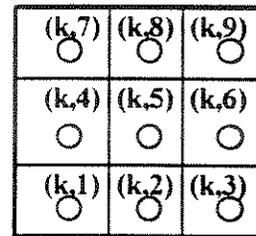
e $j =$ Contador de linhas do sistema global;

$i =$ Contador de colunas do sistema global;

e $1 \leq i \leq 4 \Rightarrow$ Para sistema 02 $1 \leq i \leq 9 \Rightarrow$ Para sistema 03



$k = f(i, j)$
SISTEMA 02



$k = f(i, j)$
SISTEMA 03

Figura 3.20 - Endereçamento dos pontos de malha reduzida para o sistema 02 e 03

A) ENSAIO 01:

$L_x = 0.5 \text{ m}$	$N_x = 15 \text{ elementos}$	$T_{ox} = 20 \text{ }^\circ\text{C}$	$h_{ox} = 1500 \text{ W/m}^2\text{K}$
$L_y = 0.2 \text{ m}$	$N_y = 15 \text{ elementos}$	$T_{oy} = 25 \text{ }^\circ\text{C}$	$h_{oy} = 1000 \text{ W/m}^2\text{K}$
Liga de Aço-Carbono	%C = 0.1%		$\Delta t = 0.2 \text{ seg}$

As Figuras 3.21 e 3.22 apresentam a comparação da evolução térmica para o ponto $(i,j) = (1,1)$ do Sistema 01 com os respectivos pontos no Sistema 02 e 03. Pode-se observar que o efeito do equacionamento desenvolvido esta em acordo com o sistema base (Sistema 01), contudo é importante notar o efeito do aumento de precisão relativa com os deslocamentos das curvas do sistema 02 ou 03, tendo como central a curva do sistema 01, na borda do lingote com o refinamento da malha nesta região do sistema de fundição.

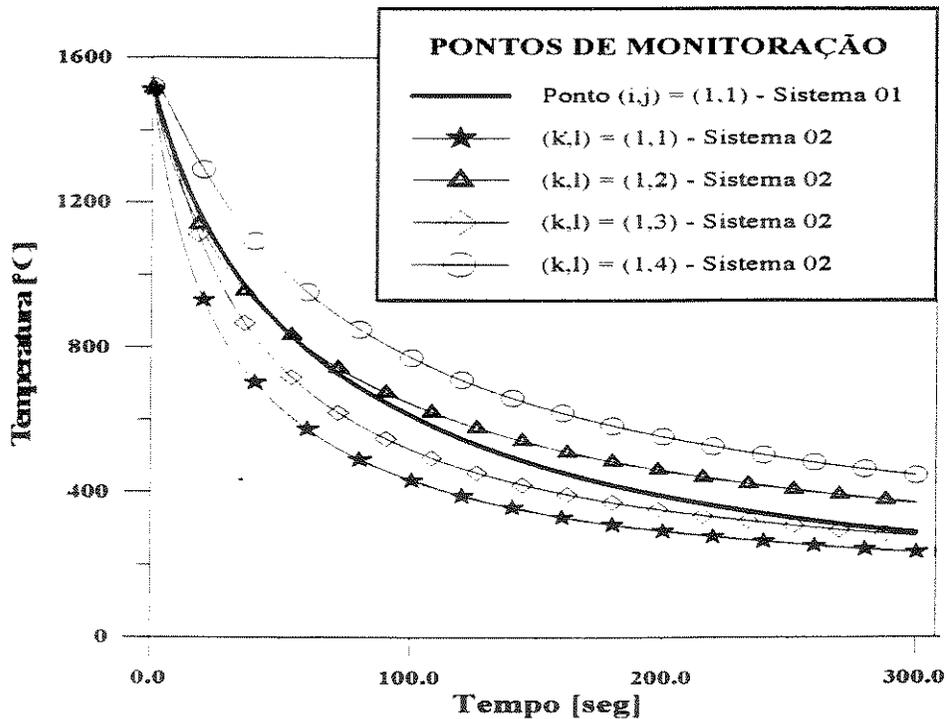


Figura 3.21 - Evolução térmica do ponto $(i,j) = (1,1)$ com os pontos equivalentes do sistema 2

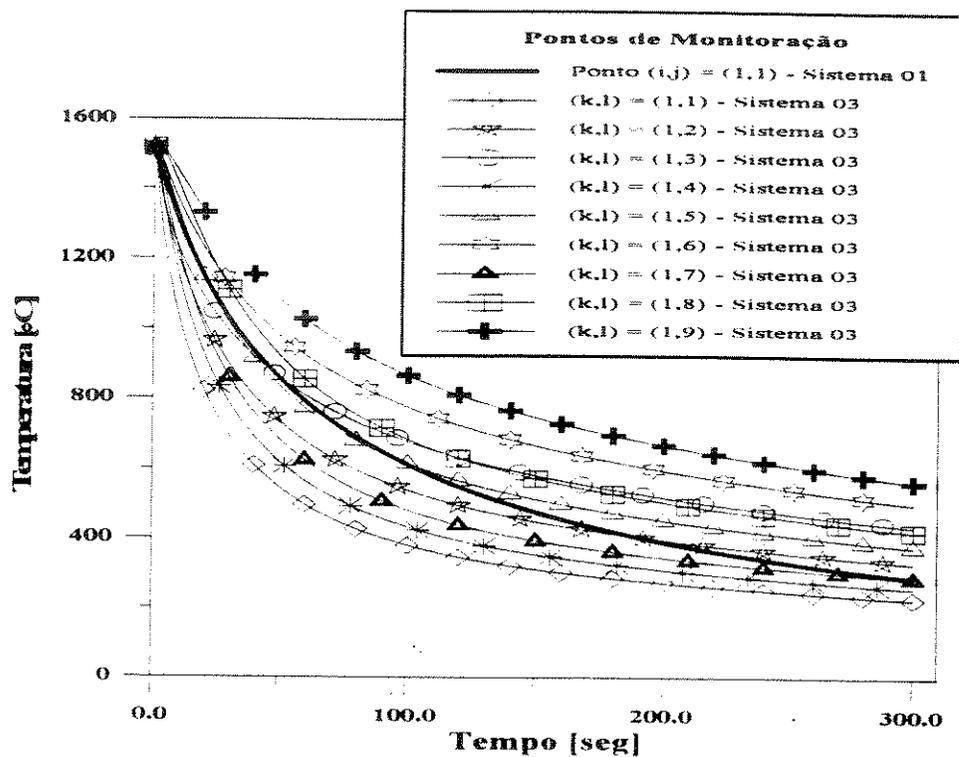


Figura 3.22 - Evolução térmica do ponto $(i,j) = (1,1)$ com os pontos equivalentes do sistema 3

É interessante observar que o aumento de precisão nas bordas do lingote se reflete ao longo de todo o modelo, onde pode-se observar a variação da evolução térmica no ponto $(i,j) = (2,2)$ de todos os três sistema (Sistema 01, 02 e 03), conforme visto na Figura 3.23.

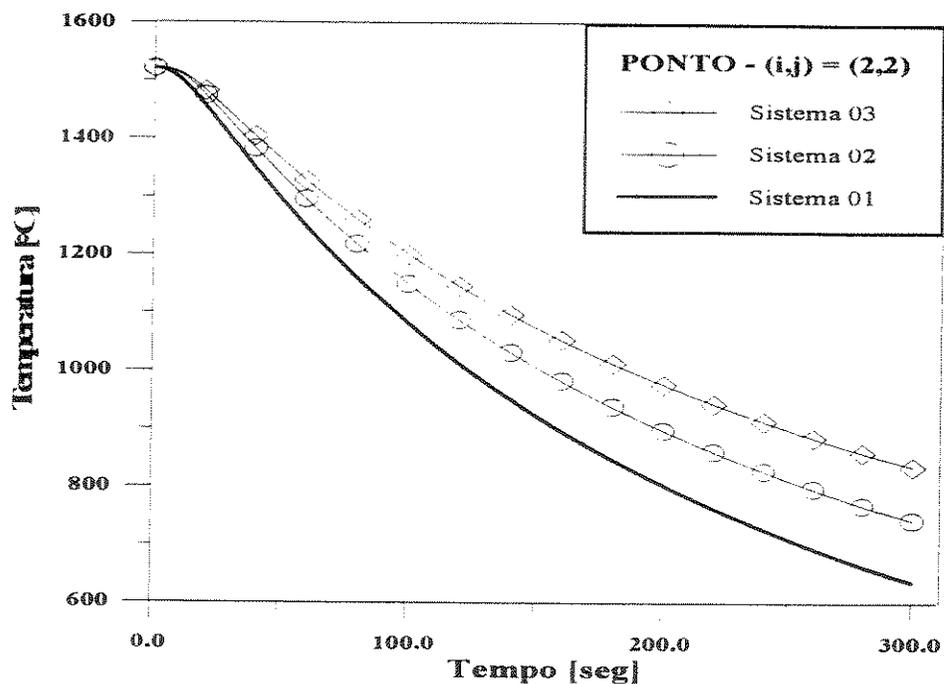


Figura 3.23 - Comparação da evolução térmica no ponto $(i,j) = (2,2)$ dos sistemas 01, 02 e 03

Note-se pelas Figuras 3.21 e 3.22 que é esperado que a evolução do ponto $(i,j) = (1,1)$ do Sistema 01 venha ser uma intermediária ou média entre os pontos relativos aos sistemas 02 e 03. Isto é um tanto evidente por motivos óbvios, contudo é importante notar que as curvas acima do ponto $(i,j) = (1,1)$ no sistema 01, para os sistemas 02 e 03 representam justamente os pontos menos refrigerados ou mais distantes da fonte de refrigeração que o ponto em questão, ocorrendo o inverso para as curvas abaixo deste ponto. Isto traz a comprovação de que todo o equacionamento desenvolvido anteriormente é bastante lógico e como pode ser visto, comprovado pelo método convencional.

O aumento de precisão nos sistemas de malha mais refinada, também é esperado, contudo é importante destacar que este efeito não aumenta o tempo de processamento do modelo numérico significativamente, pois a malha reduzida se encontra apenas na borda do lingote e não ao longo de todo o corpo, como seria necessário caso se utilizasse o M.D.F. na sua forma convencional. Isto é muito importante quando tratar-se de modelos que serão diretamente utilizados em equipamentos de controle como por exemplo no Lingotamento Contínuo de Aços.

3.5 Resistência de Integração para Sistemas de Contornos Contínuos (Esferas e Cilindros)

3.5.1. - Apresentação Numérica:

3.5.1.1. Análise Vetorial:

Em consideração a uma análise vetorial sobre a linha do fluxo de energia, é válido o objetivo de introduzir um sistema de coordenadas para definir pontos no espaço tridimensional através de 3 (três) vetores linearmente independentes e ortogonais, sendo de primeira análise a notação dos três sistemas clássicos de coordenadas: cartesiano, cilíndrico e esférico, conforme a Figura 3.24.

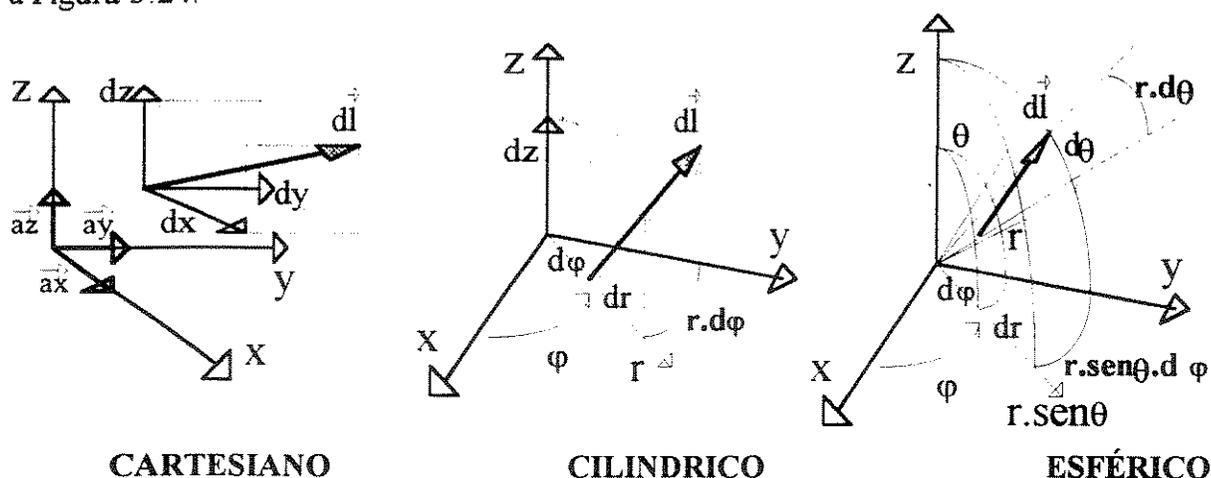


Figura 3.24 - Sistema de coordenadas espaciais

O vetor diferencial de deslocamento (\vec{dl}) de energia, para os sistemas apresentados acima, é dado por:

$$\text{Cartesiano} \Rightarrow \vec{dl} = dx \cdot \vec{a}_x + dy \cdot \vec{a}_y + dz \cdot \vec{a}_z \quad (3.91)$$

$$\text{Cilíndrico} \Rightarrow \vec{dl} = dr \cdot \vec{a}_r + r \cdot d\phi \cdot \vec{a}_\phi + dz \cdot \vec{a}_z \quad (3.92)$$

$$\text{Esférico} \Rightarrow \vec{dl} = dr \cdot \vec{a}_r + r \cdot d\phi \cdot \vec{a}_\phi + r \cdot \text{sen}\theta \cdot d\theta \cdot \vec{a}_\theta \quad (3.93)$$

A Equação diferencial definida para um elemento de resistência é dado por:

$$\Delta R_{cs} = \frac{\Delta l}{\sigma \cdot \Delta S} \Rightarrow R_{cs} = \frac{l}{\sum \sigma \cdot \frac{\Delta S}{\Delta l}} \quad (3.94)$$

onde: R_{es} = Resistência total da linha de condução do fluxo de energia;
 σ = Condutibilidade da região por onde atravessa o fluxo de energia;
 Δs = Diferencial da área de passagem do fluxo de energia;
 Δl = Diferencial de comprimento da linha de passagem do fluxo;

assim:

$$R_{es} = \frac{1}{\sum \sigma \cdot \frac{h_2 \cdot h_3}{h_1} \cdot \frac{d\beta \cdot d\gamma}{d\alpha}} \quad (3.95)$$

onde h_1 , h_2 e h_3 são definidos para o vetor diferencial de deslocamento, sendo:

$$d\vec{l} = h_1 \cdot d\alpha \cdot \vec{a}_\alpha + h_2 \cdot d\beta \cdot \vec{a}_\beta + h_3 \cdot d\gamma \cdot \vec{a}_\gamma \quad (3.96)$$

assim, tem-se que a equação geral da resistência de integração é dada por:

$$R_{es} = \frac{1}{\sigma_{comp}} \int \frac{d\alpha}{\iint_{\text{área}} \frac{h_2 \cdot h_3}{h_1} d\beta \cdot d\gamma} \quad (3.97)$$

sendo: $d\alpha$ = diferencial de comprimento

$d\beta \cdot d\gamma$ = diferencial de área

A equação acima apresenta uma generalidade no cálculo de uma resistência à passagem de um fluxo de energia qualquer, para uma linha de geometria qualquer. Desse modo pode-se calcular os resistores de um fluxo térmico para um sistema de fundição que envolva uma forma geométrica complexa. Apresentamos na seqüência deste os cálculos e resultados obtidos para sistemas cilíndricos e esféricos utilizando-se do Método de Diferenças Finitas.

3.5.1.2. Elementos de Volume:

Para os elementos diferenciais de volume, tem-se que:

$$\text{Cartesiano} \Rightarrow dv = dx \cdot dy \cdot dz \quad (3.98)$$

$$\text{Cilindrico} \Rightarrow dv = r \cdot dr \cdot d\phi \cdot dz \quad (3.99)$$

$$\text{Esférico} \Rightarrow dv = r^2 \cdot \text{sen} \theta \cdot dr \cdot d\phi \cdot d\theta \quad (3.100)$$

onde em uma solução das integrais definidas chega-se em:

$$\text{Cartesiano} \Rightarrow \text{Vol} = dx \cdot dy \cdot dz \quad (3.101)$$

$$\text{Cilindrico} \Rightarrow \text{Vol} = \frac{r_1^2 - r_0^2}{2} \cdot d\phi \cdot dz \quad (3.102)$$

$$\text{Esférico} \Rightarrow \text{Vol} = \left(\frac{r_1^3 - r_0^3}{3} \right) \cdot (1 - \sqrt{1 - d\theta^2}) \cdot d\phi \quad (3.103)$$

Sendo ' r_0 ' e ' r_1 ' os raios inicial e final respectivamente dos elementos de volume, onde:

$$r_1 - r_0 = dr \quad (3.104)$$

e dx , dy , dz , $d\phi$ e $d\theta$ as componentes diferenciais de comprimento e ângulo para os casos em questão (Cilindros e Esferas).

3.5.2. - Sistema Cilindrico

3.5.2.1. Análise Matemática

Considere o elemento cilíndrico de Diferença Finita dado na Figura 3.25:

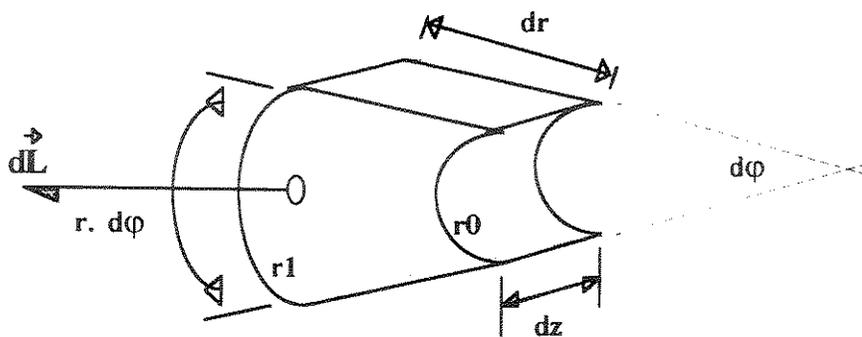


Figura 3.25 - Elemento Diferencial Cilíndrico

Em termos da Integral definida tem-se:

$$Rt = \frac{1}{k} \cdot \int_{r_0}^{r_1} \frac{dr}{\int_0^{dz} \int_0^{d\phi} r \cdot d\phi \cdot dz} \quad (3.105)$$

Sendo: R_t = Resistência Térmica do Material;
 k = Condutividade Térmica do Material;
 r = O Raio do Cilindro;

Assim:

$$R_t = \frac{\ln(r_1 / r_0)}{k \cdot d\phi \cdot dz} \quad [\text{K/W}] \quad (3.106)$$

Para o Capacitor Térmico, tem-se que: $C_t = \rho \cdot c' \cdot \text{Vol}$ (3.107)

sendo que 'Vol', representa o volume do elemento de Diferença Finita, dado pela Equação 3.102, assim:

$$C_t = \rho \cdot c' \cdot \left(\frac{r_1^2 - r_0^2}{2} \cdot d\phi \cdot dz \right) \quad (3.108)$$

3.5.2.2. Sistema Experimental:

Considerando um elemento de volume no sistema de coordenadas cilíndricas com mapa de diferenças finitas, conforme a Figura 3.26:

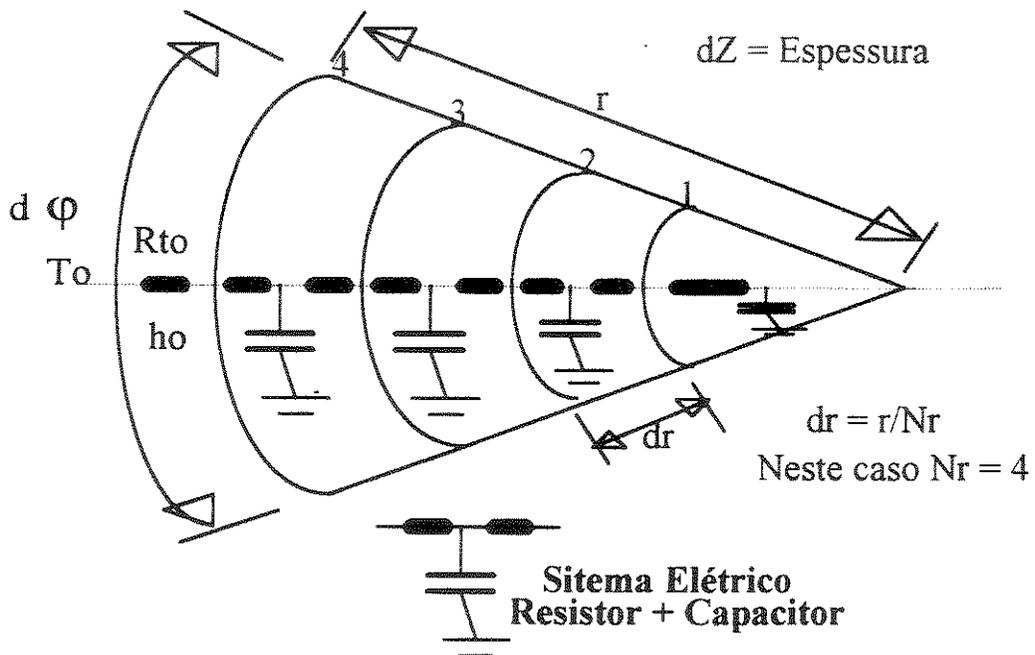
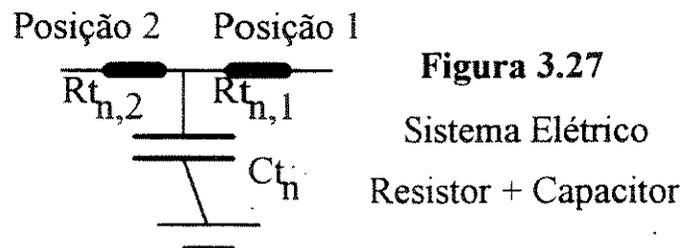


Figura 3.26 - Partição de Diferenças Finitas para Elemento de Volume Cilíndrico

onde a resistência de convecção é dada por:

$$Rt_o = \frac{1}{h_o \cdot r \cdot d\phi \cdot dz} \quad (3.109)$$

Para o sistema elétrico de **Resistor + Capacitor** conforme apresentado na Figura 3.27, tem-se a necessidade de se considerar a posição em que se encontra o resistor, pois a área de passagem do fluxo de calor varia com o aumento ou a diminuição do raio, assim:



Considerar $Nr = N^\circ$ de divisões do raio e 'n' o elemento relativo a contagem de 1 até Nr.

Para $n = 2$ até Nr:

$$\text{Posição 1} \Rightarrow \begin{cases} r_o = (n-1) \cdot dr \\ r_l = (n-1/2) \cdot dr \end{cases} \Rightarrow \text{Para } n = 2 \text{ até Nr}$$

$$\text{Portanto: } Rt_{n,1} = \frac{\ln\left(\frac{2n-1}{2n-2}\right)}{k_n \cdot d\phi \cdot dz} \quad (3.110)$$

$$\text{Posição 2} \Rightarrow \begin{cases} r_o = (n-1/2) \cdot dr \\ r_l = n \cdot dr \end{cases} \Rightarrow \text{Para } n = 1 \text{ até Nr}$$

$$\text{Portanto: } Rt_{n,2} = \frac{\ln\left(\frac{2n}{2n-1}\right)}{k_n \cdot d\phi \cdot dz} \quad (3.111)$$

E para o Capacitor térmico, tem-se que:

$$Ct_n = \rho_n \cdot c_n \cdot \left(\frac{2n-1}{2}\right) \cdot dr^2 \cdot d\phi \cdot dz \quad (3.112)$$

3.5.2.3. Aplicação Prática do Sistema Cilindrico no Método de Diferenças Finitas com a Analogia a Circuitos Elétricos

Considere o disco circular, dado na Figura abaixo:

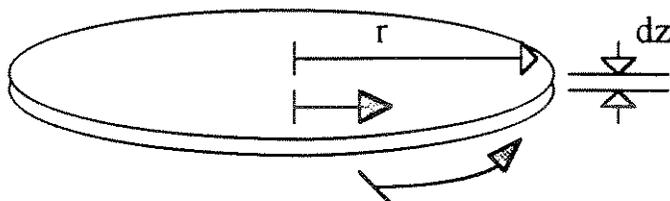


Figura 3.28 - Disco Circular Utilizado no Modelo Numérico

Aplicando a este disco o mapeamento pelo M.D.F., onde define-se:

N_r = N° de Subdivisões do Raio (r);

N_ϕ = N° de Subdivisões do Perímetro;

Tem-se que:
$$dr = \frac{r}{N_r} \quad \text{e} \quad d\phi = \frac{2 \cdot \pi}{N_\phi} \quad (3.113)$$

Logo aplicando o mapeamento ao disco circular, chega-se em:

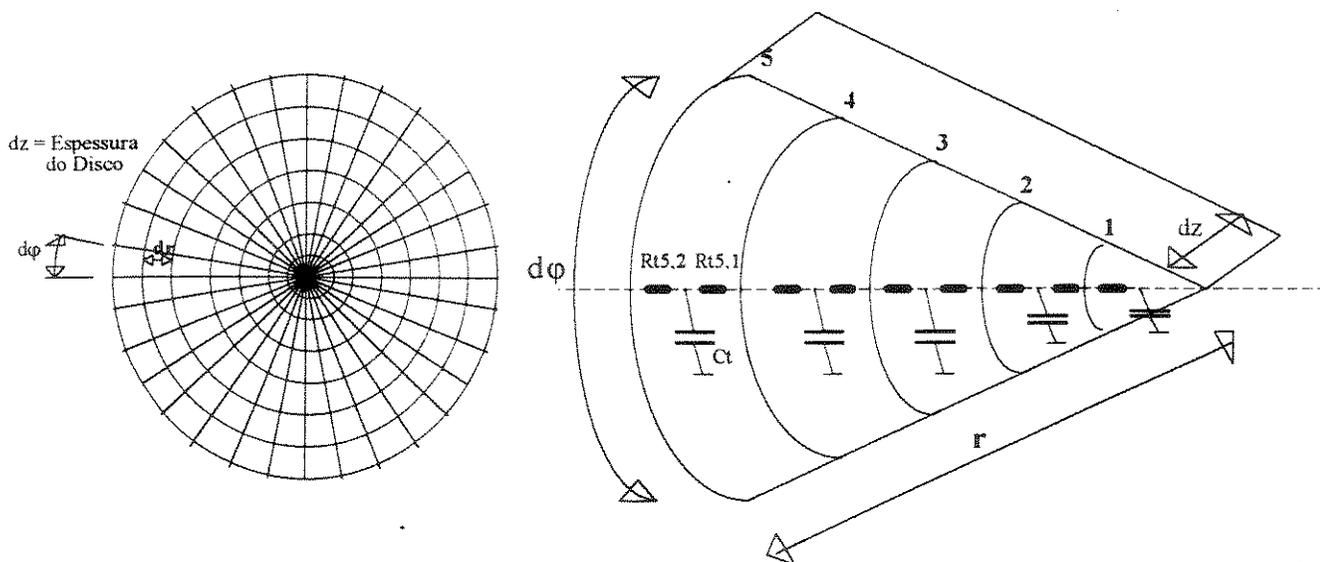


Figura 3.29 - Mapeamento do Disco Circular no M.D.F. análogo a Circuitos Elétricos

Observar que para este sistema, admite-se fluxo de calor radial, assim aplicando-se as equações dadas anteriormente para o cálculo das temperaturas pontuais, chega-se aos resultados apresentados na seqüência deste trabalho, conforme visto na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 - Ensaios de Simulação para a Geometria de Disco Circular

Ensaio 3.1.1	Raio = 0.1 m		$N_{\phi} = 50$
	$T_v = 1550 \text{ }^{\circ}\text{C}$	$dz = 0.01\text{m}$	$\Delta t = 0.1 \text{ seg}$
	%C = 0.1	$T_o = 20 \text{ }^{\circ}\text{C}$	$h_o = 1500 \text{ W/m}^2.\text{K}$
Ensaio 3.1.2	Raio = 0.2 m	$N_r = 50$	$N_{\phi} = 100$
	$T_v = 1550 \text{ }^{\circ}\text{C}$	$dz = 0.01\text{m}$	$\Delta t = 1.0 \text{ seg}$
	%C = 0.1	$T_o = 20 \text{ }^{\circ}\text{C}$	

Ensaio 3.1.1

A Figura 3.30 mostra a evolução da temperatura no interior do disco cilíndrico para os pontos apresentados nesta. A Figura 3.31 apresenta uma variação no número de pontos da malha nodal para o diferencial de raio, Observe-se que o erro na evolução da casca sólida para malhas mais grossas pode ser desprezado, contudo observa-se que para o valor da temperatura de superfície, este erro pode chegar a ordens bem maiores ($\cong 100^{\circ}\text{C}$ - em 100 seg.) conforme visto na Figura 3.32. Um detalhe interessante nesta figura se refere ao fato de que o aumento do número de pontos na malha satura os resultados após um valor, não tendo mais sentido refinar a malha após este valor, como pode-se observar as curvas em 50 e 30 pontos da Figura 3.32 são bastante próximas.

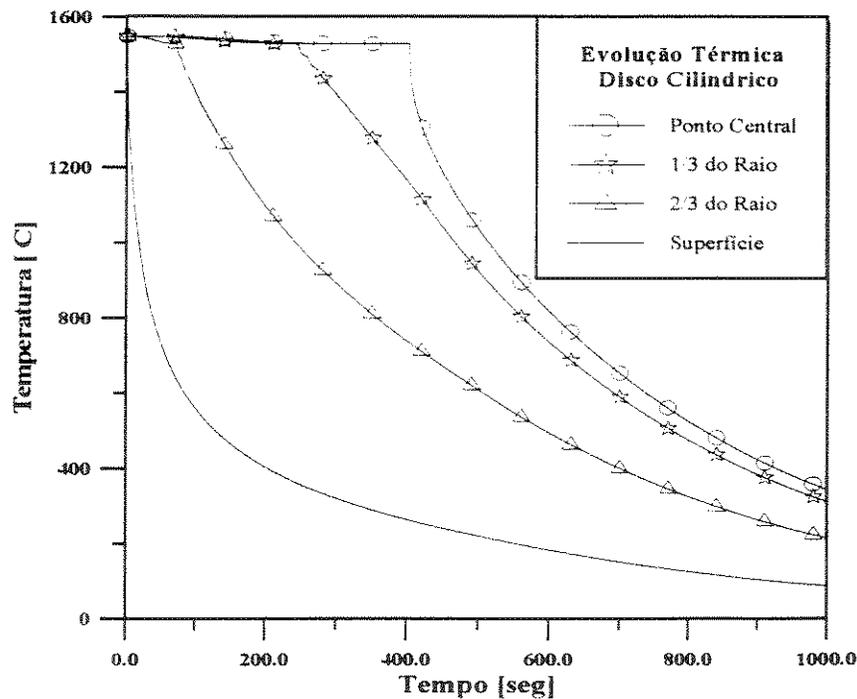


Figura 3.30 - Evolução da Temperatura ao longo do Raio [Ref. Ensaio 3.1.1]

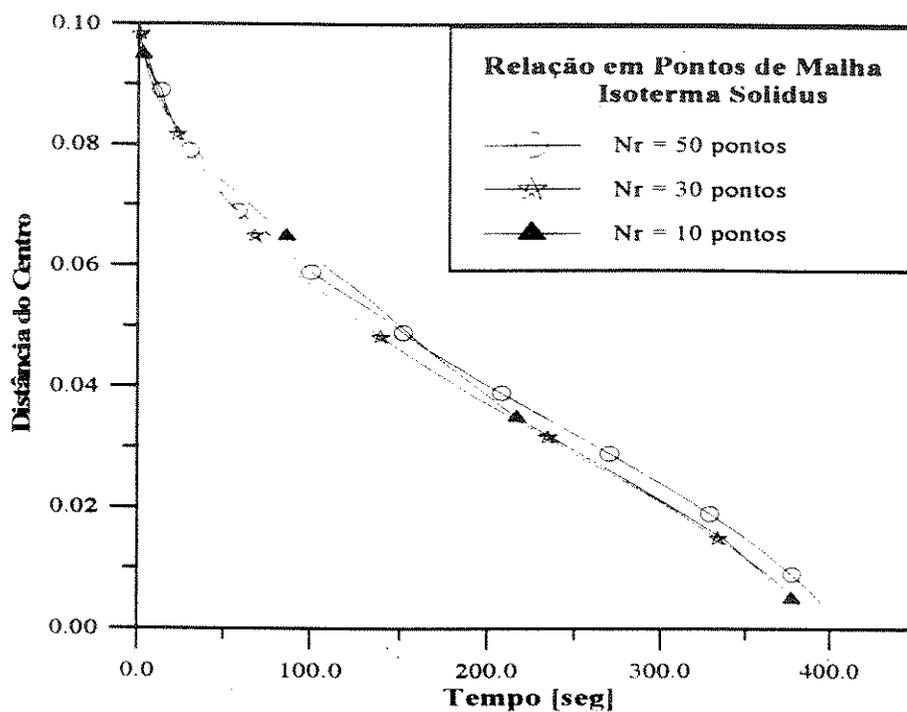


Figura 3.31 - Evolução da Casca Sólida no Disco Cilíndrico [Ref. Ensaio 3.1.1]

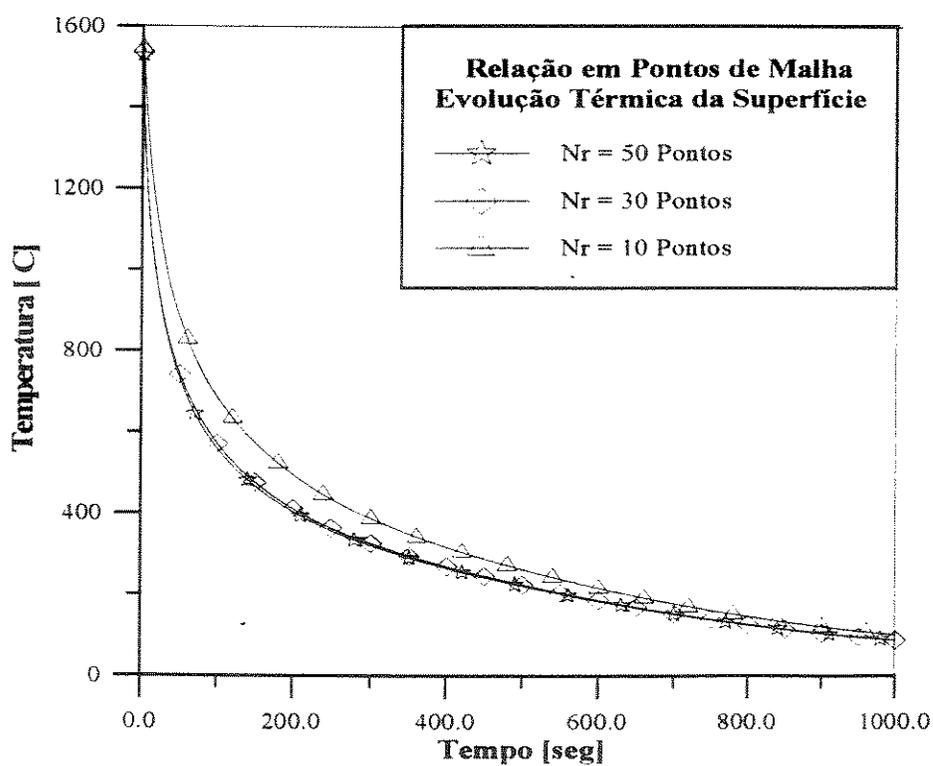


Figura 3.32 - Evolução da Temperatura de Superfície no Disco Cilíndrico [Ref. Ensaio 3.1.1]

Ensaio 3.1.2

No ensaio 3.1.2 apresentamos o perfil térmico ao longo do raio do cilindro para os instantes indicados na Figura 3.33. As Figuras 3.34 e 3.35 mostram o efeito prático da variação do coeficiente de retirada de calor da superfície, observe que este efeito é exponencial sobre uma ordem de grandeza, onde as relações em $h_o = 10000$ e $1000 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$ são próximas, tornando-se efetivamente tênue a retirada de calor para $h_o = 100 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$. A variação do coeficiente de retirada de calor da superfície, se reflete de forma agressiva e marcante no efeito da evolução da casca sólida, conforme pode ser visualizado na Figura 3.35.

Em observância a coerência física dos resultados apresentados pelo modelo, toma-se como válida sua eficiência representativa do sistema físico, restando a estes a aferição física através da comparação com curvas experimentais.

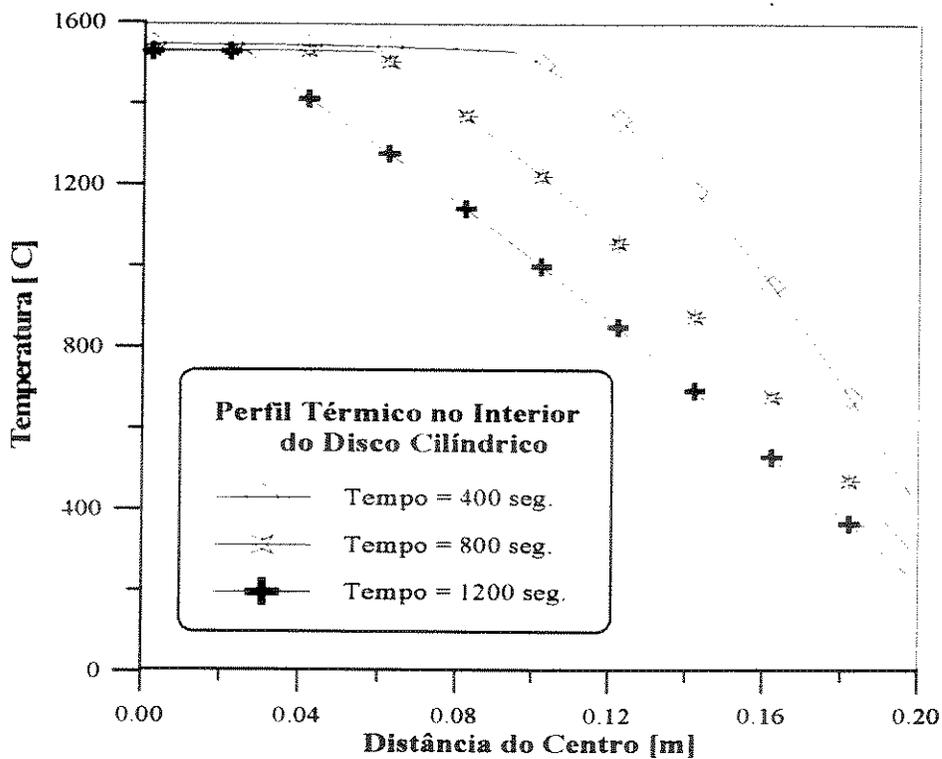


Figura 3.33 - Perfil Térmico no Interior do Disco Cilíndrico [Ref. Ensaio 3.1.2]

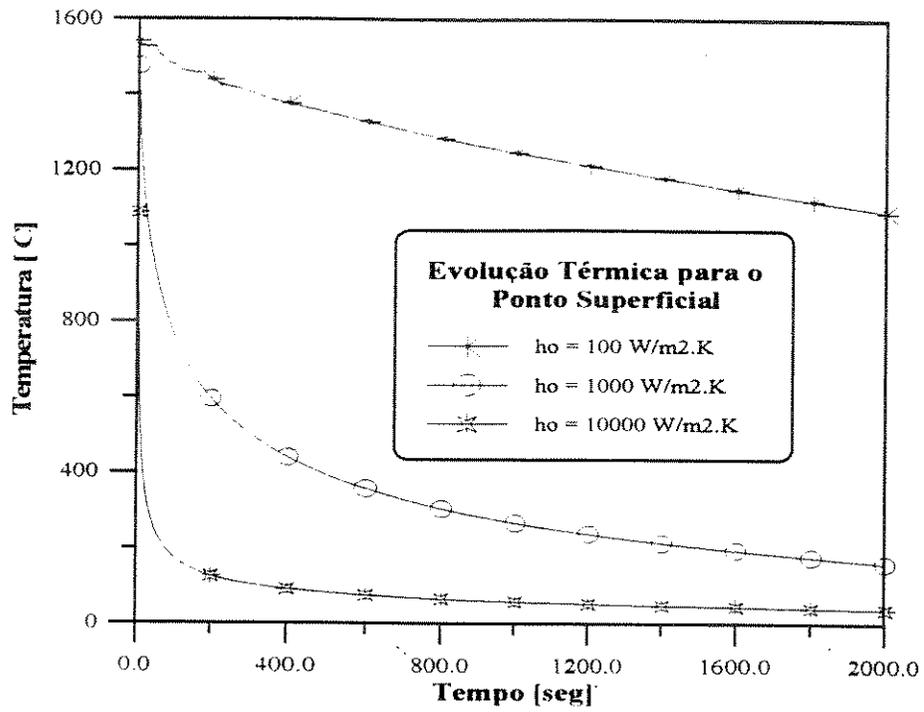


Figura 3.34 - Temperatura de Superfície para Variação do Coeficiente de Calor [Ref. Ensaio 3.1.1]

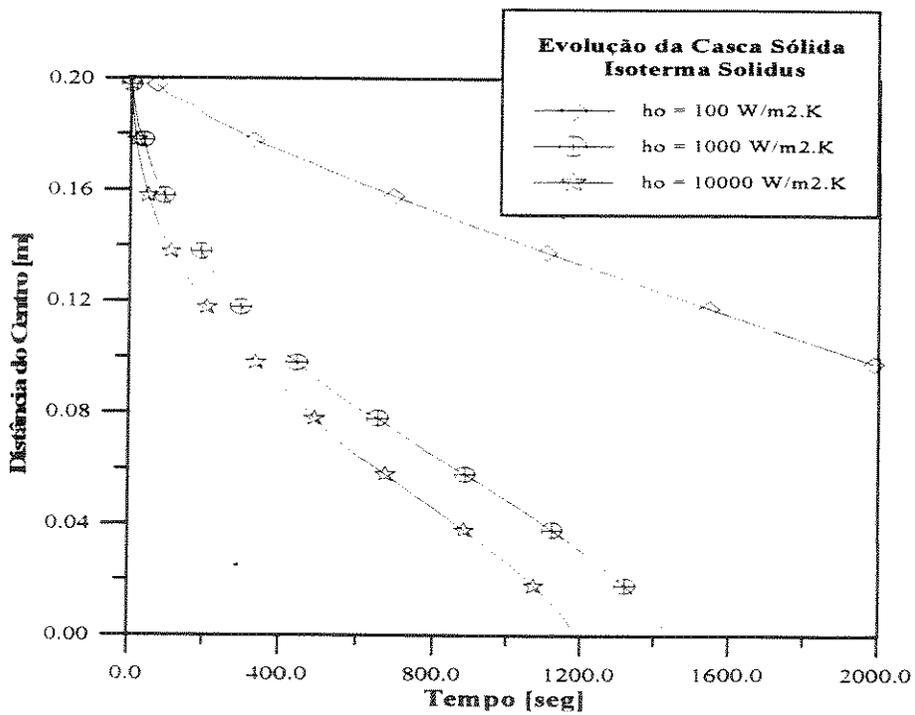


Figura 3.35 - Evolução da Casca Sólida na Variação do Coeficiente de Calor [Ref. Ensaio 3.1.1]

3.5.3. - Sistema Esférico

3.5.3.1. Análise Matemática

Considere o elemento esférico de Diferença Finita dado na Figura abaixo:

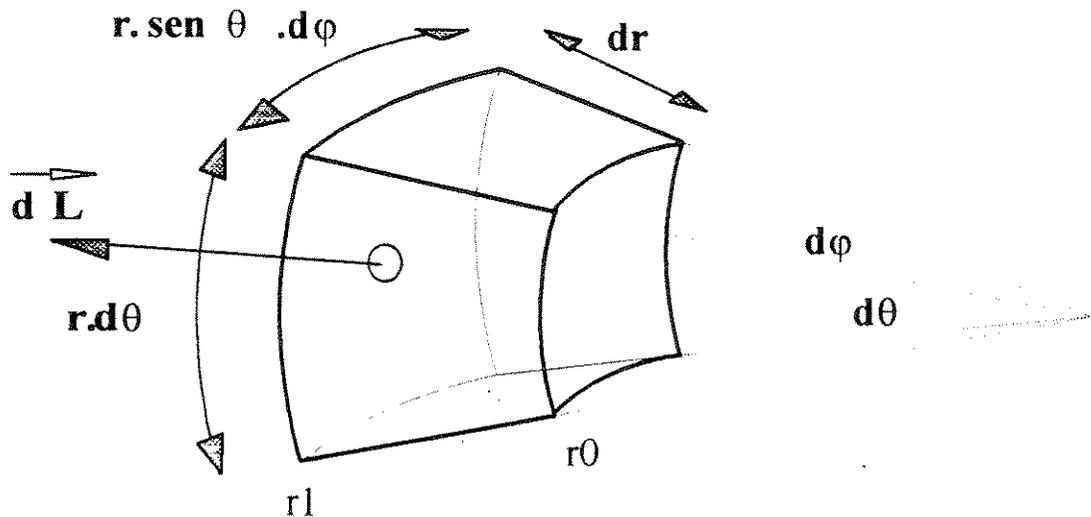


Figura 3.36 - Elemento Diferencial Esférico

Em termos da integral definida tem-se que:

$$R_t = \frac{1}{k} \cdot \int_{r_0}^{r_1} \frac{dr}{\int_0^{d\theta} \int_0^{d\phi} r^2 \cdot \text{sen}(\theta) d\phi \cdot d\theta} \quad (3.114)$$

Sendo: R_t = Resistência Térmica do Material;
 k = Condutividade Térmica do Material;
 r = Raio da Esfera;

Assim:

$$R_t = \frac{dr}{k \cdot d\phi \cdot (1 - \cos(d\theta)) \cdot r_0 \cdot r_1} \quad [\text{K/W}] \quad (3.115)$$

Para ângulos pequenos de ' $d\theta$ ' vale como boa aproximação matemática:

$$\cos(d\theta) \cong \sqrt{1 - d\theta^2} \quad (3.116)$$

Assim:

$$Rt = \frac{dr}{k \cdot d\phi \cdot (1 - \sqrt{1 - d\theta^2}) \cdot r_0 \cdot r_1} \quad (3.117)$$

O Capacitor térmico é dado pela Equação 3.107, onde: $Ct = \rho \cdot c' \cdot Vol$, sendo que 'Vol', representa o volume do elemento de Diferença Finita, dado pela Equação 3.103. Logo:

$$Ct = \rho \cdot c' \cdot \frac{r_1^3 - r_0^3}{3} \cdot d\phi \cdot (1 - \sqrt{1 - d\theta^2}) \quad (3.118)$$

Considerando 'n' para o número de subdivisões do raio no cálculo de r1 e r0, temos que:

$$\Rightarrow \begin{cases} r_0 = (n-1) \cdot dr \\ r_1 = n \cdot dr \end{cases}$$

Assim:

$$Ct_n = \rho \cdot c' \cdot \left(\frac{3 \cdot n^2 - 3 \cdot n + 1}{3} \cdot dr^3 \cdot d\phi \cdot (1 - \sqrt{1 - d\theta^2}) \right) \quad (3.119)$$

3.5.3.2. Sistema Experimental:

Considerando um elemento de volume no sistema de coordenadas esféricas com mapa de diferenças finitas, conforme a Figura 3.37.

A necessidade de se considerar a posição de elemento resistivo no elemento de Diferenças Finitas é semelhante ao caso do cilindro, portanto:

$$\text{Posição 1} \Rightarrow \begin{cases} r_0 = (n-1) \cdot dr \\ r_1 = (n-1/2) \cdot dr \end{cases} \quad \Rightarrow \text{Para } n = 2 \text{ até } Nr$$

e

$$\text{Posição 2} \Rightarrow \begin{cases} r_0 = (n-1/2) \cdot dr \\ r_1 = n \cdot dr \end{cases} \quad \Rightarrow \text{Para } n = 1 \text{ até } Nr$$

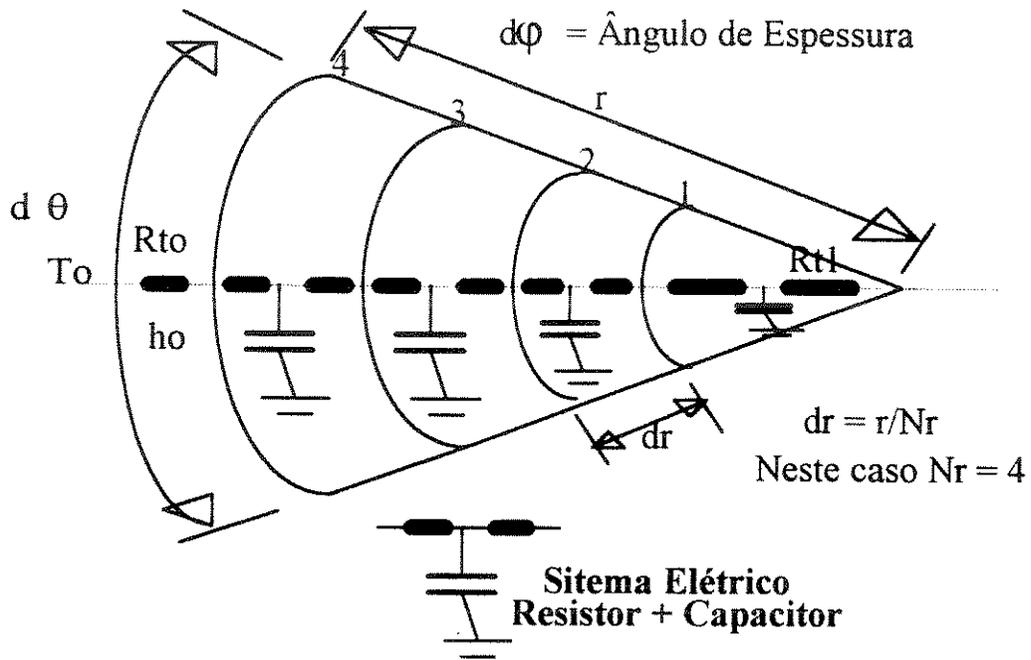


Figura 3.37 - Partição de Diferenças Finitas para Elemento de Volume Esférico

Deste modo a equação geral é dada por:

$$R_{t_n} \cong \frac{2}{k_1 \cdot d\phi \cdot (1 - \sqrt{1 - d\theta^2})} \cdot A_n \quad (3.120)$$

Sendo:

$$\text{Posição 1} \Rightarrow A_n = \frac{1}{2 \cdot n^2 - 3 \cdot n + 1} \quad (3.121)$$

$$\text{Posição 2} \Rightarrow A_n = \frac{1}{2 \cdot n^2 - n} \quad (3.122)$$

O cálculo da resistência convectiva (R_{t_0}) é dada por:

$$R_{t_0} = \frac{1}{h_o \cdot r^2 \cdot d\phi \cdot (1 - \sqrt{1 - d\theta^2})} \quad (3.123)$$

3.5.3.3. Aplicação Prática do Sistema Esférico no Método de Diferenças Finitas com a Analogia a Circuitos Elétricos

Considere a calota esférica, dada na Figura abaixo:

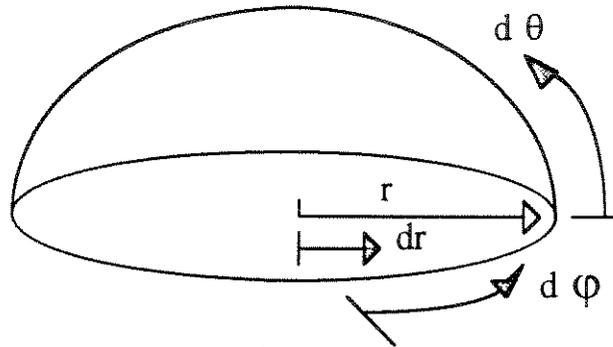


Figura 3.38 - Calota Esférica Utilizada no Modelo Numérico

Aplicando o mapeamento pelo M.D.F., onde define-se:

- N_r = N° de Subdivisões do Raio (r);
- N_ϕ = N° de Subdivisões do Perímetro;
- N_θ = N° de Subdivisões de Ângulo;

Tem-se que:

$$dr = \frac{r}{N_r} \quad , \quad d\phi = \frac{2 \cdot \pi}{N_\phi} \quad e \quad d\theta = \frac{\pi}{N_\theta} \quad (3.124)$$

Admitindo-se fluxo de calor radial, e aplicando-se as equações dadas anteriormente para o cálculo das temperaturas pontuais, chega-se aos resultados apresentados na seqüência deste trabalho.

Os ensaios que seguem para o sistema esférico, valem os mesmos comentários feitos para o sistema cilíndrico.

Tabela 3.2 - Ensaios de Simulação para a Geometria de Calota Esférica

Ensaio 3.2.1	Raio = 0.1 m	Nr = 10	N _φ = 50	N _θ = 36
	%C 0.1	Tv = 1550 °C		
	ho = 1500 W/m ² .K	To = 20 °C	Δt = 0.1 seg	
Ensaio 3.2.2	Raio = 0.1 m	Nr = 10	N _φ = 30	N _θ = 30
	%C 0.1	Tv = 1550 °C		
	ho = Variável	To = 20 °C	Δt = 0.1 seg	
Ensaio 3.2.3	Raio = 0.1 m	Nr = Variável	N _φ = 30	N _θ = 30
	%C 0.1	Tv = 1530 °C		
	ho = 1000 W/m ² .K	To = 20 °C	Δt = 0.1 seg	

Ensaio 3.2.1

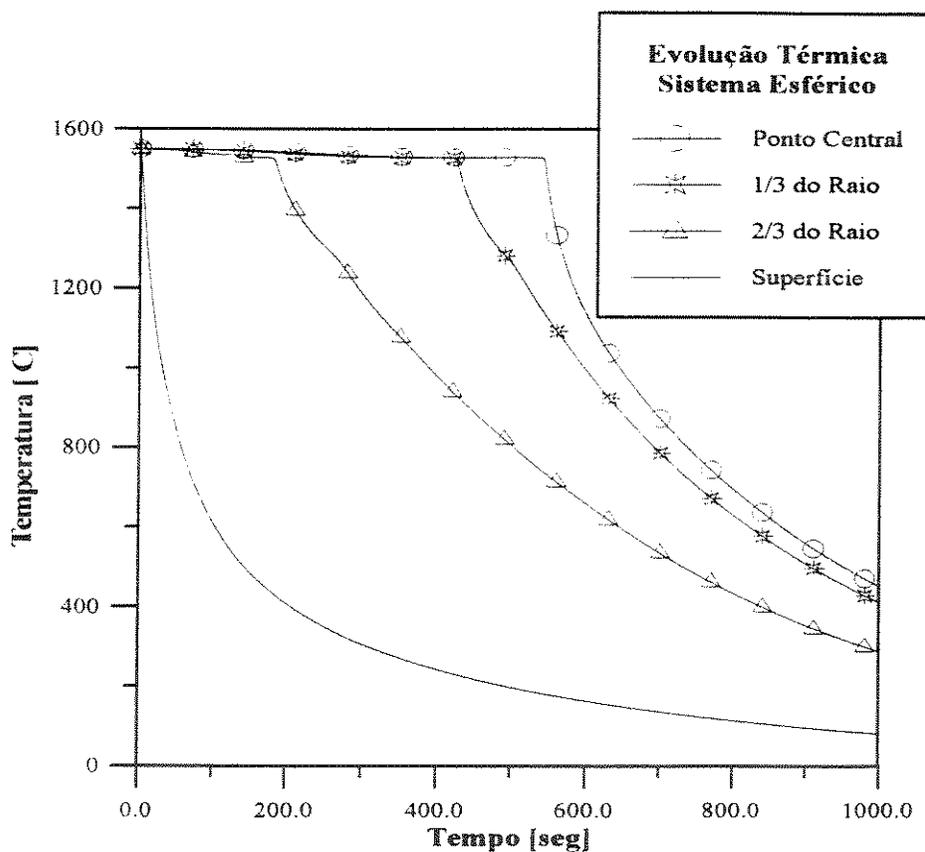


Figura 3.39 - Evolução Térmica em Pontos Localizados no Raio da Esfera
[Ref. Ensaio 3.2.1]

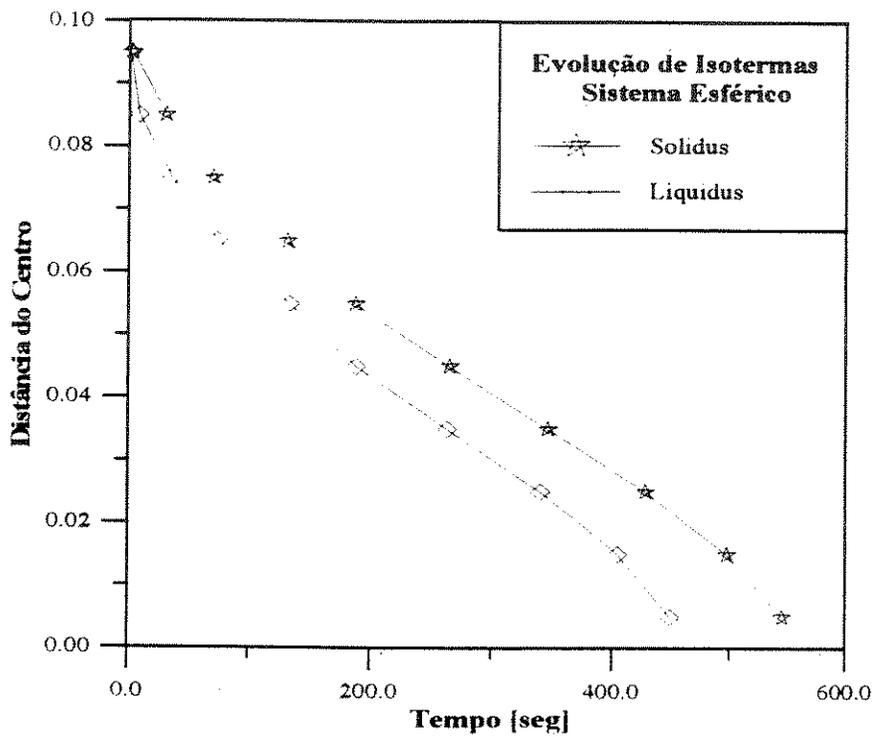


Figura 3.40 - Evolução das Isothermas no Interior da Esfera [Ref. Ensaio 3.2.1]

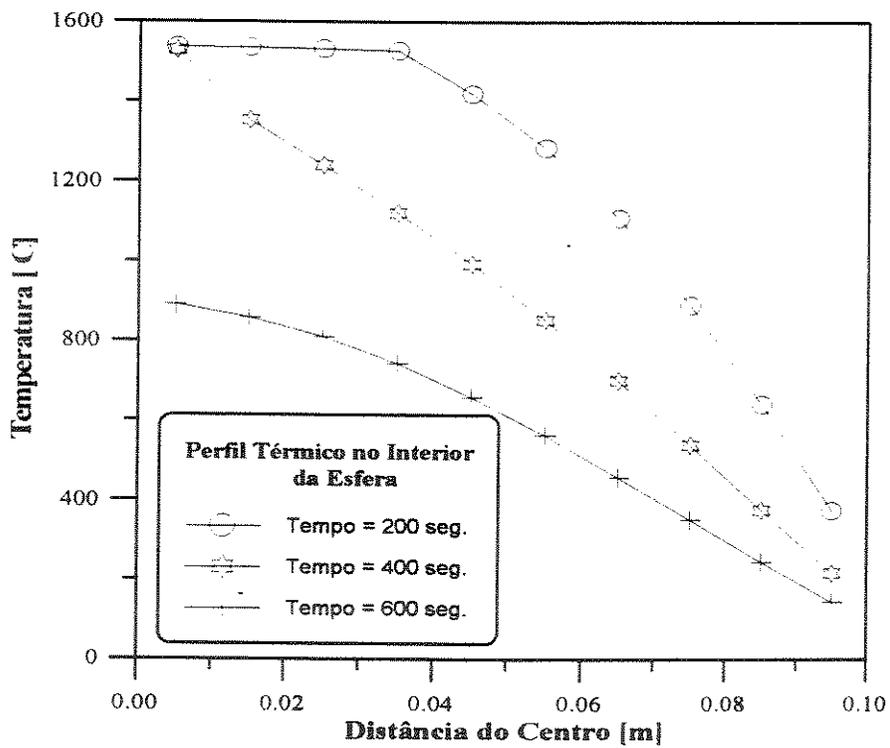


Figura 3.41 - Perfil Térmico ao Longo do Raio da Esfera [Ref. Ensaio 3.2.1]

Ensaio 3.2.2

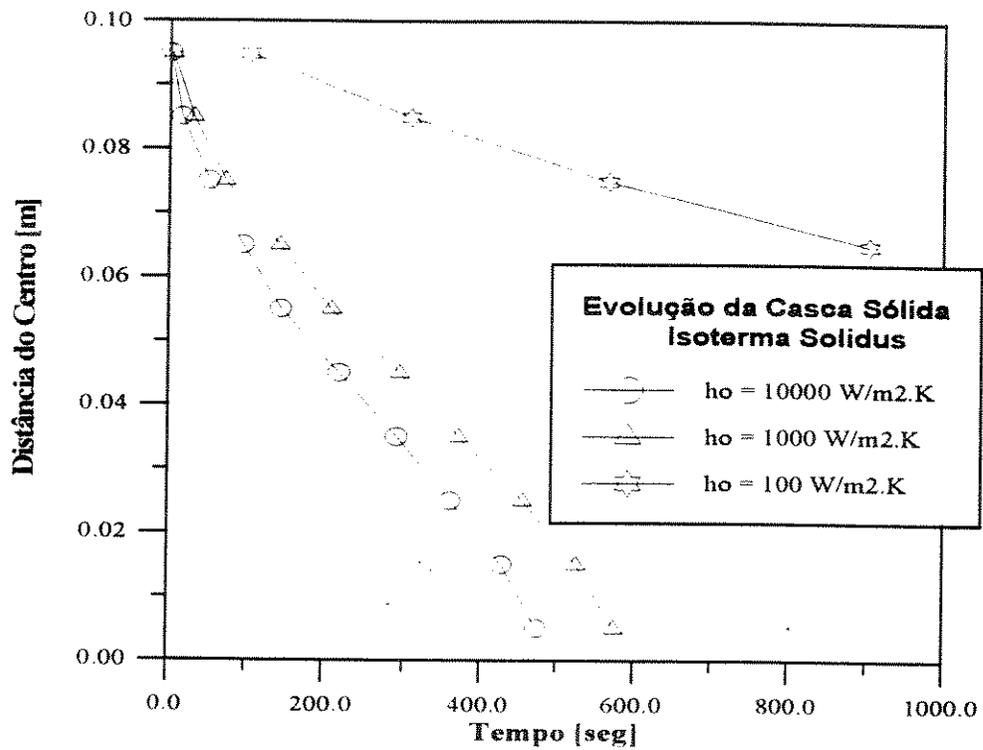


Figura 3.42 - Evolução de Casca Sólida na Esfera para Variação do Coeficiente de Retirada de Calor [Ref. Ensaio 3.2.2]

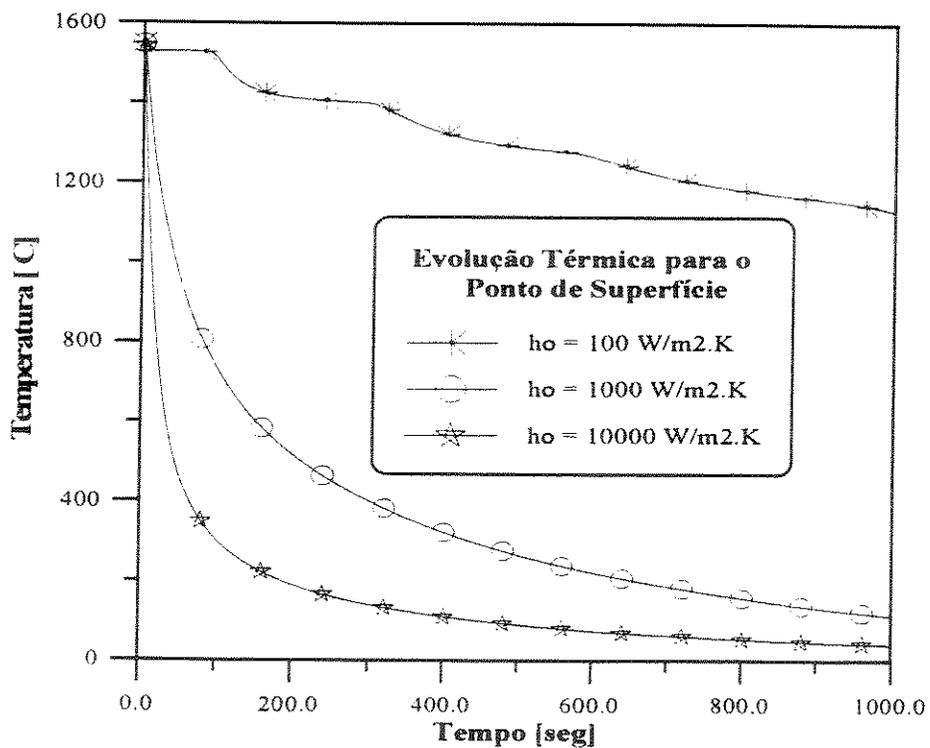


Figura 3.43 - Evolução Térmica da Superfície na Variação do Coeficiente de Calor [Ref. Ensaio 3.2.2]

Ensaio 3.2.3

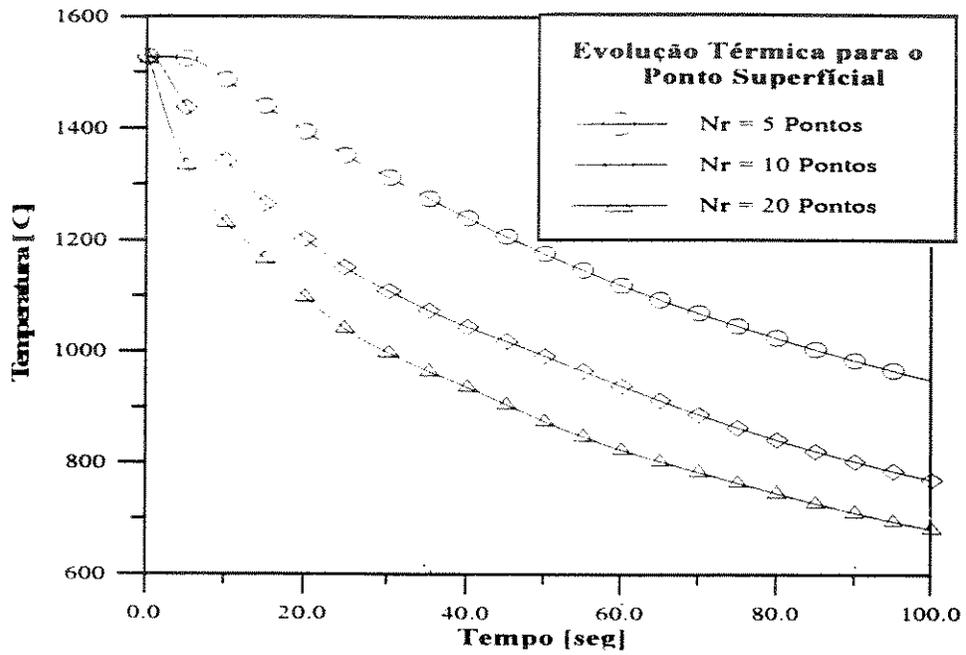


Figura 3.44 - Evolução da Temperatura de Superfície / Sistema Cilindrico [Ref. Ensaio 3.2.3]

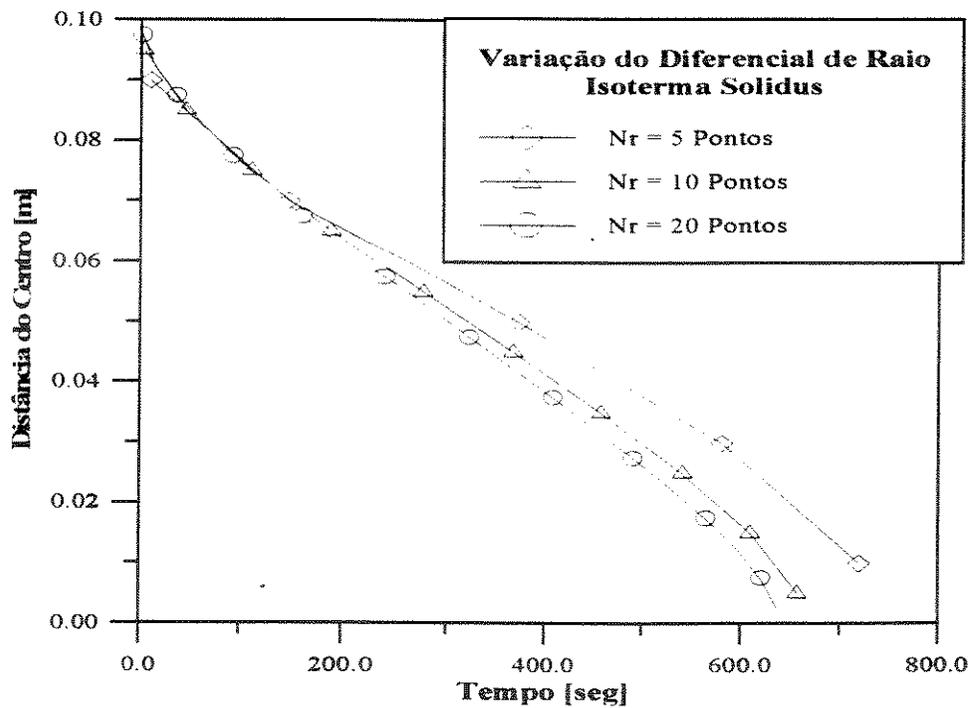


Figura 3.45 - Evolução da Casca Sólida / Sistema Cilindrico [Ref. Ensaio 3.2.3]

3.6 Sistemas Complexos - O Acoplamento do Modelo no Método Numérico

Com as manipulações das malhas do M.D.F. apresentado nos itens anteriores mostramos algumas possibilidades de mapeamento de corpos de geometria complexa. O objetivo aqui, consiste em inserir as malhas do M.D.F. - Acoplado a teoria de circuitos Elétricos, garantindo assim a certeza de sua utilização. Os resultados apresentados anteriormente são suficientes para validar o bom andamento do modelo desenvolvido.

A) SISTEMA 01:

Suponha o sistema de solidificação apresentado na Figura abaixo, onde será aplicado o mapeamento do M.D.F.:

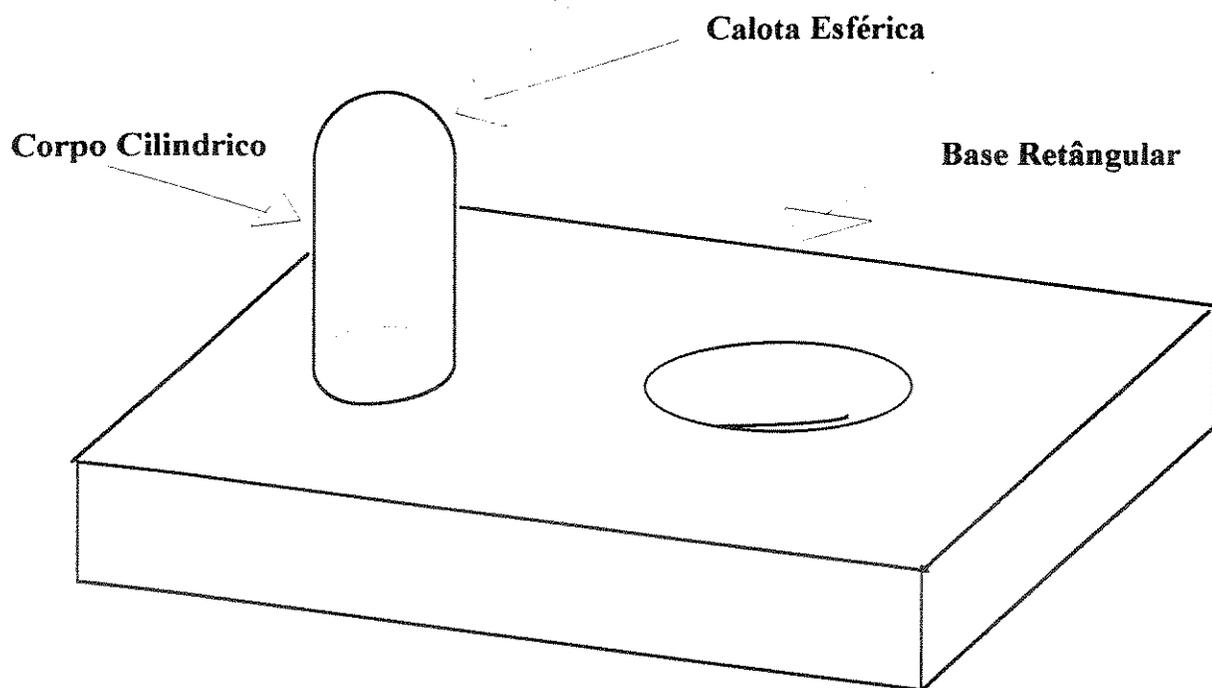


Figura 3.46 - Corpo físico a ser mapeado pelo M.D.F.

Considerando que os fluxos de retirada de calor do corpo físico são perpendiculares a superfície do corpo, o mapeamento é dado como segue:

Para a Base Retangular:

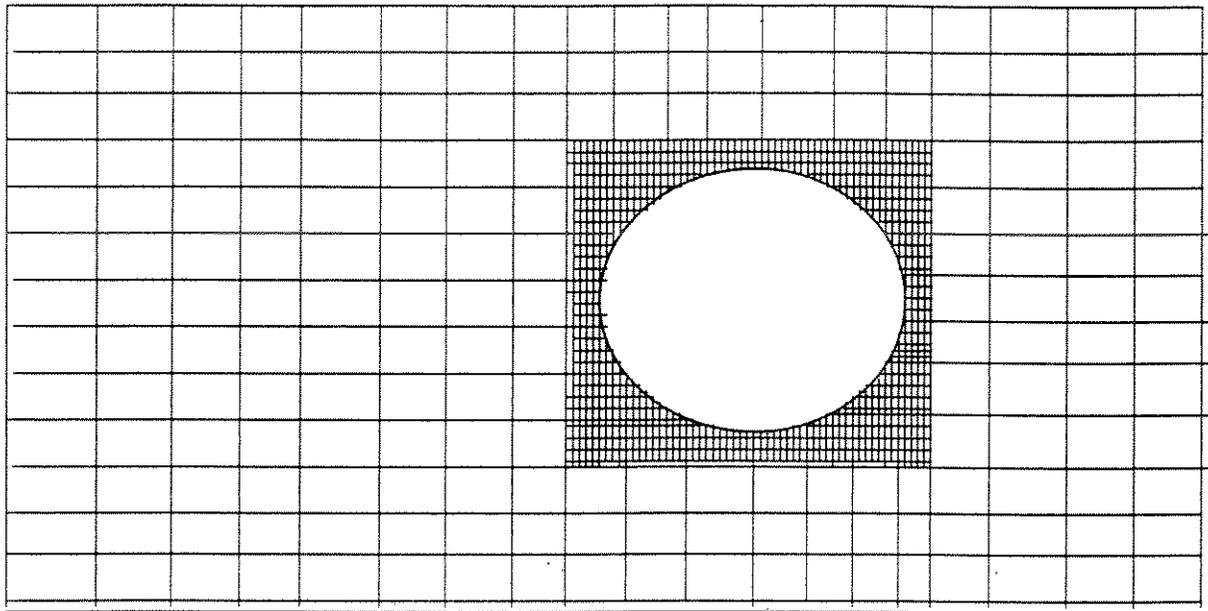


Figura 3.47 - Refino de Malha no Contorno Vazado

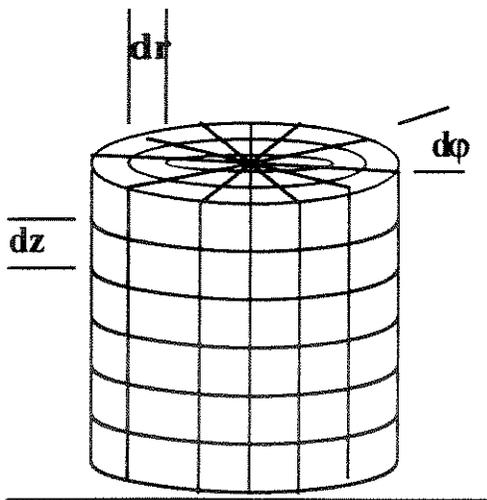


Figura 3.48 - Mapa de Modelo para a Corpo Cilindrico

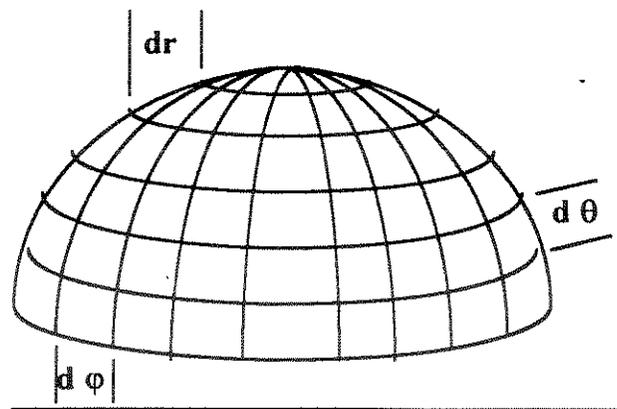


Figura 3.49 - Mapa de Modelo para a Calota Esférica

Observe: Considerar para a calota esférica ' dr ' e ' $d\phi$ ' idênticos ao do corpo cilíndrico, permitindo assim compatibilidade entre os módulos

Assim mostra-se a grande maleabilidade oferecida pelo M.D.F. com o acoplamento da teoria elétrica. As malhas apresentadas serão posteriormente utilizadas para mapear as peças industriais apresentadas no capítulo seguinte, dando assim movimentação a todo modelo aqui desenvolvido, finalizando assim a elaboração deste.

3.7 Discussão Prática Sobre o Efeito do Erro Numérico no Método de Diferenças Finitas

3.7.1. - Modo Explícito Versus Modo Implícito

O método de diferenças finitas representa uma forte ferramenta de cálculo na solução de equações diferenciais parciais. No problema particular da transferência de energia térmica com enfoque na solidificação de materiais, este método vem sendo muito estudado e aplicado por diversos pesquisadores. Contudo a literatura não é muito clara sobre as condições de aplicação do método uma vez que este pode se apresentar sobre duas formas de trabalho: "O MODO EXPLÍCITO" e "O MODO IMPLÍCITO". Ambos os modos tratam do mesmo método sobre as mesmas condições de entrada gerando evidentemente as mesmas respostas de saída, entretanto diferem nos limites matemáticos aplicados em suas equações numéricas. O modo de trabalho explícito possui dentro de seu equacionamento um limite na condição do intervalo de tempo máximo permitido, sendo este limite uma função direta das condições de malha e precisão exigidas pelo sistema, sendo que a não observação deste limite pode levar os resultados numéricos a situações instáveis inutilizando o método.

O modo de trabalho implícito não possui nenhum limite numérico podendo ser utilizado sobre qualquer sistema ou malha com qualquer entrada desejada, sendo este sempre estável e convergente. É claro que a garantia da estabilidade permanente oferecida pelo modo implícito custa um preço, e justamente a dificuldade numérica na elaboração e solução de sistemas lineares matriciais é um custo razoável a se perder quando necessitamos de implementações velozes do trabalho numérico realizado por um computador. Por exemplo uma determinada malha desenvolvida sobre um sistema de solidificação permite como intervalo de tempo máximo "dt" um valor igual a 100 microsegundos (0.0001 s), supondo que desejássemos varrer como intervalo do efeito de solidificação um período não inferior a 30 minutos, desta forma o trabalho numérico do computador será a realização de 18 milhões de passos iterativos de solução. No modo implícito não existe este valor limite onde poderia ser utilizado um valor de "dt" qualquer, por exemplo 0.1 segundo, com o qual teríamos 18.000 passos iterativos de solução. Um aumento de velocidade de 1000 vezes, a Figura 3.50 ilustra uma situação semelhante com a simulação do resfriamento de aço com 0,1% de carbono em um molde retangular refrigerado.

No entanto, observando os resultados gerados por ambos os modos de trabalho, em particular a sistemas que sofrem o efeito da mudança de fase, conclui-se que este aumento no valor de "dt" pode trazer algum prejuízo. Suponha que M.D.F. seja utilizado para o mapeamento da dinâmica das frentes de solidificação de uma liga binária qualquer, e que

a malha utilizada no sistema tenha uma característica extremamente fina com elementos nodais bastante reduzidos, onde a mudança de fase sobre os diversos elementos da malha é dada pela característica da liga. Assim, realizando um ensaio numérico de simulação e monitorizando um ponto qualquer da malha, pode-se perceber que a aplicação de um valor de "dt" muito alto pode 'pular' o efeito da transformação de fase do ponto monitorizado, gerando neste elemento um efeito de erro não desejado as características do ensaio. Na Figura 3.51 ilustrou-se este inconveniente do modelo numérico, para as mesmas condições do sistema da Figura 3.50. Contudo se o ensaio consistir apenas no levantamento das características da evolução de temperatura de superfície do molde ou do metal, este erro numérico deve passar sem nenhum efeito nocivo aos objetivos do ensaio, uma vez que um valor de "dt" alto em relação ao refinamento de malha não garante a visualização de mudanças rápidas de temperatura ao longo de uma simulação, mas apresenta resultados coerentes em situações de macroescala. Para este caso é aconselhável utilizar o modo de trabalho explícito com o limite máximo de "dt" dado pelo próprio modelo.

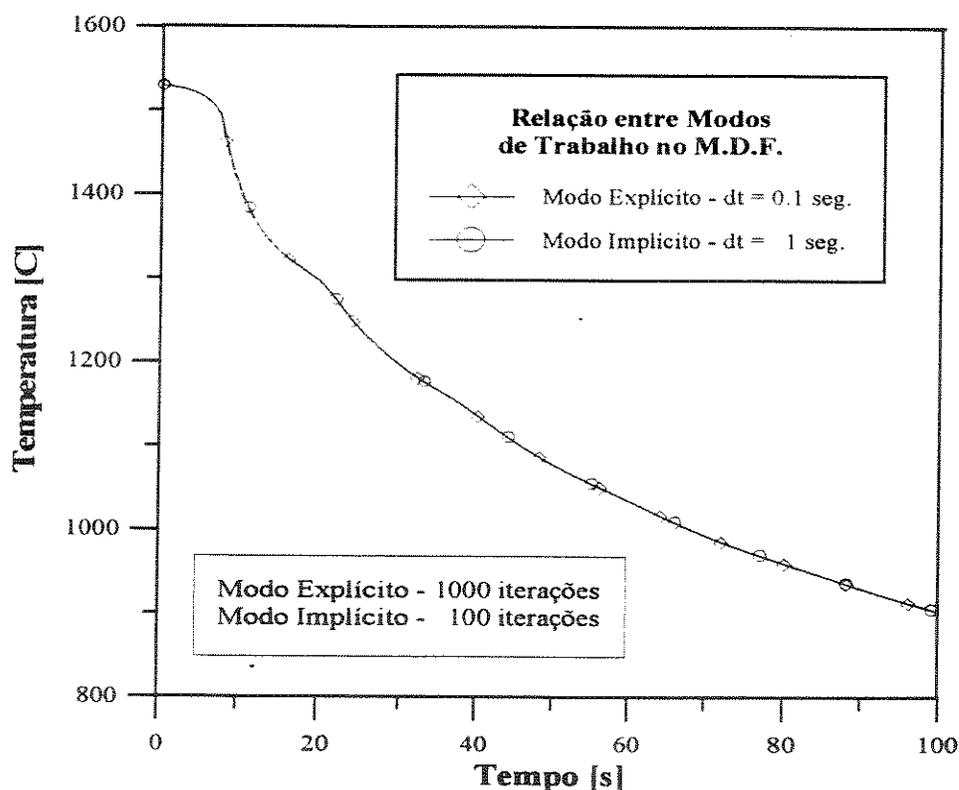


Figura 3.50 - Relação entre os Modos de trabalho do Método de Diferenças Finitas

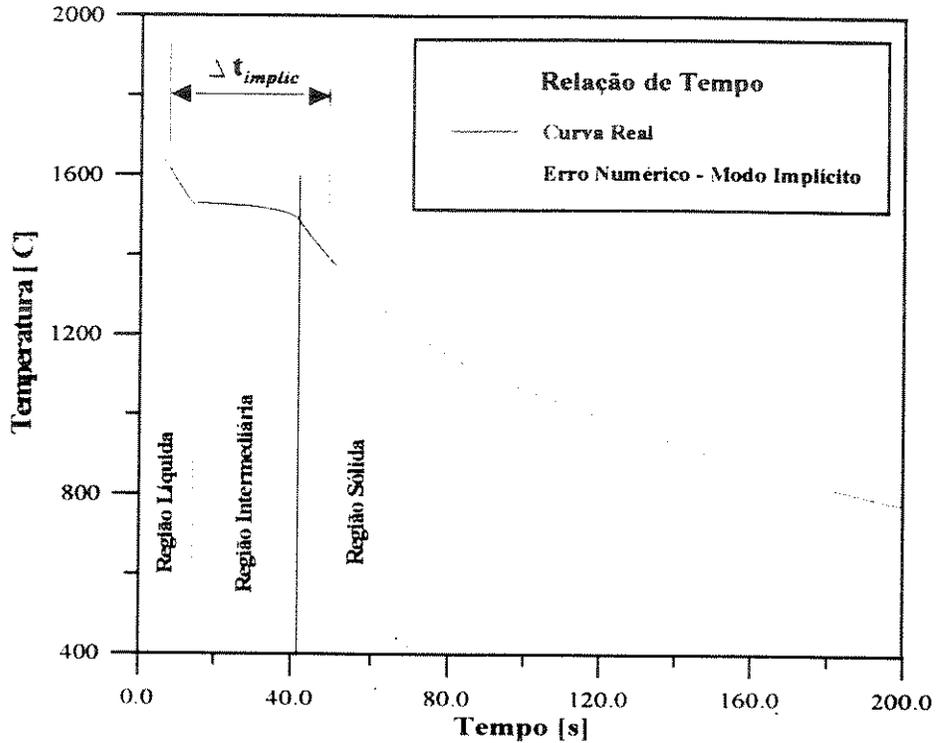


Figura 3.51 - Erro Numérico apresentado para altos valores de " Δt "

3.7.2. - O Modo Misto ou Modo da Média (CRANK-NICHOLSON):

Além dos modos implícito e explícito de trabalho do M.D.F., existe um outro modo de trabalho do sistema matemático: O MODO MISTO ou o MODO DA MÉDIA. Este consiste em se multiplicar a equação obtida pelo MODO IMPLÍCITO por um fator "F" e soma-la a equação obtida pelo MODO EXPLÍCITO multiplicada por "1-F", sendo o fator "F" um número assumido entre '0' e '1'. A média aritmética das soluções é obtida com o fator "F = 1/2", sendo este valor associado com o MÉTODO DE 'CRANK-NICHOLSON' (Equação 3.125). A utilização deste MODO pode levar a equações maiores em termos numérico de trabalho computacional, contudo vale como sugestão de análise a verificação das características de ensaio obtidas por esta nova formulação.

$$\begin{aligned}
 & F \cdot (T_{i-1,j}^{n+1} + T_{i+1,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1} + T_{i,j+1}^{n+1} - 4 \cdot T_{i,j}^{n+1}) + \\
 & + (1-F) \cdot (T_{i-1,j}^n + T_{i+1,j}^n + T_{i,j-1}^n + T_{i,j+1}^n - 4 \cdot T_{i,j}^n) + \\
 & + q \cdot \frac{\Delta x^2}{k} = \frac{\Delta x^2}{\alpha \cdot \Delta t} \cdot (T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n)
 \end{aligned}
 \tag{3.125}$$

3.7.3. - A Utilização do Modo Implícito:

3.7.3.1. Sistemas Lineares

A utilização do modo implícito leva o equacionamento numérico a necessidade de solução em sistemas lineares do tipo:

$$[\mathbf{M}] * \{\mathbf{X}\} = \{\mathbf{R}\} \quad (3.126)$$

onde: $[\mathbf{M}]$ = Matriz quadrada de ordem $N \times N$;

$\{\mathbf{R}\}$ = Vetor Resposta $N \times 1$;

$\{\mathbf{X}\}$ = Vetor Incógnita $N \times 1$;

A ordem dos sistemas lineares é uma função direta da ordem espacial que o sistema de simulação esta representado:

$$\text{Representação UNIDIMENSIONAL} \Rightarrow N = N_{p_x} + 2; \quad (3.127)$$

$$\text{Representação BIDIMENSIONAL} \Rightarrow N = (N_{p_x} + 2) \cdot (N_{p_y} + 2); \quad (3.128)$$

$$\text{Representação TRIDIMENSIONAL} \Rightarrow N = (N_{p_x} + 2) \cdot (N_{p_y} + 2) \cdot (N_{p_z} + 2); \quad (3.129)$$

onde: N_{p_x} = Número de pontos na direção 'X';

N_{p_y} = Número de pontos na direção 'Y';

N_{p_z} = Número de pontos na direção 'Z';

3.7.3.2. Solução de Sistemas Lineares:

Na literatura pode-se encontrar inúmeros métodos matemáticos que apontam a solução dos sistemas lineares descritos acima. Entre estes métodos é importante destacar dois tipos:

Tipo 01) Métodos Diretos:

- Transformação LU; $\Rightarrow [\mathbf{M}].\{\mathbf{X}\} = \{\mathbf{R}\} \Rightarrow [\mathbf{L}].[\mathbf{U}].\{\mathbf{X}\} = \{\mathbf{R}\}$

- Eliminação de GAUSS; $\Rightarrow [\mathbf{M}].\{\mathbf{X}\} = \{\mathbf{R}\} \Rightarrow [\mathbf{U}].\{\mathbf{X}\} = \{\mathbf{R}'\}$

- Eliminação de GAUSS-JORDAN; $\Rightarrow [\mathbf{M}].\{\mathbf{X}\} = \{\mathbf{R}\} \Rightarrow [\mathbf{I}].\{\mathbf{X}\} = \{\mathbf{Z}\}$

- Solução direta pela inversa; $\Rightarrow [\mathbf{M}].\{\mathbf{X}\} = \{\mathbf{R}\} \Rightarrow \{\mathbf{X}\} = \{\mathbf{R}\} \cdot [\mathbf{M}^{-1}]$

Tipo 02) Métodos Iterativos:

- Método de JACOBI-RICHARDSON;
- Método de GAUSS-SEIDEL;

Os métodos diretos são aqueles que apresentam a solução do sistema linear com um único passo de seu equacionamento, o vetor incógnita "{X}" tem uma solução única sendo esta diretamente visualizada após a aplicação do método de solução. Os métodos iterativos são aqueles que apresentam a solução do sistema linear após uma seqüência de passos iterativos sobre seu equacionamento, o vetor incógnita "{X}" tende a uma solução única após a seqüência iterativa ter sido concluída. A conclusão desta seqüência iterativa se dá por intermédio de um critério de parada, diretamente relacionado com o erro máximo permitido para o vetor incógnita "{X}". A solução de um método iterativo sempre parte de um valor arbitrário inicial no valor do vetor incógnita, além da necessidade de se garantir que o sistema linear seja convergente sobre o método de solução empregado. Por questões óbvias à própria definição dos tipos de métodos empregados para a solução de sistemas lineares, os métodos preferidos para a solução dos sistemas gerados no "M.D.F. - MODO IMPLÍCITO" são os métodos de solução direta. A necessidade iterativa do M.D.F. de soluções rápidas impede que um método para a solução de seus sistemas lineares, também venha a ser iterativo. Assim na seqüência analisaremos apenas o emprego dos métodos de solução direta.

3.7.3.3. Condicionamento de um Sistema Linear:

Na aplicação dos métodos numéricos, uma propriedade muito importante a ser verificada é a estabilidade do sistema sobre o efeito de pequenas perturbações dos dados numéricos, ou seja se pequenas perturbações nos dados iniciais acarretam pequenas alterações na solução final. Em outras palavras estamos interessados em saber se o acúmulo de pequenos erros, devido ao arredondamento ou a capacidade de armazenamento em máquina, na solução iterativa do M.D.F. se propaga com alta ou baixa velocidade podendo levar a simulação global a resultados desastrosos. Por exemplo considere os seguintes sistemas:

$$A) \quad \begin{bmatrix} 3 & 6 & 0 & 3 \\ 1 & 4 & -2 & 5 \\ 7 & 15 & 6 & 23 \\ 5 & 17 & -2 & 29 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 4 \\ 6 \end{bmatrix}$$

cuja solução e dada por:

Pela Inversa $\Rightarrow x = (-1.0000, 2.0000, 0.0000, 0.1250)^t$

Por Eliminação de GAUSS $\Rightarrow x = (-0.2500, 0.0000, 0.0000, 0.2500)^t$

Por Transformação LU \Rightarrow Não é possível;

Por Eliminação de JORDAN \Rightarrow Não é possível;

para as soluções acima o erro relativo (ξ) em cada método é dado por:

$$\xi = \frac{\|R - R_R\|_{\infty}}{\|R\|_{\infty}} \Rightarrow \begin{cases} R_R = \text{Resposta Obtida} \\ R = \text{Resposta Esperada} \end{cases} \quad (3.130)$$

Assim: Para Solução Inversa $\Rightarrow \xi = 444 \%$

Para Eliminação de GAUSS $\Rightarrow \xi = 0 \%$

$$B) \begin{bmatrix} 3 & 6 & 0 & 3 \\ 1 & 4 & -2 & 5 \\ 7 & 15 & 6 & 23 \\ 5 & 17 & -2 & 29.0001 \end{bmatrix} * \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 4 \\ 6 \end{Bmatrix}$$

cuja solução e dada por:

Pela Inversa $\Rightarrow x = (-2.0000, 1.0000, 0.5000, 0.0000)^t$

Por Eliminação de GAUSS $\Rightarrow x = (-2.0000, 1.0000, 0.5000, 0.0000)^t$

Por Transformação LU \Rightarrow Não é possível;

Por Eliminação de JORDAN \Rightarrow Não é possível;

e o erro relativo em cada método é dado por:

Para Solução Inversa $\Rightarrow \xi = 0 \%$

Para Eliminação de GAUSS $\Rightarrow \xi = 0 \%$

Observa-se que o sistema B) é o sistema A) perturbado no elemento M44, e que esta pequena perturbação modificou consideravelmente a solução dos sistema A) e B).

Consideremos a mesma análise para os seguintes sistemas:

$$C) \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 5 & 0 & 3 \\ 3 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 10 & 2 & 18 \end{bmatrix} * \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1 \\ -5 \\ 5 \\ -6 \end{Bmatrix}$$

cuja solução e dada por:

Pela Inversa $\Rightarrow x = (0.3333, -1.0000, 2.0000, 0.0000)^t$

Por Eliminação de GAUSS $\Rightarrow x = (0.3333, -1.0000, 2.0000, 0.0000)^t$

Por Transformação LU $\Rightarrow x = (0.3333, -1.0000, 2.0000, 0.0000)^t$

Por Eliminação de JORDAN $\Rightarrow x = (0.3333, -1.0000, 2.0000, 0.0000)^t$

o erro relativo é dado por: $\xi = 0\%$ para todos os métodos

$$D) \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 5 & 0 & 3 \\ 3 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 10 & 2 & 18.00075 \end{bmatrix} * \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1 \\ -5 \\ 5 \\ -6 \end{Bmatrix}$$

cuja solução e dada por:

Pela Inversa $\Rightarrow x = (0.3333, -1.0000, 2.0000, 0.0000)^t$

Por Eliminação de GAUSS $\Rightarrow x = (0.3333, -1.0000, 2.0000, 0.0000)^t$

Por Transformação LU $\Rightarrow x = (0.3333, -1.0000, 2.0000, 0.0000)^t$

Por Eliminação de JORDAN $\Rightarrow x = (0.3333, -1.0000, 2.0000, 0.0000)^t$

o erro relativo é dado por: $\xi = 0\%$ para todos os métodos

Observa-se que o sistema D) é o sistema C) perturbado no elemento M44, e que desta vez uma pequena perturbação não modificou a solução dos sistema C) e D).

Devemos nos perguntar qual a diferença existente entre os sistemas acima, já que no primeiro caso uma pequena perturbação em um de seus elementos levou a respostas tão distintas, e o mesmo efeito não foi verificado para o segundo caso. Para isto nos valem do seguinte resultado:

Considerando 'Normas' consistentes de matrizes e vetores pode-se provar o seguinte teorema:

Seja " $[M] \cdot \{X\} = \{R\}$ ", com $[M] \in R_{(N,N)}$, $\{X\}$ e $\{R\} \in R^N$

i) Se perturbarmos o vetor 'R' com um resíduo 'r' pertencente a R^N , então a solução $\{X_b\}$ do novo sistema satisfaz:

$$[M] \cdot \{X_b\} = \{R\} + \{r\} \quad (3.131)$$

Nestas condições temos que:

$$\frac{\|X - X_b\|}{\|X_b\|} \leq \|M\| \cdot \|M^{-1}\| \cdot \frac{\|r\|}{\|R\|} = K(M) \cdot \frac{\|r\|}{\|R\|} \quad (3.132)$$

ii) Se perturbarmos a matriz $[M]$ com uma matriz $[M_r]$ pertencente a $R_{(N,N)}$, então a solução $\{X_b\}$ do novo sistema satisfaz:

$$([M] + [M_r]) \cdot \{X_b\} = \{R\} \quad (3.133)$$

Nestas condições temos que:

$$\frac{\|X - X_b\|}{\|X_b\|} \leq \|M\| \cdot \|M^{-1}\| \cdot \frac{\|M_r\|}{\|M\|} = K(M) \cdot \frac{\|M_r\|}{\|M\|} \quad (3.134)$$

① Enfatizamos a importância do número " $K(M) = \|M\| \cdot \|M^{-1}\|$ ", pois ele traduz a liberdade que o erro relativo (produzido por perturbações em $\{R\}$ ou $[M]$) tem para ser desastroso a soluções dos sistemas lineares, mesmo para pequenas perturbações.

② O número $K(M)$ é sempre maior ou igual a '1', pois:

$$1 = \|M \cdot M^{-1}\| \leq \|M\| \cdot \|M^{-1}\| = K(M) \quad (3.135)$$

e quanto menor for $K(M)$ menor será a liberdade do erro relativo, e menor o seu efeito de propagação.

③ Quanto mais próximo de '1' estiver $K(M)$ melhor será o "comportamento" do sistema linear.

④ O sistema linear se diz bem ou mau condicionado conforme $K(M)$ seja pequeno ou grande.

⑤ $K(M)$ é chamado "Número de Condição da Matriz $[M]$ ", sendo uma propriedade da matriz independente do processo numérico.

Assim retornando aos sistemas analisados anteriormente tem-se:

Para o primeiro caso:

$$\|M\| = 60.00 \quad \text{e} \quad \|M^{-1}\| = 6.3 \times 10^{16}$$

Logo: $K(M) = 37.8 \times 10^{17}$

Vemos então que $K(M)$ é grande, e portanto $[M]$ é mal condicionada.

Para o segundo caso:

$$\|M\| = 25.000 \quad \text{e} \quad \|M^{-1}\| = 1.250$$

Logo: $K(M) = 31.250$

Temos que $K(M)$ é pequeno, e portanto $[M]$ é bem condicionada.

Estes resultados conferem com os resultados observados na análise dos sistemas.

OBSERVE: Fato semelhante pode ser visto quando a perturbação ocorre em $\{R\}$.

Observando a generalidade dos sistemas lineares gerados pelo M.D.F., constata-se que estes sempre geram sistemas particulares, por exemplo para uma dimensão (unidimensional) do M.D.F. teremos sempre sistemas "TRIDIAGONAIS", sendo os únicos elementos constantes na matriz os da diagonal principal e suas adjacentes. Deste modo pode-se estudar o condicionamento gerado em seu sistema ao longo da solidificação de alguns materiais distintos, bem como a observação do refinamento de malha apresentado por estes.

Na Figura 3.52 apresentamos a variação do número de condição da matriz do M.D.F. em função do refinamento de malha para um sistema unidimensional, em solidificação de Aço-C e molde refrigerado. Observa-se que esta mostra-se muito bem condicionada, podendo-se afirmar que para a representação unidimensional do M.D.F. o modelo numérico utilizado na sua solução é indiferente a propagação do erro gerado neste.

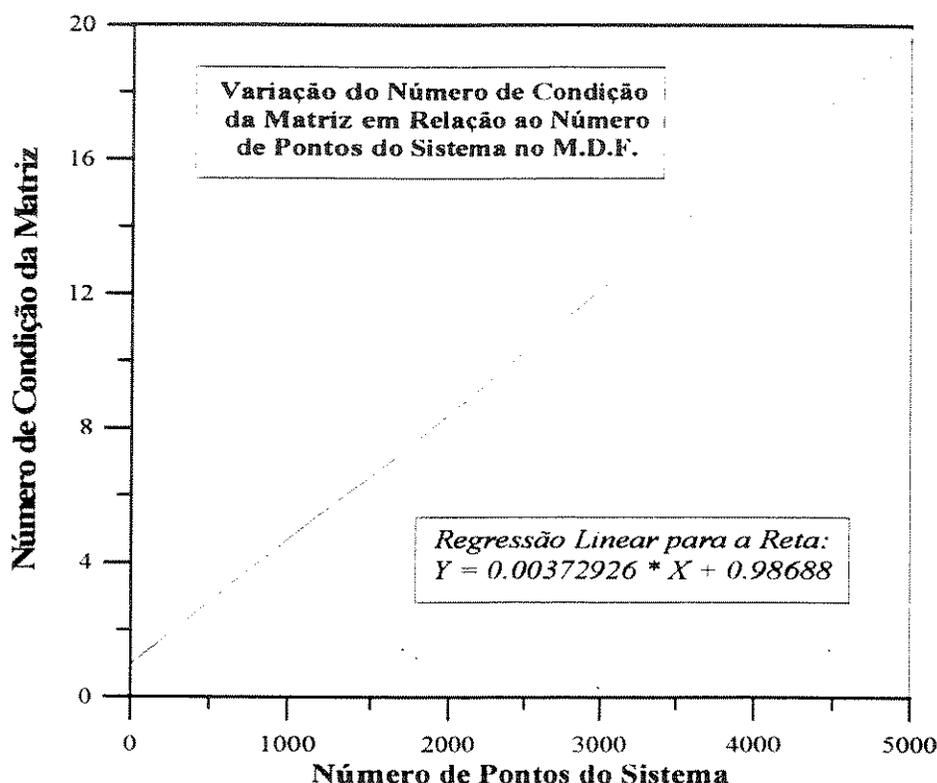


Figura 3.52 - Condicionamento do Sistema Linear gerado pelo M.D.F. em função da variação do refinamento de malha - Sistema Unidimensional

3.7.3.4. Velocidade de Solução em Sistemas Lineares:

Para a análise coerente do efeito de velocidade do processamento em distintos métodos numéricos para a solução dos sistemas lineares, é importante conhecer os conceitos básicos sobre como um processador eletrônico realiza uma determinada operação matemática. Desta forma em termos de linguagem de máquina, compreende-se que cada operação matemática (-; +; *; /) é realizada com velocidades individuais, em outras palavras, um processador realiza uma simples soma com uma velocidade diferente de uma subtração ou uma multiplicação. Deste modo, em observação ao efeito em linguagem de máquina, pode-se estabelecer um peso de cálculo para cada operador matemático, e interno aos algoritmos de solução dos métodos numéricos, pode-se levantar um valor de peso para a dinâmica de trabalho do algoritmo. Na Tabela 3.3, apresentamos os pesos utilizados para cada operador, lembrando que estes valores foram estimados após uma análise do fluxo de passos para o cálculo realizado em linguagem de máquina.

Tabela 3.3 - Relação de Peso de Cálculo para Operadores Matemáticos

Especificação	Operador	Peso Estimado
Igualdade	=	1
Soma	+	2
Subtração	-	5
Multiplicação	*	32
Divisão	/	40

Suponha a seguinte equação:

$$X_i = C.X_j + g$$

Considerando os pesos de cálculo para cada operador tem-se que a equação acima tem peso de: $\text{Peso} = 1(\text{igualdade}) + 32(\text{multiplicação}) + 2(\text{soma}) = 35$

Suponha que esta equação venha a ser utilizada em um processo iterativo de cálculo, onde a mesma esteja contida em uma malha, que na dinâmica de solução do sistema esta venha a ser realizada por um número "N" de vezes:

Para $i = 1$ até N, Faça:

$$X_i = C.X_j + g$$

Assim a malha descrita acima possui um peso relativo de: $(35 * N)$;

Deste modo levantou-se a relação dos pesos de trabalho para os métodos diretos de solução dos sistemas lineares, para diversas ordens de sistema, sendo seus resultados ilustrados na Figura 3.53. Note nesta Figura o desempenho infeliz da solução pelo método da inversa e da obtenção de resultados satisfatórios para o método da transformação LU.

Contudo se considerarmos as otimizações apresentadas no item 3.3.6.2., onde vetoriza-se a matriz de banda do M.D.F., e sobre esta gera-se uma solução por eliminação de Gauss, observando apenas os elementos diferentes de zero, tem-se que a velocidade de solução deste novo sistema aumenta drasticamente. A Figura 3.5.4 compara as velocidades de trabalho entre os métodos LU, e o método de Gauss otimizado para uma malha tridiagonal. Observe nesta, que além de Gauss representar uma velocidade extremamente superior (pois o menor peso de cálculo especifica o método mais rápido), ainda tem-se que esta curva possui crescimento linear com relação ao aumento da ordem do sistema, e não um crescimento exponencial como visto nas curvas da Figura 3.53.

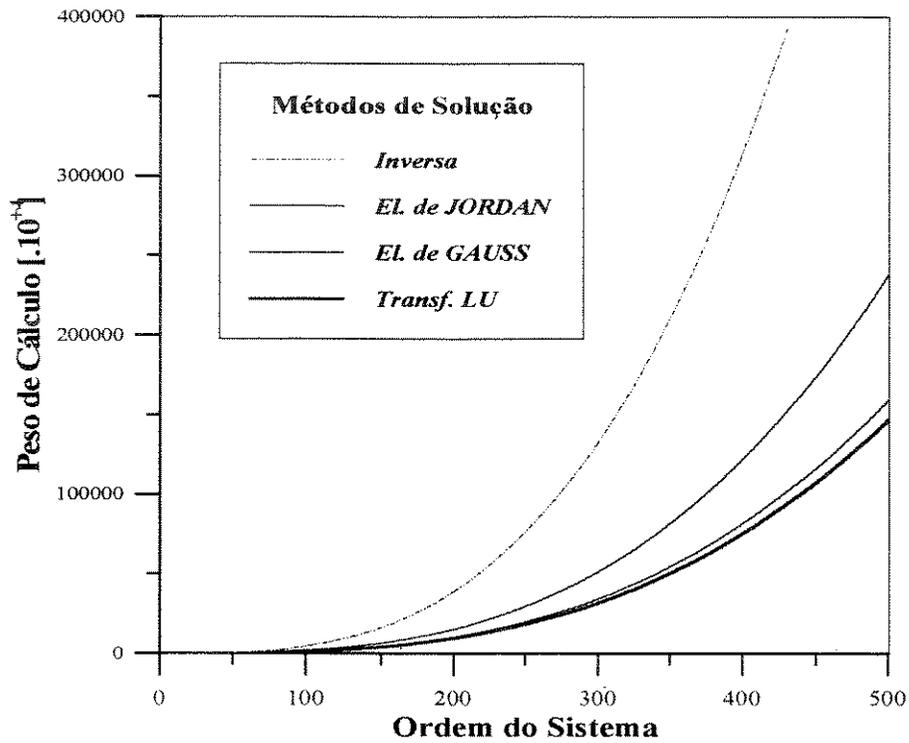


Figura 3.53 - Comparação da velocidade de trabalho para os métodos convencionais de solução de sistemas numéricos lineares

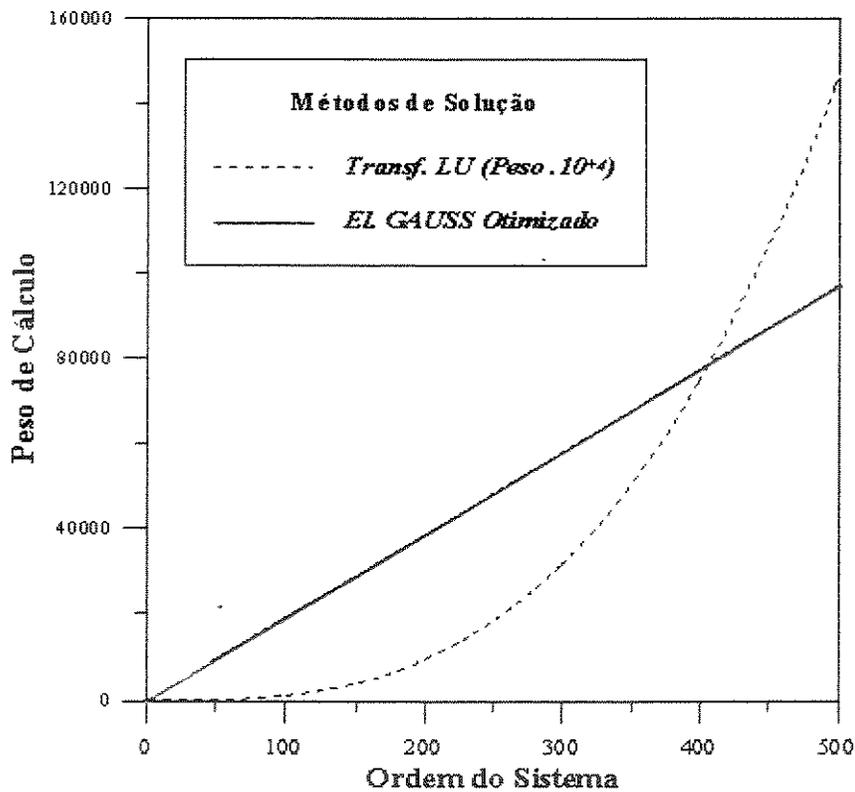


Figura 3.54 - Comparação da velocidade de trabalho entre o método de transformação LU e o método da eliminação de Gauss, otimizado para a solução do M.D.F. unidimensional

Capítulo 4

Técnicas para Elaboração de Programas Numéricos

4.1 Descrições Iniciais

No capítulo que segue, discute-se todas as técnicas empregadas no desenvolvimento de um programa computacional sobre um determinado problema do plano industrial. No caso particular, faz-se uma descrição prática e direcional da "Engenharia de Software" para o levantamento dos problemas encontrados sobre sistemas de fundição utilizados na indústria metalúrgica, e a aplicação física das técnicas expostas, dentro de um programa real desenvolvido no contexto deste trabalho. É fato que, muitas das observações apresentadas neste item, não foram realizadas na prática, uma vez que tais implementações exigiriam tempo útil do projeto global, desviando sensivelmente o escopo inicial deste trabalho. Contudo a orientação vista para a aplicação, e a manipulação do desenvolvimento destes programas, faz-se de modo direto e claro, uma vez que após a conclusão do projeto base estas implementações ou atualizações podem ser facilmente executadas.

O comportamento físico de um sistema completo de fundição é dado sobre uma estrutura relativamente complexa, visto que as diversas variáveis envolvidas interagem gerando elementos muitas vezes não visíveis dentro de um modelo matemático que procure simular o efeito de solidificação. A utilização coerente desta matemática, leva a elaboração de modelos práticos com desempenho satisfatórios na dinâmica do processo, contudo tais modelos devem ser desenvolvidos sobre a completa observação do trabalho funcional em uma máquina eletrônica (computador). Estes mesmos modelos podem trazer problemas adicionais sobre sua operação, no que se refere aos limites físicos da máquina utilizada. Por exemplo, considere um modelo matemático que seja eficiente em sua representação do fenômeno de solidificação envolvido, dentro de um sistema que contenha em sua estrutura um molde de características conhecidas e um metal base cuja dinâmica de transformação de fase seja bem descrita. Este modelo, apesar de fisicamente consistente, pode não ser eficiente em sua estrutura de "Software", exigindo da máquina a alocação excessiva de memória além do

tempo de simulação requerer, por exemplo, dias de processo contínuo. Deste modo a boa eficiência da representação do modelo sobre a física envolvida cai por terra com o péssimo desempenho deste na implementação em máquina. Assim faz-se necessário um bom casamento das técnicas envolvidas para o desenvolvimento e aplicação de um eficiente sistema de "software" sobre um eficiente sistema da representação física das variáveis metalúrgicas envolvidas.

A consistência do modelo numérico com a representação sucinta da física envolvida, foi amplamente discutida e exposta até o presente momento, contudo no item que segue apresentaremos as bases funcionais da arquitetura desenvolvida e aplicada aos programas realizados, tomando as relações fundamentais da utilização em máquina destes programas, bem como o real acoplamento do modelo numérico sobre o desenvolvimento das técnicas da "Engenharia de Software" apresentadas.

4.2 A Engenharia do Projeto de Processo

Tomando como ponto de partida a análise de um sistema completo de solidificação, sobre a representação estrutural de um molde, contendo em seu interior um metal líquido que sofra o processo da transferência de calor, do interior do metal para a superfície do molde, levantamos o procedimento geral para o conhecimento base do problema e seu mapa de trabalho para a geração de um programa numérico de simulação. A Figura 4.1 engloba de forma genérica a estrutura do procedimento geral, para o conhecimento de um problema qualquer em engenharia:

4.2.1. - Formulação do Problema:

O problema é definido ou descrito em amplitude de termos, através de detalhes. Um dos mais eficientes métodos para se estudar ou analisar um problema e através da aplicação conceitual da "caixa preta", conforme visto na Figura 4.2.

Este método consiste em colher informações sobre as entradas e saídas do problema para o conhecimento ou mapeamento dos detalhes envolvidos na representação do processo objetivando a solução do problema. No trabalho em questão, as entradas sobre a estrutura geométrica do molde, as relações sobre a estrutura geométrica e os elementos de retirada de calor do sistema, como chapas frias ou resfriadores acoplados, toda a dinâmica dos transientes de transformação de fase da liga envolvida, bem como a própria relação metal/molde, devem ser considerados como os elementos de entrada do problema. As saídas

desejadas serão dadas na forma de tabelas, ou sobre a compactação de gráficos representativos do perfil de temperatura e da evolução desta em alguns pontos localizados do sistema. A análise posterior é feita com o estudo destas curvas sobre a representação física do sistema, observando as velocidades de solidificação envolvidas nos pontos de monitorização, e através destas o conhecimento do real efeito físico que ocorre no interior da liga ao longo do processo de solidificação.

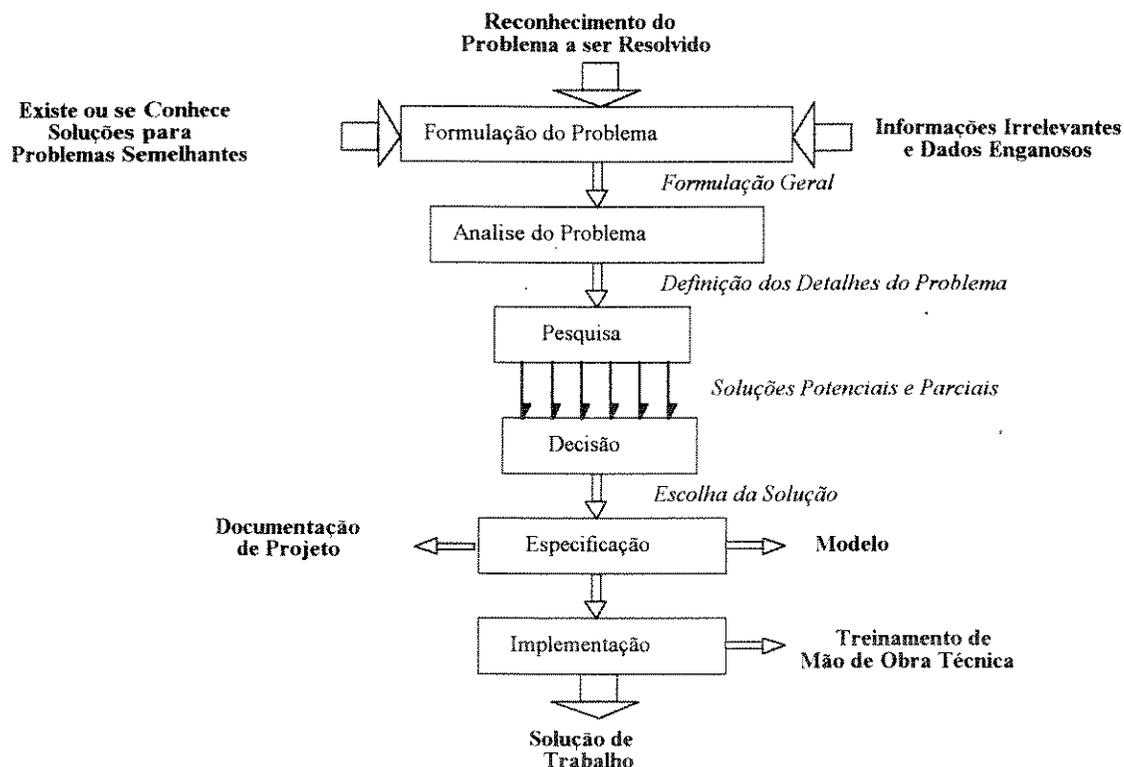


Figura 4.1 - Procedimento Geral para a Análise de um Problema em Engenharia

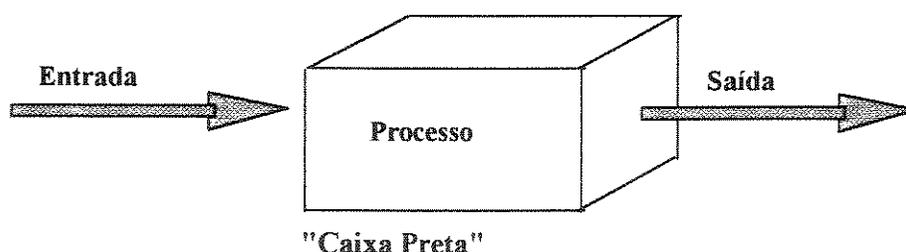


Figura 4.2 - Método da "caixa preta" para análise de problemas

4.2.2. - Análise do Problema:

A definição do problema é refinada para prover detalhes essenciais. O segundo passo para o projeto consiste em obter detalhes qualitativos e quantitativos das características das entradas e saídas, identificadas no primeiro passo. Esta fase consiste em levantar os critérios funcionais para a seleção da melhor solução do problema. Estes critérios usualmente incluem custo, integridade, facilidade de manutenção, precisão e eficiência, que associados às entradas e saídas do problema permitirão um conhecimento coerente sobre a representação de trabalho do processo. Uma metodologia de análise deve ser estruturada com o objetivo de qualificar os blocos funcionais da estrutura do processo. Esta metodologia, realimentada com os outros passos envolvidos no projeto do processo direciona um maior detalhamento do problema envolvido. Por exemplo: Suponha a análise do sistema de fundição descrito anteriormente que exposto a a uma determinada entrada forneça uma resposta específica, conforme a Figura 4.3.

Entradas:

Variáveis Metalúrgicas
Variáveis Geométricas
Relações Metal/Molde

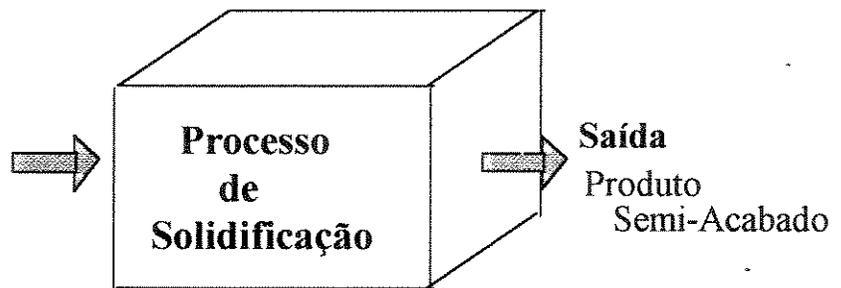


Figura 4.3 - Representação de um sistema de solidificação

A realimentação dos passos do projeto do processo, leva a determinação de uma explosão interna no bloco solidificação, detalhando o problema conforme a Figura 4.4.

4.2.3. - Pesquisa:

Uma série de soluções potenciais para o problema são acumuladas. O terceiro passo equivale à pesquisa realizada sobre todas as possíveis soluções do problema como função dos critérios elaborados na fase de análise deste. A pesquisa caminha em direção ao processo explorando todos os possíveis caminhos de solução do problema. Estes caminhos incluem a experiência individual, livros textos, periódicos técnicos, experiência prática, e o mais importante dos elementos - A CRIATIVIDADE. O objetivo da fase de pesquisa no projeto do processo é maximizar o número e variedades de soluções sobre as quais uma decisão final possa ser tomada. Um modelo numérico que represente de forma clara as relações físicas do sistema envolvido, é o nó de partida para a pesquisa da melhor solução do problema. Neste

mesmo trabalho, apresentamos uma discussão global para a aplicação da melhor condição de ensaio com o método escolhido. Deste modo observa-se que a análise para a melhor solução do problema proposto cumpre-se de forma clara e conclusiva, podendo a partir de então lançar mão de sua eventual aplicação técnica.

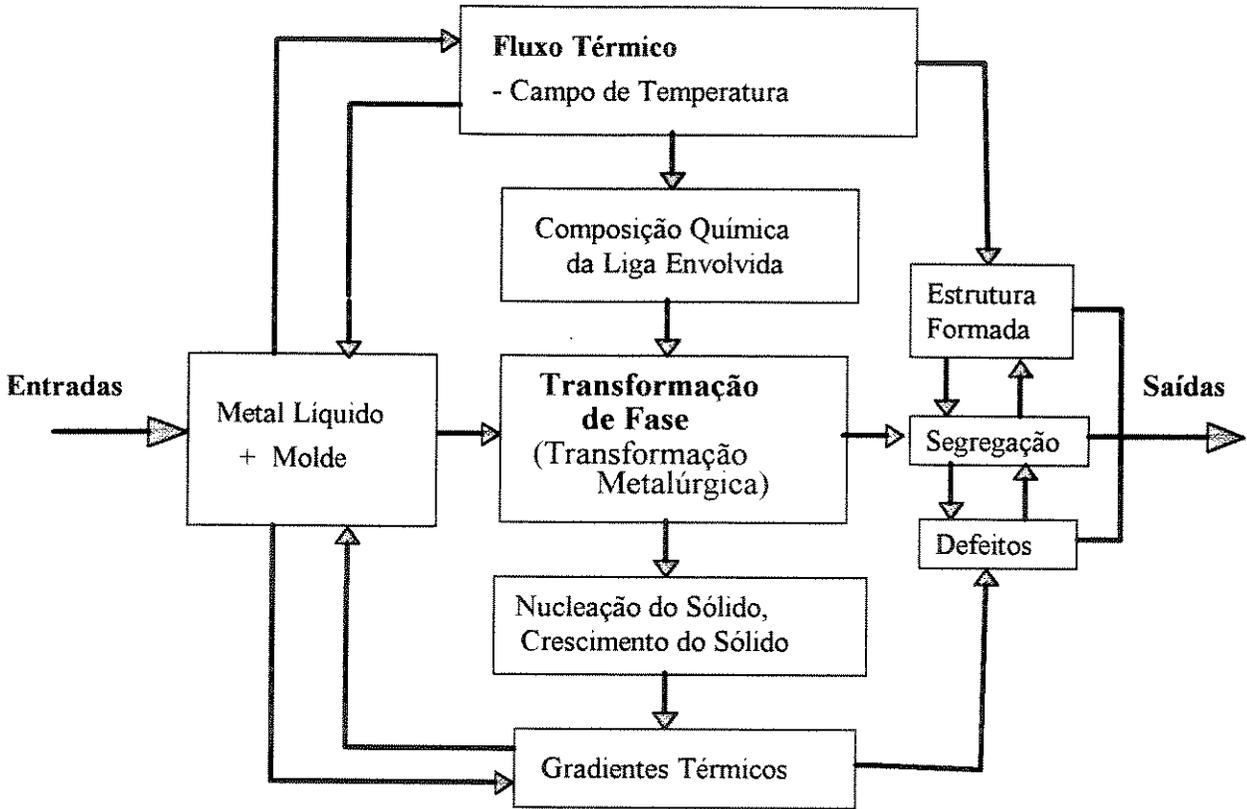


Figura 4.4 - Partições funcionais do bloco do processo de solidificação

4.2.4. - Decisão:

Cada solução em potencial é avaliada e comparada alternativamente, até que a melhor solução seja obtida. Após a fase de pesquisa, tem-se o espaço (ou escopo) das possíveis soluções ou formas de soluções do problema proposto, dentro do qual uma única solução preferencial deva ser seguida. Algumas das alternativas levantadas podem apresentar-se de forma ridícula ou irrealizável, contudo, mesmo estas podem apresentar características ou feições em seus elementos de solução que beneficiem uma ou mais soluções razoáveis ao problema. O processo de decisão pode variar, no modo realizável de problema a problema, contudo geralmente segue-se uma série de quatro passos funcionais:

① - O critério de seleção deve ser bem definido e sobre este critério estabelecem-se pesos relativos aos elementos individuais do critério assumido;

② - O desempenho das soluções alternativas com respeito ao critério devem ser previstas sobre a precisão oferecida por estas;

③ - O desempenho das soluções alternativas devem ser comparados com base em seus desempenhos previstos;

④ - A seleção da solução preferida pode ser feita;

O critério pode ser baseado em muitos fatores incluindo custo de produção, desempenho funcional, eficiência, integridade, manutenção, facilidade de uso, etc.. No item de pesquisa detalhamos a decisão tomada em relação a utilização do Método de Diferenças Finitas para a solução do problema da análise do sistema de solidificação.

4.2.5. - Especificação da Solução:

A física e as características de desempenho do projeto (ou solução) devem ser especificadas em detalhes para permitir que este possa ser revisado, analisado, e verificado com facilidade. Para que o projeto possa ser operado e mantido por outras pessoas, é essencial que este tenha sido documentado cuidadosamente com eficiência. O treinamento do pessoal técnico que posteriormente irá operar o sistema de simulação desenvolvido, bem como todas as modificações e até mesmo a própria fase de implementação do mesmo, são baseadas fundamentalmente sobre toda a documentação realizada ao longo do projeto.

4.2.6. - Implementação:

O produto final é desenvolvido segundo o projeto. A responsabilidade do engenheiro e pesquisador, raramente se encerra com a especificação da solução, mas muitas vezes estende-se dentro da produção do produto, ganhando aceitação do projeto, treinamento dos usuários e operadores do produto, observando e avaliando o projeto sobre a pesquisa operacional, participando e garantindo a implementação funcional do projeto. Para cada passo no circuito, novas informações ou novas percepções dentro de campo, devem ser reavaliadas desde a formulação do projeto. Estas novas informações podem modificar ou

invalidar o processo de decisão, forçando desta forma toda uma iteração com os campos do circuito, conforme apresenta a Figura 4.5.

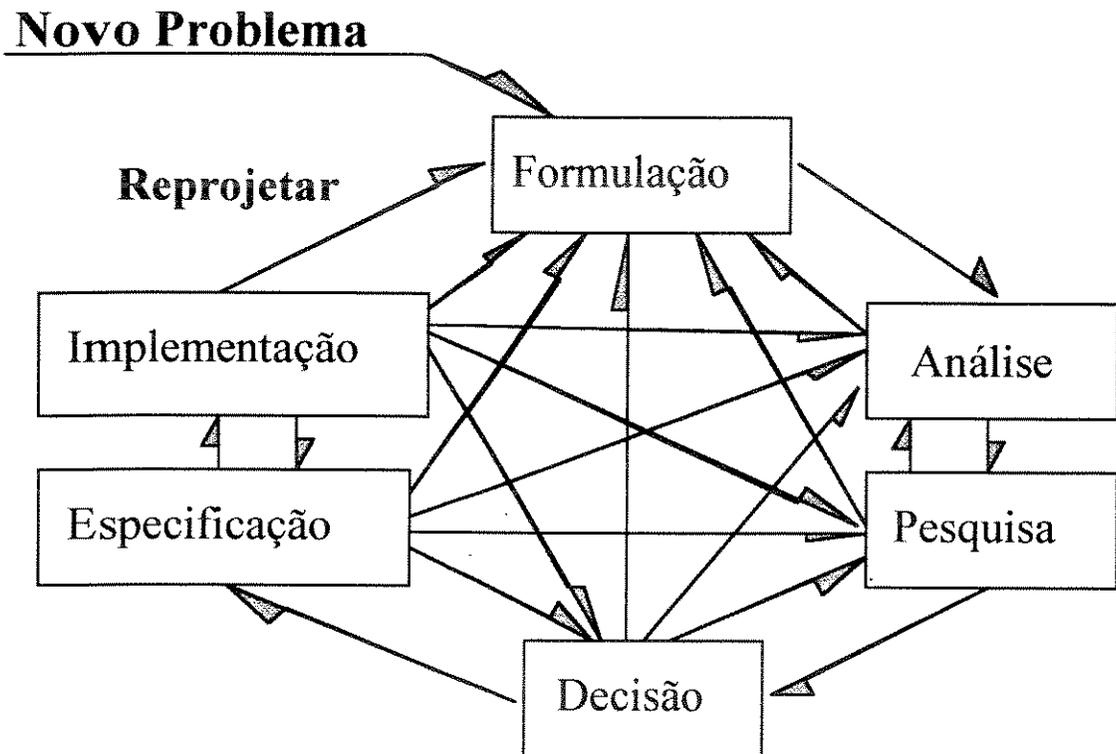


Figura 4.5 - Representação iterativa para o desenvolvimento do projeto global de análise

Nesta fase tem-se incluída a reestruturação do projeto com sua eventual aferição, e compactação do modelo sobre a representação de estrutura de programa. Neste ponto do trabalho é fundamental o conhecimento geral dos elementos de trabalhos envolvidos na implementação física do sistema, como a máquina de operação, o conhecimento exigido para o operador externo, as características funcionais do modelo numérico, e toda a dinâmica envolvida na funcionalidade do sistema e equipamento.

4.3 Elementos de Trabalho

Uma análise geral sobre os elementos de trabalho envolvidos dentro da implementação de todo o sistema deve ser efetuada, como última fase de projeto, realimentando novas necessidades caso venha a ocorrer, bem como toda a conformação e aceitação do projeto dentro da solução do sistema físico abordado. No caso em questão, tem-se os elementos de trabalho, conforme dado na seqüência:

①. "*Hardware*" - Toda a eletrônica envolvida na implementação do sistema, desde a eletrônica interna da máquina (computador) na qual o sistema será funcional, bem como todos os elementos periféricos envolvidos no equipamento:

- Velocidade de trabalho do sistema;
- Capacidade de armazenamento de dados;
- Sensoriamento externo (sim ou não ?);
- Sensores são permanentes ou descartáveis ?;
- Colocação dos sensores é prática ou complicada ?;
- Realimentação do sistema com os elementos externos ?;
- Controle automático (sim ou não ?);
- Velocidade de recepção e processamento dos dados;

Todos os itens expostos acima, devem ser minuciosamente estudados e conhecidos objetivando o trabalho contínuo e sensato do sistema desenvolvido.

②. "*Software*" - Programa do sistema, equivale a toda parte

funcional de atuação 'inteligente' do processo:

- Realimentação externa (sim ou não ?);
- Exige interface com o usuário ou prog. trabalha independente ?;
- Forma de representação dos resultados (Relatório, Gráfico, Tabelas, Mistos ou controle externo);
- O programa possui estrutura de rede contínua, estrutura linear, estrutura inteligente ou sistema especialista ?;

③. "*Operador Externo*" - Usuário do sistema, representa um elemento transiente na dinâmica do programa, tendo este o objetivo clássico de relatar ou interagir fisicamente com o sistema:

- Exige conhecimento do sistema - 'Hard e Soft' (sim ou não ?);
- Interfaces são amigáveis (facilidade de uso e entradas de dados);
- Análise dos resultados gerados exige conhecimento específico do sistema (sim ou não ?);
- Comunicação dentro da dinâmica do "software" (sim ou não ?);

④. "*Modelo Numérico*" - Equacionamento iterativo, modular ou dinâmico contínuo, este equivale ao coração do sistema, pois a boa representação da física do processo vale-se da forma como o modelo tenha sido desenvolvido:

- Análise global de erros;
- Estabilidade do sistema se iterativo;
- Convergência a respostas funcionais;

⑤. "*Problema de Análise*" - Resposta desejadas sobre o sistema de fundição analisado, quais os objetivos da simulação e a representação requerida para a geração de projetos de qualidades ótimas:

- Perguntas a serem cumpridas:
 - O que obter ?;
 - Obter em função de quem ?;
 - Como analisar e sugerir mudanças nos equipa//tos básicos?;

⑥. "*Fatores Influentes na Dinâmica do Sistema*" - Relação organizacional sobre todos os elementos envolvidos no sistema

Um clássico exemplo de funcionalidade consiste no fato da representação requerida pelo sistema de fundição, onde inicialmente geramos um programa que simule as condições de trabalho dos equipamentos existentes dentro da realidade industrial, a análise dos resultados gerados permite a reestruturação destes equipamentos para a produção com aumento de qualidade. O mesmo programa deve permitir a facilidade de atualização em relação a outras peças de fundição, com características geométricas diferentes da geometria inicial, bem como a possibilidade de gerar elementos de saída para a realimentação física com a dinâmica do sistema envolvido, fazendo deste modo com que um sistema que gere apenas resultados burocráticos, possa gerar resultados de realimentação em controle automático de produção. A Figura 4.6 mostra um esboço representativo deste tipo de desenvolvimento.

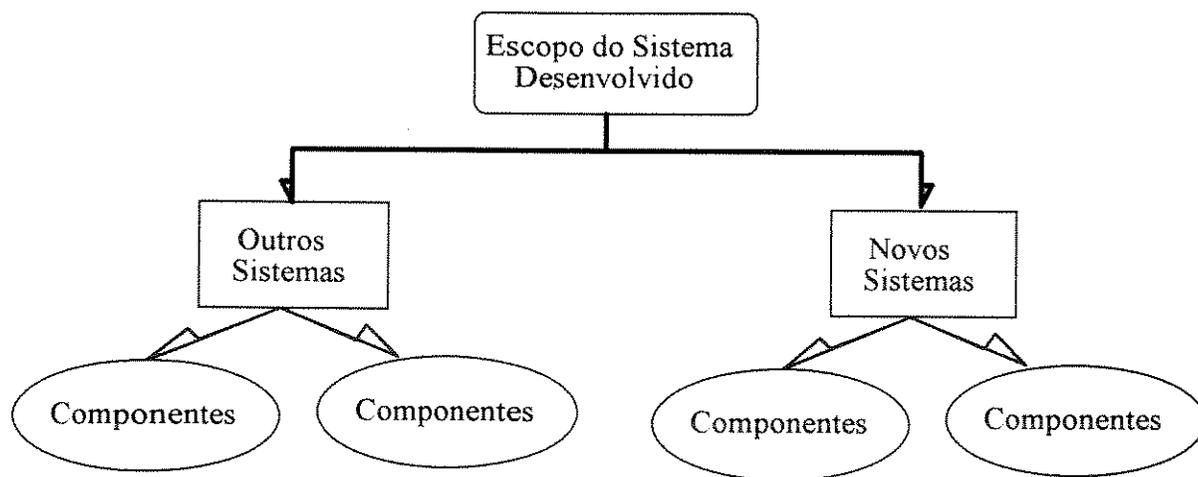


Figura 4.6 - Representação da possibilidade de atualização de sistemas desenvolvidos

4.4 O Ambiente de Trabalho para o Desenvolvimento de Sistemas

É óbvio que o ambiente de trabalho para o sistema desenvolvido não pode ser generalizado para um ambiente de "Mundo Global", ou seja o ambiente original sobre o qual venha a ser desenvolvido um sistema, deve possuir condições de natureza exata, e sobre este devem ser definidos os contrastes com outros ambientes de trabalho. Conceitualmente, é conveniente pensar que a definição de um sistema através de um modelo de trabalho é desenvolvido para operar sobre o ambiente de trabalho do qual foi inicialmente originado. A Figura 4.7, apresenta a representação desta estrutura hierárquica.

Sob os conceitos definidos, fica fácil perceber os motivos que levaram a idéia básica deste projeto, na identificação de empresas de fundição que auxiliem o trabalho global, uma vez que todos os conceitos para o desenvolvimento dos programas e sistemas de medida e

monitorização, que vêm sendo utilizados são fortemente voltados a realidade encontrada dentro próprio ambiente de produção. Por outro lado, o ambiente de laboratório é protegido sob a condição ilimitada da criatividade, uma vez que os equipamentos de medida e teste em laboratório, podem ser invariavelmente alterados ou modificados conforme a necessidade do ensaio a ser realizado. O modelo descritivo dos sistemas de fundição, apresentados neste projeto, são facilmente convertidos ou transportados tanto do ambiente industrial para o ambiente de laboratório como vice-versa. Este deve ser um dos objetivos fundamentais para um bom projeto, a "*portabilidade*". Na seqüência discute-se os itens funcionais que um projeto bem elaborado deva conter.



Figura 4.7 - Sistema Proposto como Parte do Ambiente de Trabalho

4.5 Itens de Especificação de Projeto

Usando técnicas da análise de estrutura, a engenharia do fator humano, e a modelagem matemática, pode-se formular condições e conceitos para uma aplicação eficiente de um sistema desenvolvido. Cada item de qualidade avaliada deve ser determinado dentro da extensão e das feições desejadas e requeridas ao produto final.

① - *Segurança e Integridade de Representação* ⇔ A operação de um sistema de simulação e/ou controle dentro dos limites críticos de estabilidade, deve ser auto-suficiente para garantir a integridade dos dados ou saídas representativas que indiquem que o equipamento atingiu condições críticas de trabalho. O modelo numérico desenvolvido, foi minuciosamente estudado e avaliado para de garantir a segurança da representação clara da física envolvida, evitando deste modo possibilidades de análises errôneas e, eventualmente levar um projeto desqualificado para a produção ótima.

② - *Eficiência de Teste* ⇒ Como os testes no sistema envolvido podem garantir e comprovar a realidade física envolvida ?. Este item é necessário para os sistemas que exijam alta representação realística. O caso do Lingotamento Contínuo, dentro da aplicação de programas numéricos na fundição, é um destes tipos de sistema que necessitam de garantia permanente de teste para a perfeita representação do sistema envolvido.

③ - *Garantia de Manutenção e Atualização de Sistema* ⇒ Como um sistema pode ser mantido e preservado o bom funcionamento, uma vez conhecidos os erros intrínsecos a seu desenvolvimento ?. Este item deve ser visto em relação a 'portabilidade' do projeto ou sua migração para diferentes ambientes de trabalho, sem uma radicalização das mudanças necessárias ou exigidas aos equipamentos envolvidos.

④ - *Eficiência de Resultados* ⇒ Quais medidas ou resultados usados devem ser considerados importantes ?. Os custos operacionais envolvidos no contexto da dinâmica de trabalho dos módulos de análise, como: equipamento, controle, programa de atuação e computador, devem ser mapeados individualmente e acoplados dentro de um único ambiente, garantindo que a somatória dos erros gerados sobre cada módulo não possua magnitude crítica ao bom funcionamento do sistema global. O conhecimento coerente da física representativa dos termopares envolvidos, os tempos de resposta influentes na dinâmica de trabalho e a velocidade de processamento dos dados, característica do programa numérico, equívalem aos elementos críticos ao acompanhamento da eficiência dos resultados gerados no sistema produzido.

⑤ - *Facilidade de Compreensão Representativa* ⇒ O sistema desenvolvido possui facilidade da compreensão aplicativa da física envolvida no equipamento ?. Este item é fundamental para a utilização de todo o projeto, por pessoas e operadores que sejam em sua parcialidade leigos nos detalhes internos do sistema de trabalho. A preocupação básica, tem como direção fundamental o desenvolvimento de sistemas que possuam em sua totalidade a facilidade de utilização por usuários que não sejam especialistas, em nenhum dos elementos funcionais de trabalho do sistema global (Hardware, Software, Modelo Numérico).

⑥ - *Adaptabilidade* ⇒ O sistema pode ser transferido para computadores de porte semelhante e de características equivalentes, ou o sistema foi desenvolvido sobre uma única plataforma de trabalho ?.

4.6 Desenvolvimento de Sistema

Após o levantamento de todas as técnicas e estruturação do projeto, conforme apresentadas anteriormente, resta um fechamento global com a elaboração da documentação técnica do programa. A fase de desenvolvimento inclui a determinação da

linguagem requerida ao sistema e, uma vez observado que a necessidade de um sistema que permita o acoplamento sobre equipamentos externos (controle ou medição de dados), conforme é caso, bem como a possibilidade de melhoramentos futuros específicos à máquina de trabalho, além é claro de toda uma autonomia sobre a velocidade de processamento do sistema e da disponibilidade exata da alocação de memória, toma-se como característica funcional a linguagem, um acesso fácil à eletrônica interna da máquina. Optamos por uma linguagem que permita a programação em baixo nível, onde sobre tais condições a "Linguagem C" apresenta-se com altíssima qualidade ao trabalho requerido.

A conclusão da fase de definição, e as análises sobre o sistema são formalizadas sobre um projeto de etapas que garantam em sua totalidade a visualização das características de erro, eficiência, e facilidade de implementações que direcionem em primeiro plano a economia realística do tempo de desenvolvimento e fechamento geral do sistema. Na Figura 4.8 elaboramos o plano de etapas para a conclusão do suporte das funções de análises aqui expostas.

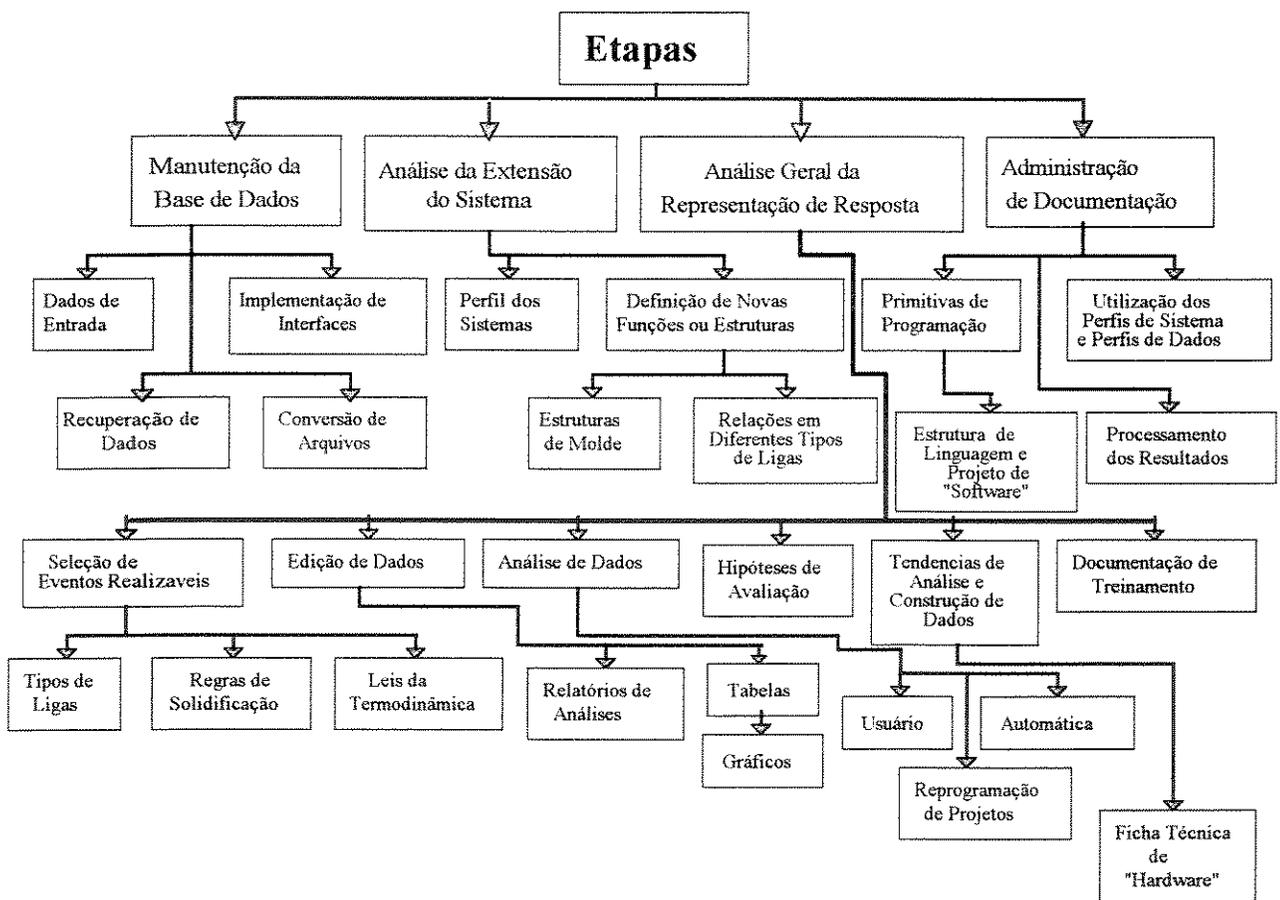


Figura 4.8 - Etapas para a elaboração e fechamento do programa de trabalho

Capítulo 5

Aplicação Prática do Modelo Matemático

5.1 Características de Aplicação Prática em Sistemas de Geometria Complexa

A eficiência do modelo numérico desenvolvido neste projeto pode ser confirmada com sua eventual aplicação em peças reais de trabalho. A maleabilidade e flexibilidade apresentada na analogia do M.D.F. com redes elétricas passivas é validada com a observação da facilidade de mapear peças de complexidade relativa dentro do espaço tridimensional. As equações visualizadas neste item representam as manipulações geométricas com interesse de concluir um mapeamento global das peças, voltado principalmente ao objetivo de cercar as regiões de uma peça complexa, que possam apresentar problemas e/ou defeitos de ordem macro e/ou microestrutural. Em capítulo anterior mostramos as possibilidades de manipulação destas malhas sendo que este capítulo objetiva justamente apresentar a utilização prática destas manipulações, onde um trabalho global é desenvolvido, fechando as regiões funcionais das peças estudadas.

Sobre o aspecto global, não é difícil perceber que toda peça complexa dentro do espaço tridimensional é composta por arcos, círculos, calotas esféricas, degraus, ressaltos, cantoneiras curvas ou retas, dispostas individualmente ou acopladas, formando geometrias intrincadas, aparentemente de difícil solução. Contudo a apresentação do mapa de modelo sobre uma peça complexa induz diretamente ao mapeamento de qualquer outra peça de disposição física mais complicada.

Para as regiões compostas de orifício (ou ressalto) circular sobre base plana, trabalhamos com a subdivisão dos elementos da rede dispostos ao redor do orifício (ou ressalto) vazado, conforme visto na Figura 5.1. O objetivo base é encontrar as dimensões físicas do nó em função de alguma variável conhecida da peça. Para este caso o raio do orifício (ou ressalto) circular e a relação com a subdivisão de ângulo do círculo são bastante interessantes.

Bibliografia de Apoio: [Camahan-1969] ; [Boylestad-1982] ; [Hayt-1975] ; [Ozsisik-1977] ; [Perry-1963]

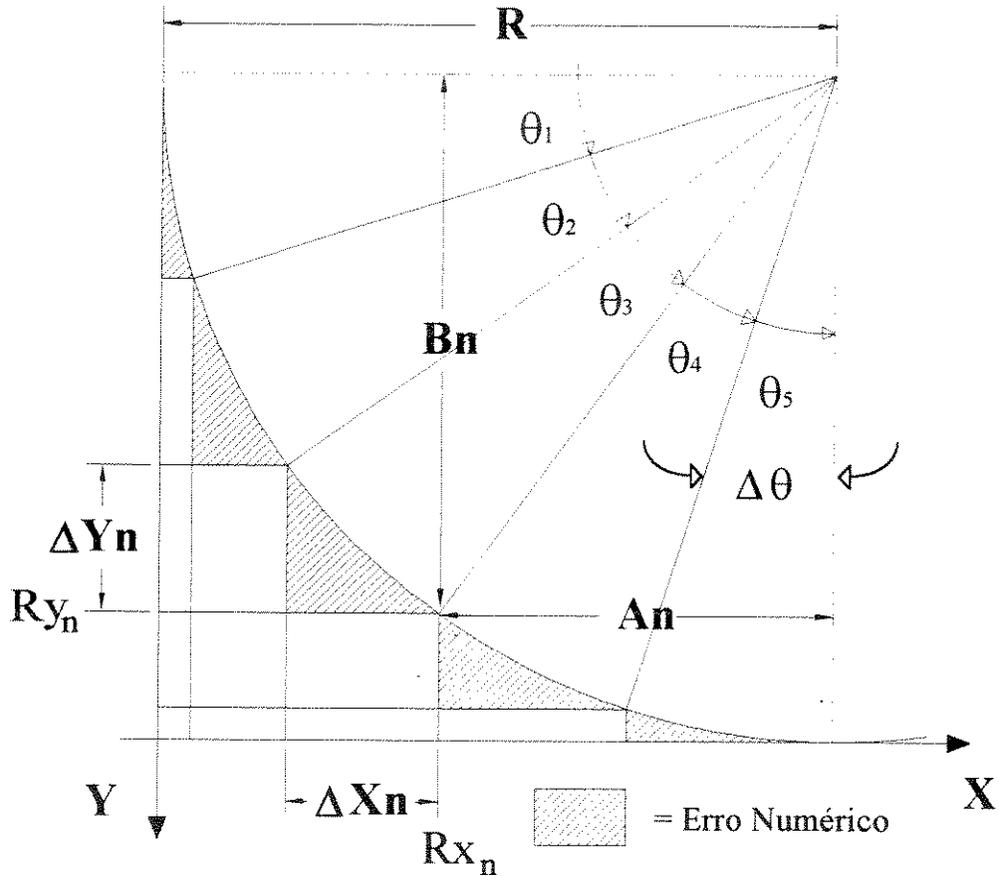


Figura 5.1 - Elementos da rede nodal dispostos ao redor de orifício (ou ressalto) vazado
-Sem Efeito de Escala-

Assim subdividimos um quadrante do orifício (ou ressalto) por um número de escala desejado ao modelo, onde:

$$\Delta\theta = \frac{\pi/2}{N_\theta} \Rightarrow N_\theta = \text{Número de Subdivisões do Quadrante} \quad (5.1)$$

$$\text{Assim: } \theta_n = n \cdot \Delta\theta \rightarrow \begin{cases} 1 \leq n \leq N_\theta \\ \Delta\theta \leq \theta_n \leq \pi/2 \end{cases} \quad (5.2)$$

Em consideração aos eixos de apoio (A_n e B_n) da relação com o raio, temos:

$$A_n = R \cdot \cos(\theta_n) \quad \text{e} \quad B_n = R \cdot \sin(\theta_n) \quad (5.3)$$

Desta forma os elementos de eixo são dados na forma:

$$R_{x_n} = R - A_n \quad \text{e} \quad R_{y_n} = B_n \quad (5.4)$$

onde:

$$\Delta X_n = R_{x_n} - R_{x_{n-1}} = R. [\cos(\theta_{n-1}) - \cos(\theta_n)] \quad (5.5)$$

$$\Delta Y_n = R_{y_n} - R_{y_{n-1}} = R. [\text{sen}(\theta_n) - \text{sen}(\theta_{n-1})] \quad (5.6)$$

Desse modo podemos tomar um orifício (ou ressalto) circular dividido em 4 partes ou quadrantes conforme a Figura 5.2.

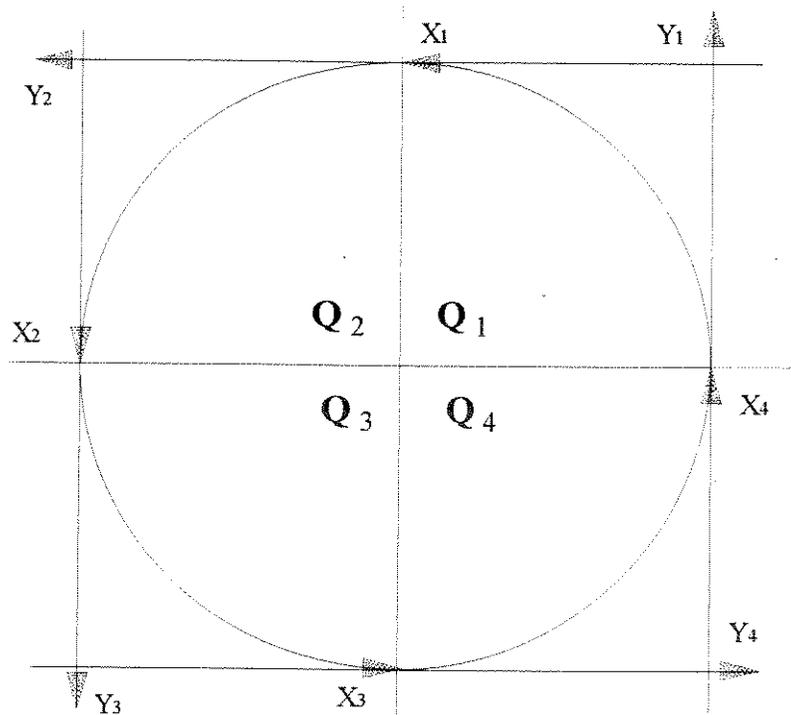


Figura 5.2 - Relação dos eixos de quadrantes para orifício (ou ressalto) vazado

Pode-se aplicar deste modo um conjunto para um mapa com quatro furos (ou ressaltos) justapostos conforme visto na Figura 5.3. É interessante notar que se as dimensões do orifício (ou ressalto) forem relativamente pequenas comparadas com as dimensões da peça global, o erro numérico visualizado no mapa pode ser desconsiderado. Entretanto, algumas condições de orifício (ou ressalto) vazado podem apresentar erro relativo considerável, como o caso do mapa aplicado a um orifício (ou ressalto) central em base, onde a dimensão do orifício (ou ressalto) em comparação ao tamanho da base, pode apresentar erro crítico no sistema.

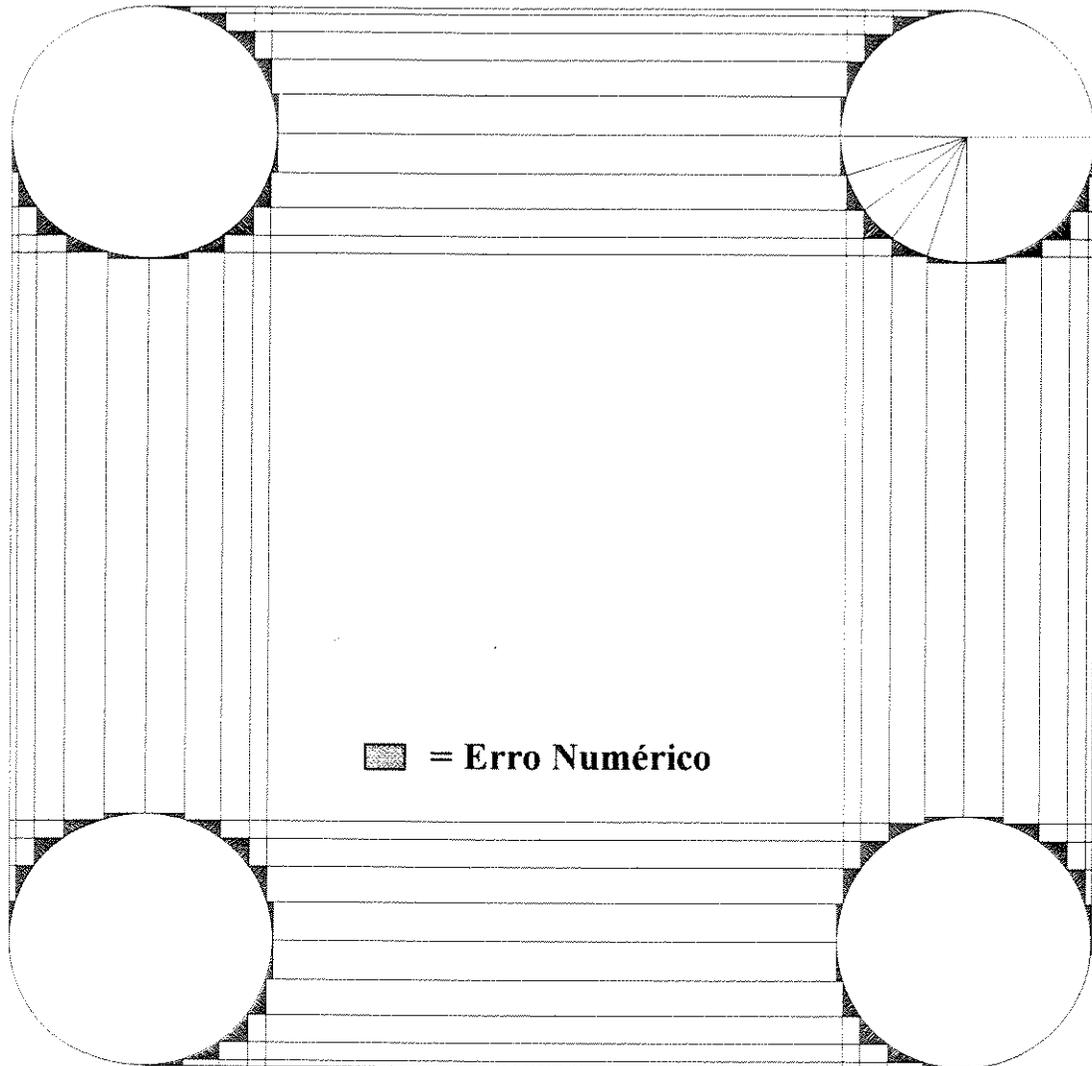


Figura 5.3 - Mapa do M.D.F. para o conjunto de orifícios (ou ressaltos) dispostos simetricamente
-Sem Efeito de Escala-

Neste caso pode-se elevar ponderadamente o número de subdivisões do quadrante, elevando paralelamente a precisão numérica, contudo este efeito pode gerar uma quantidade relativamente grande de nós finitos com pequenas dimensões e isto pode causar uma demora crítica no processamento em máquina do modelo. Assim para estes casos será interessante considerar uma redução em 2ª escala, sobre o erro do mapa apresentado, conforme visto na Figura 5.4. Desse modo não elevamos a quantidade de nós finitos em regiões da peça que não exijam tal circunstância, mas apenas nas regiões de mapeamento detalhado. A ligação dos pontos de interface com os pontos laterais foi descrita anteriormente, e as movimentações algébricas para este caso são dadas como segue:

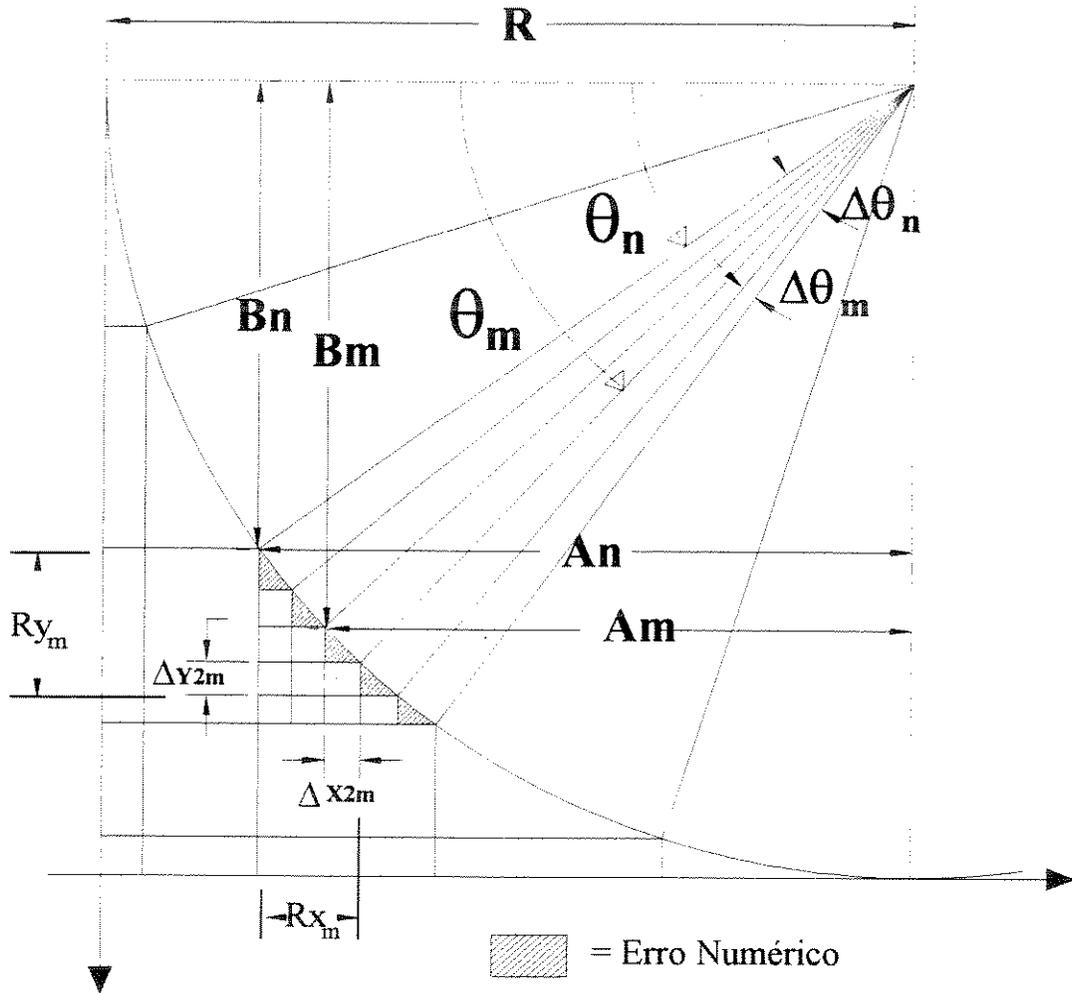


Figura 5.4 - Redução em 2ª Escala para a condição de orifício (ou ressalto) vazado sobre base plana
 -Sem Efeito de Escala-

Divisão em 2ª Escala:

$$\theta_{2m} = \theta_n + m \cdot \Delta\theta_m \Rightarrow \begin{cases} \text{\{ Sendo } 1 \leq n \leq N_{\theta_n} \\ \text{\{ Para } 1 \leq m \leq N_{\theta_m} \end{cases} \quad (5.7)$$

onde: $\Delta\theta_m = \frac{\Delta\theta_n}{N_{\theta_m}}$ (5.8)

Assim:

$$\Delta X_{2m} = R_{x_m} - R_{x_{m-1}} \quad (5.9)$$

$$\Delta Y_{2m} = R_{y_m} - R_{y_{m-1}} \quad (5.10)$$

para:

$$A_m = R \cdot \cos(\theta_n + m \cdot \Delta\theta_m) \quad (5.11)$$

$$B_m = R \cdot \text{sen}(\theta_n + m \cdot \Delta\theta_m) \quad (5.12)$$

onde:

$$R_{xm} = R - A_m \quad (5.13)$$

e

$$R_{ym} = B_m - B_n \quad (5.14)$$

Desse modo, teremos:

$$\Delta X_{2m} = R - A_m - (R - A_{m-1}) \quad (5.15)$$

ou

$$\Delta X_{2m} = A_{m-1} - A_m \quad (5.16)$$

onde:

$$\Delta X_{2m} = R \cdot [\cos(\theta_n + (m-1) \cdot \Delta\theta_m) - \cos(\theta_n + m \cdot \Delta\theta_m)] \quad (5.17)$$

e:

$$\Delta Y_{2m} = (B_m - B_n) - (B_{m-1} - B_n) \quad (5.18)$$

$$\Delta Y_{2m} = B_m - B_{m-1} \quad (5.19)$$

onde:

$$\Delta Y_{2m} = R \cdot [\text{sen}(\theta_n + m \cdot \Delta\theta_m) - \text{sen}(\theta_n + (m-1) \cdot \Delta\theta_m)] \quad (5.20)$$

Portanto o mapa aplicado em situações onde um orifício (ou ressalto) circular se encontrar no caminho do mapa convencional, utiliza-se o algebrismo apresentado, solucionando o acoplamento da peça com o modelo numérico. No entanto existem casos em que este orifício (ou ressalto) pode encontrar-se em uma posição não tão favorável como o anterior. Por exemplo, suponha uma representação em base circular com orifícios (ou ressaltos), que podem conduzir a um efeito de erro indesejável ao modelo. A Figura 5.5 mostra um mapa para a situação descrita anteriormente. Para o caso de orifícios (ou ressaltos) pequenos, podemos realizar o mapa apresentado na Figura 5.6, com o algebrismo visto na sequência deste.

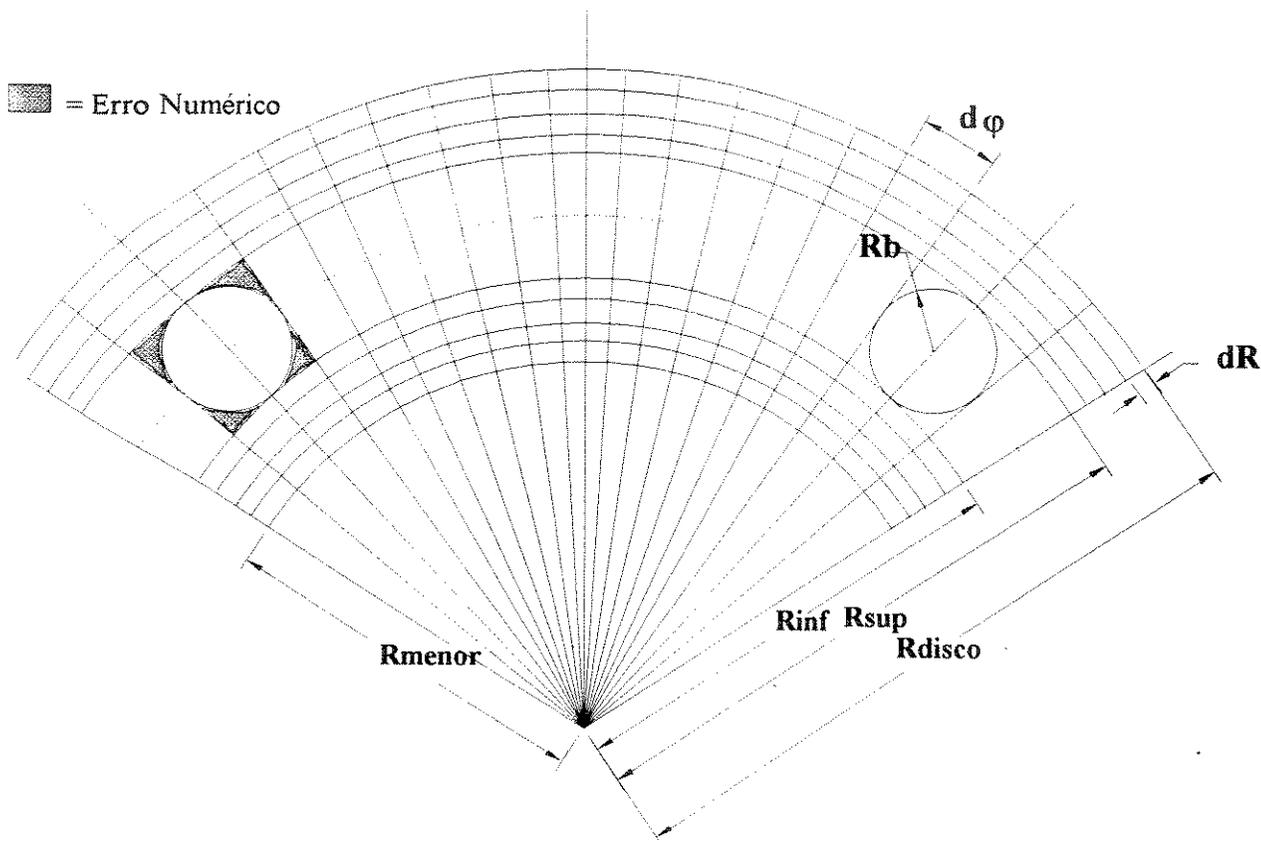


Figura 5.5 - Mapa para a situação de orifício (ou ressalto) vazado em base circular
 - Sem Efeito de Escala -

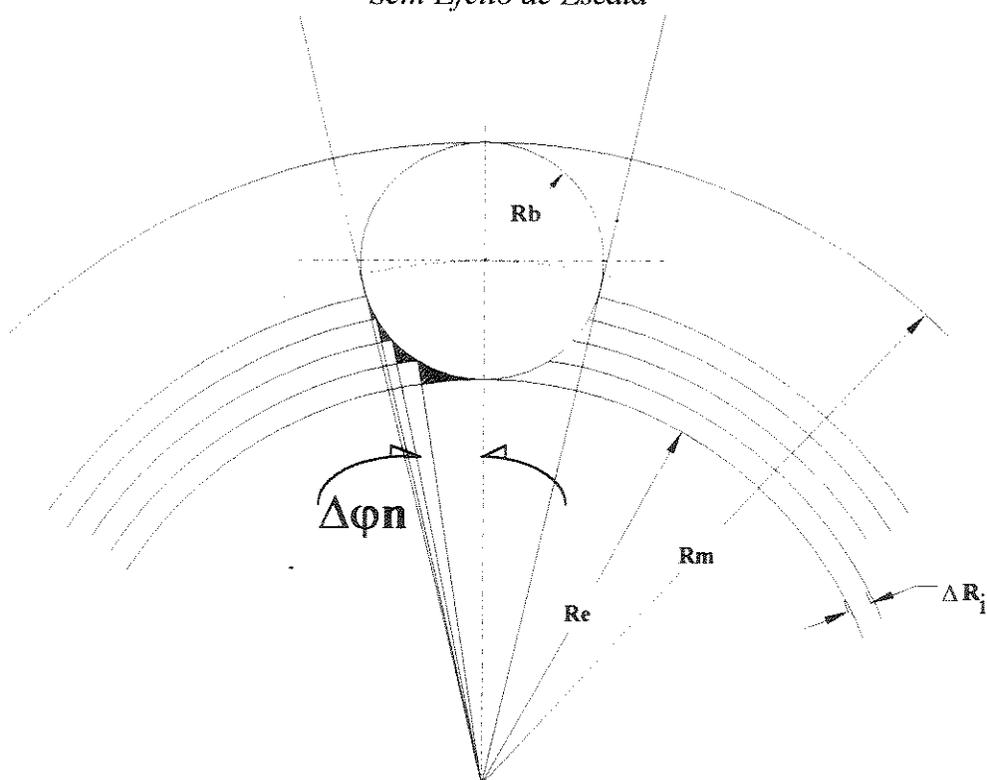


Figura 5.6 - Mapa do M.D.F. para orifício (ou ressalto) em base circular
 - Sem Efeito de Escala -

Para o equacionamento do mapa anterior tomamos como base a Figura abaixo:

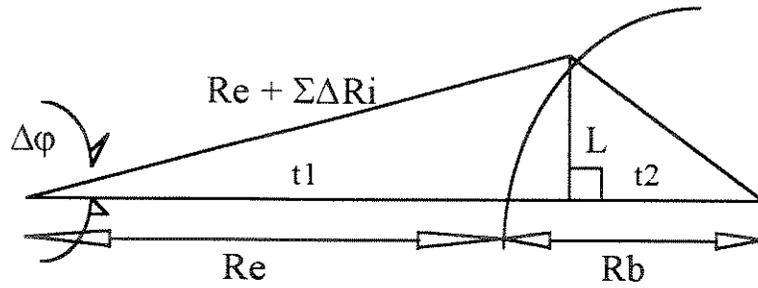


Figura 5.7 - Figura geométrica para solução de mapa da Figura 5.6.

Solução:

$$\text{sen } \Delta\varphi_i = \frac{L}{\text{Re} + \sum_i^n \Delta R_i} \quad (5.21)$$

$$t_1^2 + L^2 = (\text{Re} + \sum_i^n \Delta R_i)^2 \quad (5.22)$$

$$t_2^2 + L^2 = R_b^2 \quad (5.23)$$

$$t_1 + t_2 = \text{Re} + R_b \quad (5.24)$$

Chamando:

$$\text{Re} + R_b = Z \quad (5.25)$$

$$\text{Re} + \sum_i^n \Delta R_i = \gamma_i \quad (5.26)$$

Assim por (5.24):

$$t_1 = Z - t_2 \quad (5.27)$$

Aplicando (5.25) em (5.22) e subtraindo do resultado (5.23):

$$\begin{aligned}
 Z^2 - 2.Z.t_2 + t_2^2 + L^2 &= \gamma_i^2 \\
 - (t_2^2 + L^2 &= R_b^2) \\
 \hline
 &= Z^2 - 2.Z.t_2 = \gamma_i^2 - R_b^2
 \end{aligned}
 \tag{5.28}$$

Assim:

$$t_2 = \frac{R_b^2 + Z^2 - \gamma_i^2}{2.Z}
 \tag{5.29}$$

Substituindo (5.26) em (5.23):

$$L = \left[R_b^2 - \left(\frac{R_b^2 + Z^2 - \gamma_i^2}{2.Z} \right)^2 \right]^{1/2}
 \tag{5.30}$$

Abrindo γ_i e Z, chega-se em:

$$L = \left[R_b^2 - \left(\frac{R_b^2 + (Re + R_b)^2 - \left(Re + \sum_i^n \Delta R_i \right)^2}{2.(Re + R_b)} \right)^2 \right]^{1/2}
 \tag{5.31}$$

Assim utilizando (5.31) em (5.21), chega-se ao resultado onde:

$$\Delta\phi_i = \text{arc sen} \left[\frac{R_b^2 - \left[\frac{R_b^2 + (R_e + R_b)^2 - \left(R_e + \sum_i^n \Delta R_i \right)^2}{2 \cdot (R_e + R_b)} \right]^2}{\left(R_e + \sum_i^n \Delta R_i \right)} \right]^{1/2} \quad (5.32)$$

Mantendo ainda o tratamento do modelo sobre a base com orifícios (ou ressaltos) vazados, observar uma situação destes orifícios (ou ressaltos) com cantos de base, onde estes são circulares e concêntricos aos orifícios (ou ressaltos) de encaixe. Para este caso utiliza-se os nós de Diferenças Finitas em geometrias cilíndricas, conforme apresentado na Figura 5.8.

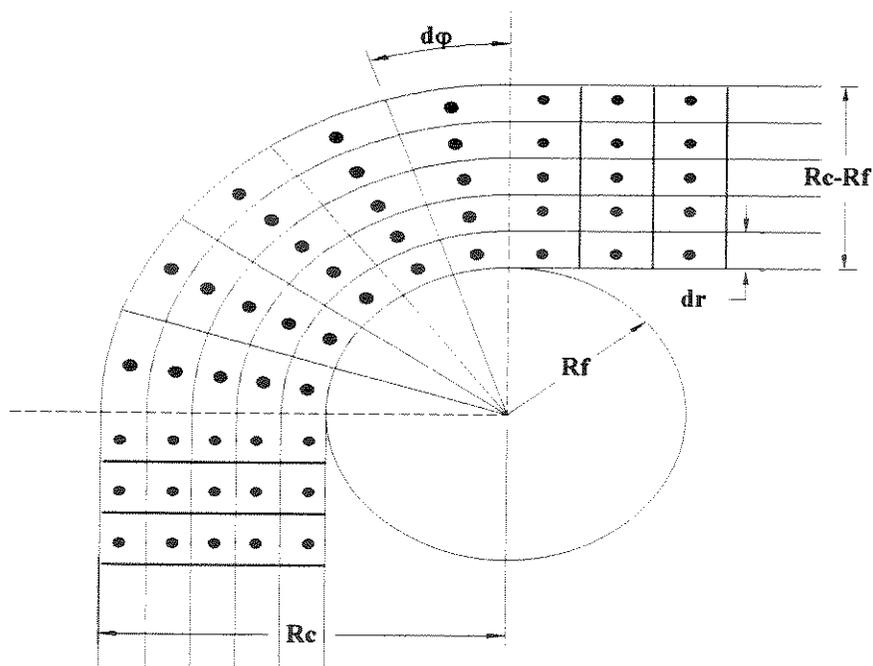


Figura 5.8 - Mapa de modelo sobre canto circular concêntrico a orifício (ou ressalto) vazado
-Sem Efeito de Escala-

Observe a situação onde tem-se na borda uma região triangular com representação da espessura relativa de uma peça. A condição de mapa para esta borda é dada conforme a Figura 5.9, onde a redução do tamanho de pontos na região de contorno da peça é fortemente consistente com a garantia de não elevar em demasiado o processamento computacional do programa numérico, uma vez que a malha fina se encontra apenas na borda da peça. A Figura 5.10 mostra a figura geométrica de apoio ao equacionamento para a redução dos pontos da borda de superfície, onde:

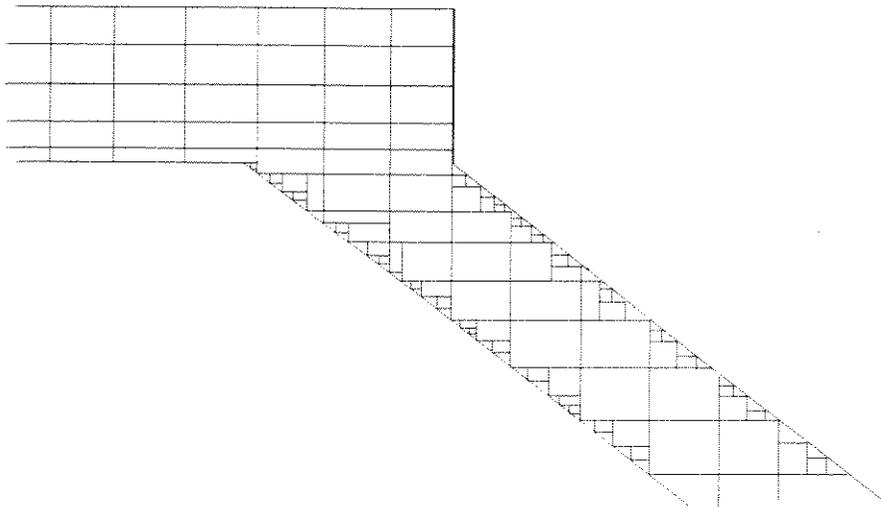


Figura 5.9 - Erro sobre a borda da peça de referência nas regiões triangulares -
-Sem Efeito de Escala-

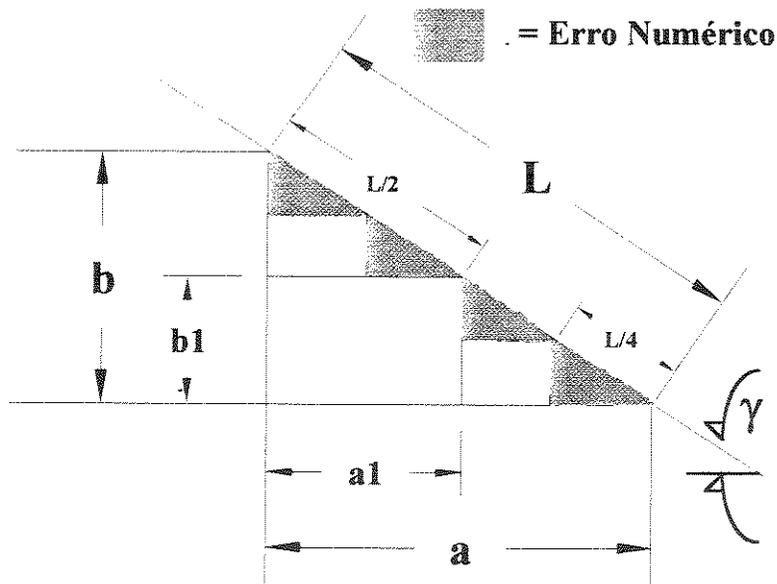


Figura 5.10 - Figura geométrica para solução de mapa da Figura 5.9

Solução:

$$\cos \gamma = \frac{a}{L} = \frac{a - a_1}{L/2} \quad (5.33)$$

Portanto: $a = 2.a - 2.a_1$ (5.34)

Assim: $2.a_1 = a \Rightarrow a_1 = \frac{a}{2}$ (5.35)

Por outro lado:

$$\text{sen} \gamma = \frac{b}{L} = \frac{b - b_1}{L/2} \quad (5.36)$$

Portanto: $b = 2.b - 2.b_1$ (5.37)

Assim: $2.b_1 = b \Rightarrow b_1 = \frac{b}{2}$ (5.38)

Deste modo o valor dos catetos será indiferente ao valor do ângulo, sendo o ponto médio da hipotenusa correspondente a intersecção do ponto médio dos catetos. Pode-se resolver a colocação destes pontos considerando a relação de área, onde pela Figura 5.11 desejamos que $A_1 = A_2$:

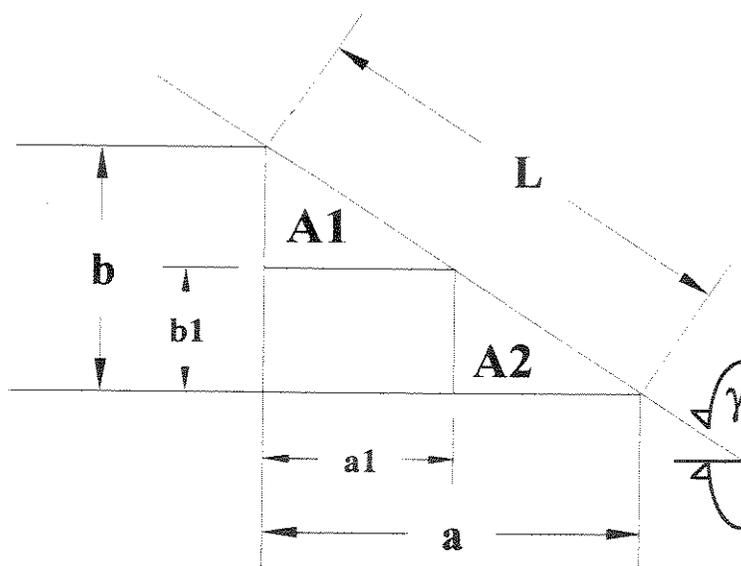


Figura 5.11 - Figura geométrica para solução de mapa da Figura 5.9

Tem-se que: $A_1 = \frac{(b - b_1) \cdot a_1}{2}$ e

$$A_2 = \frac{(a - a_1) \cdot b_1}{2} \quad (5.39)$$

Assim: $(a - a_1) \cdot b_1 = (b - b_1) \cdot a_1$ (5.40)

Onde: $\frac{a}{b} = \frac{a_1}{b_1} \Rightarrow$ Relação para a garantia de que $A_1 = A_2$. (5.41)

ou: $b_1 = a_1 \cdot \text{tg}(\gamma)$ (5.42)

Suponha uma interface de "uma base curva com reta" relativamente crítica e complexa em termos geométricos. Para esta região o mapa tomado é dado conforme a Figura 5.12.A, onde otimiza-se o efeito de acoplamento de malha na interface deste. Entretanto devido a consideração de dimensões muito pequenas comparada com a ordem de grandeza da peça, a modelagem desta interface pode ser tomada com boa aproximação numérica pela Figura 5.12.B, onde considera-se como cubos perfeitos os nódulos da interface da haste reta com o cano cilíndrico. O cálculo das resistências e do capacitor térmico já foram apresentados em fases anteriores a esta.

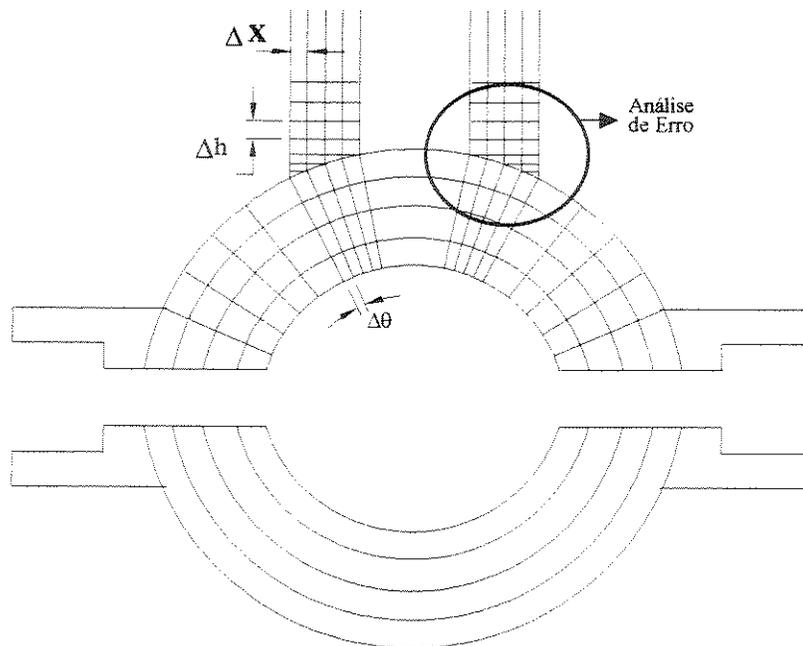


Figura 5.12.A - Mapa geométrico para o M.D.F. aplicado a região de interface de uma base curva com reta -Sem Efeito de Escala-

Como pode ser visto neste item do trabalho, o modelo numérico em termos matemáticos mostrou-se capaz de acomodar um efeito relativamente amplo de malhas numéricas com o objetivo de modelagem para a simulação. Comprovamos com este item a maleabilidade obtida pelo modelo desenvolvido. A facilidade e flexibilidade da utilização do modelo para a aplicação em peças de geometria complexa no espaço tridimensional e a possibilidade de desenvolver um programa numérico solúvel em um computador digital, tem neste item do trabalho sua comprovação realizada. Na próxima fase deste projeto será dado o levantamento final deste programa numérico e posteriormente seus resultados serão aferidos com os resultados reais obtidos no processo industrial de solidificação das referidas peças. Após esta aferição e eventual comprovação do bom funcionamento do modelo, ter-se-á em mãos uma forte ferramenta para a elaboração final de um projeto qualificado de características otimizadas do processamento técnico-industrial das referidas peças.

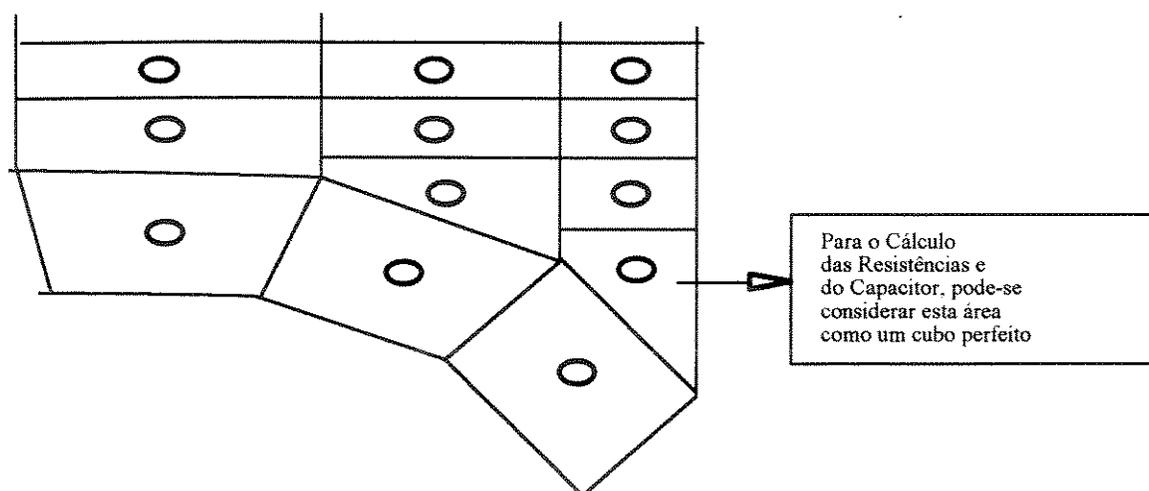


Figura 5.12.B - Aproximação numérica para o tratamento de interface de curva com reta, conforme a Figura 5.12.A

5.2 O Mapa de Modelo Sobre as Peças de Referência na Aplicação Prática

5.2.1. - Ensaio em Laboratório

Para a aferição do modelo em laboratório de pesquisa, optamos por uma geometria radial, uma vez que estas geometrias aparecem com relativa frequência em secções de peças de geometria complexa. Um molde de Aço 1020, com geometria cilíndrica e base esférica, conforme apresentado na Figura 5.13 foi utilizado para a fusão de chumbo e uma liga de alumínio (7075 - SAE 215).

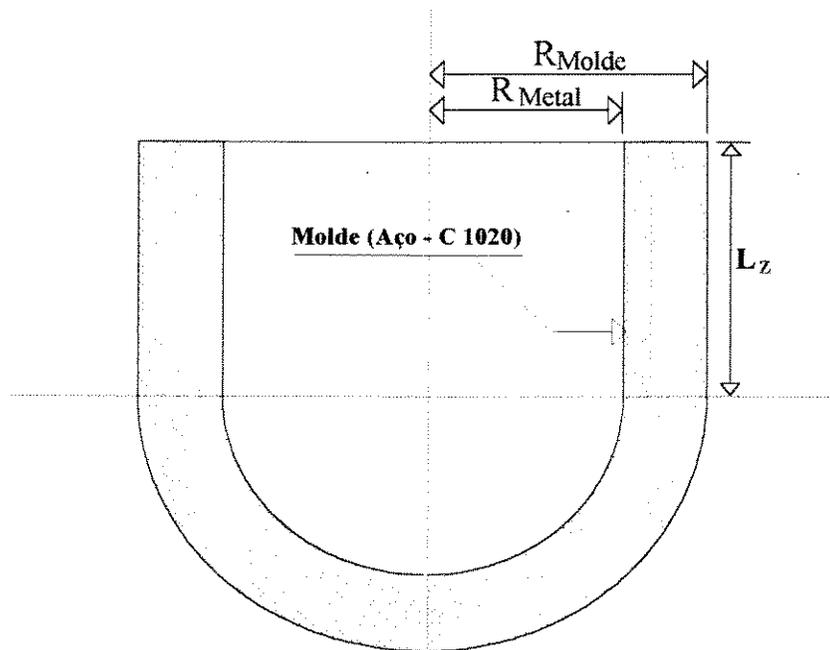


Figura 5.13 - Representação Física do Sistema Molde/Metal

Neste aplicou-se o mapa de Diferenças Finitas, representado pela analogia elétrica conforme dado pelas Figuras 5.14, 5.15 e 5.16, assim:

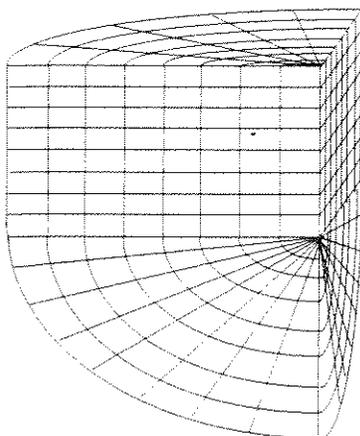


Figura 5.14 - Sistema Metálico com a disposição da malha do Método de Diferenças Finitas

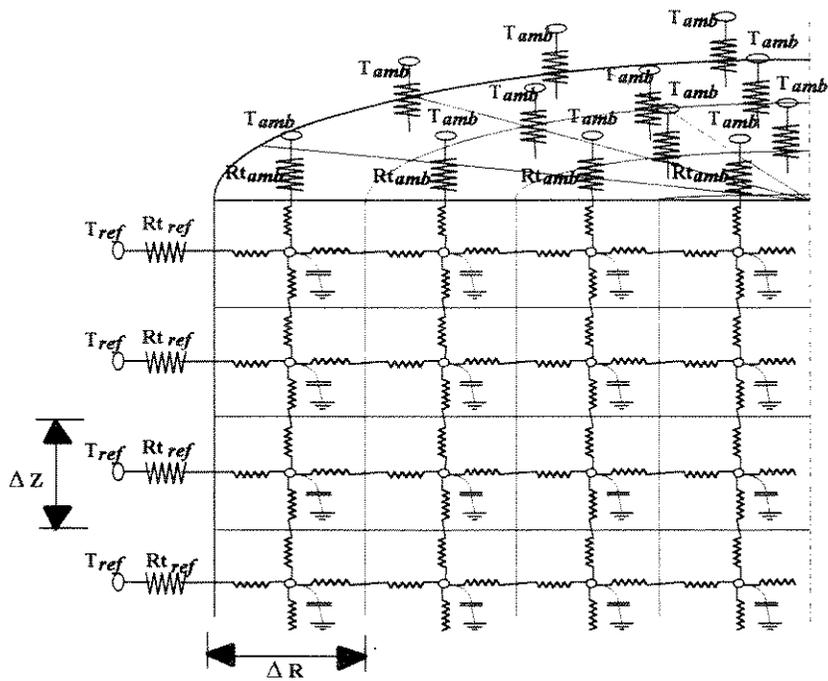


Figura 5.15 - Malha Passiva (Capacitores + Resistores) da região cilíndrica da peça

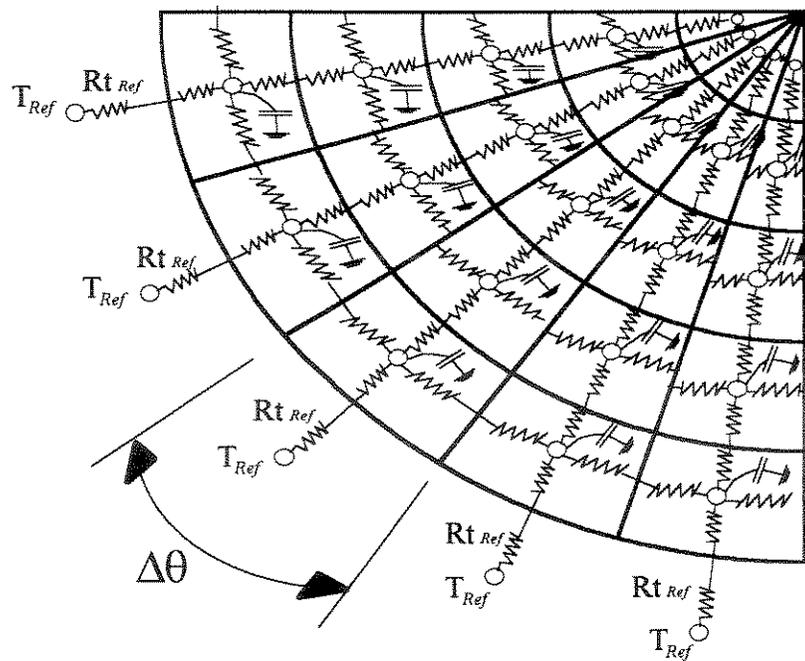


Figura 5.16 - Malha Passiva (Capacitores + Resistores) da região esférica da peça

Para o molde da Figura 5.13, acoplamos uma malha de resistência elétrica para o aquecimento do molde e eventual fusão do material em seu interior. Isto foi necessário pois como se trata de uma aferição do modelo numérico, não é prudente incluir as incertezas da dinâmica do vazamento, uma vez que o processo inicia sua iteração com partida de molde completamente cheio a uma temperatura igual a temperatura de vazamento. Assim fundindo-se o material em seu interior com esta malha de resistência elétrica e posteriormente separando o

molde desta malha tem-se o efeito simulado no modelo. Para evitar contato do molde com a resistência elétrica e evitando assim um curto-circuito, elaborou-se uma casca de material cerâmico refratário apoiando a resistência elétrica na superfície circular do molde, impedindo desta forma o contato físico do molde com a resistência. A Figura 5.17 apresenta um esboço do sistema aplicado.

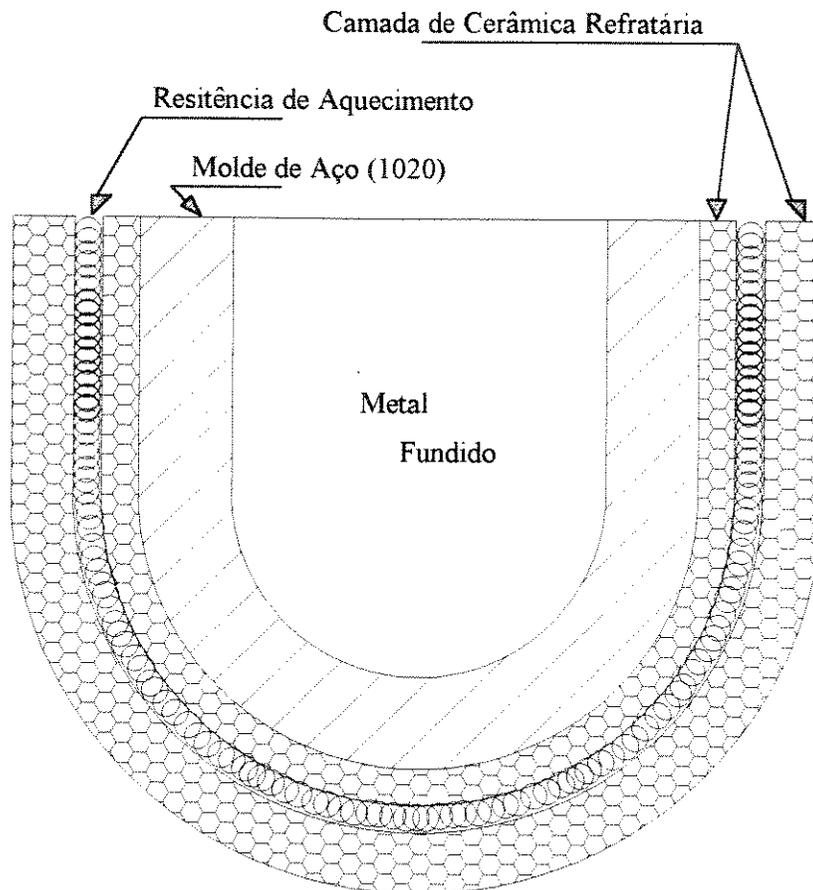


Figura 5.17 - Sistema de Fundição Experimental para Aferição do Modelo Numérico

Estabeleceu-se os cálculos iniciais para a potência exigida pelo sistema para a fusão de alguns materiais, como o chumbo e alumínio, seguindo a sequência de passos apresentada no Apêndice B.

Posteriormente observou-se a disposição de alguns termopares, localizados estrategicamente dentro do molde em regiões muito próximas do metal conforme visto na Figura 5.18.

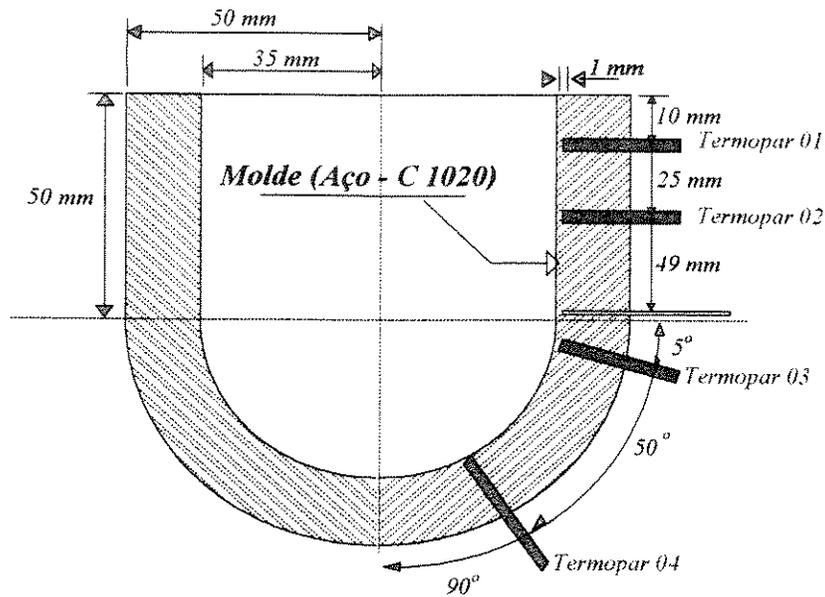


Figura 5.18 - Disposição dos termopares de medida do sistema de aferição para laboratório

5.2.1.1. Elementos de Ensaio

Na seqüência apresentam-se todos os elementos utilizados na montagem do respectivo experimento.

Na Figura 5.19 apresenta-se uma foto com o detalhe da bobina de resistência, e do molde de aço. A bobina será enrolada na superfície do molde e a mesma aquecerá o molde com o objetivo de fundir os materiais diretamente em seu interior.

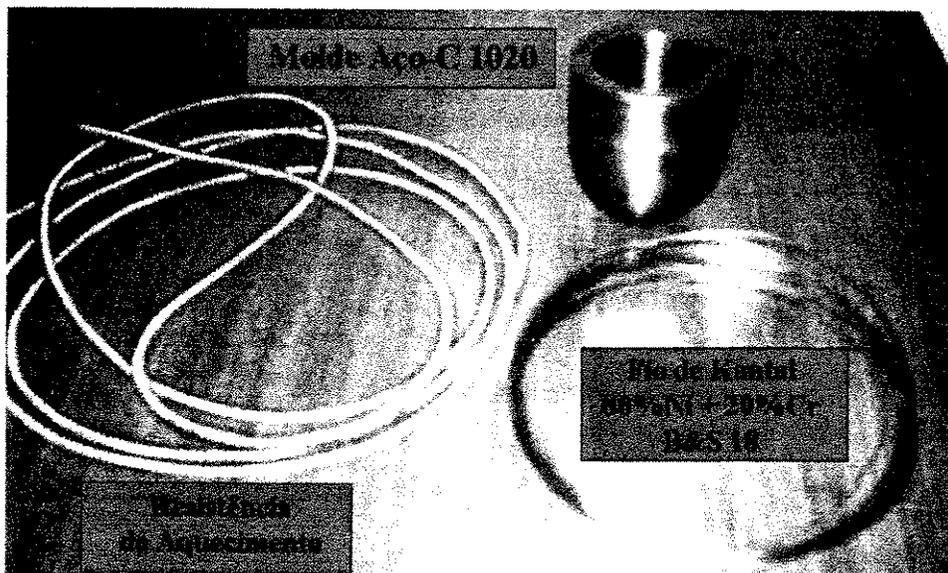


Figura 5.19 - Foto que detalha o molde de aço, a resistência de aquecimento e o cabo de Kantal utilizado para confeccionar a resistência

A massa cerâmica refratária corresponde a uma massa moldável "Fiberfrax LDS", de fabricação nacional (Carburundum - Vinhedo - S.P.) cujas características apresentam-se na Tabela 5.1.

Tabela 5.1 - Propriedades Físicas Típicas da Massa 'LDS' - [Ref.: Manual do Fabricante]

Cor	Branca
Porcentagem de Sólidos	55%
Densidade - Seco	640 kg/m ³
Densidade - Úmido	1280 kg/m ³
Resistência à Erosão	> 61 m/s

Na Figura 5.20 apresenta-se a curva da condutividade térmica da massa cerâmica como função da temperatura de trabalho. Observe que esta tem uma característica muito isolante, e devido a este motivo a casca de isolamento deve ser pequena.

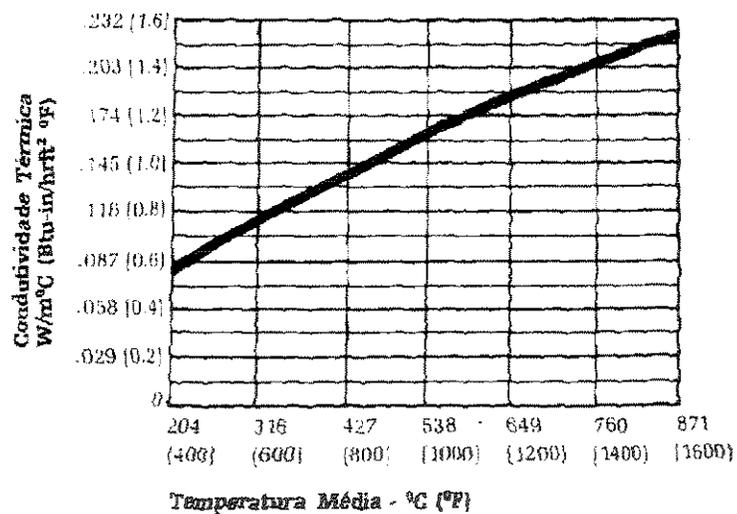


Figura 5.20 - Curva dos valores da condutividade térmica da massa LDS versus temperatura de trabalho [Ref.: Manual do Fabricante]

O acompanhamento dos resultados de ensaio são obtidos por meio de termopares "Tipo J" (Ferro/Cobre-Níquel) e "Tipo K" (Cromel-Alumel), onde na Figura 5.21 uma foto representativa destaca os termopares utilizados no experimento.

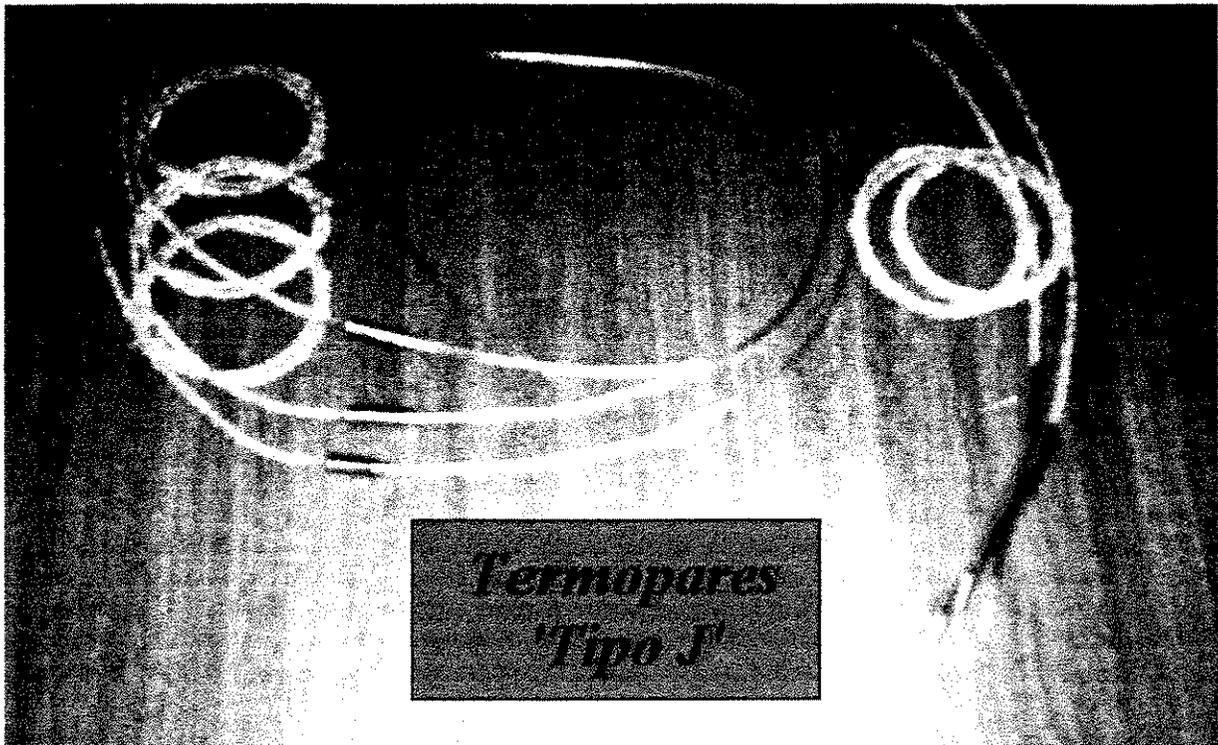


Figura 5.21 - Foto que detalha os termopares utilizados no experimento de laboratório

A captura dos dados de ensaio é realizada por meio de um registrador de dados microprocessado de 6 (seis) canais modelo MT566, fornecido pela "ECB do Brasil". A monitorização das temperaturas é feita com medidas rápidas através de um indicador digital, fornecido pela mesma empresa do registrador. A Figura 5.22 detalha estes dois equipamentos.

5.2.1.2. Metodologia de Ensaio

Na Figura 5.23 tem-se o esboço representativo do equipamento experimental utilizado na obtenção dos resultados para a aferição do modelo numérico, e na sequência apresentamos o roteiro técnico do ensaio prático.

Roteiro de Ensaio:

① Fusão do metal de ensaio no interior do molde, via aquecimento elétrico dado pela resistência Ohmica;

② Com o auxílio do indicador digital de temperatura, conhecer a temperatura do metal, após a respectiva fusão e superaquecimento do mesmo e registrar este valor como " $T_{inicial\ do\ Metal\ Líquido}$ ";

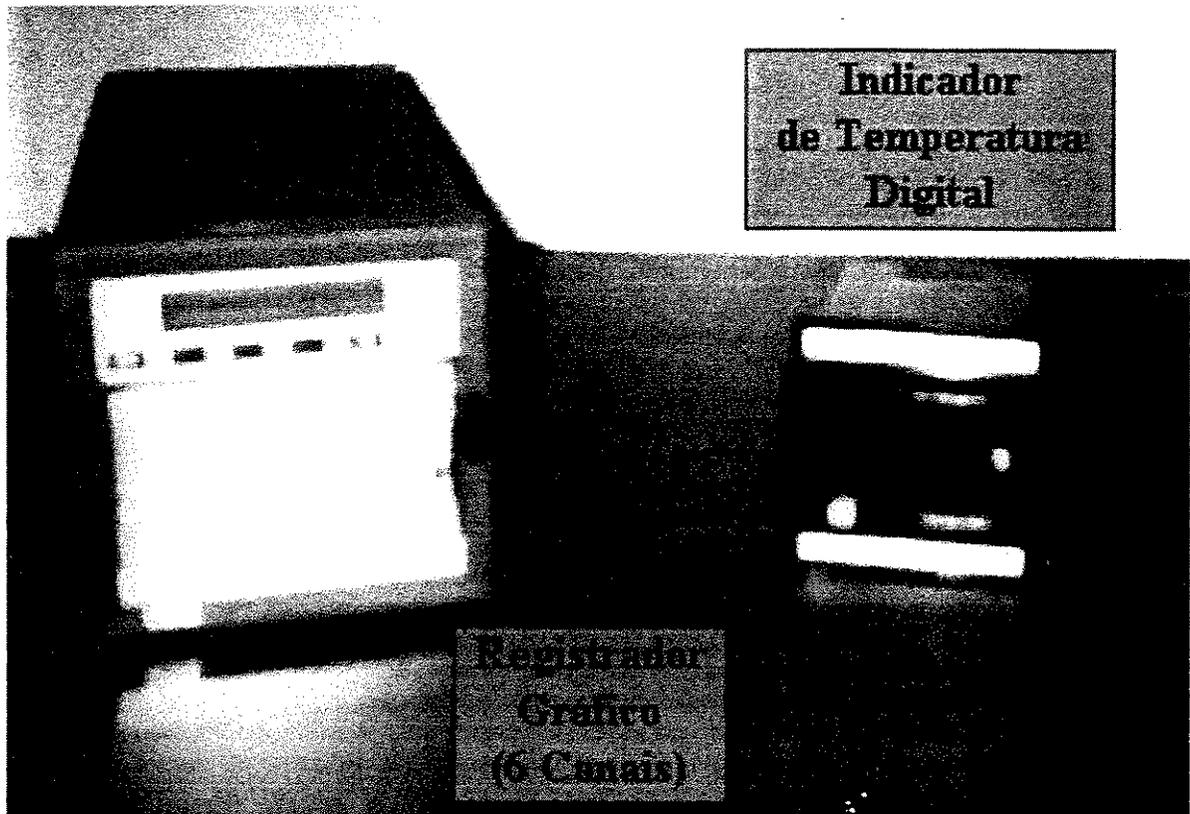


Figura 5.22 - Registrador Programável para seis canais e o indicador de temperatura digital

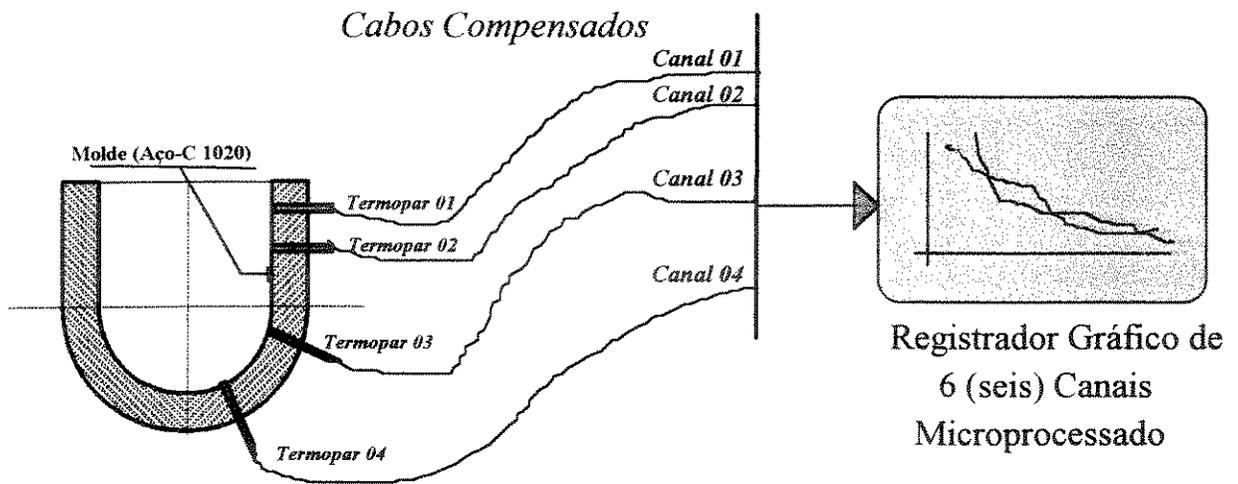


Figura 5.23 - Aparato experimental para aferição do modelo numérico

- ③ Isolar o molde da resistência de aquecimento, para o resfriamento do molde em temperatura ambiente;
- ④ Acompanhar a evolução térmica nos pontos indicados;
- ⑤ Fechar ensaio com curvas de resfriamento, obtidas no registrador eletrônico;

A Figura 5.24 apresenta uma foto representativa com o aparato experimental em aplicação prática.

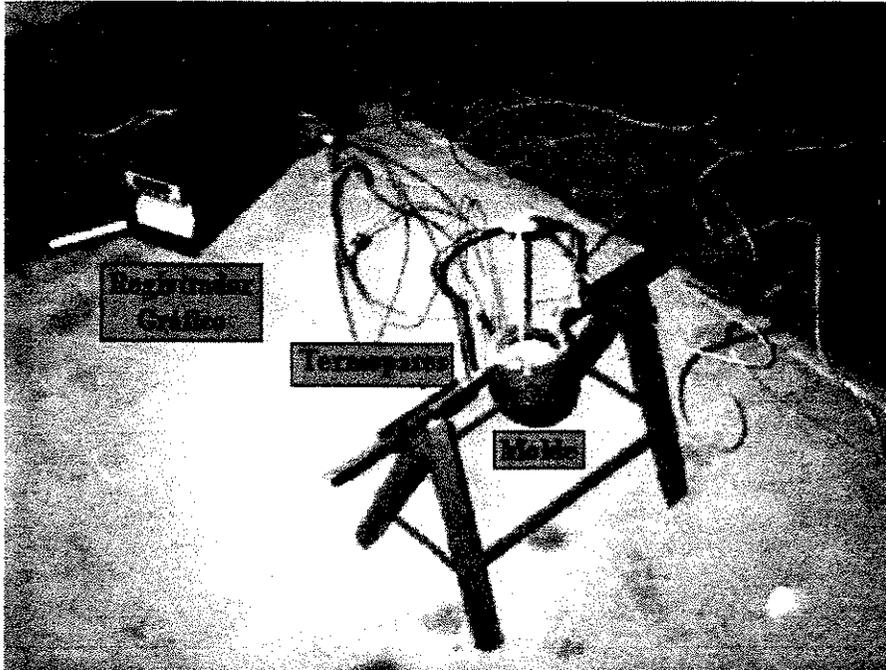


Figura 5.24 - Equipamento experimental utilizado em laboratório para aferição do modelo Numérico

5.2.1.3. Resultados de Ensaio (Simulação e Experimental)

Ensaio A - Material \Rightarrow Chumbo - Pb

O primeiro ensaio realizado em laboratório refere-se a fusão do chumbo no interior do molde e posteriormente o acompanhamento da evolução das curvas de solidificação. As características físicas deste material são dadas no Apêndice C.

Obteve-se com sucesso neste ensaio os resultados dos quatro termopares (Referente a Figura 5.18). As Figuras 5.25 e 5.26 mostram a evolução de temperatura dos dados experimentais em comparação com os dados do modelo proposto. Observar nestas figuras a consistência física do modelo desenvolvido, para erros relativos dados na sua ordem máxima de $\cong 7\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($\Rightarrow 2,25\%$) nas curvas da Figura 5.25 para o tempo de 215 s aproximadamente e, de $\cong 8\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($\Rightarrow 2,30\%$) para as curvas da Figura 5.26 no tempo aproximado de 210 s.

Para o sistema em questão, pode-se estimar com cálculos analíticos os elementos referentes ao processo de transferência de calor, onde:

h_{cref} = Coeficiente de convecção 'Ambiente' no resfriamento da interface molde/meio-ambiente;

h_a = Coeficiente de convecção 'Ambiente' no resfriamento no funil do molde na interface metal/meio-ambiente;

h_{New} = Coeficiente de convecção 'Newtoniano' no resfriamento da interface metal/molde;

O cálculo de h_{cref} , deve levar em conta os mecanismos de radiação e convecção combinados, onde:

$$h_{\text{cref}} = h_c + h_r \quad (5.43)$$

sendo: h_c = Coeficiente de Convecção [$\text{W}/\text{m}^2 \cdot \text{K}$];

e h_r = Coeficiente de Convecção Radiativa [$\text{W}/\text{m}^2 \cdot \text{K}$];

Para o cálculo do coeficiente radiativo tem-se que:

$$h_r = \sigma \cdot \varepsilon \cdot (T_s - T_o) \cdot (T_s^2 + T_o^2) \quad (5.44)$$

onde: σ = Constante de 'Stefan-Boltzman' [$= 5,672 \times 10^{-8} \text{ W}/\text{m}^2 \cdot \text{K}^4$] - [Kern-1950];

ε = Coeficiente de emissividade radiativa da superfície do corpo

Para o Aço $\varepsilon = 0,8$;

T_s = Temperatura da superfície do corpo;

T_o = Temperatura do meio fluido;

Deste modo para o caso considerado, utilizou-se $T_s = 593 \text{ K}$ ($320 \text{ }^\circ\text{C} \Rightarrow$ Medido) e $T_o = 308 \text{ K}$ ($35 \text{ }^\circ\text{C} \Rightarrow$ Estimado próximo a parede do molde) obtendo-se:

$$h_r = 3,32 \text{ W}/\text{m}^2 \cdot \text{K}$$

Para o cálculo do coeficiente de convecção:

$$h_c = \frac{k \cdot N_u}{\chi} \quad (5.45)$$

$$N_u = K \cdot C \cdot (G_r \cdot P_r)^n \quad (5.46)$$

$$G_r = \frac{g \cdot \gamma \cdot \rho^2 \cdot \chi^3 (T_s - T_o)}{\eta^2} \quad (5.47)$$

$$P_r = \frac{\eta \cdot c}{k} \quad (5.48)$$

onde: χ = Dimensão característica que se refere à distância coberta pelo fluido ao passar pela superfície [m];

k = Condutividade térmica do fluido [W/m.K];

C e n = Constantes experimentais dependentes da geometria do corpo;

K = Fator corretivo;

g = Aceleração da gravidade ($\cong 9,81 \text{ m/s}^2$);

γ = Coeficiente de expansão térmica volumétrica (= $1/T_o$ para gases) [K^{-1}];

ρ = Densidade do fluido [kg/m^3];

η = Viscosidade do fluido [kg/m.s];

c = Calor específico do fluido [J/kg.K];

Para um fluxo de fluido laminar e superfície em posição horizontal, tem-se que [Kern-1950]:

$$C = 0,8; \quad n = 1/4 \quad e$$

$$K = \left[1 + \left(1 + \frac{1}{\sqrt{P_r}} \right)^2 \right]^{-1/4} \quad (5.49)$$

As propriedades do ar a 360 K [Perry-1963] são:

$$k = 1,60 \times 10^{-2} \text{ W/m.K};$$

$$\rho = 1,17 \text{ kg/m}^3 \text{ (1 atm)};$$

$$\eta = 3,50 \times 10^{-5} \text{ kg/s.m (1 atm)};$$

$$c = 1006,30 \text{ J/kg.K};$$

Assim: $h_c = 11,20 \text{ W/m}^2.K$ [$\chi = 0,010 \text{ m}$];

Logo: $h_{\text{cref}} \cong 11,20 + 3,32 = 14,52 \text{ W/m}^2.K$

O cálculo de ' h_a ', também leva em conta os mecanismos de convecção e radiação combinados sendo, para este o valor de h_r igual ao calculado anteriormente ($h_r = 3,32 \text{ W/m}^2.K$). Para um fluxo de fluido laminar e a superfície do corpo na posição vertical, tem-se que:

$$C = 0,54; \quad n = 1/4 \quad \text{e} \quad K = 1$$

Neste caso, a estimativa de cálculo é:

$$h_c = 6,60 \text{ W/m}^2.K;$$

$$h_a = 3,32 + 6,60 = 9,92 \text{ W/m}^2.K \cong 10 \text{ W/m}^2.K$$

O valor de h_{New} é estimado sobre as considerações da interface metal/molde em função da ordem de grandeza deste valor apresentado pela literatura, (parede do molde com certa rugosidade e oxidado no contato com o metal $\Rightarrow h_{\text{New}} = 1200 \text{ W/m}^2.K$). Pode-se observar pelas Figuras 5.25 e 5.26 que o modelo representou o sistema em estudo, sob certas considerações de tolerância.

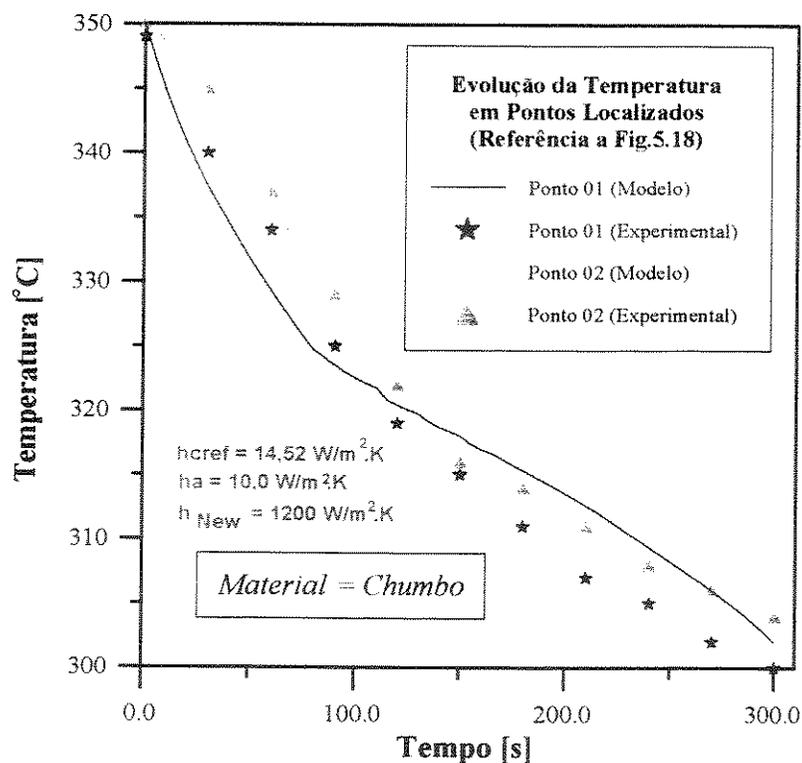


Figura 5.25 - Comparação entre o sistema experimental para molde cilíndrico/esférico e o modelo proposto (Pontos 01 e 02)

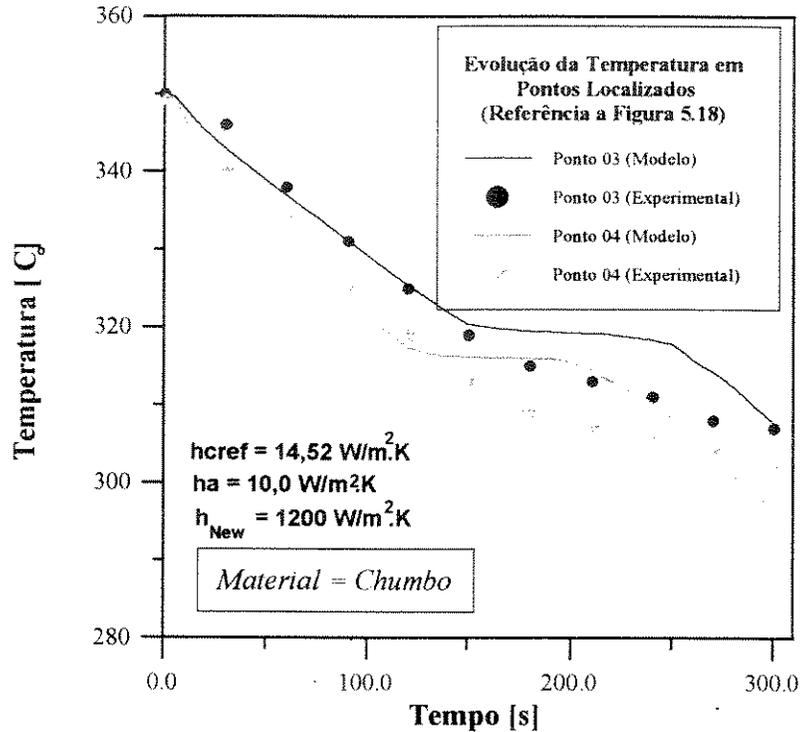


Figura 5.26 - Comparação entre o sistema experimental para molde cilíndrico/esférico e o modelo proposto (Pontos 03 e 04)

A simulação dos ensaios vistos acima foi aplicada no interior do molde, onde observou-se a evolução da isoterma 'solidus' da parede do molde até o centro da peça, conforme visto na Figura 5.27. Observa-se que a frente de solidificação é mais acelerada na região da geometria esférica do que na região cilíndrica. Este resultado é consistente com observações de modelo [Santos-1993] que comprovam que geometrias esféricas tendem a resfriar com velocidades superiores a geometrias cilíndricas. Deste modo pode-se comprovar a influência marcante da geometria da peça produzida nos processos de retirada de calor dos sistemas de solidificação.

Ensaio B - Material ⇒ Liga de Al (7075 - SAE 215)

No segundo ensaio realizado em laboratório foi utilizado uma liga de Al (7075 - SAE 215) cujas características são apresentadas no Apêndice C.

Para este modelo utilizou-se a regra de 'Scheil' [Sheil-1942] representativo a uma situação sem difusão de soluto na fase sólida devido ao tamanho de raio atômico relativamente grande do soluto principal em relação ao pequeno tamanho do raio atômico do reticulado de alumínio e mistura completa no líquido.

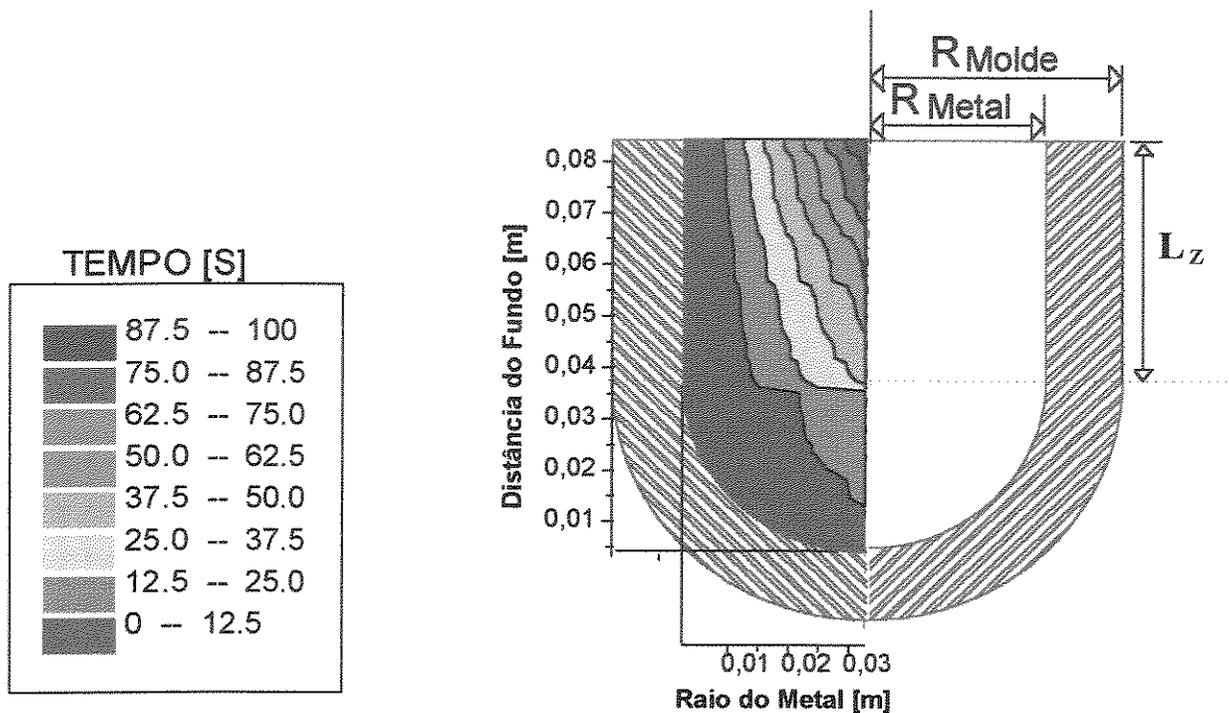


Figura 5.27 - Evolução da Isotherma Solidus no Interior do Molde [Simulação]

O cálculo estimado de h_{New} , h_a e h_{cref} para este ensaio, é semelhante ao utilizado no primeiro caso, contudo a temperatura de superfície do molde é alterada para: $T_s = 973 \text{ K}$ ($700 \text{ }^\circ\text{C} \Rightarrow \text{Medido}$), sendo $T_o = 318 \text{ K}$ ($45 \text{ }^\circ\text{C} \Rightarrow \text{Estimado próximo a parede do molde}$).

Assim: $h_r = 25,13 \text{ W/m}^2.K$

e $h_c = 13,80 \text{ W/m}^2.K;$

e deste modo: $h_{cref} = 39,93 \text{ W/m}^2.K$

Para o cálculo de ' h_a ', tem-se que:

$$h_r = 25,13 \text{ W/m}^2.K$$

e $h_c = 13,00 \text{ W/m}^2.K;$

e deste modo: $h_a = 38,13 \text{ W/m}^2.K$

O valor de ' h_{New} ' é tomado com valor numérico igual ao utilizado no primeiro caso, sob a ordem de $1200 \text{ W/m}^2.K$.

Observe a Figura 5.28 onde acoplou-se um termopar no interior do metal fundido na direção do termopar de número 02 do molde (Ver Fig. 5.18). O modelo mostrou-se

consistente e prático mesmo em situações de solidificação em ligas onde o resfriamento sofre inflexões em função das características da região pastosa.

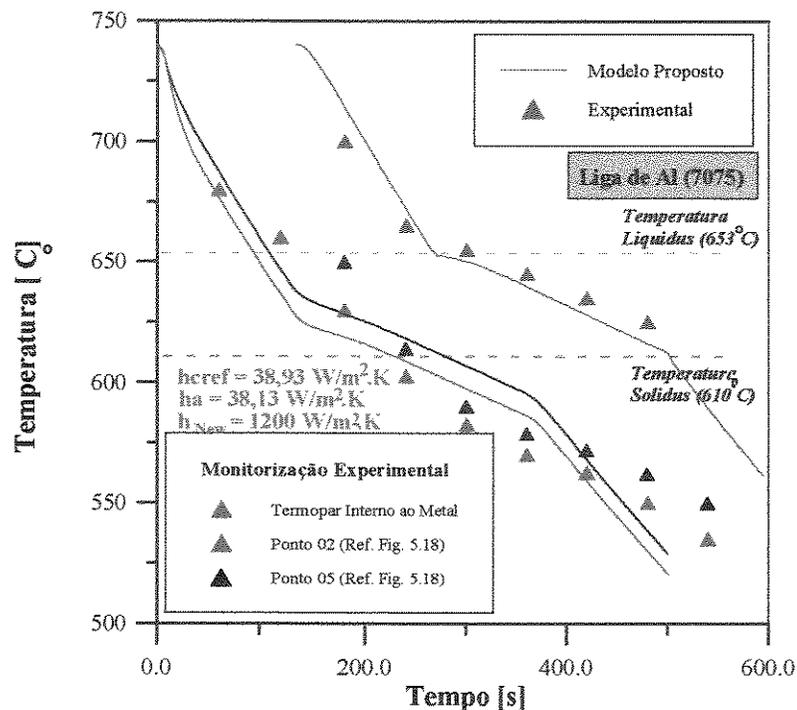


Figura 5.28 - Comparação entre a evolução de pontos localizados de captura, no sistema experimental (Ref. a Fig. 5.18) e no modelo proposto

5.2.1.4. Discussão a Respeito da Aferição do Modelo

É esperada alguma diferença inicial entre a curva experimental e os resultados gerados na simulação do processo, e isto ocorrerá devido ao fato de que os coeficientes de entrada no modelo (como o coeficiente de retirada de calor molde/metal e na superfície do molde para o meio ambiente e do molde/meio ambiente) são estimados com cálculos analíticos, os quais não consideram muitos fatores que podem acrescentar erros aos resultados. Pode-se varrer estes parâmetros de entrada de modelo dentro de limites reais objetivando levar as curvas de simulação o mais próxima das curvas reais. Feito isto, tem-se um valor aproximado dos parâmetros atuantes no sistema físico, podendo estes valores serem utilizados posteriormente em simulações práticas do sistema. Deste modo tem-se a aferição do modelo, devendo observar que os parâmetros obtidos para um sistema fechado (isto é, com o mesmo material de fundição e condições de resfriamento) é específico apenas a este sistema. As Figuras 5.29 e 5.30, representam as curvas em varredura dos coeficientes convectivos atuantes no sistema de laboratório para os resultados obtidos com a solidificação do chumbo e da liga de alumínio.

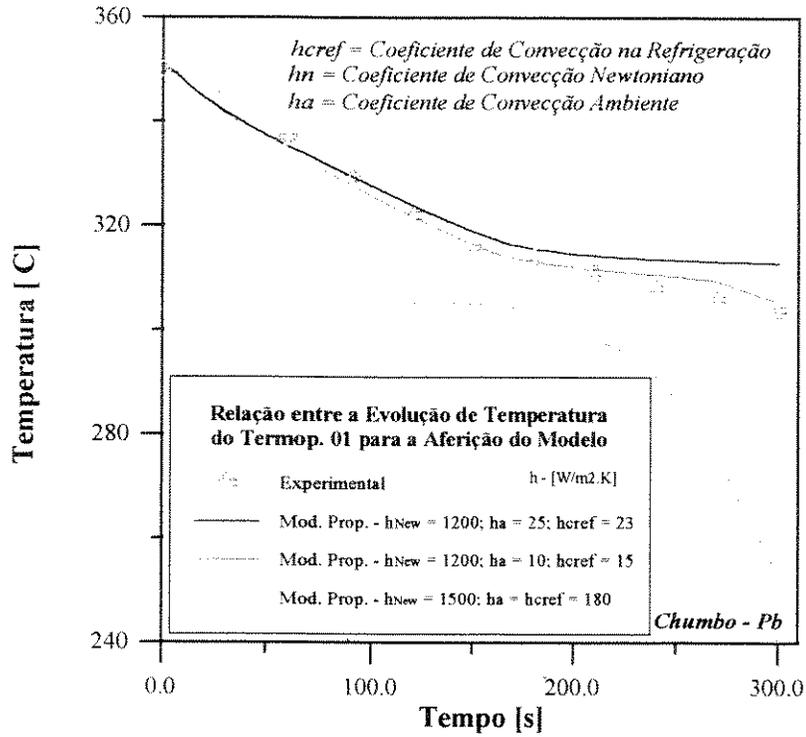


Figura 5.29 - Varredura em aferição para o sistema experimental do molde cilíndrico/esférico para a solidificação do chumbo

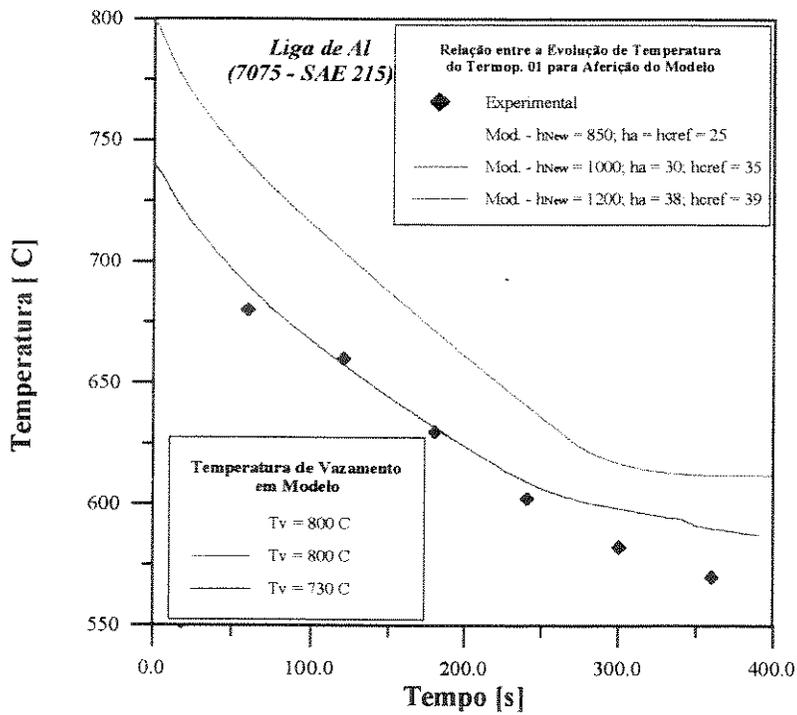


Figura 5.30 - Varredura em aferição para o sistema experimental do molde cilíndrico/esférico para a solidificação da liga de alumínio (7075 - SAE 215)

5.2.2 - Ensaio em Peça Industrial (Peça de Referência Número 01)

Inicialmente apresentamos a peça de referência fornecida pela LITEMA - Comércio e Indústria de Ligas Técnicas e Materiais Ltda. Na seqüência, mostram-se o projeto da peça após fundição e peça usinada subdividido em quatro partes originais:

Corpo Eliminador de Ar

Figura 5.31A - Vista Frontal ⇔ Projeto Peça Usinada

Figura 5.31B - Vista Frontal ⇔ Projeto Fundição

Figura 5.32A - Vista Superior ⇔ Projeto Peça Usinada

Figura 5.32B - Vista Superior ⇔ Projeto Fundição

Figura 5.33A - Vista Lateral ⇔ Projeto Peça Usinada

Figura 5.33B - Vista Lateral ⇔ Projeto Fundição

Figura 5.34A - Corte A-A da Figura 5.33A ⇔ Projeto Peça Usinada

Figura 5.34B - Corte A-A da Figura 5.33A ⇔ Projeto Fundição

O modelo representativo das regiões de obtenção de dados, bem como toda a manipulação realizada em malha pelo Método de Diferenças Finitas é apresentado na seqüência deste.

Figura 5.31.A - CORPO ELIMINADOR DE AR

Vista: FRONTAL

Empresa: LITEMA

Material: Aço Inox

Projeto: Peça Usinada

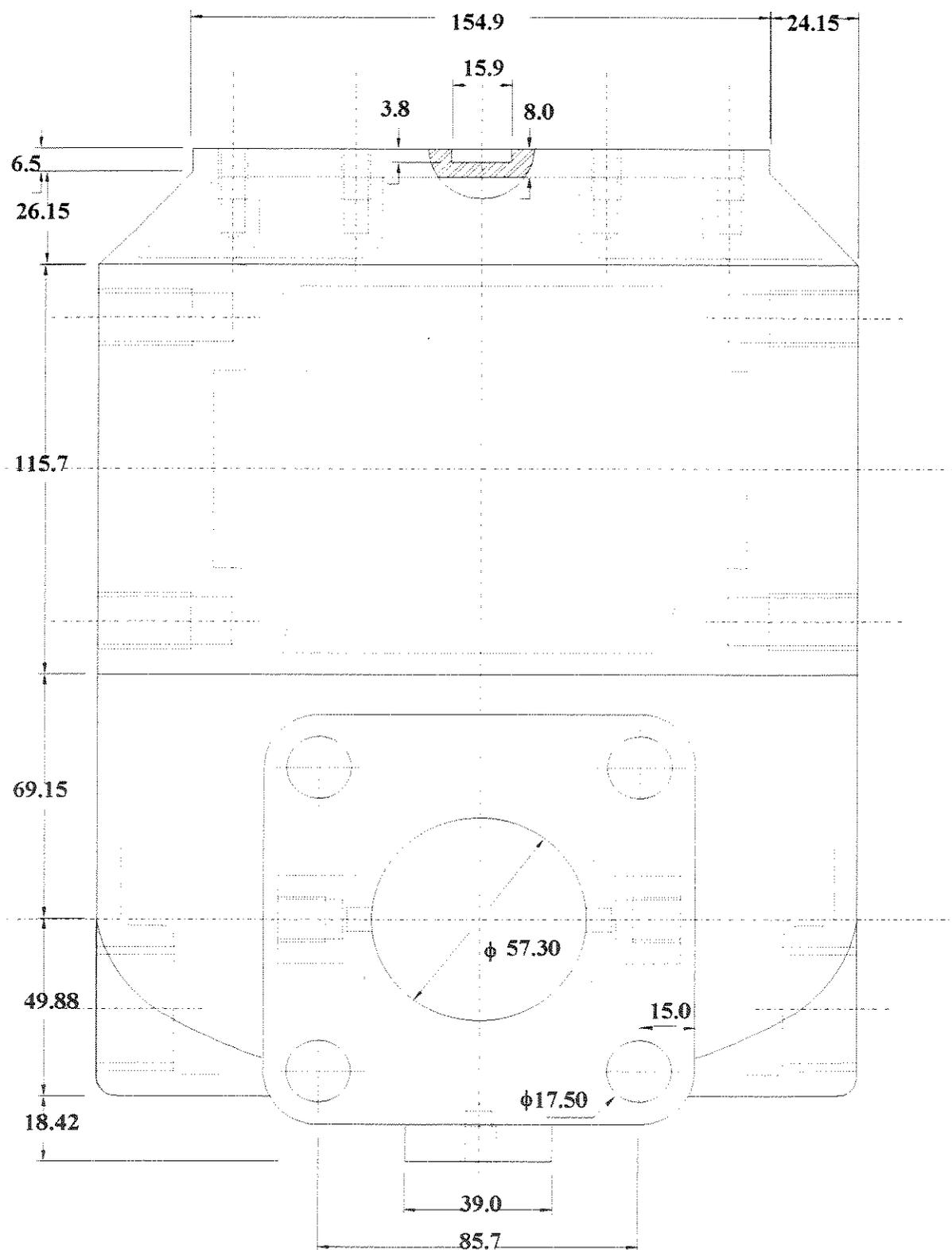


Figura 5.31.B - CORPO ELIMINADOR DE AR

Vista: FRONTAL

Empresa: LITEMA

Material: Aço Inox

Projeto: Fundição

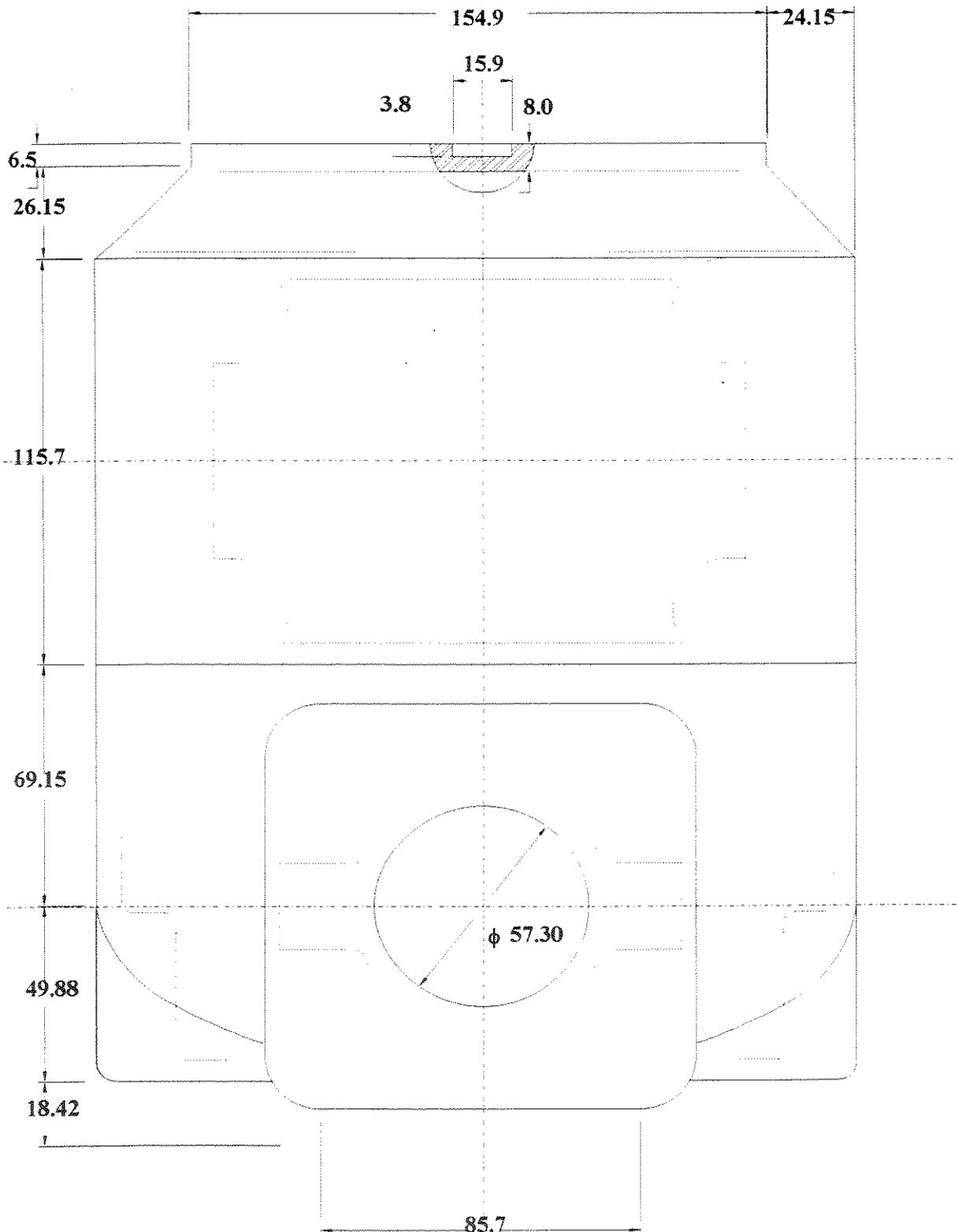


Figura 5.32.A - CORPO ELIMINADOR DE AR

Vista: SUPERIOR

Empresa: LITEMA

Material: Aço Inox

Projeto: Peça Usinada

Broca ϕ 6.5 - Prof. 23.8

Rosca 5/16" - Prof. 14.3

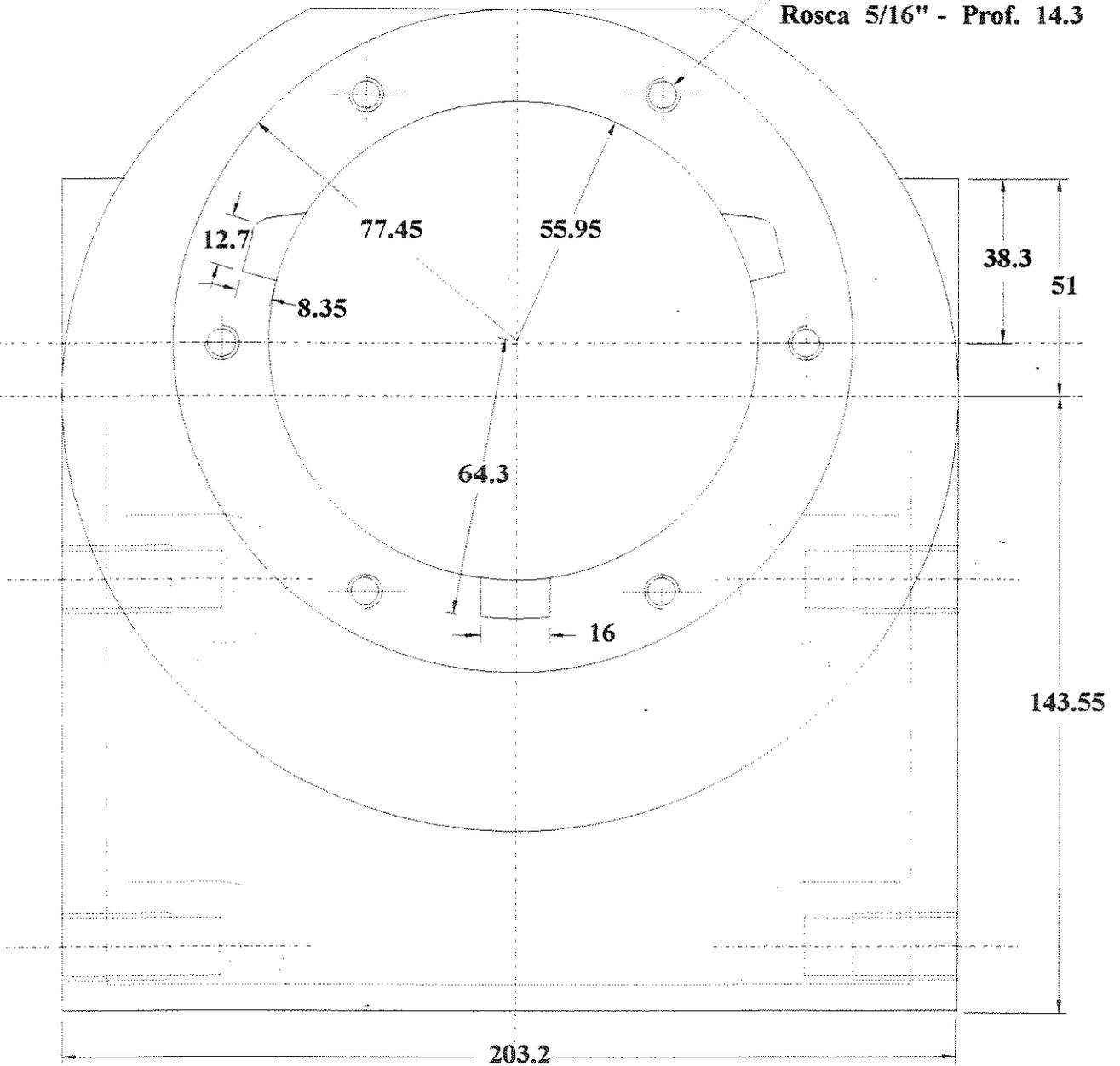


Figura 5.32.B - CORPO ELIMINADOR DE AR

Vista: SUPERIOR
Empresa: LITEMA
Material: Aço Inox

Projeto: Fundição

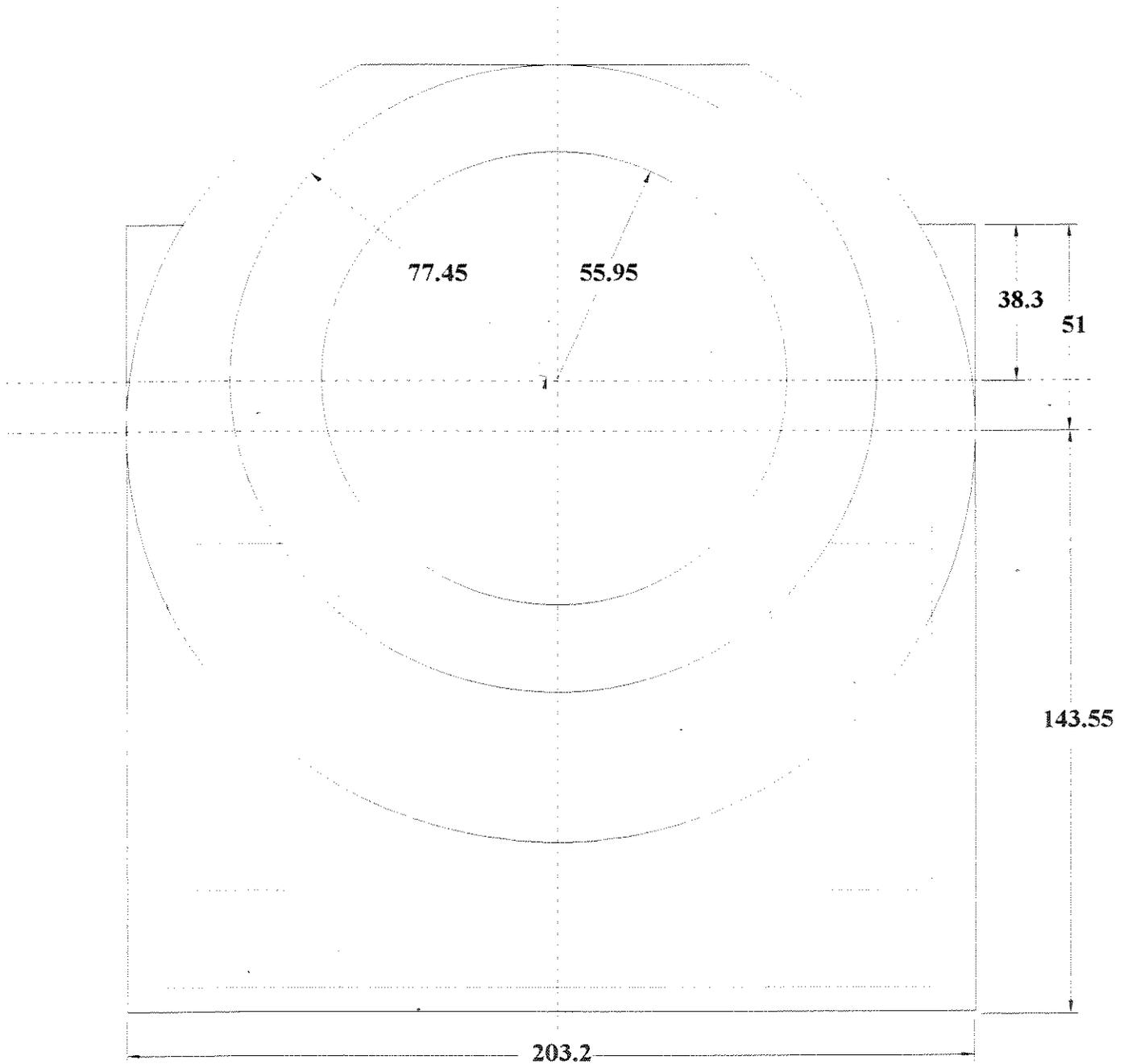


Figura 5.33.A - CORPO ELIMINADOR DE AR

Vista: LATERAL

Empresa: LITEMA

Material: Aço Inox

Projeto: Peça Usinada

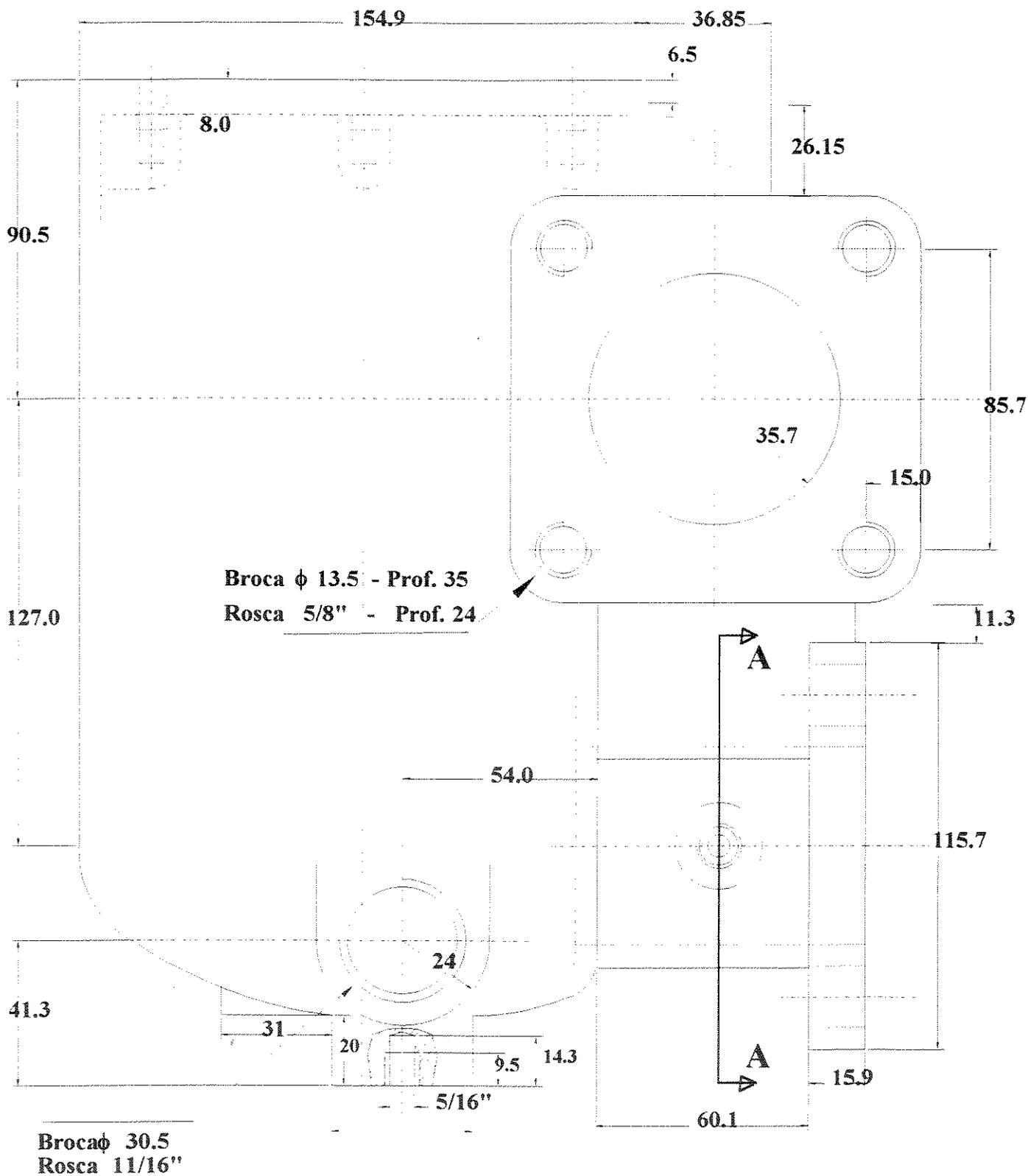


Figura 5.33.B - CORPO ELIMINADOR DE AR

Vista: LATERAL

Empresa: LITEMA

Material: Aço Inox

Projeto: Fundição

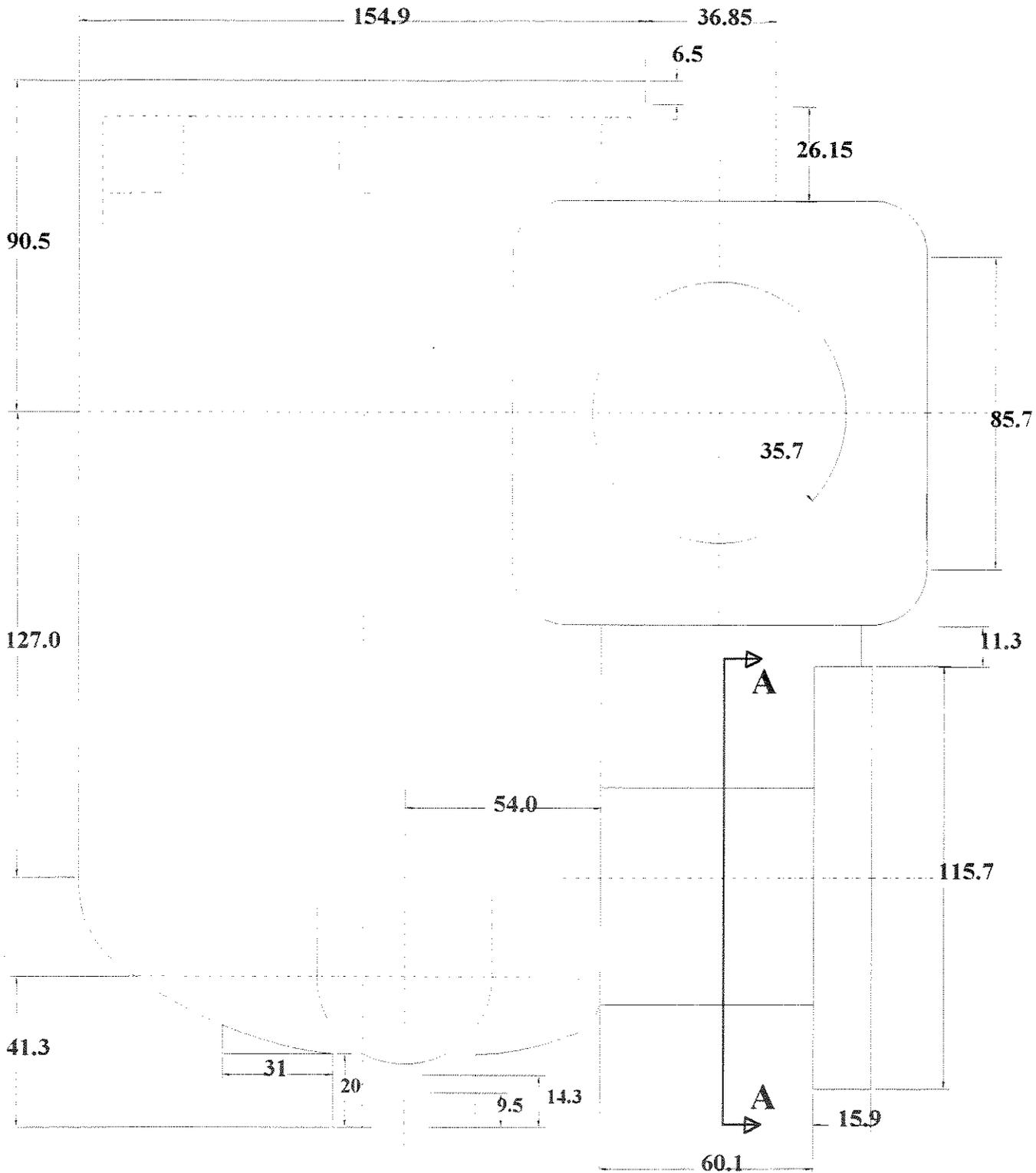


Figura 5.34.A - CORPO ELIMINADOR DE AR

Vista: CORTE A-A

Empresa: LITEMA

Material: Aço Inox

Projeto: Peça Usinada

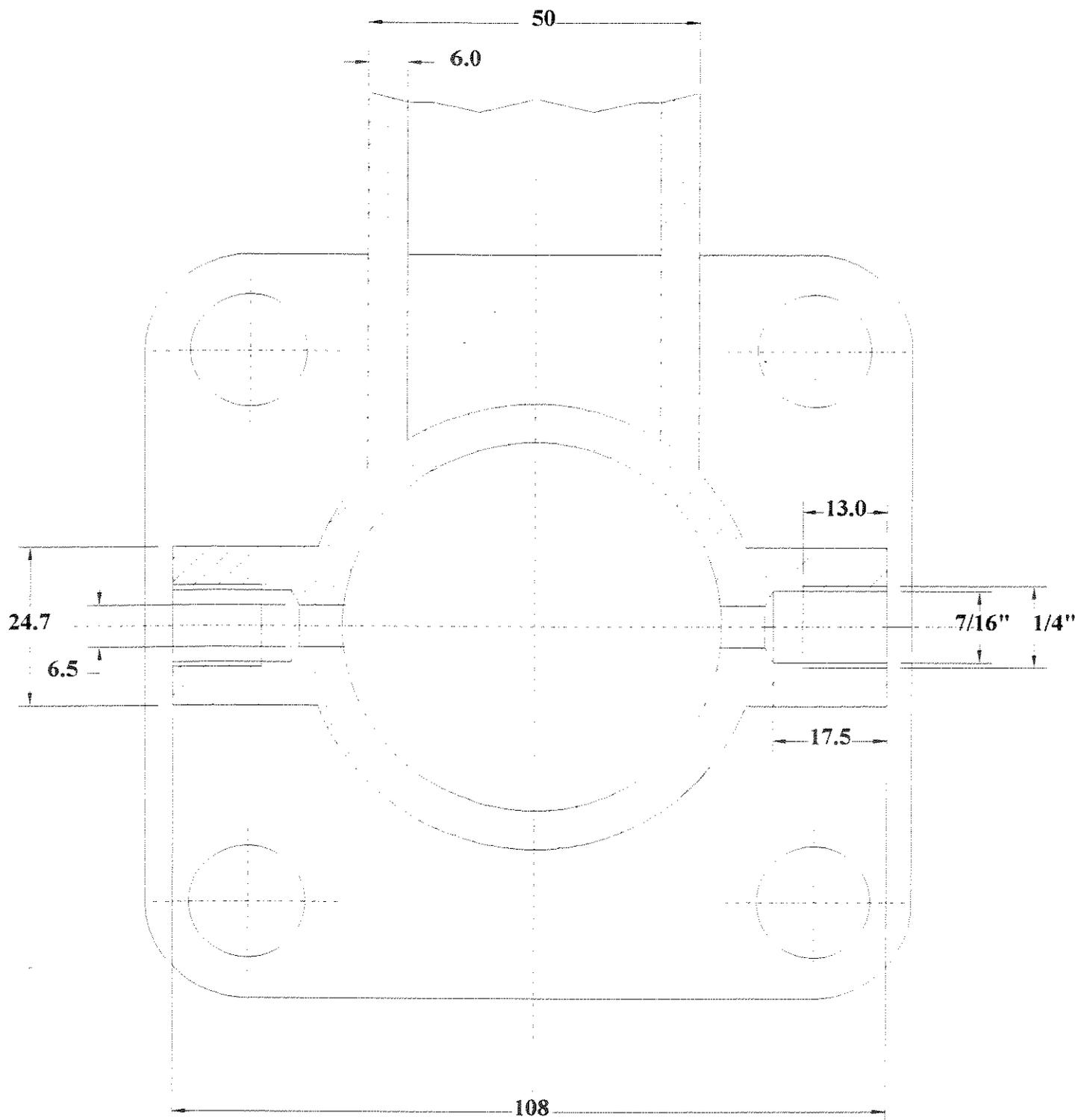


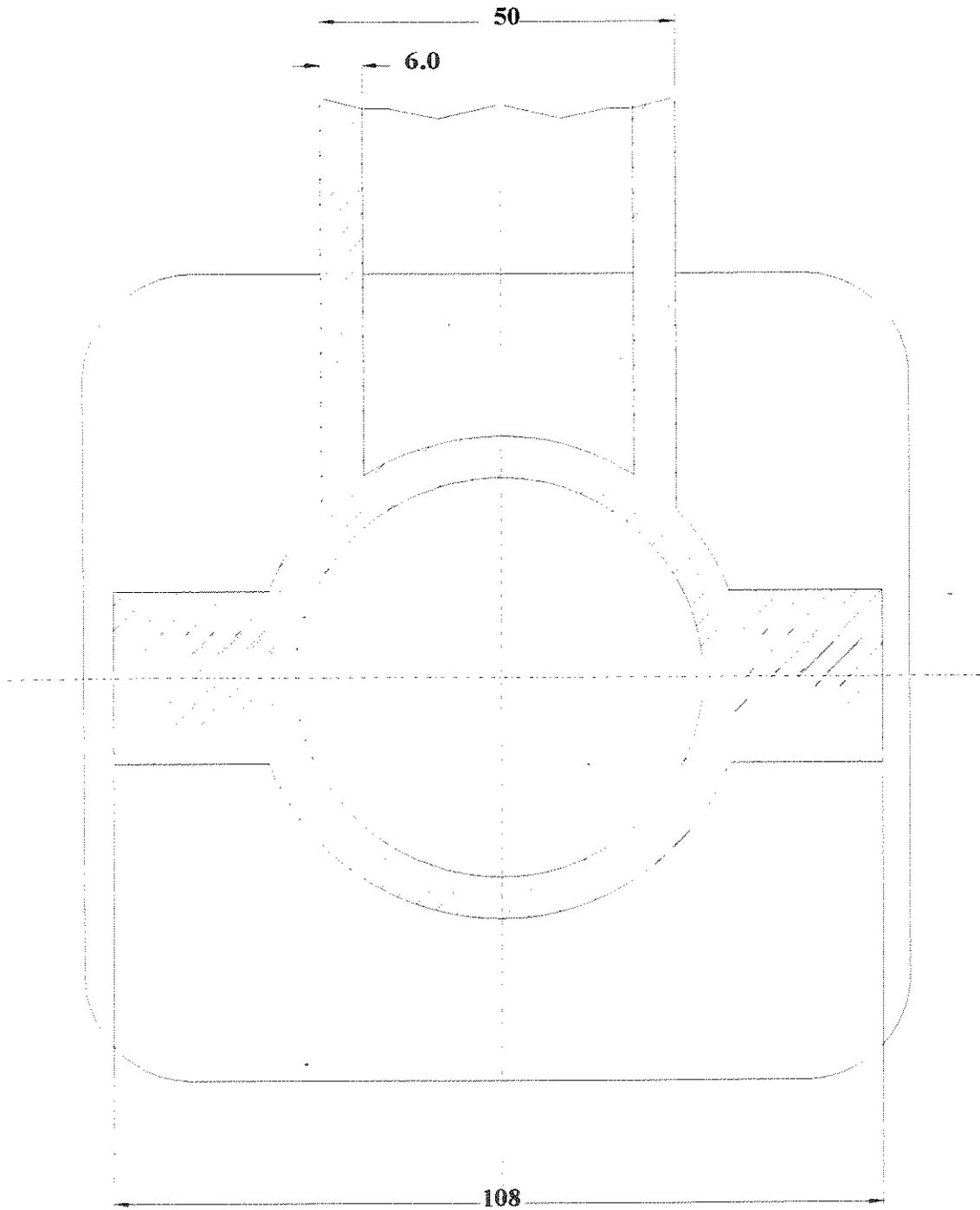
Figura 5.34.B - CORPO ELIMINADOR DE AR

Vista: CORTE A-A

Empresa: LITEMA

Material: Aço Inox

Projeto: Fundição



Para uma melhor ilustração, a peça anterior é apresentada em três vistas tridimensionais representativa a Figura 5.35.

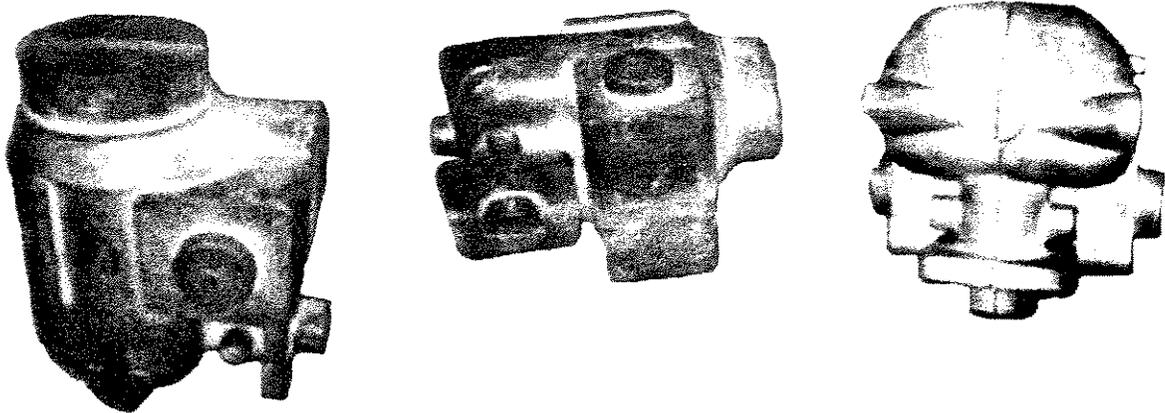


Figura 5.35 - Vistas Tridimensionais da Peça de Referência fornecida pela LITEMA - Comércio e Indústria de Ligas Técnicas e Materiais Ltda.

Os pontos de sensoriamento aplicados a esta peça é dado na vista da Figura 5.33.B, e sua representação em termos dimensionais é vista na Figura 5.36.

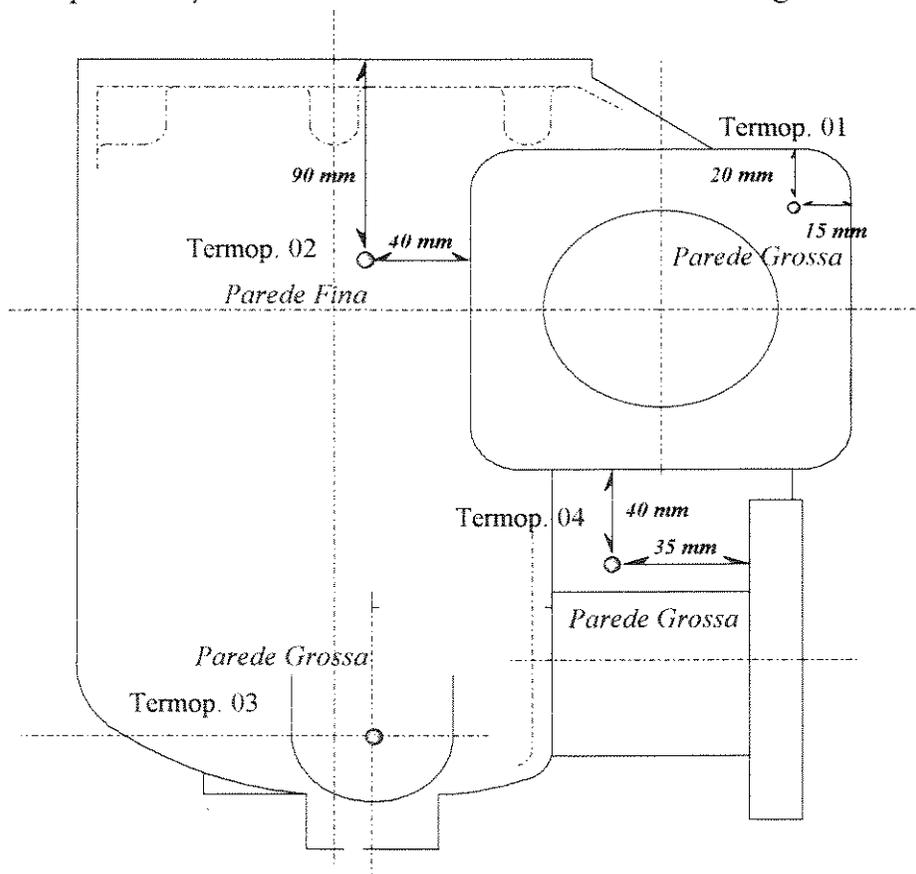


Figura 5.36 - Pontos de monitorização térmica aplicado a peça de referencia fornecida pela LITEMA - Comércio e Indústria de Ligas Técnicas e Materiais Ltda.

5.2.2.1 Elementos de Ensaio

A aferição do modelo dentro do plano industrial, equívale a uma realidade de trabalho consideravelmente diferente da apresentada para a aferição do mesmo com ensaios desenvolvidos em laboratório, pois nesta não tem-se a liberdade de incrementações de ensaios em tipos ou características que se adequem aos objetivos do experimento. A realidade industrial é fechada em relação a sua rotina produtiva, desta forma deve-se compatibilizar o objetivo do ensaio experimental a esta rotina produtiva. Assim faz-se neste item uma exposição descritiva dos experimentos desenvolvidos neste novo ambiente de trabalho, onde apresenta-se com detalhes as características envolvidas a cada tipo de experimento.

Os termopares envolvidos na aferição industrial são do "Tipo R" - (Platina-13% Ródio/Platina), pois este tipo de termopar é recomendado para atmosferas com vapores metálicos, e principalmente pelo fato destes apresentarem boa precisão em temperaturas elevadas, e sendo que os materiais utilizados nos ensaios práticos serão o Aço-Inox (Liga CF-8M : 19Cr-10Ni-2.5Mo) com temperatura de fusão em 1400 °C e o Ferro Cinzento Comum com temperatura de fusão de fusão em 1250 °C (ambos os materiais encontram-se com suas características físicas expostas no apêndice C). Na Figura 5.37, apresenta-se um foto com os termopares utilizados.

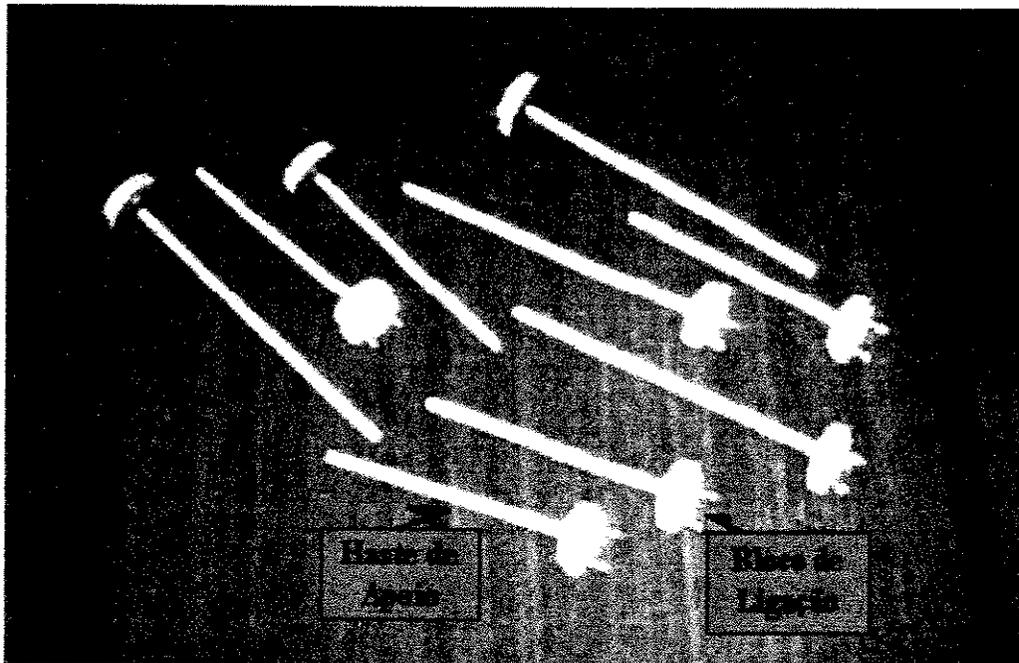


Figura 5.37 - Termopares "Tipo R" utilizados nos experimentos industriais

5.2.2.2 Verificação Experimental

A disposição física dos termopares no sistema após o fechamento do molde é vista na Figura 5.38, observe-se que o molde se encontra deitado nesta foto, onde a boca de vazamento está localizada na lateral direita deste.



Figura 5.38 - Disposição física dos termopares após o fechamento do molde

Apresentamos também uma foto (Figura 5.39) detalhando o momento do vazamento no respectivo ensaio, com a temperatura do metal líquido medida em 1580 °C.

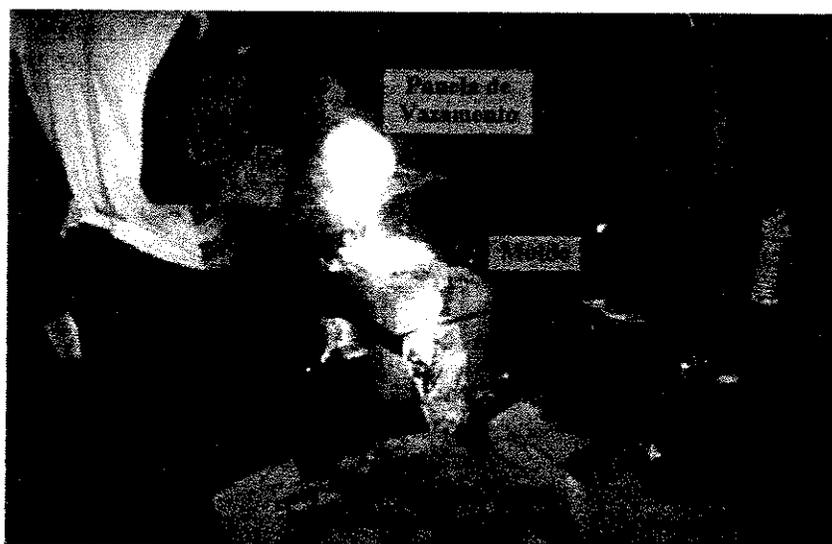


Figura 5.39 - Detalhe do momento de vazamento do metal líquido no molde

LITEMA - Comércio e Indústria de Ligas Técnicas e Materiais Ltda

5.2.2.3 Resultados de Ensaio (Simulação e Experimental)

Conforme pode ser visto na Figura 5.36, tem-se 4 (quatro) termopares de ensaio instalados. Infelizmente neste experimento 3 (três) termopares não suportaram a temperatura de vazamento e abriram (quebraram) perdendo-se assim seus respectivos registros. Devido à complexidade da realidade de trabalho da indústria, não foi possível repetir o ensaio. Assim expomos o modelo e o mapa de modelo para o único registro de ensaio obtido referente ao termopar de número 01.

O modelo de aplicação foi desenvolvido sobre as regiões setoriais de captura de dados do sistema real de fundição. Neste as malhas do Método de Diferenças finitas mostraram-se facilmente aplicáveis. O mapa de modelo referente a região localizada do termopar de número 01, é dado pela Figura 5.40.

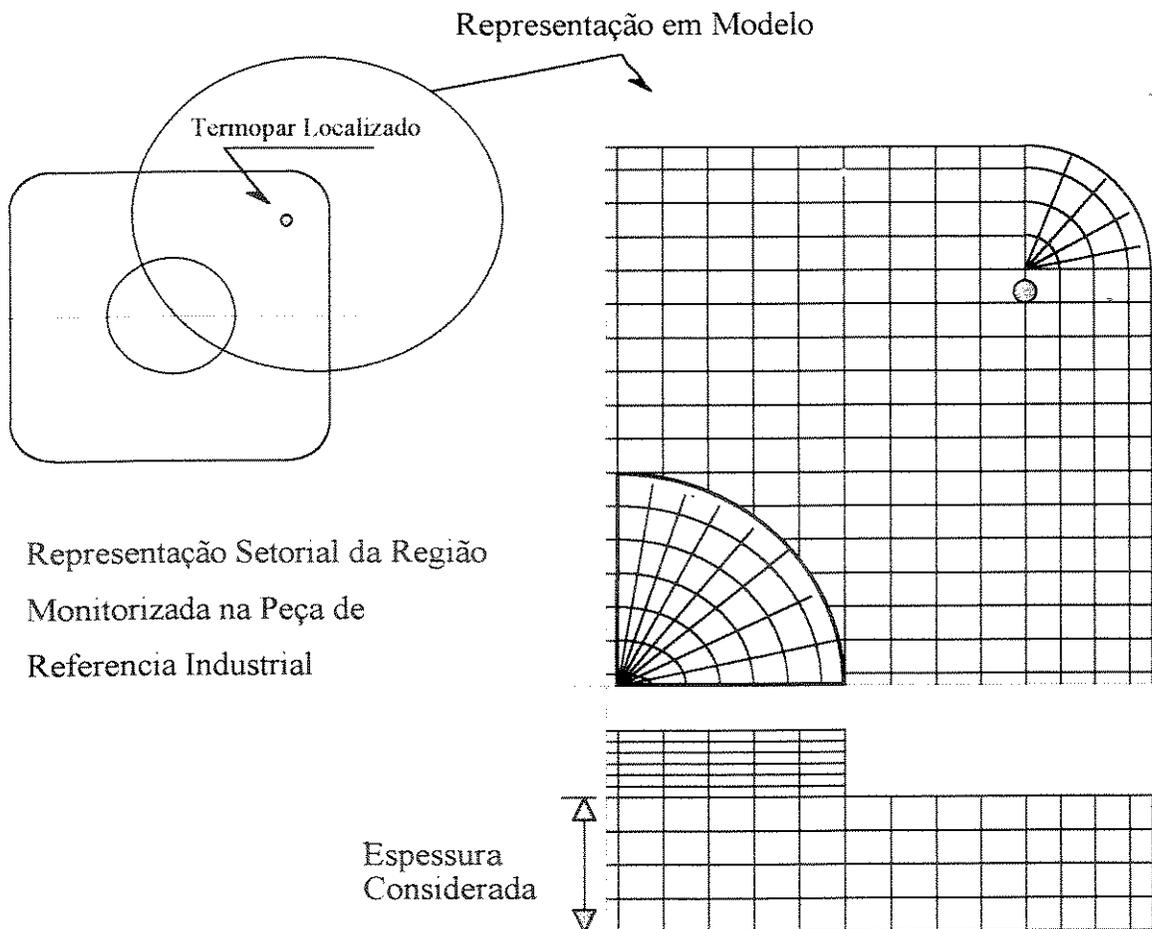


Figura 5.40 - Mapa de modelo aplicado a peça de referência fornecida pela LITEMA - Comércio e Indústria de Ligas Técnicas e Materiais Ltda.

Os resultados obtidos no ensaio real e no ensaio de modelo são comparados, conforme observa-se na Figura 5.41. Novamente o modelo mostra-se consistente com a realidade física, representando de forma clara as curvas de resfriamento do processo.

Observa-se na Figura 5.38, na qual apresenta-se o sistema com o molde fechado e anterior ao vazamento, um molde fabricado em areia com resina sendo que as características físicas deste material não são conhecidas. Lançou-se mão de um modelo representando um sistema de fundição, onde a resistência térmica do molde é inserida no coeficiente de resfriamento (h_{cRef}). Deste modo o sistema de modelo pode simular qualquer consideração de resfriamento na interface metal/meio, sendo este elemento incluído no efeito de resfriamento do sistema. Um cálculo estimado do valor de ' h_{cRef} ' é dado pela seguinte expressão:

$$\frac{1}{h_{cRef}} = \frac{1}{h_{cMol/Met}} + \frac{1}{h_{EspMolde}} + \frac{1}{h_{cMol/Meio}} + \Delta \quad (5.50)$$

onde:

h_{cRef} = Coeficiente global de transferência de calor da superfície do metal até o meio ambiente;

$h_{cMol/Met}$ = Coeficiente de convecção 'Newtoniano' na interface molde/metal;

$h_{Esp.Molde}$ = Coeficiente de transferência de calor na espessura efetiva do molde;

$h_{cMol/Meio}$ = Coeficiente de convecção 'Ambiente' na interface molde/meio ambiente;

Δ = Erro (consideração de elementos não equacionados, que afetam o coeficiente global de transferência de calor);

Para a Equação 5.50, pode-se considerar o fato de que ' $h_{cMol/Met}$ ' e ' $h_{cMol/Meio}$ ' correspondem a valores elevados quando comparados com ' $h_{cEspMolde}$ ', assim sendo esta equação será bem representada pela simplificação dada por:

$$\frac{1}{h_{cRef}} \cong \frac{1}{h_{EspMolde}} = \frac{\xi_{Efet.doMolde}}{k_{Molde}} \quad (5.51)$$

onde:

$\xi_{Efet.doMolde}$ = Espessura efetiva do molde, que atua na transferência de calor do sistema [m];

k_{Molde} = Condutividade térmica do material de molde [W/m.K];

Para moldes de areia a condutividade térmica é dada na ordem de $0,8 \text{ W/m.K}$ [Kubo-1985], e a espessura efetiva do transporte de calor na parede do molde para o respectivo ensaio, deve ser estimada como uma função do tempo de monitorização do experimento, sendo que esta não representa na realidade toda a espessura física da parede do molde, mas apenas uma parcela que sofre a variação de temperatura, colaborando para a retirada de calor do sistema. O Apêndice "D" apresenta com detalhes o cálculo estimado deste parâmetro, sendo que este apresenta um valor numérico de $h_{\text{cref}} = 44 \text{ W/m}^2.\text{K}$.

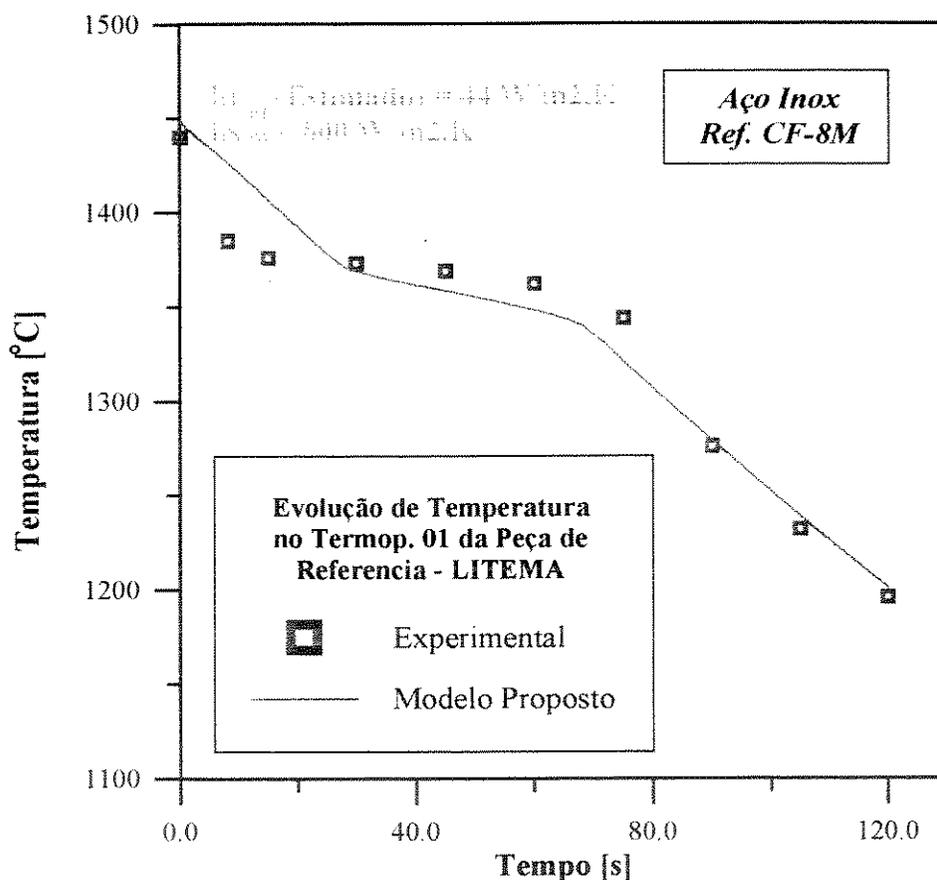


Figura 5.41 - Comparação das curvas experimental e modelo do resfriamento da superfície do metal

5.2.2.4 Discussão a Respeito da Aferição do Modelo

Conforme exposto no item 5.2.1.4 para a aferição do modelo aplicado em laboratório, é esperada uma diferença inicial na comparação dos resultados de modelo com os resultados experimentais, devido aos valores iniciais estimados para o coeficiente de transferência para a aplicação do modelo. Entretanto no ensaio realizado em laboratório, o modelo considerou o molde, sendo este também mapeado pela malha do Método de Diferenças Finitas.

Na realidade, o ensaio desenvolvido em laboratório tende a se adequar ao modelo permitindo ao operador a medida e o cálculo de quase todos os parâmetros envolvidos no sistema. Por outro lado na indústria nem sempre se conhece ou se pode medir todos parâmetros envolvidos no sistema completo de fundição, ficando mais complicado o trabalho do modelo numérico desenvolvido devido a necessidade de se estimar numericamente os valores dos parâmetros desconhecidos do sistema. Note-se na Figura 5.42, como a curva de resfriamento do elemento de medida na superfície do metal atinge diferentes condições de taxas de resfriamento com a variação do coeficiente de retirada de calor e da temperatura de vazamento.

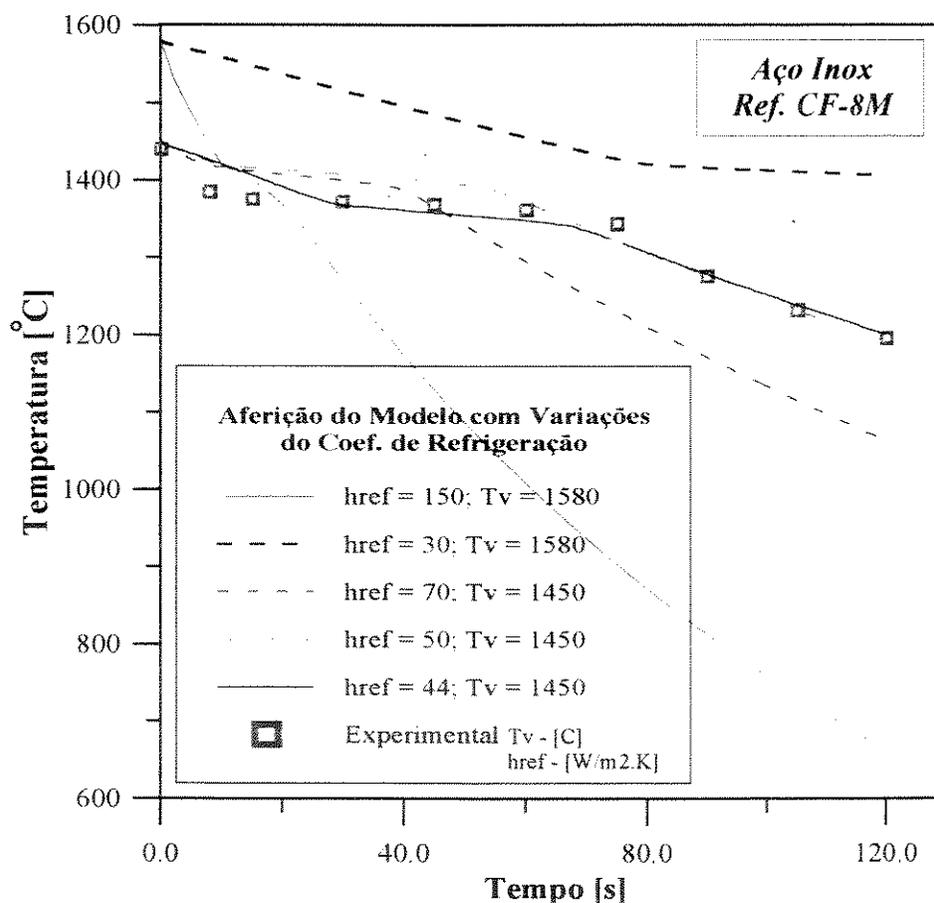


Figura 5.42 - Varredura em aferição para o sistema experimental da peça de referência fornecida pela LITEMA - Comércio e Indústria de Ligas Técnicas e Materiais Ltda.

5.2.3 - Ensaio em Peça Industrial (Peça de Referência Número 02)

A segunda peça de referencia é fornecida pela FASA-Zinser Industrial S.A.. Por motivos de não autorização da empresa, não apresentamos o projeto da peça, contudo mostramos vistas fotográficas da peça em sua tridimensionalidade e nestas destacamos os ponto de sensoriamento aplicados ao sistema. A Figura 5.43 expõe um perfil lateral onde observa-se uma peça de relativa complexidade tridimensional. Aplicou-se setorialmente aos pontos de sensoriamento o modelo desenvolvido, onde na Figura 5.44 nota-se um ponto de monitorização (Termopar n° 01) em uma das laterais da peça.

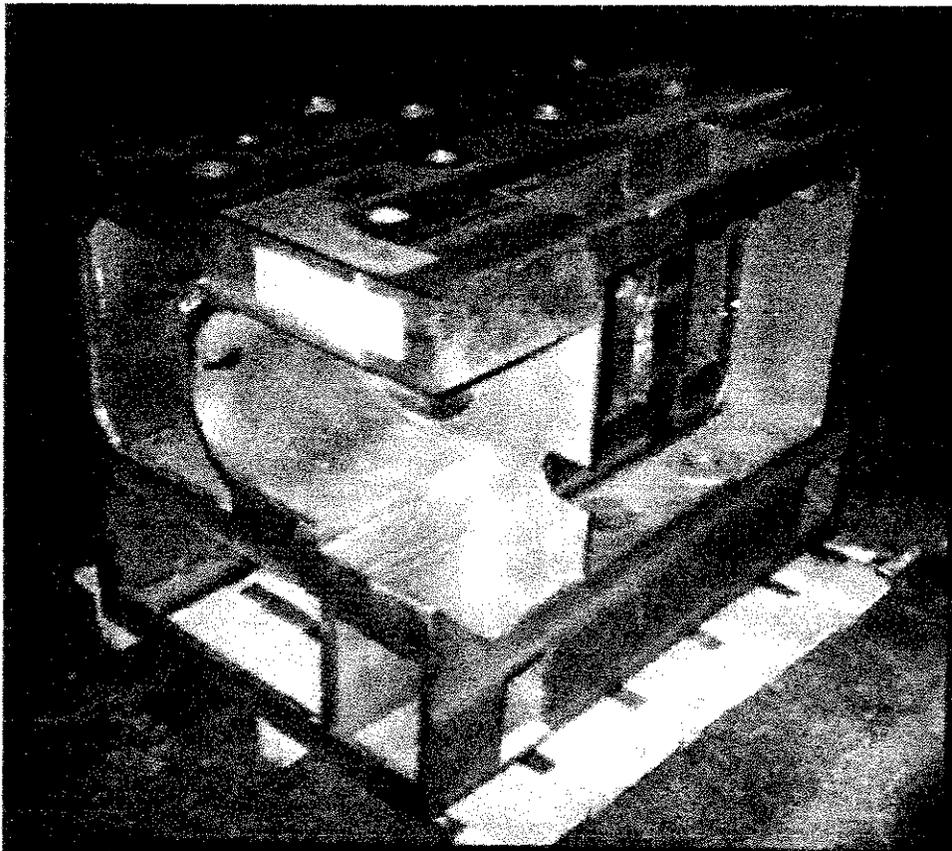


Figura 5.43 - Foto representativa do perfil lateral da peça de referencia fornecida pela FASA-Zinser Industrial S.A.

A Figura 5.45 apresenta uma lateral onde observa-se outro ponto de monitorização (Termopar n° 02), e a Figura 5.46 que expõe outra lateral onde identifica-se mais dois pontos de monitorização na peça (Termopares n°s 03 e 04). As Figura 5.47 e 5.48 apresentam mais duas vistas da peça em questão.

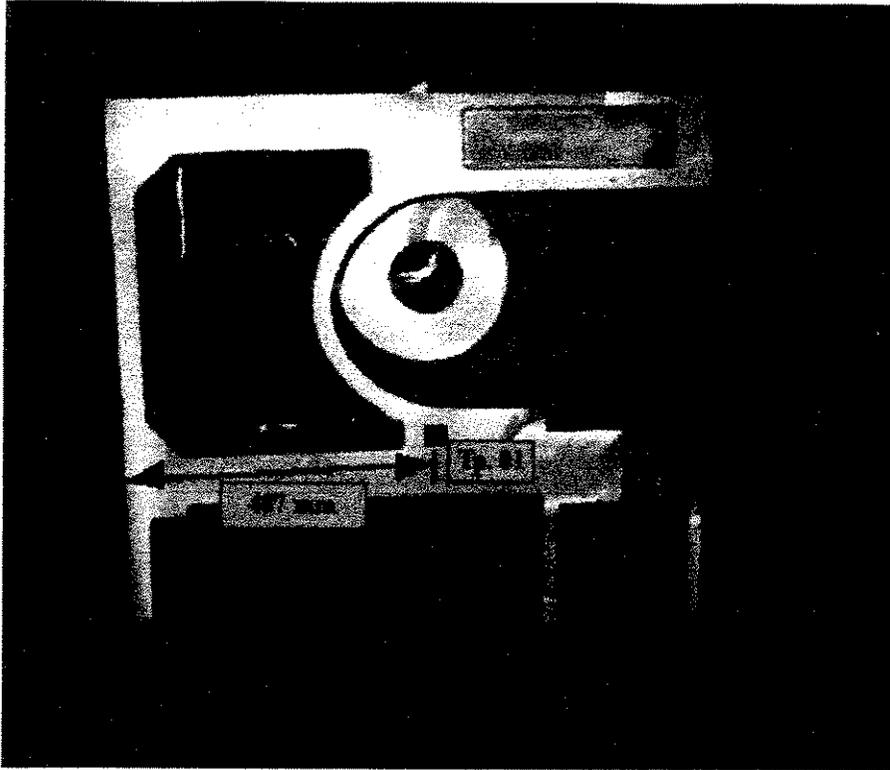


Figura 5.44 - Foto representativa da lateral da peça de referencia, com o ponto respectivo a localização de um termopar (Tp.01), fornecida pela FASA-Zinser Industrial S.A.

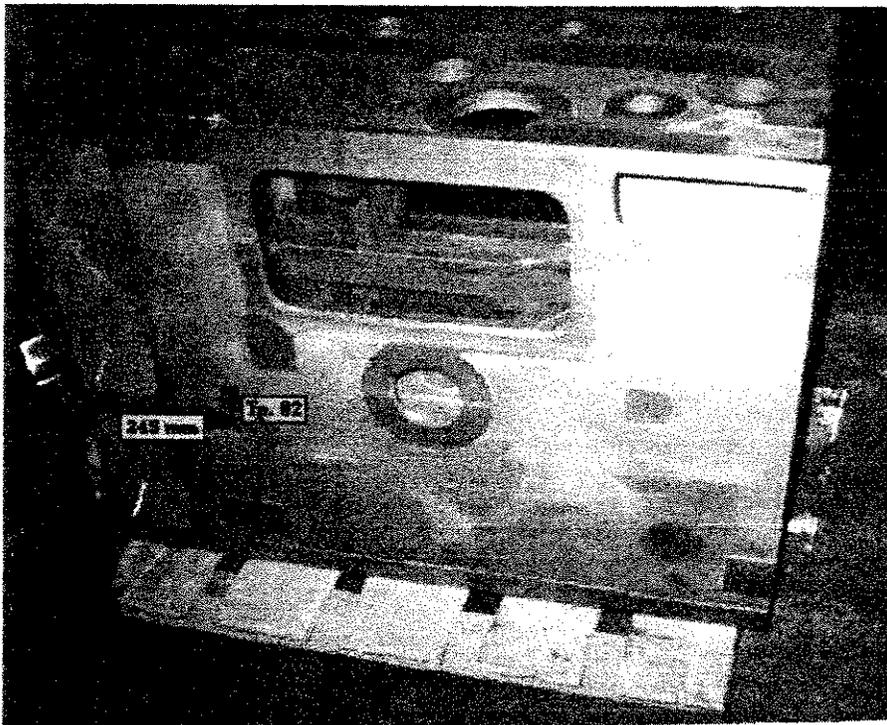


Figura 5.45 - Foto representativa da lateral da peça de referencia, com o ponto respectivo a localização de um termopar (Tp. 02), fornecida pela FASA-Zinser Industrial S.A.

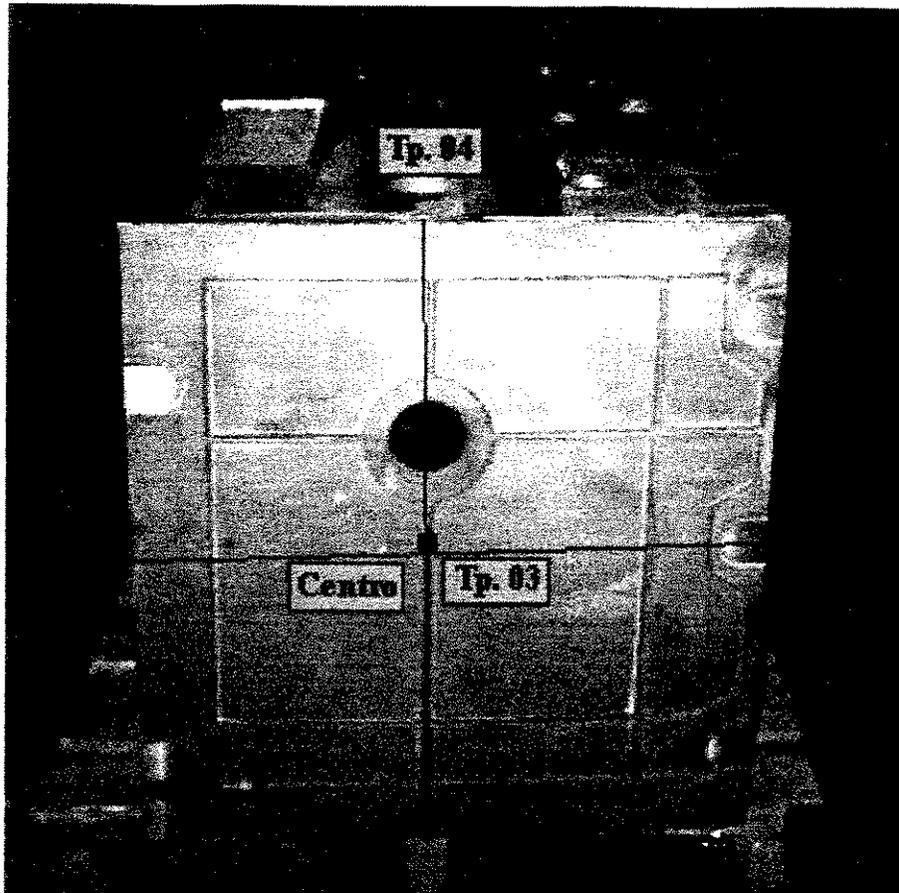


Figura 5.46 - Foto representativa da lateral da peça de referencia, com dois pontos respectivos as localizações de termopares (Tp. 3 e Tp. 4), fornecida pela FASA-Zinser Industrial S.A.

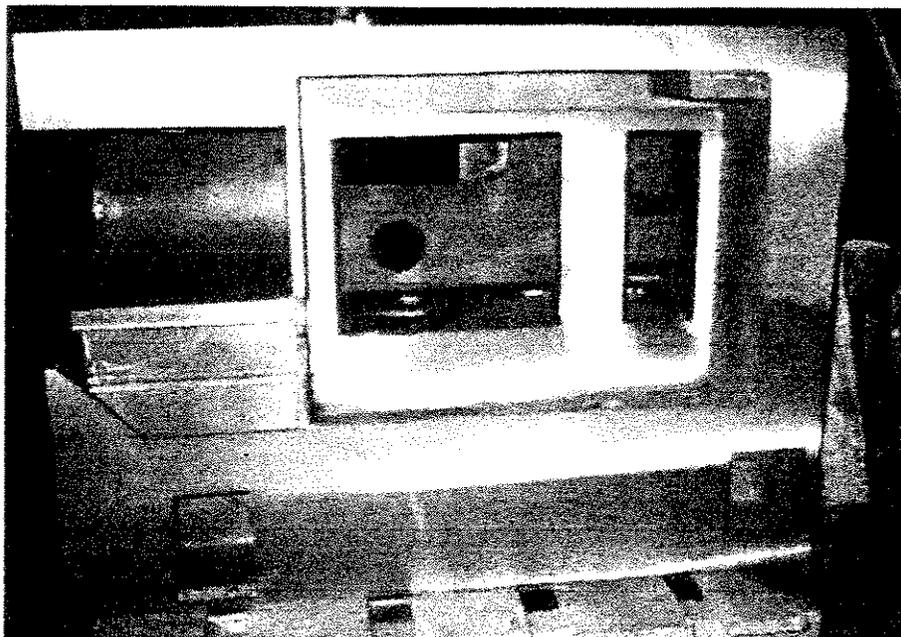


Figura 5.47 - Foto representativa de lateral da peça de referencia fornecida pela FASA-Zinser Industrial S.A.

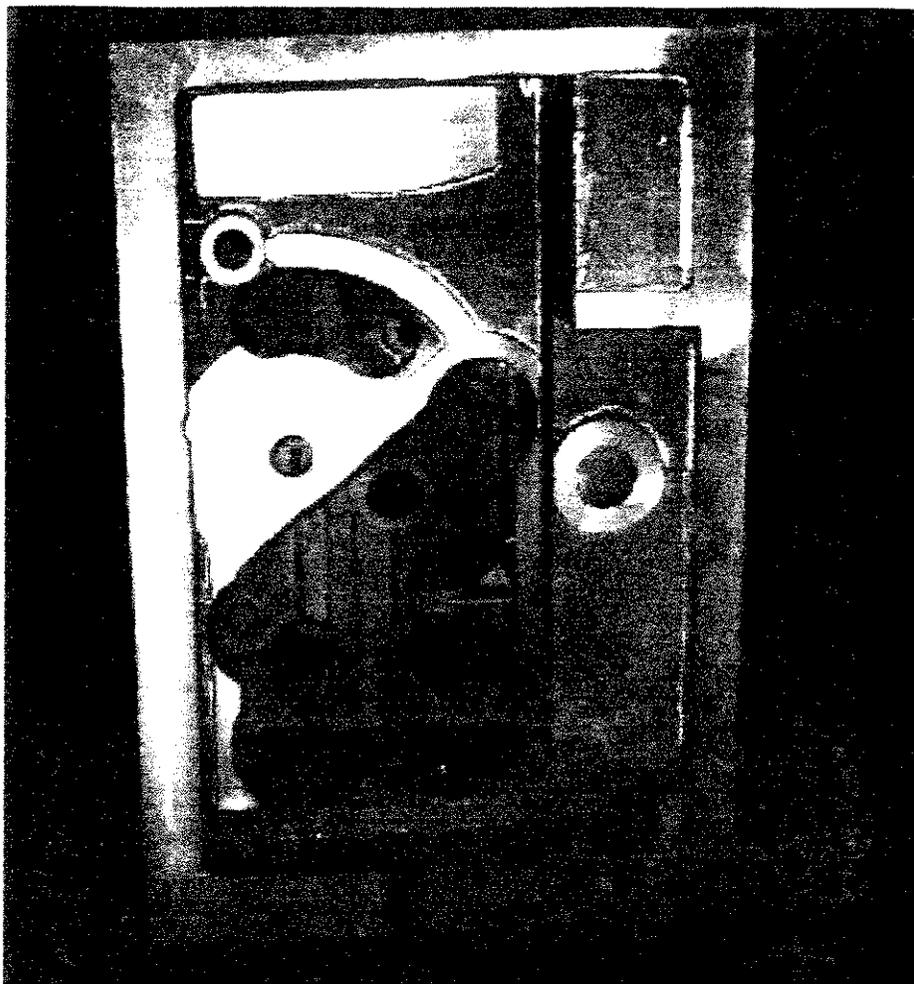


Figura 5.48 - Foto representativa do centro interno da peça de referencia fornecida pela FASA-Zinser Industrial S.A.

5.2.3.1 Elementos de Ensaio

Os elementos de ensaio representativos deste sistema correspondem aos elementos do molde (Bloco interno e externo) e a disposição dos termopares localizados neste. A Figura 5.49 apresenta uma vista do bloco interno do molde e a indicação neste dos pontos de sensoriamento. A Figura 5.50 aproxima o foco sobre o termopar de número 01 e a Figura 5.51 destaca o termopar de número 03. A Figura 5.52 apresenta o fechamento do molde com a tampa de lacre.

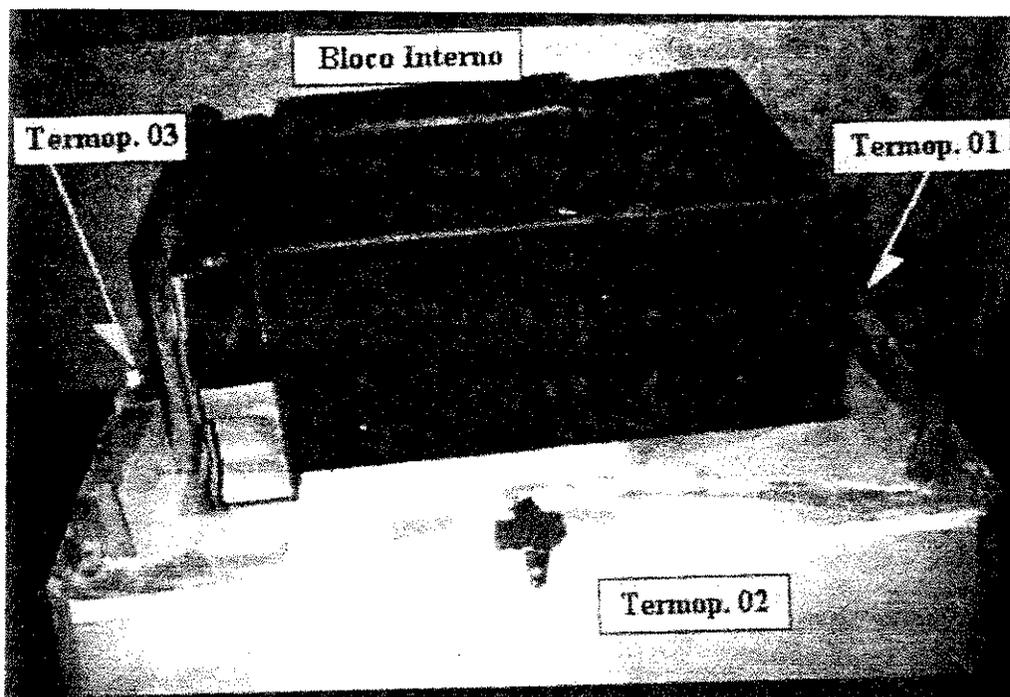


Figura 5.49 - Disposição interna do molde com a indicação da localização dos termopares

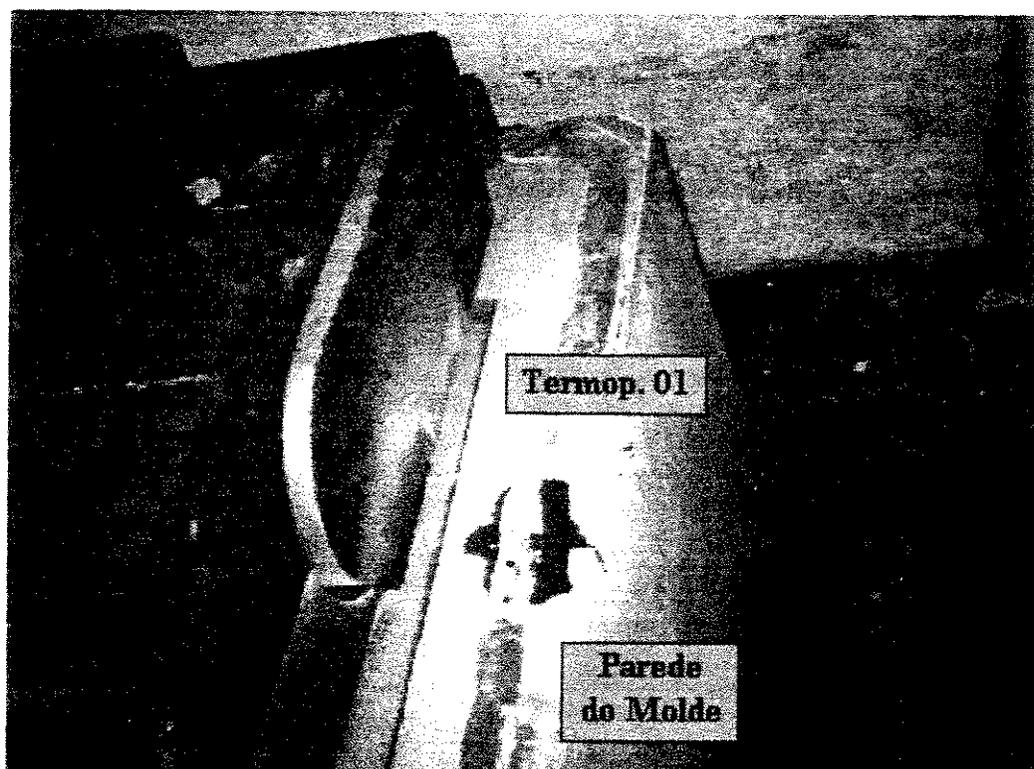


Figura 5.50 - Detalhe que destaca a posição do termopar de número 01

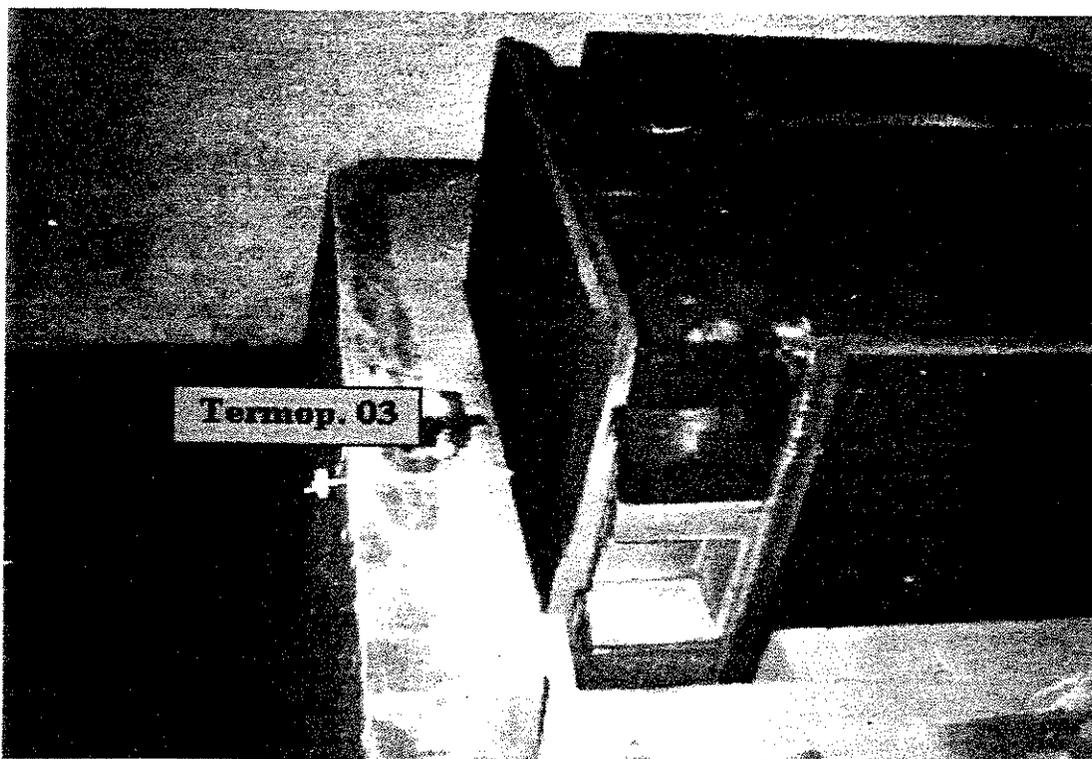


Figura 5.51 - Detalhe que destaca a posição do termopar de número 03



Figura 5.52 - Detalhe do lacramento do molde -FASA-Zinser Industrial S.A.

5.2.3.2 Verificação Experimental

Apresentamos neste item um detalhe do vazamento de metal líquido (Figura 5.53) no enchimento do molde, sendo registrado um tempo de enchimento completo em torno de 52 segundos e temperatura de vazamento na ordem de 1340 °C, sendo que o molde não sofreu pré-aquecimento. Os elementos de registro são vistos na Figura 5.54.

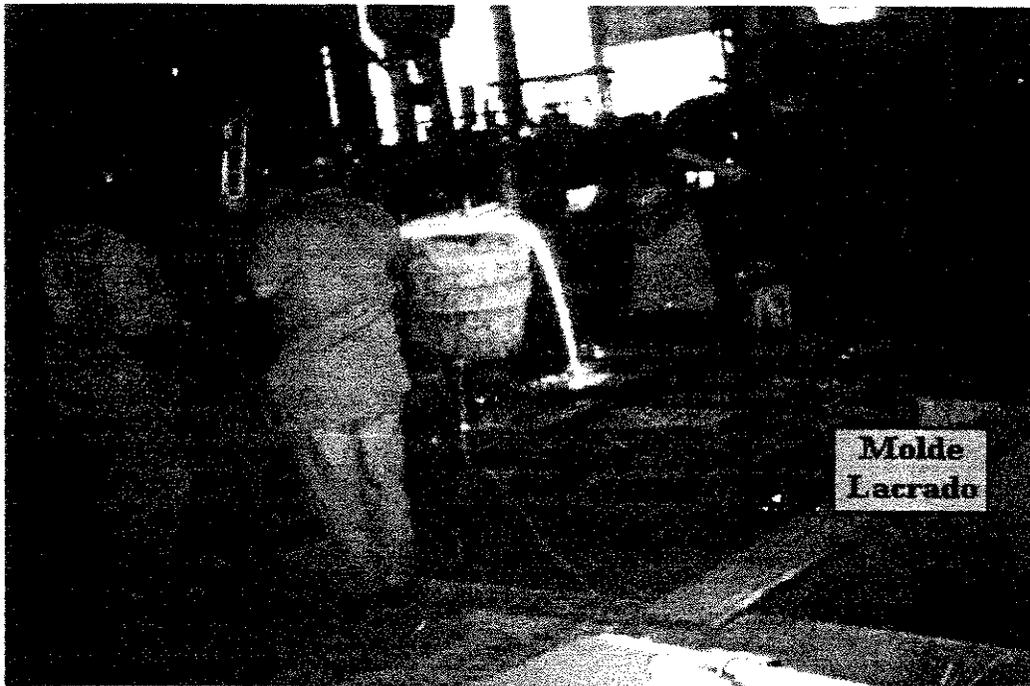


Figura 5.53 - Vazamento do metal líquido para o enchimento do molde

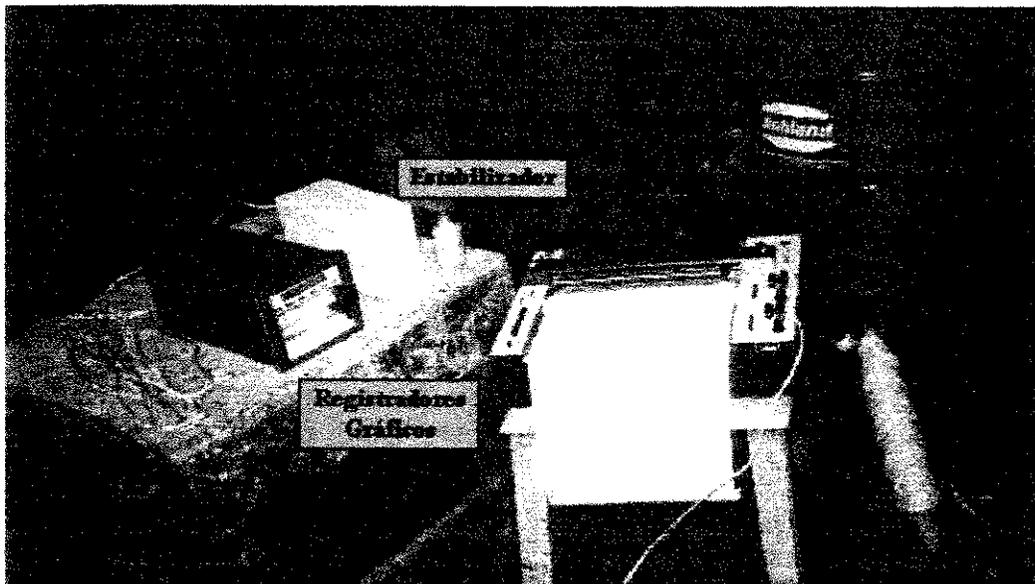


Figura 5.54 - Disposição dos elementos de registro utilizados no ensaio

5.2.3.3 Resultados de Ensaio (Simulação e Experimental)

Conforme relatado anteriormente, neste ensaio perdeu-se o registro de 2 (dois) termopares (Tp. 02 e Tp. 03). Assim expomos o modelo e o mapa de Diferenças Finitas para os pontos em questão, onde na Figura 5.55 tem-se o elemento de registro número 01.

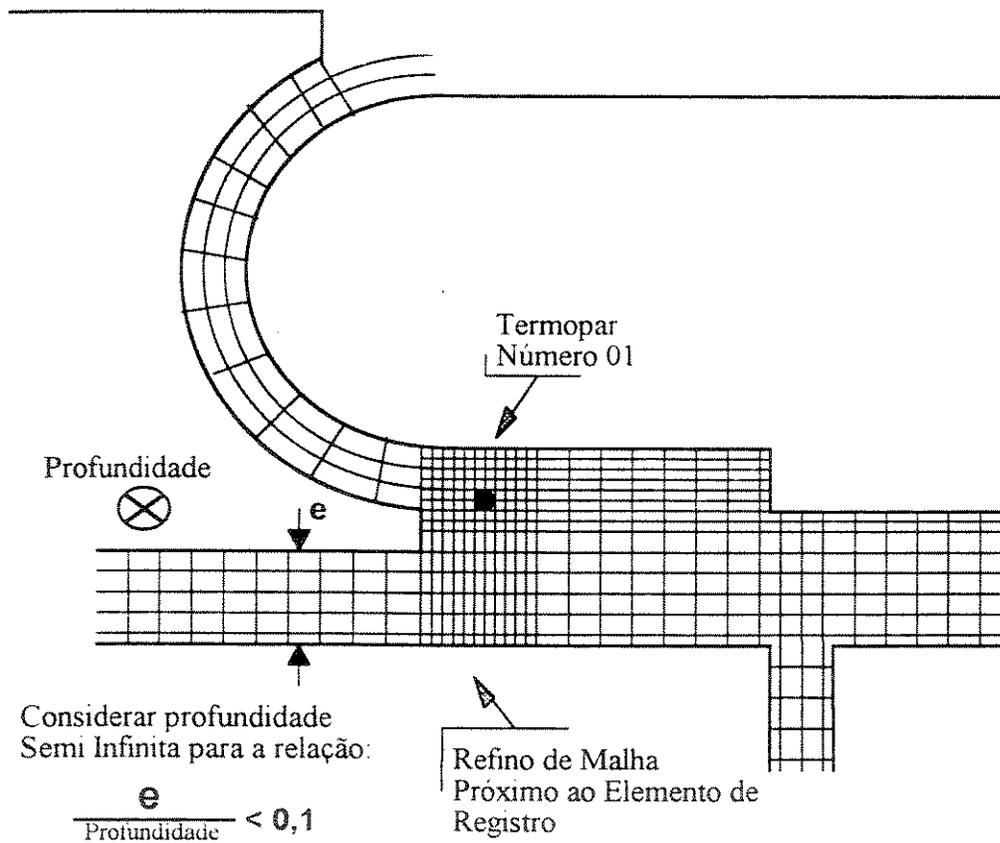


Figura 5.55 - Mapa de modelo aplicado a região setorial do termopar número 01 (Ver Ref. Fig. 5.44), na peça de referencia fornecida pela FASA-Zinser Industrial S.A.

Na Figura 5.56 apresentamos um esboço da face onde foi inserida o quarto termopar, observe que o desenho não se encontra com escala representativa, pois como narrado anteriormente, não fomos autorizados pela referida empresa a divulgar o projeto desta peça. Contudo a Figura 5.56 serve de base para a elaboração da rede numérica do Método de Diferenças Finitas, conforme apresentado na Figura 5.57.

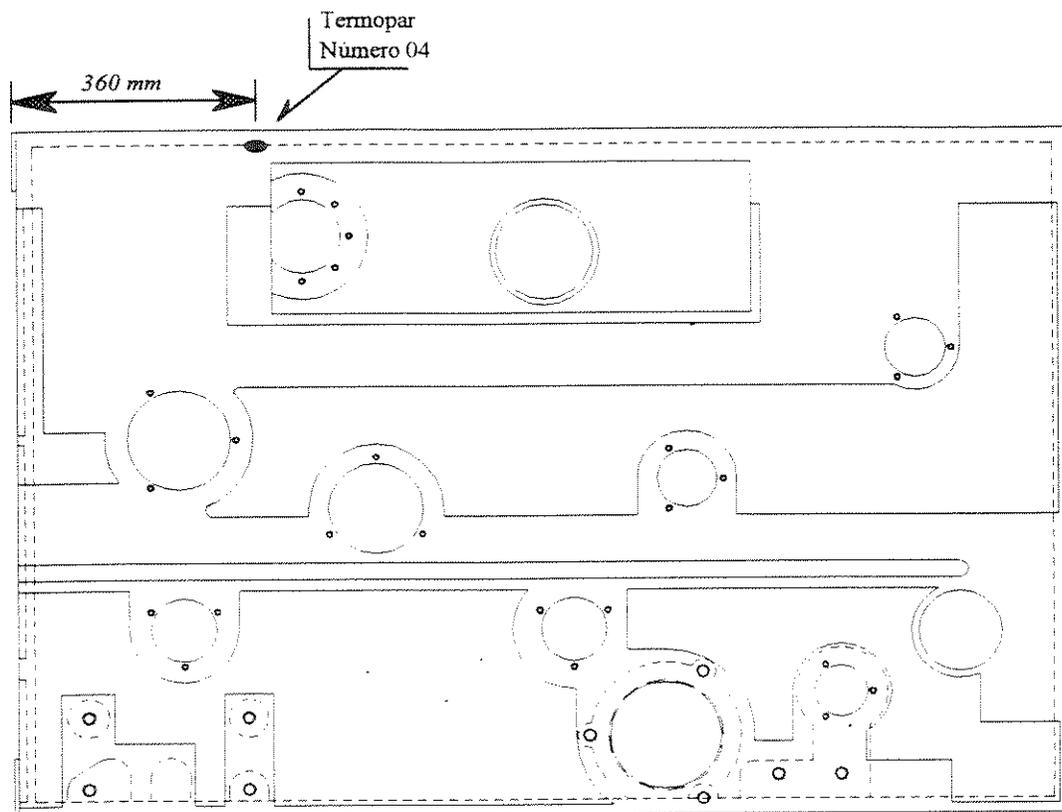


Figura 5.56 - Esboço representativo da parede que recebe o termopar número 04, referencia fornecida pela FASA-Zinser Industrial S.A.

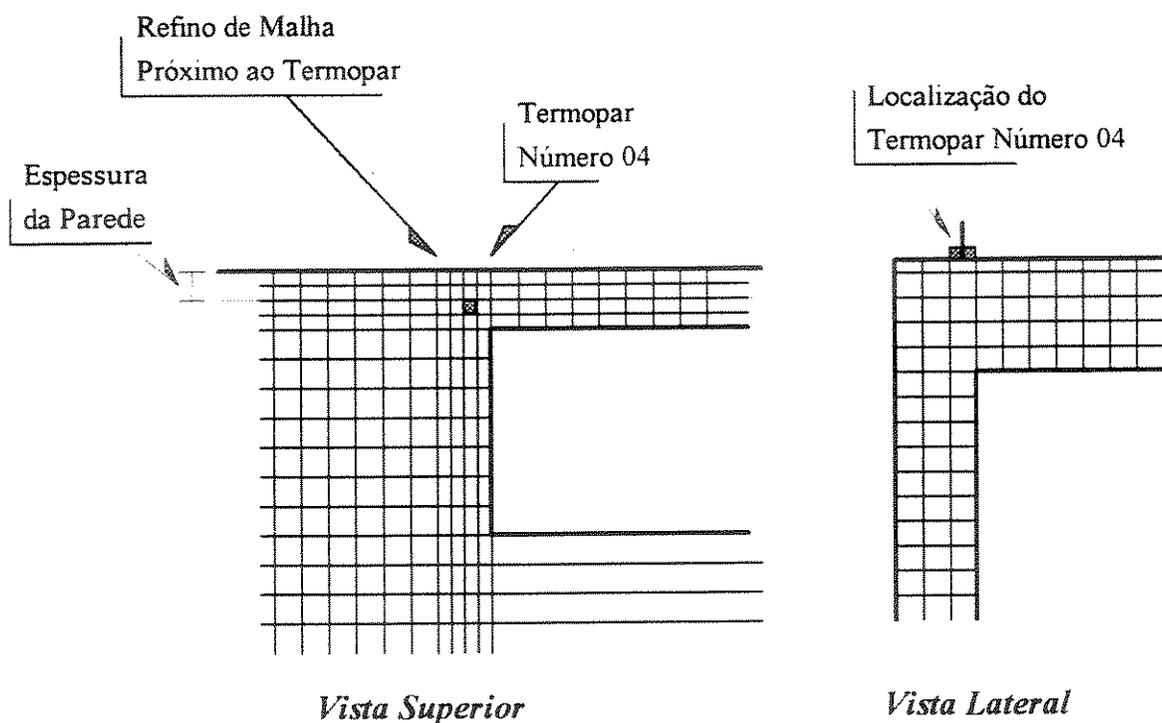


Figura 5.57 - Mapa de modelo aplicado a região setorial do termopar número 04, na peça de referencia fornecida pela FASA-Zinser Industrial S.A.

Na Figura 5.58, apresenta-se as curvas comparativas entre o modelo proposto e os resultados experimentais para os termopares de número 01 e 04. Observe que o modelo interage muito bem com a realidade física do processo, sendo que o acompanhamento da mudança de fase em modelo comportou-se bem utilizando-se a 'regra da alavanca' para a evolução da fração sólida. O resultado do valor estimado de $h_{c_{ref}}$ para a aferição do sistema foi de $h_{c_{ref}} = 23,6 \text{ W/m}^2.K$. O cálculo da estimativa deste valor foi realizado da mesma forma que o experimento anterior e é apresentado no 'Apêndice D'.

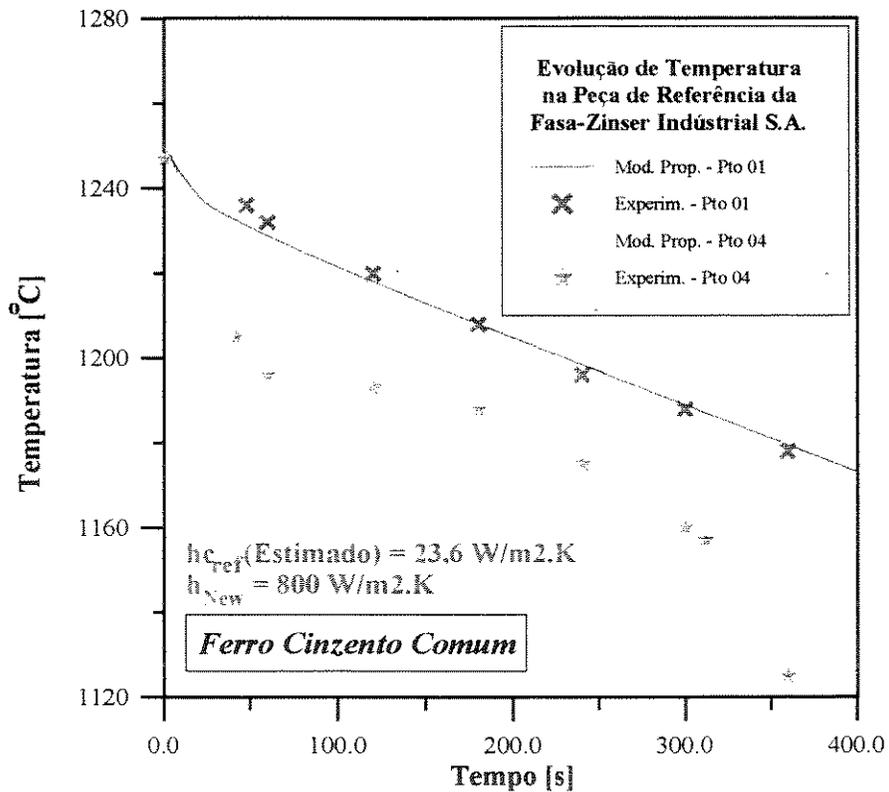


Figura 5.58 - Comparação experimental e teórica para os pontos de monitorização (Trp. 01 e Trp 04), da peça de referência fornecida pela Fasa-Zinser Industrial S.A.

Capítulo 6

A Técnica para a Elaboração de Projeto Qualificado

Um sistema completo de solidificação, incluindo as características de molde, metal fundido, lubrificantes utilizados, além de todas as condições de contorno do processo global, como temperatura de vazamento do metal, características geométricas do molde, pré-aquecimento, refrigeradores, isolamento de molde, localização das bocas de enchimento do molde e tempo total de enchimento devem ser analisados de maneira única uma vez que todos os fatores se combinam produzindo os efeitos finais na micro e macro estrutura da peça de produção. Entretanto esta análise global e unificada de todas as variáveis envolvidas no ensaio, se dá de maneira relativamente complexa, uma vez que a modificação de uma variável pode afetar sensivelmente a influência exercida pelas outras variáveis do sistema. O estudo de numerosos pesquisadores, mostram a presença de uma forte preocupação sobre um casamento dos diversos fatores envolvidos no processo de solidificação, na tentativa de se elaborar equações capazes de prever as condições e características físicas de uma peça após sua desmoldagem, como função direta destas relações com as condições de contorno envolvidas no processamento.

Contudo, devido a complexidade das equações numéricas envolvidas bem como a extensiva quantidade de equações que devam ser resolvidas paralelamente, torna-se impossível a implementação de modelos numéricos de solidificação sem o auxílio direto de um equipamento de computador. Por outro lado a verificação do bom funcionamento destes programas sobre uma representação clara e conclusiva dos resultados finais obtidos no sistema real devem ser observados, podendo a partir de então permitir ao técnico responsável pela produção modificar ou reimplementar seus sistemas em função destes resultados obtidos na simulação do processo.

Ao longo deste projeto as visitas técnicas realizadas nas empresas de apoio ao trabalho, mostraram uma quantidade relativamente grande de problemas de aspecto produtivo,

enfrentado pelos técnicos metalúrgicos. É claro que nos referimos a empresas de pequeno porte, as quais conclusivamente tem um trabalho dificultado devido a falta de maiores recursos técnicos e/ou financeiros. Os programas de simulação tem o sentido de auxiliar estas empresas reduzindo custos de produção com aumento de qualidade das peças geradas. Como ilustração de um tipo de problema muito comum a estas empresas, temos o vazamento de uma peça de geometria relativamente complexa, apresentada na Figura 6.1.

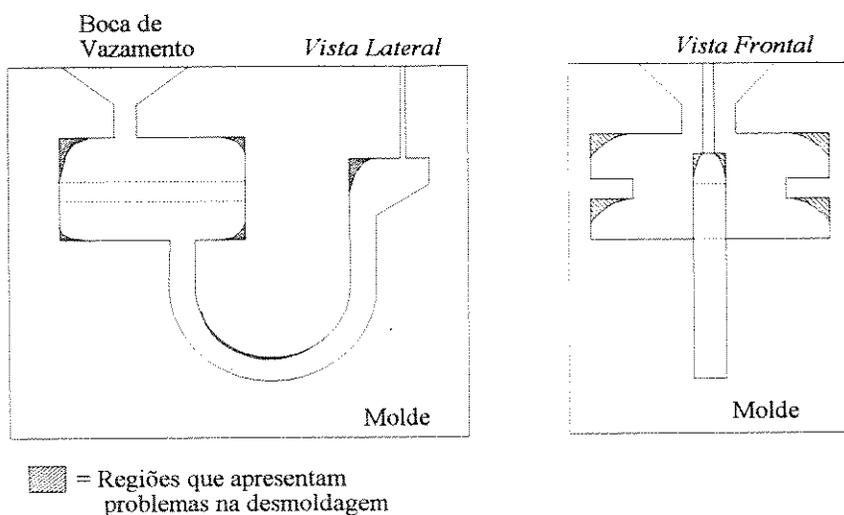


Figura 6.1 - Sistema Molde de Fundição

As regiões em destaque da peça correspondem a regiões críticas de enchimento, em geral apresentando problemas de bolhas ou grande concentração de escória na desmoldagem. Nos casos mais simples a usinagem pode ser a solução contudo, nos casos críticos, a peça é perdida. O tratamento empírico, muito comum nestas empresas, sugere que se reduza a viscosidade do metal líquido no vazamento para o enchimento global do molde. Esta redução da viscosidade é conseguida com o aumento da temperatura de vazamento. Um estudo mais amplo dos diversos fatores envolvidos no processo podem ser levantados facilmente com um programa de simulação, podendo apontar sugestões de melhoria de sistema de forma clara e significativa. Por exemplo, muitas vezes uma modificação no tipo de lubrificante utilizado no molde ou um pré-aquecimento controlado de molde, leva a uma alteração nas características da retirada de calor, podendo produzir o enchimento global do molde sem as desvantagens envolvidas na maneira anterior. Contudo esta respostas voltadas a um projeto qualificado do sistema de fundição só podem ser conseguidas com o apoio das ferramentas de simulação. Outro problema bastante comum entre os metalúrgicos consiste na análise dimensional, calculada sobre a taxa de contração do metal durante a solidificação. O preenchimento coerente de material líquido dentro do molde, e a garantia de que após solidificado não ocorram imperfeições devido ao problema dos vazios gerados pelo rechupe na contração do material, também pode ser analisado com o programa de simulação. Os pontos de entrada do metal líquido na geometria tridimensional da peça complexa consiste de outro tipo de

problema, que em geral possui difícil solução para os projetistas do processo metalúrgico, os quais aferem seus resultados com ensaios reais de enchimento de molde na dentro da própria linha de produção. Processo que exige tempo, gasto de material e perda desnecessária de potencial técnico. Um programa de simulação elaborado sobre análise qualitativa pode apontar os pontos de enchimento que melhor acomodarão o sistema físico real, gerando toda uma economia de processo, muitas vezes não calculada pelas empresas metalúrgicas.

A elaboração de sistemas eficientes e com custos de produção minimizados, tem sido o foco principal da geração dos programas de computador para a posterior correção dos defeitos causados na linha de produção sem que haja a necessidade de implementações do tipo "*tentativa e erro*", sendo que este tipo de procedimento toma muito tempo e principalmente o ônus associado. As relações técnicas para o perfeito casamento do modelo desenvolvido com os resultados obtidos nos experimentos realizados devem ser conhecidos no objetivo de aferir o modelo dentro das especificações funcionais de ensaio e a partir de então torna-se possível a utilização do modelo com funcionamento dentro de um programa de computador para a realização de simulações que levem a resultados aplicados. Estes resultados após uma análise servirão como base à reestruturação e reprogramação dos sistemas físicos envolvidos, levando estes a um trabalho ótimo dentro das especificações de qualidade aceitável e custo minimizado.

A pergunta a ser respondida neste tópico consiste na seguinte: Como um programa de computador, que simule um determinado processo de transferência de calor e eventual solidificação de um material metálico no interior de um molde, pode responder a questões de âmbito funcional ao equipamento físico real, levando este a uma produção otimizada do produto semi-acabado ?.

Em primeira análise devemos nos concentrar sobre quais tipos de problemas, envolvidos no campo técnico do sistema de fundição, tem-se interesse em conhecer. Por exemplo, um problema muito comum consiste nas imperfeições macroestruturais, que aparecem na peça após a desmoldagem. Estas imperfeições em geral são causadas pelo enchimento inadequado do molde conforme narrado anteriormente, e as bolhas superficiais devido a este vazamento incorreto podem danificar a peça a ponto de considerá-la efetivamente perdida. Alguns pontos internos ao molde podem apresentar certas complexidades geométricas que dificultem a penetração total do metal líquido gerando regiões de falhas irreparáveis, conforme pode ser visualizado pela Figura 6.2. Este tipo de defeito em geral esta associado a viscosidade do metal líquido, quando no enchimento do molde, e a viscosidade por sua vez equivale a um parâmetro diretamente associado a temperatura do metal. Cálculos iniciais podem prever com exatidão a viscosidade do metal para o enchimento completo da peça e, em função desta pode-se saber qual a temperatura mínima necessária que o metal líquido deve possuir nestas regiões críticas da peça. O modelo numérico, tem a capacidade de simular todo o processo, desde o

vazamento do metal até o enchimento total do molde e sua eventual desmoldagem, sendo que este pode responder com exatidão quais características devem ser envolvidas para a coerência do produto acabado.

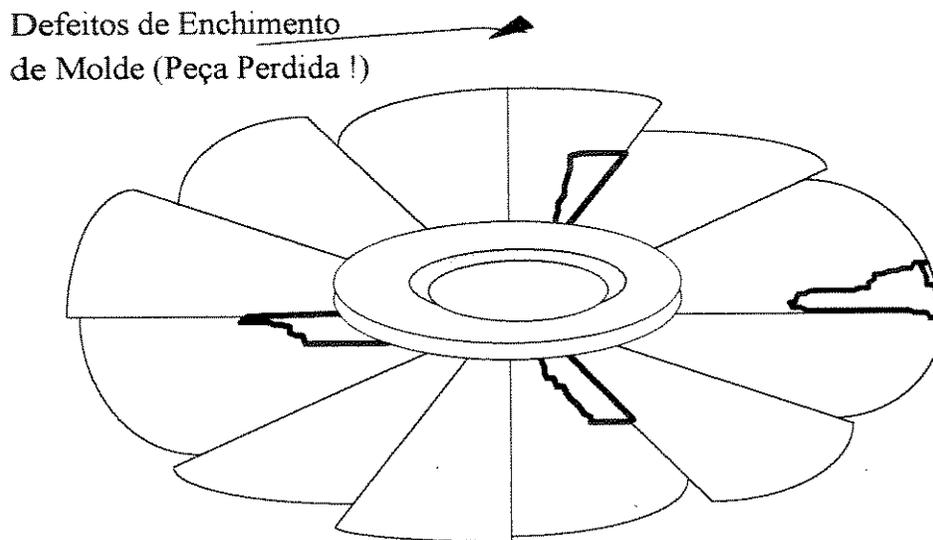


Figura 6.2 - Esquema de uma hélice de Aço Inox, perdida devido ao defeitos de mau enchimento de molde

Em outras palavras o modelo pode responder a questões do tipo:

- ❶ A temperatura de vazamento do metal líquido pode ou deve ser aumentada ?
- ❷ As regiões da peça, que sofrem o problema dos defeitos devem receber um pré-aquecimento ? , e qual o valor mínimo deste pré-aquecimento ?
- ❸ O projeto das entradas de vazamento do metal líquido no molde devem ser modificadas ?

Assim o custo envolvido pela produção para resolver tal problema, não estará mais associado a técnica de "*tentativa e erro*", sendo que produtos de qualidades superiores poderão ser gerados com maior facilidade.

Outro problema comum encontrado na desmoldagem de peças semi-acabadas, consiste no arraste de escória ou bolhas superficiais (Ver Figura 6.3). Apesar destes problemas terem origens diferentes a solução para os dois casos é a mesma. As bolhas superficiais em geral tem causa na turbulência de vazamento do metal líquido no interior do molde; a escória esta associada a pureza do metal líquido que será vazado. Ambos os casos associam-se com a velocidade de avanço da frente de solidificação na interface sólido/líquido no interior do molde.

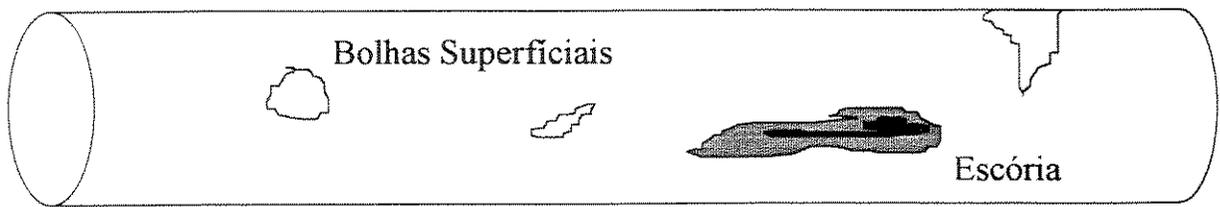
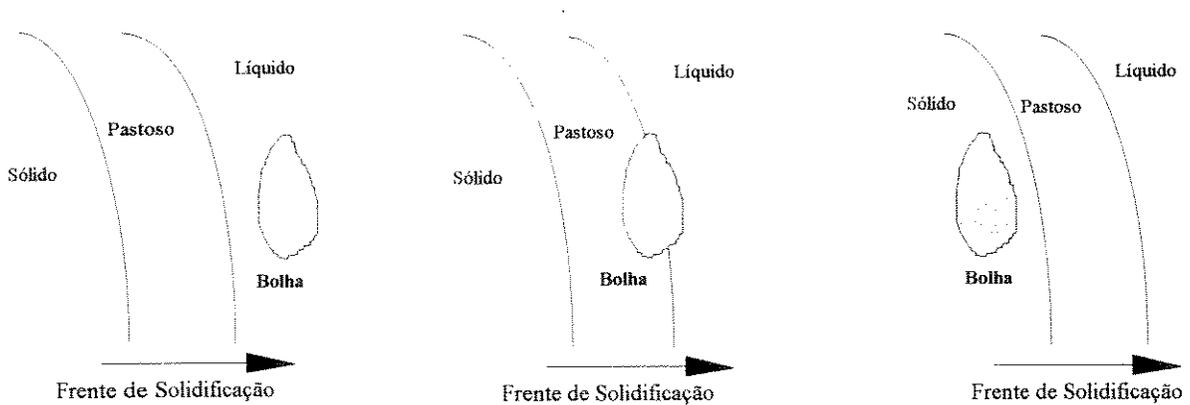
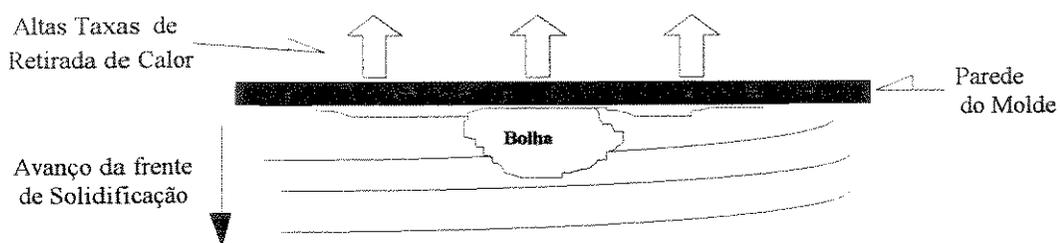


Figura 6.3 - Eixo com falhas superficiais - Não pode ser usinado, a peça é perdida.

Altas taxas de da retirada de calor do metal líquido pelo molde, resultam em uma frente de solidificação, a partir da interface molde/metal, muito rápida não permitindo que as bolhas de turbulência aderidas na superfície desloquem-se para o interior do metal, acompanhando a frente de solidificação. Estas, e também a escória são capturadas na dinâmica de solidificação, congelando suas posições, a Figura 6.4 esboça o referido processo.



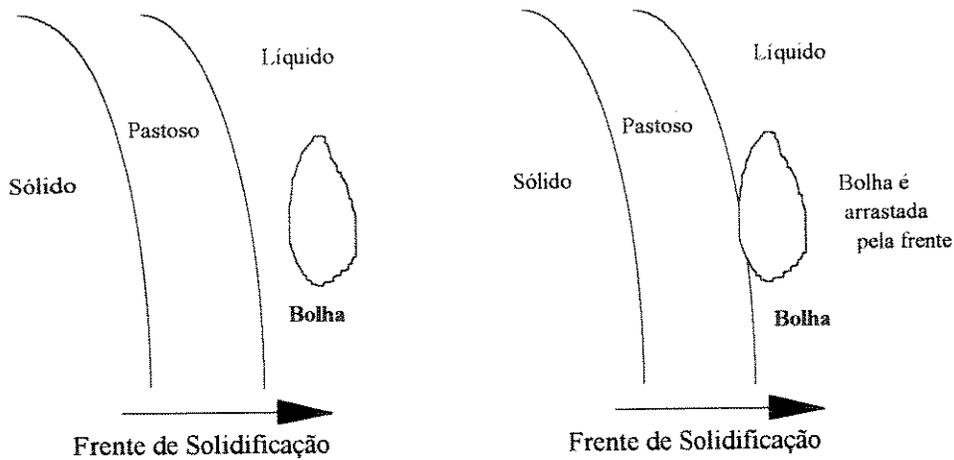
Mecanismo de captura de bolhas internas, pela frente de solidificação



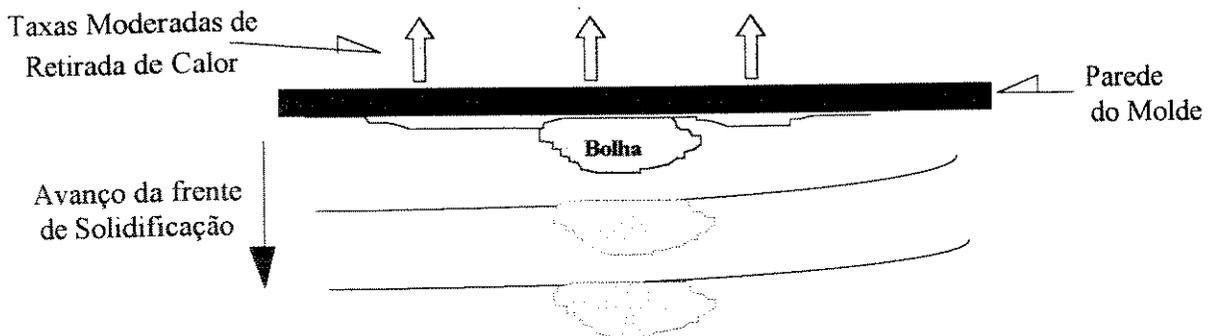
Mecanismo de captura de bolhas superficiais, pela frente de solidificação

Figura 6.4 - Processo de captura de bolhas internas e superficiais dentro do processo de solidificação

A solução deste problema é relativamente simples, pois basta alterar as taxas de retirada de calor do sistema para reduzir a velocidade da frente de solidificação na superfície da peça e permitir o deslocamento das falhas para o interior da peça, conforme ilustra a Figura 6.5.



Mecanismo de arraste de bolhas internas, pela frente de solidificação



Mecanismo de arraste das bolhas superficiais para o interior da peça

Figura 6.5 - Processo de arraste das bolhas internas e superficiais no processo de solidificação

Esta redução na taxa da retirada de calor pode ser feita com a modificação do material do molde ou com um pré-aquecimento controlado do mesmo antes do vazamento. Contudo a redução do resfriamento pode alterar consideravelmente a microestrutura superficial da peça e, neste caso, o modelo deve responder sobre os benefícios e deficiências deste procedimento.

Outra possibilidade de geração de projeto qualificado consiste no controle automático, que alguns tipos de sistemas permitem em sua estrutura. Esta equivale a uma das mais interessantes utilizações dos modelos numéricos de simulação dos sistemas físicos, onde embora a complexidade de controle de um determinado processo, consiste em dimensionamento mais custoso sobre o programa desenvolvido, os resultados finais são altamente satisfatórios. Suponha um determinado processo que sofra uma refrigeração controlada com bombas de pressão que alimentem o fluxo refrigerante do sistema e que a temperatura deste fluxo refrigerante deve estar contida dentro de determinadas faixas limites para o efeito ótimo do processo. Neste caso o controle manual é complexo além de ser

necessário elevada experiência do operador para manter tal controle. Com um equipamento automático realimentado "on-line" por um computador, o processo torna-se mais seguro e eficiente, garantindo assim produtos de qualidade melhorada.

Finalmente após a aferição do modelo para o sistema físico real, tem-se em mãos as condições de contorno e o valor quantitativo dos parâmetros físicos que atuam sobre o equipamento. Pode-se lançar mão destes valores para gerar simulações eficientes sobre o sistema de fundição, gerando assim o projeto qualificado. Em outras palavras, suponha que uma peça, após a desmoldagem, venha apresentar pontos de imperfeições localizada. Utilizamos o modelo para gerar programas que simulem o processo sobre estas regiões localizadas e posteriormente aferimos o programa atuando com a comparação dos resultados de modelo e dos resultados de ensaio de monitorização da evolução da temperatura, para algum ponto da peça que não sofra nenhum tipo de defeito. Esta monitorização é feita com o auxílio de termopares atuando como sensores. Esta comparação fornecerá os valores quantitativos de entrada do modelo numérico, valores que serão posteriormente utilizados para as simulações de efeito prático das regiões que oferecem problemas ao sistema. Estas simulações fornecerão resultados que permitirão ao técnico metalúrgico reajustar o equipamento físico em função da teoria apresentada anteriormente, gerando assim o projeto qualificado do sistema de fundição.

Finalizando o capítulo e as explicações técnicas apresentadas anteriormente para a elaboração de um projeto qualificado, com o apoio do programa numérico desenvolvido neste trabalho, expõem-se um fluxograma que representa os passos de interação entre as fases de trabalho, monitorizações necessárias e perguntas que o modelo numérico deve responder para o fechamento de um projeto qualificado, aplicado sobre uma peça ou um sistema metalúrgico que apresente problemas em seu processamento. O fluxograma é dado na Figura 6.6.

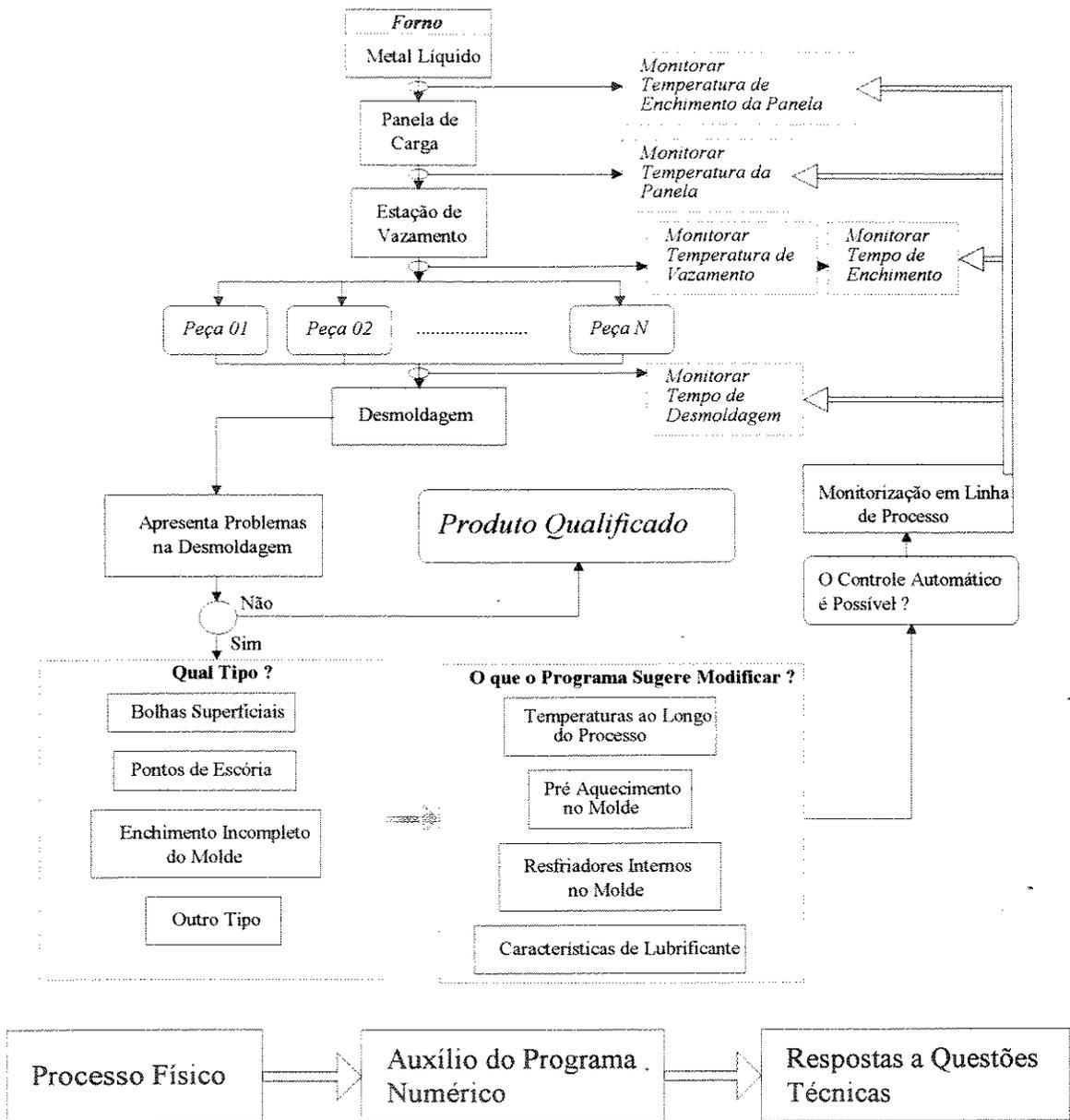


Figura 6.6 - Fluxograma Interativo para a Elaboração de Projeto Qualificado de um Sistema de Fundição

Capítulo 7

Conclusões e Sugestões para Próximos Trabalhos

Os resultados obtidos decorrentes do desenvolvimento de um modelo de diferenças finitas, modificado através da analogia entre circuitos térmicos e elétricos, e a adaptação na teoria da resistência de integração objetivando sua aplicação na análise da solidificação de peças de geometria complexa, permitem que sejam extraídas as seguintes conclusões:

① O modelo desenvolvido permite analisar o comportamento térmico da solidificação de peças de geometria complexa, adaptando-se com praticidade e versatilidade ao cálculo de precisão em pontos críticos da peça, sendo maleável quanto ao tipo de material fundido bem como as características do molde;

② O confronto entre as expectativas teóricas do modelo desenvolvido com resultados experimentais, demonstrou sua confiabilidade na previsão do campo térmico durante a solidificação do processo, apresentando-se bem aplicável em ligas, onde o resfriamento sofre inflexões em função das características da região pastosa;

③ O modelo foi utilizado na simulação de condições operacionais diferentes (Laboratório e Indústria), e dentro dos severos requisitos metalúrgicos de preservação da qualidade do produto, mostrando-se potencialmente adequado para a aplicação em processos que necessitem de controle automático;

④ A utilização da analogia térmico/elétrica, demonstrou seu potencial como forte ferramenta para a otimização de programas numéricos voltados a sistemas de computador de pequeno e médio porte, gerando programas de velocidade de processamento aceitáveis e alocações de memória compatíveis com os equipamentos de mercado;

⑤ A análise global dos resultados gerados nos programas numéricos junto com os resultados obtidos experimentalmente, mostraram a viabilidade da aplicação do modelo na implantação e desenvolvimento de projetos qualificados de sistemas que apresentem problemas em sua dinâmica de trabalho;

⑥ A análise individual dos diferentes pontos de monitorização de uma determinada peça de estudo, sua integração com o programa numérico e o fechamento de um projeto qualificado, faz-se de modo a estabelecer um planejamento preliminar das características envolvidas em todo o complexo de fundição, evitando deste modo perdas desnecessárias dentro da linha de produção.

Na seqüência deste projeto, tem-se como sugestões para próximos trabalhos:

① A aplicação de técnicas de inteligência artificial nos programas de simulação numérica, sendo que estes serão auto suficientes em relação as decisões tomadas sobre as modificações específicas aos sistemas de fundição controlados;

② A utilização do modelo apresentado para o mapeamento microestrutural das peças simuladas, apontando problemas em relação as características mecânicas da peça nas aplicações funcionais destas;

③ A utilização das técnicas de desenvolvimento de programas apresentadas neste trabalho, objetivando a aplicação em programas numéricos que venham a ser utilizados por usuários da linha de produção, gerando interfaces amigáveis e de fácil acesso aos técnicos menos experientes nas áreas de simulação matemática.

Referências Bibliográficas

Periódicos Utilizados:

- [1] ACTA METALLURGICA ET MATERIALIA
- [2] APPLIED SCIENTIFIC RESEACH
- [3] INTERNATIONAL JOURNAL HEAT MASS TRANSFER
- [4] INTERNATIONAL JOURNAL for NUMERICAL METHODS in ENGINEERING
- [5] INTERNATIONAL MATERIALS REWIEWS
- [6] INTERNATIONAL METALS REVIEWS
- [7] JOURNAL of CRYSTAL GROWTH
- [8] MATERIALS TRANSACTIONS of the JAPAN INSTITUTE of METALS (JIM)
- [9] METALLURGICAL TRANSACTIONS
- [10] METALS SCIENCE
- [11] NIPPON STEEL TECHICAL REPORT
- [12] NUMERICAL HEAT TRANSFER
- [13] THE JOURNAL of the MINERALS METALS & MATERIALS SOCIETY (JOM)
- [14] TRANSACTIONS of the AMERICAN FOUNDRYMEN'S SOCIETY (AFS)
- [15] TRANSACTIONS of the ASME
- [16] TRANSACTIONS of the JAPAN INSTITUTE of METALS

Artigos Técnicos:

- ANDERSON, M. P.; Srolovitz, D. J.; Grest, G. S. & Sahni, P.S.; "Computer Simulation of Grain Growth - I, Kinetics", **Acta Metallurgica**, V.32, n°5, 783-791, (1984).
- ANESTIEV, L.; "On the Solute Redistribution at Thermally Activated Phase Transition Process - I. Theory", **Journal of Crystal Growth**, n° 140, 167-174, (1994).
- ANESTIEV, L.; "On the Solute Redistribution at Thermally Activated Phase Transition Process - II. Applications", **Journal of Crystal Growth**, n° 140, 175-181, (1994).
- ARGYROPOULOS, S.; Closset, B. & Gruzleski, J.E.; "Application of Microprocessors in Metal Casting Studies", **Transactions of the American Foundrymen's Society**, V.25, 515-522, (1983).
- BATTLE, T. P. & Pelhke, R. D.; "Equilibrium Partition Coefficients in Iron-Based Alloys", **Metallurgical Transactions B**, V.20B, 149-160, Apr (1989).
- BATTLE, T. P. & Pelhke, R. D.; "Mathematical Modeling of Microsegregation in Binary Metallic Alloys", **Metallurgical Transactions B**, V.21B, 357-375, Apr (1990).
- BATTLE, T. P.; "Mathematical Modelling of Solute Segregation in Solidifying Materials", **International Materials Reviews**, V.37, n°6, 249-270, (1992).
- BENNON, W. D. & Incropera, F. P.; "A Continuum Model for Momentum, Heat and Species Transport in Binary Solid-Liquid Phase Change System-I. Model Formulation", **International Journal Heat Mass Transfer**, V.30, n°10, 2161-2170, (1987).
- BENNON, W. D. & Incropera, F. P.; "A Continuum Model for Momentum, Heat and Species Transport in Binary Solid-Liquid Phase Change System-II. Application to Solidification in a Rectangular Cavity", **International Journal Heat Mass Transfer**, V.30, n°10, 2171-2187, (1987).
- BERRY, J. T. & Pelhke, R. D.; "Computer-Aided Design System of Castings", **Solidification Technology in the Foundry and Cathouse the Metals Society**, 432-440, Set (1980).
- BERRY, J. T. & Pelhke, R. D.; "Progress Report on the Computer-Aided Design System Project", **Transactions of the American Foundrymen's Society**, V.103, 615-622, (1980).

- BERRY, J. T. & Pelhke, R. D.; "Computer-Aided Design System of Castings", **Transactions of the American Foundrymen's Society**, V.51, 101-108, (1984).
- BRODY, H. D. & Flemings, M. C., Transaction TMS-AIME, V.236, 615-624, (1966).
- CHEN, H.T. & Lin, J. Y.; "Numerical Analisis for Hiperbolic Heat Conduction", **International Journal Heat Mass Transfer**, V.36, n°11, 2891-2898, (1993).
- CHEN, J.H. & Tsai, H.L., "An Efficiente and Accurate Numerical Algorithm for Multi-Dimensional Modeling of Casting Solidification, Part I: Control Volume Method", **Transactions of the American Foundrymen's Society**, V.98, 527-537, Apr (1990).
- CHEN, J.H. & Tsai, H.L., "Comparison on Different Modes of Latent Heat Release for Modeling Casting Solidification", **Transactions of the American Foundrymen's Society**, V.98, 539-546, Apr (1990).
- CHIOU, I.J. & Tsai, H.L., "Modeling of Porosity Formation in Castings", **Transaction of the American Foundrymen's Society**, V.98, 823-830, Apr (1990).
- CLYNE, T. W.; "Numerical Modelling of Directional Solidification of Metallic Alloys", **Metal Science**, V.16, 441-450, Set (1982).
- CLYNE, T. W. & Kurz, W., Metallurgica Transaction A, V. 12A, 965-971, (1981).
- COMINI, G., Giudice, S. & Saro, O., "A Conservative Algorithm for Multidimesional Conduction Phase Change", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V.30, 697-709, Jan (1990).
- COMINI, G., Giudice, S.; "Finite Element Solution of Non-Linear Heat Conduction Problems with Special Reference to Phase Change", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V.8, 613-624, Jan (1974).
- CORBETT, C.F. & Picard, M., "Benefits of Solidification Simulation for Steel Castings", **Transactions of the American Foundrymen's Society**, V.98, 311-318, Apr (1990).
- CROWLEY, B. A. & Ockendon, J. R.; "Modelling Mushy Regions", **Applied Scientific Reseach**, V.44, 1-7, (1987).
- CROWLEY, B. A.; "Numerical Solution of Stefan Problems", **International Journal Heat Mass Transfer**, V.21, 215-219, (1978).

- CURZ, J. S., Chevrier, J.C., Gros, Y. , Patin,G. & Marchese, D.; "Heat Flow Simulation During Solidification of Complex Shaped Pieces", **E-MRS - Strasbourg**, 65-74, Jun(1986).
- DALHUIJEN, A.J. & Segal, A., "Comparison of Finite Element Techniques for Solidification Problems", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V.23, 1807-1829, Feb (1986).
- DALLMER, D. A. & Naperville, I. L.; "Use of the Computer in the Foundry", **Transactions of the American Foundrymen's Society**, 757-764, (1984).
- DAROWSKI, L. Suwalski, J. Sidzhimov, B. & Christov, V., "Investigations of Ordering Dynamics in Carbon Martensite", **Acta Metallurgica**, V.42, n° 7, 2375-2380, (1994).
- DEMERI, M. Y.; Tang, S.C.; "Post-Processing Analysis in Sheet-Metal Forming Simulation", **The Journal of The Minerals Metals & Materials Society**, 14-16, Jun (1992).
- DERBY, B. & Ashby, M. F.; "A Microstructural Model for Primary Creep", **Acta Metallurgica**, V.35, n°6, 1349-1353, (1987).
- EXNER, H. E. & Paul, J. ; "Simplified Determination of Cooling Conditions of Aluminum-Silicon Alloys", **Metal Science**, V.17, 141-143, Mar (1983).
- FAVIER, J.J.; Garandet, J.P.; Rouzaud, A. & Camel, D.; "Mass Transport Phenomena During Solidification in Microgravity; Preliminary Results of the First Mephisto Flight Experiment", **Journal of Crystal Growth**, n° 140, 237-243, (1994).
- FLEMINGS, M. C., "Behavior of Metal Alloys in the Semisolid State", **Metallurgical Transaction B**, V.22B, 269-293, Jun (1991).
- FLOOD, S. C. & Hunt, J. D.; "A Model of a Casting", **Applied Scientific Research**, n°44, 27-42, (1987).
- FRANCIOSI, P.; "The Concepts of Latent Hardening and Strain Hardening in Metallic Single Crystals", **Acta Metallurgica**, V.33, n° 9, 1601-1612, (1985).
- GANDIN, Ch. A. & Rappaz, M.; "A Coupled Finite Element-Cellular Automaton Model for the Prediction of Dendritic Grain Structures in Solidification Processes", **Acta Metallurgica**, V.42, n° 7, 2233-2246, (1994).

- GANESAN, S. & Poirier, D. R.; "Conservation of Mass and Momentum for the Flow of Interdendritic Liquid During Solidification, **Metallurgical Transaction B**, V.21B, 173-181, Feb (1990).
- GREST, G. S.; Srolovitz, D.J. & Anderson, M.P.; "Computer Simulation of Grain Growth - IV, Anisotropic Grain Boundary Energies", **Acta Metallurgica**, V.33, n°3, 509-520, (1985).
- GUNDUZ, M. & Hunt, J. D.; "The Measurement of Solid-Liquid Surface Energies in the Al-Cu, Al-Si and Pb-Sn Systems", **Acta Metallurgica**, V.33, n° 9, 1651-1672, (1985).
- HAMAR, R.; "Numerical Simulation in Precision Casting", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V.24, 219-229, (1987).
- HANSEN, P. N.; "Modelling of Solidification Processes in Casting Using FDM-Techniques", **E-MRS Strasbourg**, 27-38, Jun (1986).
- HANSEN, P. N.; "Numerical Simulation of the Solidification Process", **Proceedings of an International Conference on Solidification**, 350-356, Jul (1977).
- HEINRICH, J. C. et al., "Thermosolutal Convection During Dendritic Solidification of Alloys; Part II. Nonlinear Convection", **Metallurgical Transactions B**, V.20B, 883-891, Dec (1989).
- HESELBARTH, H. W. & Gobel, I. R.; "Simulation of Recrystallization by Cellular Automata", **Acta Metallurgica**, V.39, n°9, 2135-2143, (1991).
- HILDENBRAND, J. & Kuhn, G.; "Non-Linear Coordinate Transformation of Finite Part Integrals in Two-Dimensional Boundary Element Analysis", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V.36, 2939-2954, (1993).
- HILLERT, M. ; "Principles of Phase Diagrams", **International Metals Reviews**, V.30, n° 2, 45-67, (1985).
- HO, K. & Pehlke, R.D., "Metal-Molde Interfacial Heat Transfer", **Metallurgical Transactions B**, V.16B, 585-594, Sept (1985).
- HOU, G. J. W. & Sheen, J.; "Numerical Methods for Second-Order Shape Sensitivity Analysis with Applications to Heat Conduction Problems", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V.36, 417-435, (1993).

- HUANG, H. et alli; "Issues in Thermal Contact and Phase Change in Porosity Prediction", **Transaction of the ASME**, V.115, 2-7, Jan (1993).
- HUANG, H., Lodhia, A. V. & Berry, J. T.; "Modelling the Effectiveness of Chills During Solidification", **Transaction of the American Foundrymen's Society**, V.98, 547-552, Apr (1990).
- HUANG, S. C. & Glicksman, M. E.; "Fundamentals of Dendritic Solidification - I. Steady-State Tip Growth", **Acta Metallurgica**, V.29, 701-715, (1981).
- HUANG, S. C. & Glicksman, M. E.; "Fundamentals of Dendritic Solidification - II. Development of Sidebranch Structure", **Acta Metallurgica**, V.29, 717-734, (1981).
- HUNTLEY, D. A. & Davis, S. H.; "Thermal Effects in Rapid Directional Solidification: Linear Theory", **Acta Metallurgica**, V.41, n°7, 2025-2043, (1993).
- IMAFUKU, I. & Chijiwa, K.; "A Mathematical Model for Shrinkage Cavity Prediction in Steel Casting", **Transaction of the American Foundrymen's Society**, V.10, 527-540, (1983).
- ION, J. C.; Sherchiff, H. R.; Ashby, M. F.; "Diagrams for Laser Materials Processing", **Acta Metallurgica**, V.40, n° 7, 1539-1551, (1992).
- JALURIA, Y., "Numerical Simulation of the Transport Process in a Heat Treatment Furnace", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V.25, 387-399, (1988).
- JOHANSEN, S.T.; Boysan, F. & Ayers, W.H.; "Mathematical Modelling of Bubble Driven Flows in Metallurgical Process", **Applied Scientific Research**, n° 44, 197-207, (1987).
- JOO, S. & Guthrie, R.I.L.; "Inclusion Behavior and Heat-Transfer Phenomena in Steelmaking Tundish Operations: Part I. Aqueous Modeling", **Metallurgical Transaction B**, V.24B, 755-765, Oct (1993).
- JOO, S. & Guthrie, R.I.L.; "Inclusion Behavior and Heat-Transfer Phenomena in Steelmaking Tundish Operations: Part II. Mathematical Model for Liquid Steel in Tundishes", **Metallurgical Transaction B**, V.24B, 767-777, Oct (1993).

- JOO, S. & Guthrie, R.I.L.; "Inclusion Behavior and Heat-Transfer Phenomena in Steelmaking Tundish Operations: Part III. Applications - Computational Approach to Tundish Design", **Metallurgical Transaction B**, V.24B, 779-788, Oct (1993).
- KAKESHITA, T. ; Shirai, H.; Simizy, K. et alli; "Effect of Magnetic Fields on Martensitic Transformations in Alloy with a Paramagnetic to an Antiferromagnetic Transition in the Austenitic State", **Transactions of the Japan Institute of Metals**, V.29, n° 7, 553-560, (1988).
- KOMINAMI, H. et alli; "Neural Network System for Breakout Prediction in Continuous Casting Process", **Nippon Steel Technical Report**, n° 49, 34-38, Apr (1991).
- KONISHI, Y.; Katoh, M. & Asai, S., "Leaching Kinetics of Copper from Natural Chalcocite in Alkaline Na₄EDTA Solutions" **Metallurgical Transaction B**, V.22B, 295-303, Jun (1991).
- KORTESIS, S. & Panagiotopoulos, P.D.; "Neural Networks for Computing in Structural Analysis: Methods and Prospects of Applications", **International Journal for Numerical Methods in Engineerings**, n° 36, 2305-2318, (1993).
- KUBO, K. & Pehlke, R.D.; "Thermal Properties of Molding Sands", **Transactions of the American Foundrymen's Society**, 405-414, (1985).
- KUBO, K. & Pehlke, R. D.; "Mathematical Modeling of Porosity Formation in Solidification", **Metallurgical Transaction B**, V.16B, 359-366, Jun (1985).
- KURZ, W.; Giovanola, B. & Trivedi, R.; Theory of Microstructural Development During Rapid Solidification", **Acta Metallurgica**, V.34, n° 5, 823-830, (1986).
- LACROIX, M. & Arsenault, A.; "Analysis of Natural Convection Melting of a Subcooled Pure Metal", **Numerical Heat Transfer - Part A**, V.23, 21-34, (1993).
- LALLY, B. ; Biegler, L. & Henein, H.; "Finite Difference Heat-Transfer Modelling for Continuous Casting", **Metallurgical Transaction B**, V.21B, 761-770, Aug (1990).
- LAW, K. H. & Mackay, D.R.;"A Parallel Row-Oriented Sparse Solution Method for Finite Element Structural Analysis", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V.36, 2895-2919, (1993).
- LAXMANAN, V.; "Dendritic Solidification - I. Analysis of Current Theories and Models", **Acta Metallurgica**, V.33, n° 6, 1023-1035, (1985).

- LAXMANAN, V.; "Dendritic Solidification - II. A Model for Dendritic Growth Under an Imposed Thermal Gradient", **Acta Metallurgica**, V.33, n° 6, 1037-1049, (1985).
- LEBLOND, J. B. & Devaux, J.; "A New Kinetic Model for Anisothermal Metallurgical Transformations in Steels Including Effect of Austenite Grain Size", **Acta Metallurgica**, V.32, n° 1, 137-146, (1984).
- LEE, Y. W.; Chang, E. & Chieu, C. F., "Modeling of Feeding Behavior of Solidifying Al-7Si-0.3Mg Alloy Plate Casting", **Metallurgical Transaction B**, V.21B, 715-722, Aug (1990).
- LEE, T. S.; Advani, S. H. & Lee, J.K.; "Indirect Finite Element Evaluation of Two-Dimensional Finite Part Integral Using Fourier Transformation", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V.36, 2981-2996, (1993).
- LEWIS, R.W. et alli, "Solidification in Castings by Finite Element Method", **The Institute of Metals**, 482-489, (1990).
- LU, Jay W. & Chen, Falin; "Instability - Mode Competition Due to Change of Partition Coefficient of Binary Alloy Unidirectionally Solidified from Bellow", **Journal of Crystal Growth**, n° 140, 182-190, (1994).
- MAGALHÃES, C.A. & Barbedo Magalhães, A.P.; "Finite Element Simulation of The Thermal Evolution of a Metallic Mould During Successive Casting of Ductile Iron", **E-MRS - Strasbourg**, 75-82, Jun(1986).
- MALTBY, J. D. & Burns, P.J.; "Performance, Accuracy, and Convergence in a Three-Dimensional Monte Carlo Radiative Heat Transfer Simulation", **Numerical Heat Transfer, Part B**, n° 19, 191-209, (1991).
- MAMPAEY, F., "A Stable Alternating Direction Method for Simulating, Multi-Dimensional Solidification Problems", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V.30, 711-728, Jan (1990).
- MASHENA, M. & Sheikh, H., "An Integral Solution of Moving Boundary Problems ", **International Journal Heat Mass Transfer**, V.29, n° 2, 317-329, (1986).
- MEHRABIAN, R.; "Rapid Solidification", **International Metals Reviews**, V.27, n°4, 185-208, (1982).

- MIETTINEN, J., "Mathematical Simulation of Interdendritic Solidification of Low-Alloyed and Stainless Steels", **Metallurgical Transaction A**, V.23A, 1155-1170, Apr (1992).
- MINAKAWA, S.; Samarasekera, I.V. & Weinberg, F.; "Centerline Porosity in Plate Casting", **Metallurgical Transaction B**, V.16.B, 823-829, Dec (1985).
- MULLINS, W. M.; "Constitutive Equation for Solidification", **Acta Metallurgica**, V.40, n° 7, 1699-1702, (1992).
- MURAKAMI, K. & Okamoto, T.; "Fluid Flow in the Mushy Zone Composed of Granular Grains", **Acta Metallurgica**, V.32, n° 10, 1741-1744, (1984).
- NANDAPURKAR, P., et al.; "Thermosolutal Convection During Dendritic Solidification of Alloys: Part I. Linear Stability Analysis", **Metallurgical Transaction B**, V.20.B, 711-721, Oct (1989).
- NEILSON, D. G. & Incropera, F. P.; "Unidirectional Solidification of a Binary Alloy and the Effects of Induced Fluid Motion", **International Journal Heat Mass Transfer**, V.34, n° 7, 1717-1732, (1991).
- NI, J. & Beckermann, C.; "A Volume-Averaged Two-Phase Model for Transport Phenomena During Solidification", **Metallurgical Transactions B**, V. 22B, 349-361, Jun.(1991).
- NIKOLIN, B. J. et al.; "Effect of Heat Treatment on the Crystalline Structure of Martensite in Iron-, Nickel-, Manganese- and Silicon- Doped Co-W and Co-Mo Alloys", **Acta Metallurgica**, V.41, n° 2, 513-515, (1993).
- 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. 17B, 833-844, Dec.(1986).
- NEILSON, D. G. & Incropera F. P.; "Tree-Dimensional Considerations of Unidirectional Solidification in a Binary Liquid", **Numerical Heat Transfer, Part A**, V.23, 1-20, (1993).
- OHTSUKA, Y.; Mizuno, K. & Yamada, J.; "Application of a Computer Simulation System to Aluminum Permanent Mold Castings", **Transactions of the American Foundrymen's Society**, V.89, 635-646, (1982).

- OVERFELT, T., "The Manufacturing Significance of Solidification Modeling", **The Journal of the Minerals Metals & Materials Society**, 17-20, June (1992).
- PHAM, Q. T.; "The Use of Lumped Capacitance in the Finite-Element Solution of Heat Conduction Problems with Phase Change", **International Journal Heat Mass Transfer**, V.29, n° 2, 285-291, (1986).
- PIERANTONI, M.; Gremaud, M.; Magnin, P.; et alli; "The Coupled Zone of Rapidly Solidified Al-Si Alloys in Laser Treatment", **Acta Metallurgica**, V.40, n° 7, 1637-1644, (1992).
- POIRIER, D. R.; "Permeability for Flow of Interdendritic Liquid in Columnar-Dendritic Alloys", **Metallurgical Transactions B**, V. 18B, 245-255, Mar.(1987).
- POPOV, J. R. & Katzarov, I. H.;"Formation of Casting with Complex Geometry Thermomechanical effects, Growth and Influence of the Air Gap", **International Journal Heat Mass Transfer**, V.36, n° 11, 2861-2867, (1993).
- RACKMIL, C.I. & Buckius, R.O.;"Numerical Solution Technique for the Transiente Equation of Transfer", **Numerical Heat Transfer**, V.6, 135-153, (1983).
- RAMAKRISHNA R., P.; "Eficient Numerical Method for Two-Dimensional Phase Change Problems", **International Journal Heat Mass Transfer**, V.11, n° 11, 2077-2084, (1984).
- RAPPAZ, M.; Charbon, Ch. & Sasikumar, R.; "About The Shape of Eutectic Grains Solidifying in a Thermal Gradient", **Acta Metallurgica**, V.42, n° 7, 2365-2374, (1994).
- RAPPAZ, M. & Gandin, Ch. A.;"Probabilistic Modelling of Microstructure Formation in Solidification Processes", **Acta Metallurgica**, V.41, n° 2, 345-360, (1993).
- RAPPAZ, M., Thevoz, Ph & Desbiolles, J. L., "Modeling of Equiaxed Microstructure Formation in Casting", **Metallurgical Transaction A**, 20A, p.311, (1989).
- RAPPAZ, M. & Blank, E.; Simulation of Oriented Dendritic Microestructures Using the Concept of Dendritic Lattice", **Journal of Crystal Growth**, V.74, 67-76, (1986).
- ROOSZ, A.; Gacsi, Z. & Fuchs, E. G.; "Solute Redistribution During Solidification and Homogenization of binary Solid Solution", **Acta Metallurgica**, V.32, n° 10, 1745-1754, (1984).

- ROOSZ, A. & Exner, H. E.; "Numerical Modelling of Dendritic Solidification in Aluminium-Rich Al-Cu-Mg Alloys", **Acta Metallurgica**, V.38, n° 2, 375-380, (1990).
- RUBINSKY, B. & Cravallo, E. G.; "A Finite Element Method for the Solution of One-Dimensional Phase Change Problems", **International Journal Heat Mass Transfer**, V.24, n° 12, 1987-1989, (1981).
- SAITOU, M. & Hirata, A.; "A Numerical Method for Solving the Two-Dimensional Unsteady Solidification Problem with Motion of Melt by Using the Boundary-Fitted Coordinate System", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V. 36, 403-416, (1993).
- SALCUDEAN, M. & Abdullah, Z., "On the Numerical Modelling of Heat Transfer During Solidification Processes", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V.25, 445-473, (1988).
- SANTOS, R. G. & Garcia, A.; "Comportamento Térmico e Microestrutural na Solidificação Radial", **Anais do 48º Congresso da Associação Brasileira de Metalurgia e Materiais (ABM)**, Rio de Janeiro, 591-602, Jul (1993).
- SASIKUMAR, R. & Sreenivasan, R.; "Two Dimensional Simulation of Dendrite Morphology", **Acta Metallurgica**, V.42, n° 7, 2381-2386, (1994).
- SCHEIL, E. , *Z. Metallkd.*, V. 34, 70-72, (1942).
- SCHREIBER, W.C., "The Numerical Simulation of Heat Conduction in Irregularly-Shaped Materials of Thermally-Dependent Properties", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V.30, 679-696, Jan (1990).
- SCHUHMANN, R.; "Solute Interactions in Multicomponent Solutions", **Metallurgical Transactions B**, V. 16B, 807-813, Dec.(1985).
- SENF, L.;"A Special Case of Diffusion with Moving Boundary", **International Journal Heat Mass Transfer**, V.24, n° 12, 1903-1905, (1981).
- SHIVKUMAR, S., Apelian, D. & Zou, J.,"Modeling of Microstructure Evolution and Microporosity Formation in Cast Aluminum Alloys", **Transaction of the American Foundrymen's Society**, V.98, 897-904, Apr (1990).
- SIGWORTH, G. K. & Wang, C.; "Mechanisms of Porosity Formation During Solidification: A theoretical Analysis", **Metallurgical Transactions B**, V.24B, 349-364, Apr(1993).

- SIGWORTH, G. K. & Wang, C.; "Evolution of Porosity in Long Freezing Range Alloy", **Metallurgical Transactions B**, V.24B, 365-377, Apr(1993).
- SONG, R., Dhatt, G. & Cheikh, A. B., "Thermo-Mechanical Finite Element Model of Casting Systems", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V.30, 579-599, Jan (1990).
- SPIM Jr., J. A. & Garcia, A., "Aplicação de um modelo Numérico na Simulação da Solidificação de Seções Radiais em Sistemas Metal/Molde Complexos", **Anais do 50º Congresso da Associação Brasileira dos Metais (ABM)**, Ago (1995).
- SPIM Jr., J. A. , Maria Clara Fillipini Ierardi & Garcia, A., "Aplicação da Inteligência Artificial na Solução Ótima das Condições Operacionais do lingotamento Contínuo", **Anais do 50º Congresso da Associação Brasileira dos Metais (ABM)**, Ago (1995).
- SPIM Jr., J. A. ; Ierardi, M. C. F. & Garcia, A., "Controle Automático do Processo de Lingotamento Contínuo de Aços com ênfase no Controle Inteligente da Região de resfriamento Secundário", **Trabalho submetido a Comissão de Publicação da Revista Brasileira de Ciências Mecânicas**, Jan (1995).
- SPIM Jr., J. A. & Garcia, A., "Modelagem da Solidificação do Lingotamento Contínuo de Tarugos de Geometria Cilíndrica", **Trabalho submetido a Comissão de Publicação da Revista Brasileira de Ciências Mecânicas**, Dez (1994).
- SPIM Jr., J. A. ; Ierardi, M. C. F. & Garcia, A., "Otimização do Método de Diferenças Finitas para a Modelagem do processo de Solidificação em Peças de Geometria Complexa", **Trabalho submetido a Comissão de Publicação da Revista Brasileira de Ciências Mecânicas**, Dez (1994).
- SPIM Jr., J. A. ; Ierardi, M. C. F. & Garcia, A., "Sistema de Inteligência Artificial Aplicado ao Controle do Resfriamento Secundário do Lingotamento Contínuo", **Anais do 49º Congresso Internacional de Tecnologia Metalúrgica e de Materiais - ABM**, V.5, 337-349, out (1994).
- SPIM Jr., J. A. ; Ierardi, M. C. F. & Garcia, A., "Otimização do Método de Diferenças Finitas para a Modelagem do Processo de Solidificação em Peças de Geometria Complexa", **Anais do 49º Congresso Internacional de Tecnologia Metalúrgica e de Materiais - ABM**, V.10, 325-334, out (1994).

- SPIM Jr., J. A. ; Ierardi, M. C. F. & Garcia, A., "Controle Automático do Processo de Lingotamento Contínuo de Aços", **Anais do 11º Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais - CBECIMAT**, V. 1, 435-438, dez (1994).
- SPIM Jr., J. A. & Garcia, A., "Análise Numérica de Secções Radiais na Fundição de Geometrias Complexas", **Anais do 11º Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais - CBECIMAT**, V. 2, 1439-1442, dez (1994).
- SPIM Jr., J. A. ; Ierardi, M.C.F. & Garcia, A.; "A aplicação da Modelagem Matemática no Controle Ótimo do Lingotamento Contínuo", **Anais do 48º Congresso Anual da Associação Brasileira de Metalurgia e Materiais - ABM**, Rio de Janeiro, 575-590, Jul (1993).
- SPIM Jr., J. A. & Garcia, A. "Modelagem Numérica da Solidificação Baseada na Analogia entre Sistemas Térmicos e Elétricos", **10º Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais - CBECIMAT**, V.2, 594-597, Dez (1992).
- SPITTLE, J. A. & Brown, S. G. R.; "Computer Simulation of the Effects of Alloy Variables on the Grain Structures of Castings", **Acta Metallurgica**, V.37, nº7, 1803-1810, (1989).
- SROLOVITZ, D.J. et alli; "Computer Simulation of Grain Growth - II, Grain Site Distribution, Topology, and Local Dynamics", **Acta Metallurgica**, V.32, nº5, 793-802, (1984).
- SROLOVITZ, D.J. et alli; "Computer Simulation of Grain Growth - III, Influence of a Particle Dispersion", **Acta Metallurgica**, V.32, nº9, 1429-1438, (1984).
- SULLIVAN Jr., J.M. & Lynch, D.R., "Non-Linear Simulation of an Undercooled Melt", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V.25, 415-444, (1988).
- SUTCLIFFE, M. P. F. & Fleck, N. A.; "Microbuckle Propagation in Carbon Fibre-Epoxy Composites", **Acta Metallurgica**, V.42, nº 7, 2219-2231, (1994).
- SVENSSON, I. L. & Lundback, E.;"Computer Simulation of the Solidification of Castings", **E-MRS - Strasbourg**, 57-64, Jun(1986).
- SWAMINATHAN, C.R. & Voller, V.R., "A General Enthalpy Method for Modeling Solidification Processes", **Metallurgical Transactions B**, V.23B, 651-664, Oct (1992).

- TAMMA, K.K. & Railkar, S.B., "Transfinite Element Methodology for Nonlinear/linear Transient Thermal Modelling/Analysis: Progress and Recent Advances", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V.25, 475-494, (1988).
- THOMAS, B.G., Samarasekera, I. V. & Brimacombe, J.K., "Comparison of Numerical Modeling Techniques for Complex, Two-Dimensional, Transiente Heat-Conduction Problems", **Metallurgical Transactions B**, V.15B, 307-318, Jun (1984).
- THOMAS, B. G.; Samarasekera, I.V. & Brimacombe, J.K.; "Mathematical Model of the Thermal Processing of Steel Ingots: Part I. Heat Flow Model", **Metallurgical Transactions B**, V.18B, 119-130, Mar (1987).
- THOMAS, B. G.; Samarasekera, I.V. & Brimacombe, J.K.; "Mathematical Model of the Thermal Processing of Steel Ingots: Part II. Stress Model", **Metallurgical Transactions B**, V.18B, 131-147, Mar (1987).
- TRIVEDI, R.; Magnin, P. & Kurz, W.; "Theory of Eutectic Growth Under Rapid Solidification Conditions", **Acta Metallurgica**, V.35, n°4, 971-980, (1987).
- UESHIMA, Y.; at alli; "Analysis of Solute Distribution in Dendrites of Carbon Steel with δ / γ Transformation During Solidification", **Metallurgical Transactions B**, V.17B, 845-859, Dec (1986).
- VANDERMEER, R. A.; Jensen, D. J.; "Modeling Microstructural Evolution of Multiple Texture Componentes During Recrystallization", **Acta Metallurgica**, V.42, n° 7, 2427-2436, (1994).
- VOLLER, V.R. & Swaminathan, C.R., "General Source-Based Method for Solidification Phase Change", **Numerical Heat Transfer, Part B**, V.19, 175-189, (1991).
- VOLLER, V. R.; Brent, A.D. & Prakash, C.; "The Modelling of Heat Mass and Solute Transport in Solidification Systems", **International Journal Heat Mass Transfer**, V.32, n°9, 1719-1731, (1989).
- VOLLER, V. & Cross, M.; "Accurate Solutions of Moving Boundary Problems Using the Enthalpy Method", **International Journal Heat Mass Transfer**, V.24, n°3, 545-556, (1981).

- WANQI, J. & Yaohe, Z.; "Formation of Hot-Top Segregation in Steel Ingot and Effect of Steel Compositions", **Metallurgical Transactions B**, V.20B, 723-730, Oct (1989).
- WASAI, K.; Kano, M. & Mukai, K.; "An Analysis of Specific Heat Capacity of Liquid Alloy Based on Ideal Associated Solution Model", **Transactions of the Japan Institute of Metals**, V.34, n° 6, 517-527, (1993).
- WELLS, K. J.; Colwell, G. T. & Berry J. T.; "Two-Dimensional Numerical Simulation of Casting Solidification with Heat Pipe Controlled Boundary Conditions", **Transaction of the American Foundrymen's Society**, V.95, 429-434, (1984).
- WOODYATT, L. Richard; Stoff, K. L.; Wolf, Floyd E. & Vasko, F. J. ; "Using Fuzzy Sets to Assign Metallurgical Grades to Steel", **The Journal of The Minerals Metals & Materials Society**, 28-31, Feb (1992).
- XIONG, Bin & Hu, Wen-Rui; "Influence of Low-Gravity Level on Crystal Growth in Floating Zone", **Journal of Crystal Growth**, n° 133, 155-167, (1993).
- YAO, L.S. & Cherney, W.;"Transiente Phase-Change Around a Horizontal Cylinder", **International Journal Heat Mass Transfer**, V.24, n° 12, 1971-1981, (1981).
- YOO, J. & Rubinsky, B., "A Finite Element Method for the Study of Solidification Process in the Presence of Natural Convection", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, V.23, 1785-1805, Feb (1986).
- YOO, J. & Rubinsky, B. "Numerical Computation Using Finite Elements for the Moving Interface in Heat Transfer Problems with Phase Transformation", **Numerical Heat Transfer**, V.6, 209-22, (1983).
- YU, K.O., Nichols, J.J. & Robinson, M., "Finite-Element Thermal Modeling of Casting Microstructures and Defects", **The Journal of the Minerals Metals & Materials Society**, 21-25, June (1992).
- YU, K.O. et alli, "Solidification Modeling of Single-Crystal Investment Castings", **Transaction of the American Foundrymen's Society**, V.98, 417-428, Apr (1990).
- ZIV, I. & Weinberg, F.; "The Columnar-to-Equiaxed Transition in Al-3pctCu", **Metallurgical Transactions B**, 20B, 731-734, Oct(1989).
- ZUZANAK, A.; "Contribution to the Metal-Mold Interfacial Heat Transfer", **Metallurgical Transactions B**, 22B, 729, Oct(1991).

Teses:

SPIM Jr., J. A. - "Aplicação da Modelagem Matemática da Solidificação no Controle Ótimo do Lingotamento Contínuo de Aços", **TESE DE MESTRADO, UNICAMP/FEM/DEMA**, (1993).

YNOUE, M.; "Modelagem Matemática da Solidificação de Ligas Binárias com Aplicação no Cálculo da Macrosegregação Inversa", **TESE DE MESTRADO, UNICAMP/FEM/DEMA**, (1992).

Livros:

ASHBY, M. F. & Jones, D.R.H.; "Engineering Materials 2 - An Introduction to Microstructures, Processing and Design", **Pergamon Press**, New York, (1986).

BOYLESTAD, R. & Nashelsky, L. ; "Electronic Devices and Circuit Theory", **Prentice-Hall, Inc. - Englewood Cliffs**, New York, (1982).

CARNAHAN, B.; Luther, H. A. & Wilkes, J. O., "Applied Numerical Methods", **J. Wiley and Sons, Inc.** New York, (1969).

CONNOR, J.J. & Brebbia, C.A.; "Finite Element Techniques for Fluid Flow", **NEWNES-BUTTERWORTHS** - London, (1976).

COOK, R. D.; "Concepts and Applications of Finite Elements Analysis", **John Wiley & Sons, Inc.**, New York, (1974).

DESAI, C. S. ; "Elementary Finite Elements Methods", **Prentice-Hall, Inc. - Englewood Cliffs**, New York, (1979).

GUY, A. G.; "Essentials of Materials Science", **McGraw-Hill**, New York, (1976).

HAYT, W. H. Jr. & Kemmerly, J. E.; "Análise de Circuitos em Engenharia", **McGraw-Hill**, (1975).

JENSEN, R. W. & Tonies, C.C.; "Software Engineering", **Prentice-Hall, Inc. - Englewood Cliffs**, New Jersey, (1979).

KELLY-BOOTLE, S.; "Dominando o Turbo C", 2º Edição, **Ciência Moderna**, (1989).

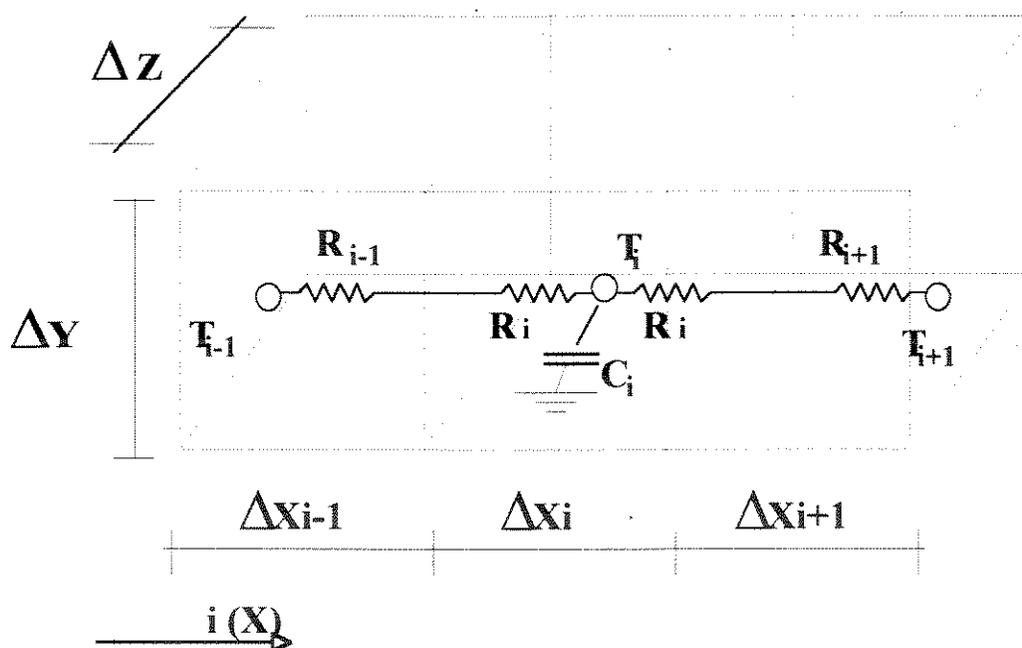
KERN, D. Q.; "Process Heat Transfer", **McGraw-Hill**, New York, (1950).

- OZISIK, M. N.; "Basic Heat Transfer", **McGraw-Hill**, New York, (1977).
- PERRY, J. H.; "Chemical Engineers' Handbook", 42° Ed., **Mc Graw-Hill Book Company**, (1963);
- SCHILDT, H.; "Artificial Intelligence Using C", **McGraw-Hill**, California, (1987).
- SCHILDT, H.; "C Avançado - Guia do Usuário", **McGraw-Hill**, (1987).
- SCHILDT, H.; "Linguagem C - Guia do Usuário", **McGraw-Hill**, (1986).
- SOBELMAN, G.E. & Krekelborg, D.E., "C Avançado - Técnicas e Aplicações", **Campus**, (1989).
- TIPLER, P.A.; "Physics", **Worth Publisher, Inc.**, New York, (1982).
- VAN VLACK, L. H.; "Elements of Materials Science", **Addison-Wesley Publishing Company, Inc.** (1964).
- WELTY, J. R.; "Engineering Heat Transfer", **J. Wiley and Sons, Inc.** New York, (1976).

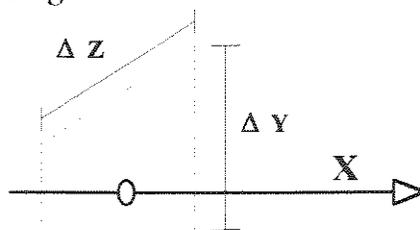
Apêndice 'A'

Relações Dimensionais para o Método de Diferenças Finitas

① - Sistema em Diferenças Finitas Unidimensional:



Relações de Área de Passagem de Fluxo Térmico:



$$\underline{At_x = \Delta Y_i \cdot \Delta Z}$$

Relações de Resistências Térmicas:

$$\underline{R_i = \frac{\Delta X_i}{2 \cdot k_i \cdot A t_x}}$$

$$\underline{R_{i+1} = \frac{\Delta X_{i+1}}{2 \cdot k_{i+1} \cdot A t_x}}$$

$$\underline{R_{i-1} = \frac{\Delta X_{i-1}}{2 \cdot k_{i-1} \cdot A t_x}}$$

Relação do Capacitor Térmico:

$$C_i = \rho_i \cdot c_i \cdot \text{Vol}_i$$

onde: $\underline{\text{Vol}_i = \Delta X_i \cdot \Delta Y \cdot \Delta Z}$ → Volume do elemento

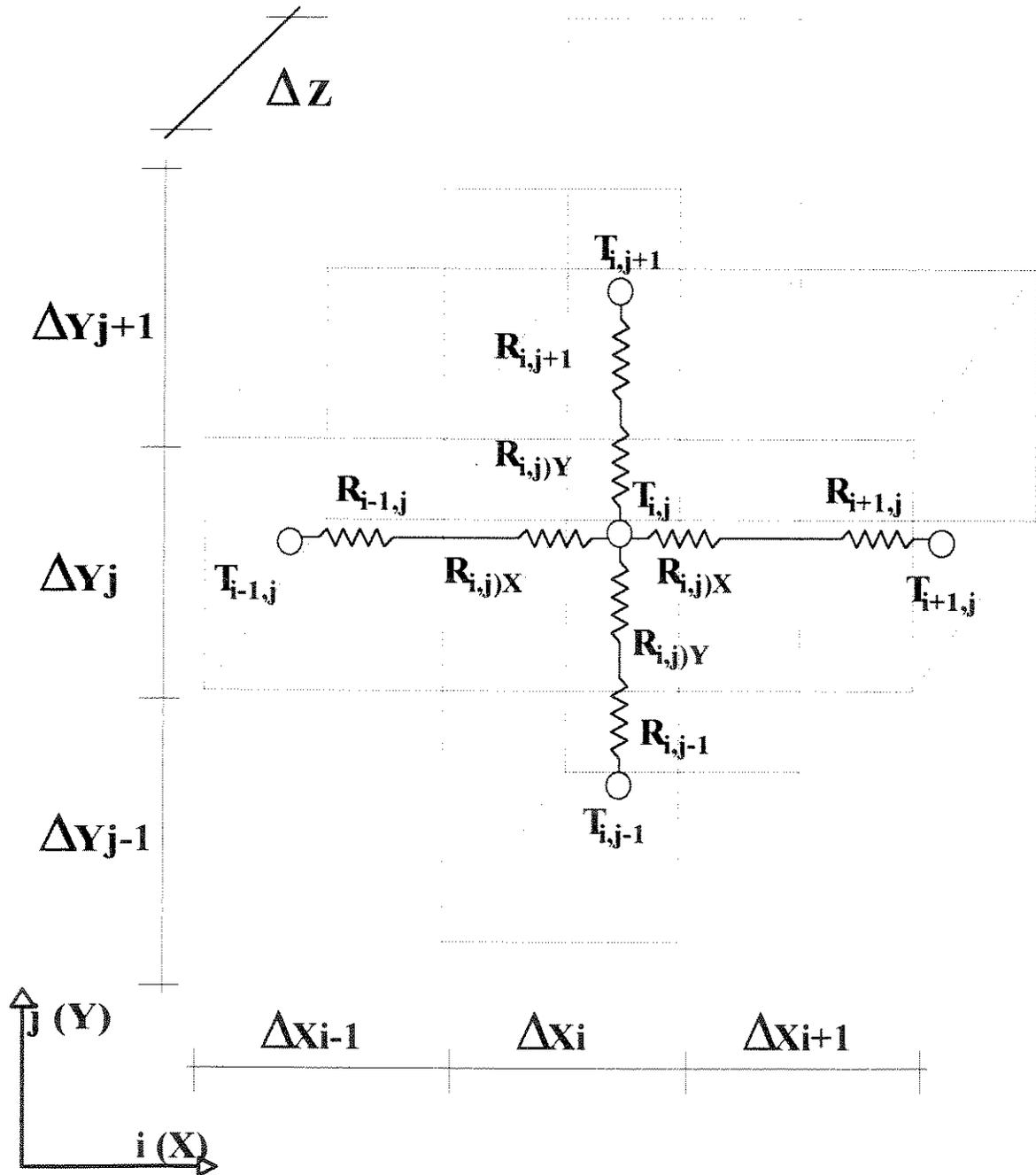
Relações dos Parâmetros de Relaxação:

$$\underline{\text{Tal}_{[(i);(i-1)]} = C_i \cdot (R_i + R_{i-1})}$$

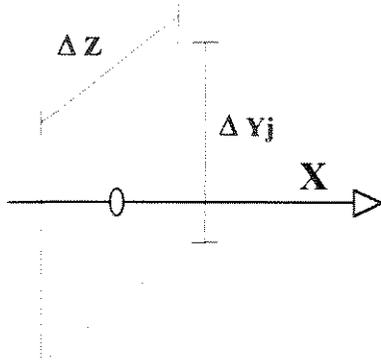
$$\underline{\text{Tal}_{[(i);(i+1)]} = C_i \cdot (R_i + R_{i+1})}$$

$$\underline{\frac{1}{(\text{Tal}_{[(i);(i)]})} = \frac{1}{(\text{Tal}_{[(i);(i-1)]})} + \frac{1}{(\text{Tal}_{[(i);(i+1)]})}}$$

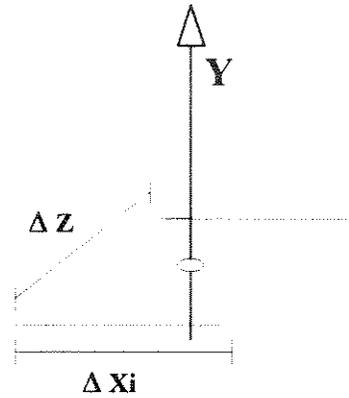
②- Sistema em Diferenças Finitas Bidimensional:



Relações de Área de Passagem de Fluxo Térmico:



$$At_x = \Delta Y_j \cdot \Delta Z$$



$$At_y = \Delta X_i \cdot \Delta Z$$

Relações de Resistências Térmicas:

$$R_{i,j)X} = \frac{\Delta X_i}{2 \cdot k_{i,j} \cdot At_x}$$

$$R_{i-1,j} = \frac{\Delta X_{i-1}}{2 \cdot k_{i-1,j} \cdot At_x}$$

$$R_{i+1,j} = \frac{\Delta X_{i+1}}{2 \cdot k_{i+1,j} \cdot At_x}$$

$$R_{i,j)Y} = \frac{\Delta Y_j}{2 \cdot k_{i,j} \cdot At_y}$$

$$R_{i,j-1} = \frac{\Delta Y_{j-1}}{2 \cdot k_{i,j-1} \cdot At_y}$$

$$R_{i,j+1} = \frac{\Delta Y_{j+1}}{2 \cdot k_{i,j+1} \cdot At_y}$$

Relação do Capacitor Térmico:

$$C_{i,j} = \rho_{i,j} \cdot c_{i,j} \cdot Vol_{i,j}$$

onde: $Vol_{i,j} = \Delta X_i \cdot \Delta Y_j \cdot \Delta Z \rightarrow$ Volume do elemento

Relações dos Parâmetros de Relaxação:

$$Tal_{[(i,j);(i-1,j)]} = C_{i,j} \cdot (R_{i,j)X} + R_{i-1,j})$$

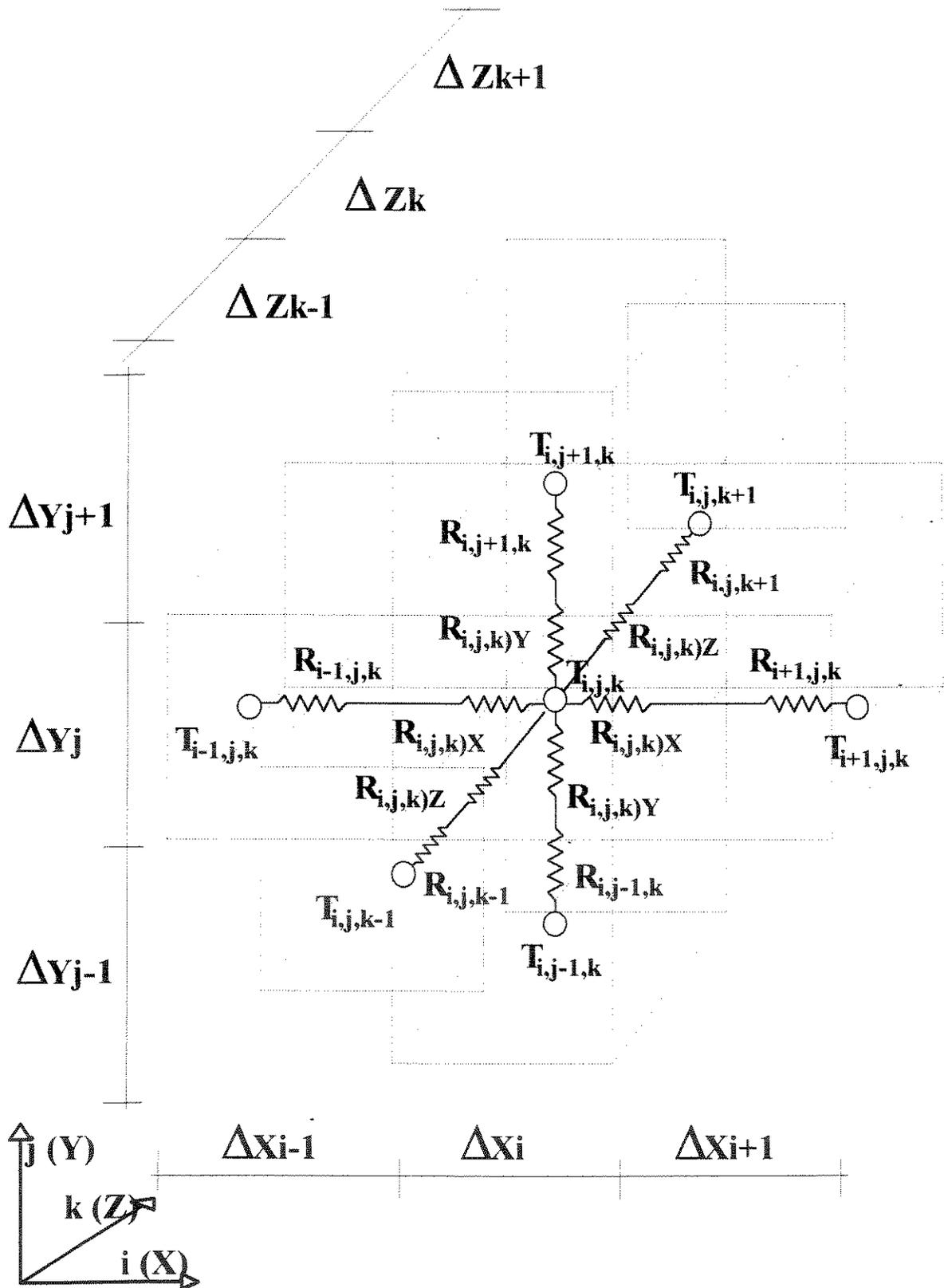
$$Tal_{[(i,j);(i+1,j)]} = C_{i,j} \cdot (R_{i,j)X} + R_{i+1,j})$$

$$Tal_{[(i,j);(i,j-1)]} = C_{i,j} \cdot (R_{i,j)Y} + R_{i,j-1})$$

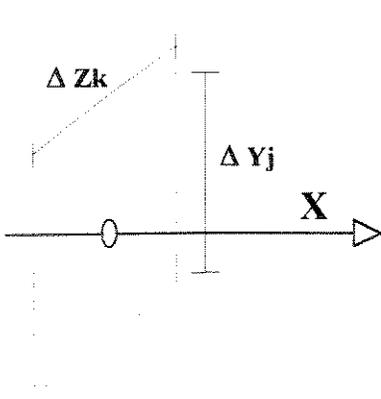
$$Tal_{[(i,j);(i,j+1)]} = C_{i,j} \cdot (R_{i,j)Y} + R_{i,j+1})$$

$$\frac{1}{(Tal_{[(i,j);(i,j)]})} = \frac{1}{(Tal_{[(i,j);(i-1,j)]})} + \frac{1}{(Tal_{[(i,j);(i+1,j)]})} + \frac{1}{(Tal_{[(i,j);(i,j-1)]})} + \frac{1}{(Tal_{[(i,j);(i,j+1)]})}$$

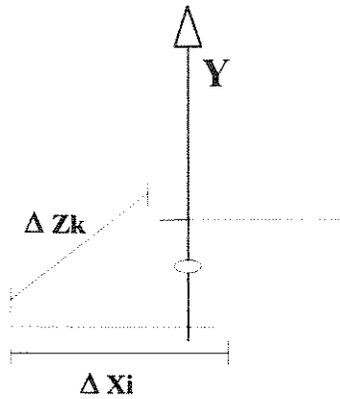
③ - Sistema em Diferenças Finitas Tridimensional:



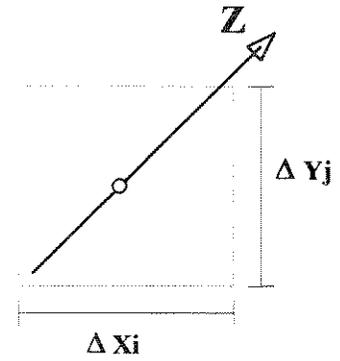
Relações de Área de Passagem de Fluxo Térmico:



$$At_x = \Delta Y_j \cdot \Delta Z_k$$



$$At_y = \Delta X_i \cdot \Delta Z_k$$



$$At_z = \Delta X_i \cdot \Delta Y_j$$

Relações de Resistências Térmicas:

$$\underline{R_{i,j,k)X} = \frac{\Delta X_i}{2 \cdot k_{i,j,k} \cdot At_x}}$$

$$\underline{R_{i-1,j,k} = \frac{\Delta X_{i-1}}{2 \cdot k_{i-1,j,k} \cdot At_x}}$$

$$\underline{R_{i+1,j,k} = \frac{\Delta X_{i+1}}{2 \cdot k_{i+1,j,k} \cdot At_x}}$$

$$\underline{R_{i,j,k)Y} = \frac{\Delta Y_j}{2 \cdot k_{i,j,k} \cdot At_y}}$$

$$\underline{R_{i,j-1,k} = \frac{\Delta Y_{j-1}}{2 \cdot k_{i,j-1,k} \cdot At_y}}$$

$$\underline{R_{i,j+1,k} = \frac{\Delta Y_{j+1}}{2 \cdot k_{i,j+1,k} \cdot At_y}}$$

$$\underline{R_{i,j,k)Z} = \frac{\Delta Z_k}{2 \cdot k_{i,j,k} \cdot At_z}}$$

$$\underline{R_{i,j,k-1} = \frac{\Delta Z_{k-1}}{2 \cdot k_{i,j,k-1} \cdot At_z}}$$

$$\underline{R_{i,j,k+1} = \frac{\Delta Z_{k+1}}{2 \cdot k_{i,j,k+1} \cdot At_z}}$$

Relação do Capacitor Térmico:

$$C_{i,j,k} = \rho_{i,j,k} \cdot c'_{i,j,k} \cdot Vol_{i,j,k}$$

onde: $Vol_{i,j,k} = \Delta X_i \cdot \Delta Y_j \cdot \Delta Z_k$ → Volume do elemento

Relações dos Parâmetros de Relaxação:

$$\underline{\text{Tal}_{[(i,j,k);(i-1,j,k)]} = C_{i,j,k} \cdot (R_{i,j,k})X + R_{i-1,j,k}}$$

$$\underline{\text{Tal}_{[(i,j,k);(i+1,j,k)]} = C_{i,j,k} \cdot (R_{i,j,k})X + R_{i+1,j,k}}$$

$$\underline{\text{Tal}_{[(i,j,k);(i,j-1,k)]} = C_{i,j,k} \cdot (R_{i,j,k})Y + R_{i,j-1,k}}$$

$$\underline{\text{Tal}_{[(i,j,k);(i,j+1,k)]} = C_{i,j,k} \cdot (R_{i,j,k})Y + R_{i,j+1,k}}$$

$$\underline{\text{Tal}_{[(i,j,k);(i,j,k-1)]} = C_{i,j,k} \cdot (R_{i,j,k})Z + R_{i,j,k-1}}$$

$$\underline{\text{Tal}_{[(i,j,k);(i,j,k+1)]} = C_{i,j,k} \cdot (R_{i,j,k})Z + R_{i,j,k+1}}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{(\text{Tal}_{[(i,j,k);(i,j,k)]})} &= \frac{1}{(\text{Tal}_{[(i,j,k);(i-1,j,k)]})} + \frac{1}{(\text{Tal}_{[(i,j,k);(i+1,j,k)]})} + \frac{1}{(\text{Tal}_{[(i,j,k);(i,j-1,k)]})} + \dots \\ &\dots + \frac{1}{(\text{Tal}_{[(i,j,k);(i,j+1,k)]})} + \frac{1}{(\text{Tal}_{[(i,j,k);(i,j,k-1)]})} + \frac{1}{(\text{Tal}_{[(i,j,k);(i,j,k+1)]})} \end{aligned}$$

Apêndice 'B'

Passos para Cálculo da Resistência Elétrica do Forno de Kantal

Passos de Cálculo:

- ① Achar a potência necessária para a fusão de uma dada massa de certo material:
⇒ Pot [kJ];
- ② Estimar um tempo total de aquecimento e encontrar a potência de trabalho:
⇒ Pot [W];
- ③ Considerando as perdas do sistema, encontrar a potência mínima de aquecimento;
- ④ Com a potência de aquecimento, calcular a resistência total necessária ao fio de kantal e a corrente útil de trabalho;
- ⑤ Com o valor da resistência, calcular o comprimento do fio de kantal e com o valor numérico da área útil do molde, calcular o diâmetro da bobina de resistência;

Descrição Numérica dos Passos de Cálculo:

$$Q_{\text{total}} = Q_{\text{aq}} + Q_{\text{f}} + Q_{\text{sq}} \qquad Q_{\text{aq}} = m \cdot c_p \cdot (T_{\text{f}} - T_{\text{ini}})$$

$$Q_{\text{f}} = m \cdot H \qquad Q_{\text{sq}} = m \cdot c_p \cdot (T_{\text{sq}} - T_{\text{f}})$$

onde: Q_{total} = Calor necessário para aquecer certa massa de material da temperatura " T_{ini} " até " T_{sq} " [Joules];

Q_{aq} = Calor necessário para aquecer certa massa de material da temperatura " T_{ini} " até " T_{f} " [Joules];

m = Massa de material [kg];

c_p = Calor específico do material [kJ/(kg.°C)];

T_f = Temperatura de fusão do material [°C];

H = Calor latente de fusão [kJ/kg];

T_{sq} = Temperatura de sobreaquecimento após a fusão do material [°C];

Q_f = Calor necessário para fundir certa massa de material [J];

Q_{sq} = Calor necessário para aquecer certa massa de material da temperatura " T_f até " T_{sq} " [J];

Elementos do Sistema:

Raio interno do molde = 5,0 cm

Raio externo do molde = 3,5 cm

Densidade do Chumbo = 11.373 kg/m³

Densidade do Alumínio = 2.707 kg/m³

Calor específico do Pb = 130 J/kg.°C

Calor específico do Al = 896 J/kg.°C

Temperatura de Fusão do Pb = 327 °C

Temperatura de Fusão do Al = 660 °C

Calor Latente do Pb = 23.000 kJ/kg

Calor Latente do Al = 377.000 kJ/kg

Volume interno do molde = 2,822 x 10⁻⁴ m

Resultados de Cálculo:

Encontrou-se como resultados da potência total para a fusão dos respectivos materiais, considerando um sobreaquecimento de 50 °C para ambos os casos após a fusão completa destes materiais, de:

$$P_{\text{total}} - \text{Pb} = 755,63 \text{ W}$$

e

$$P_{\text{total}} - \text{Al} = 1216,22 \text{ W}$$

Utilizou-se uma potência de cálculo de 2000 W, com tensão de trabalho em 220 V e corrente útil de 8,35 A.

O comprimento total do fio de kantal foi de 15 m, sendo este de 1,348 Ω/m (Referência: Kantal 80% Ni + 20% Cr - Bitola = 1,024 mm - Especificação B&S 18).

Apêndice 'C'

Propriedades Termofísicas Utilizadas

Características Gerais de Metais - Referência: [Perry - 1963]

Chumbo **Pb**:

	H [J/kg]	k [W/m.K]	c [J/kg.K]	d [kg/m ³]	T _f [°C]
Líquido	23 x 10 ³	16,1	159	10500	327
Sólido	23 x 10 ³	35	130	11373	

Alumínio **Al**:

	H [J/kg]	k [W/m.K]	c [J/kg.K]	d [kg/m ³]	T _f [°C]
Líquido	377 x 10 ³	250	890	2500	660
Sólido	377 x 10 ³	204	896	2707	

Características do Aço Carbono < 0,2 %C:

	H [J/kg]	k [W/m.K]	c [J/kg.K]	d [kg/m ³]
Líquido	260 x 10 ³	29,3	670	7400
Sólido	260 x 10 ³	25,4	679	7000

Características da Liga de Alumínio "7075":

Referência: "Metals Handbook - Ligas de Al 8ª Ed. V. I, pp. 948"

(5.5% Zn, 2.5% Mg, 1.5% Cu, 0.3% Cr)

	H [J/kg]	k [W/m.K]	c [J/kg.K]	d [kg/m ³]	T _{transf} [°C]
Líquido	377 x 10 ³	250	890	2500	638
Sólido	377 x 10 ³	290	730	2800	476

Características do Aço Inox utilizado na LITEMA - Com. e Ind. Ligas Téc. Ltda - CF-8M:
Referência: "Metals Handbook - Metais Ferrosos 9ª Ed. V. II, p. 116"

(0.08%max C, 1.5%max Mn, 2.00%max Si, 0.04%max P, 0.04%max S, 18.0 a 21.0 % Cr, 9.0 a 12.0 % Ni, 2.0 a 3.0 % Mo)

T Liquidus [°C] (*)	T Solidus [°C] (*)	Coef. de Exp. Linear [$\mu\text{m}/\text{m.K}$]	Calor Específico no sólido [J/kg.K]	Condutiv. Térmica no sólido [W/m.K]	Densidade no sólido [kg/m ³]
1370 °C	1340 °C	16,0	500	16,3	7750

(*) Valores verificados experimentalmente (Medidos);

Características do Ferro Fundido utilizado na FASA-Zinser Industrial S.A. :

T Liquidus [°C] (*)	T Solidus [°C] (*)	Calor Específico no sólido [J/kg.K]	Condutiv. Térmica no sólido [W/m.K]	Densidade no sólido [kg/m ³]
1205 °C	1157 °C	450	37	7550

(*) Valores verificados experimentalmente (Medidos);

Características de Moldes de Areia Seca: Referência: [Kubo-1985]

Calor Específico [J/kg.K]	Condutiv. Térmica [W/m.K]	Densidade [kg/m ³]
700 - 1000	0.6 - 1.3	1400 - 1600

Apêndice 'D'

Cálculo da Estimativa Inicial da Espessura Efectiva para os Experimentos com Molde de Areia

A estimativa de cálculo para o coeficiente de transferência de calor do metal líquido para o meio ambiente, levando em consideração todos os fatores associados a este transporte é dado de forma simplificada por:

$$\frac{1}{h_{\text{cref}}} \cong \frac{1}{h_{\text{Esp.Molde}}} = \frac{\xi_{\text{Efet.Molde}}}{k_{\text{Molde}}}$$

onde: $\xi_{\text{Efet.doMolde}}$ = Espessura efetiva do molde, que atua na transferência de calor do sistema [m] (esta representa a resistência ativa do molde);

k_{Molde} = Condutividade térmica do material de molde [W/m.K];

Entretanto a espessura efetiva do molde é dada na dinâmica do processo, uma vez que a condutividade térmica dos molde de areia apresentam valores extremamente baixos (ordem de 0.8 W/m.K), conforme pode-se observar na Figura D1. Para representar em termos numéricos o valor desta espessura efetiva, lançamos mão de um sistema unidimensional aplicado na interface molde/metal, e monitora-se o perfil de temperatura ao longo do tempo de ensaio, conforme a Figura D1.

Necessita-se de um valor constante para esta espessura (devido a entrada inicial do programa numérico), onde optou-se pela valor relativo a metade do tempo de máximo de ensaio.

Para o sistema da LITEMA - Com. e Ind. de Ligas Téc. e Mat. Ltda., tem-se um tempo máximo de ensaio de 120 s, onde observou-se a espessura relativa máxima para o tempo de 60 s. As curvas obtidas para o ensaio unidimensional e valores relativos da condutividade térmica são dados nas Figura D2, D3 e D4. O valor estimado do cálculo do coeficiente de resfriamento obtido nestes foi de 44 W/m².K, o valor do coeficiente "Newtoniano" é de 800W/m².K (metal/molde).

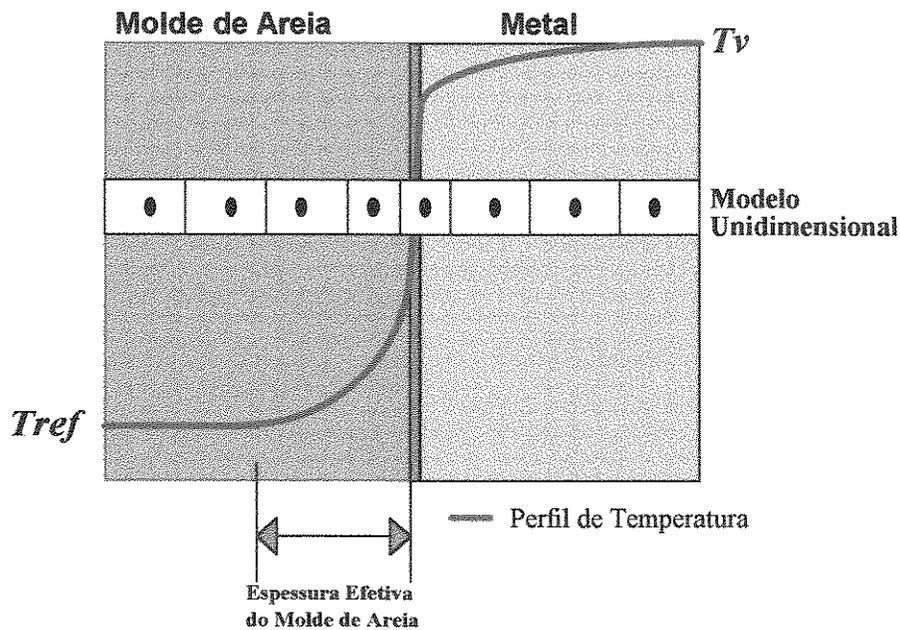


Figura D1 - Modelo para a estimativa da espessura efetiva no cálculo dos coeficientes de resfriamento envolvidos nos ensaios com moldes de areia

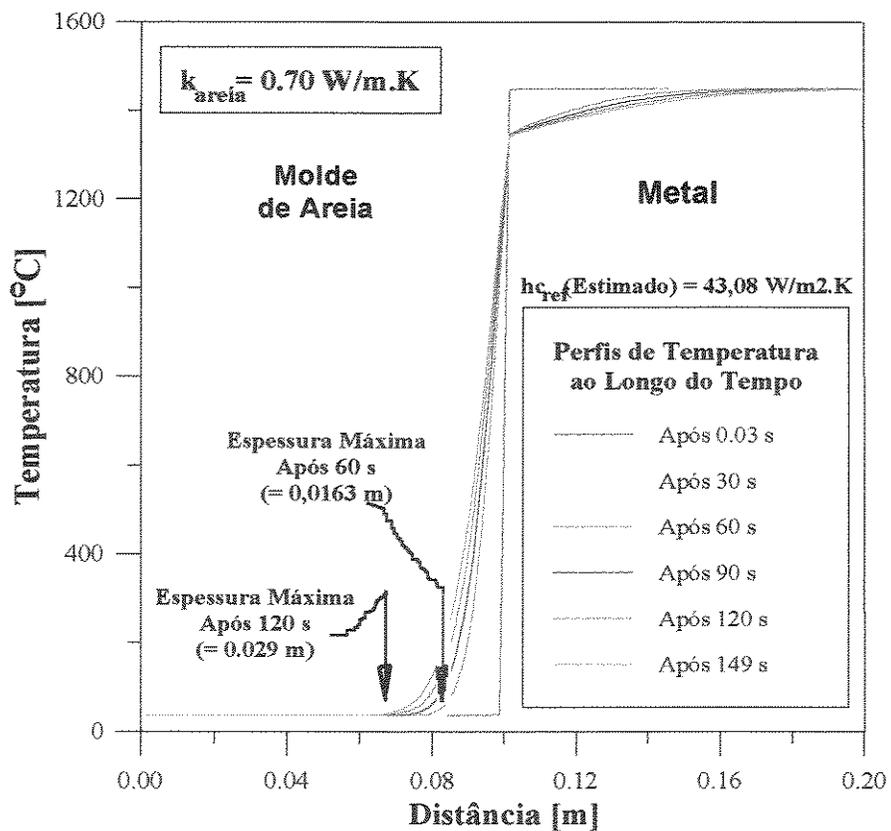


Figura D2 - Estimativa da espessura efetiva no cálculo dos coeficientes de resfriamento envolvidos nos ensaios com moldes de areia ($k_a = 0,70 \text{ W/m.K}$) - LITEMA Com. e Ind. de Ligas Téc. e Mat. Ltda.

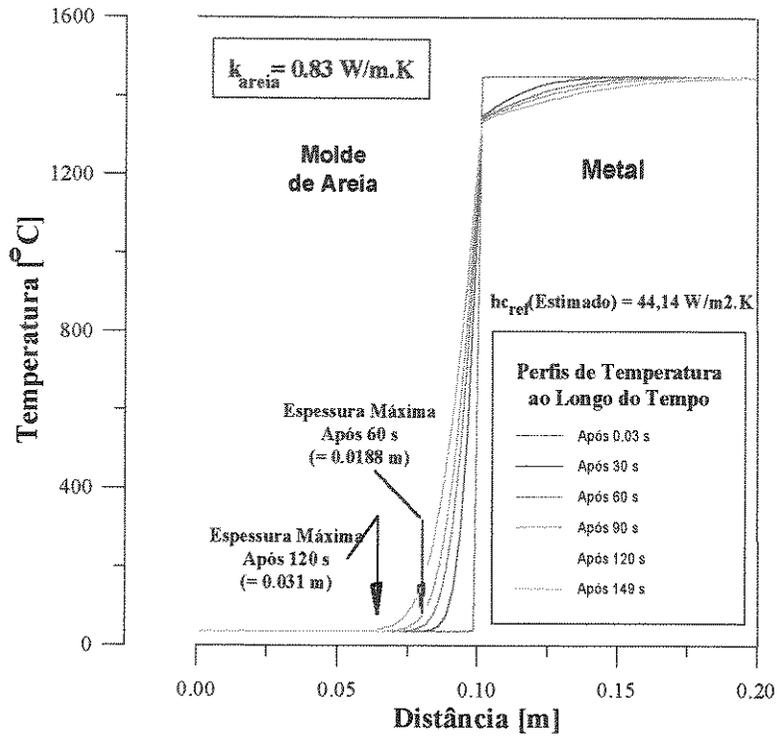


Figura D3 - Estimativa da espessura efetiva no cálculo dos coeficientes de resfriamento envolvidos nos ensaios com moldes de areia ($k_a = 0,83 \text{ W/m.K}$) - LITEMA Com. e Ind. de Ligas Téc. e Mat. Ltda.

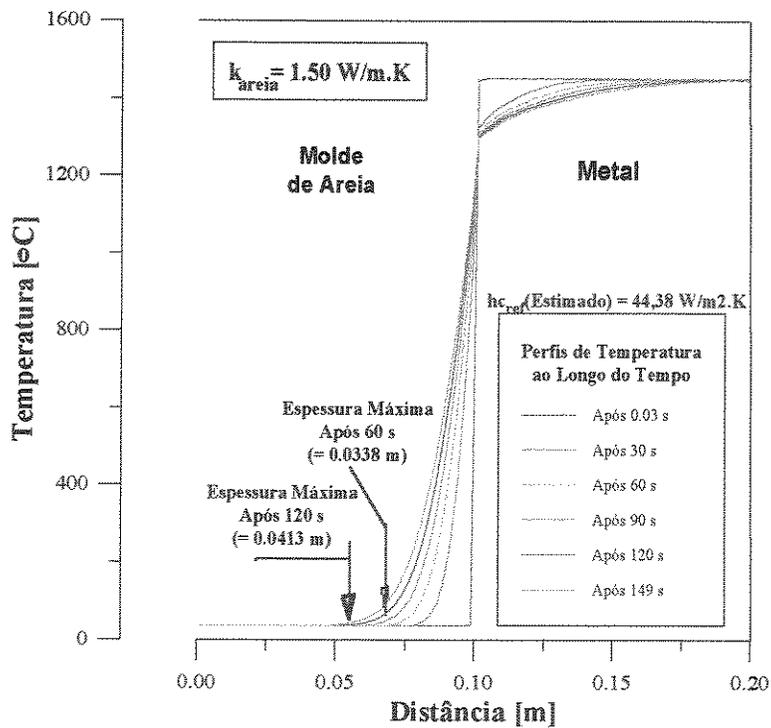


Figura D4 - Estimativa da espessura efetiva no cálculo dos coeficientes de resfriamento envolvidos nos ensaios com moldes de areia ($k_a = 1,50 \text{ W/m.K}$) - LITEMA Com. e Ind. de Ligas Téc. e Mat. Ltda.

Para o sistema da FASA-ZINSER Industrial S.A., tem-se um tempo máximo de ensaio de 400 s, onde observou-se a espessura relativa máxima para o tempo de 200 s. As curvas obtidas para o ensaio unidimensional e valores relativos da condutividade térmica é dado na Figura D5. O valor estimado do cálculo do coeficiente de resfriamento obtido nestes foi de $23,56 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$, o valor do coeficiente "Newtoniano" é de $800 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$.

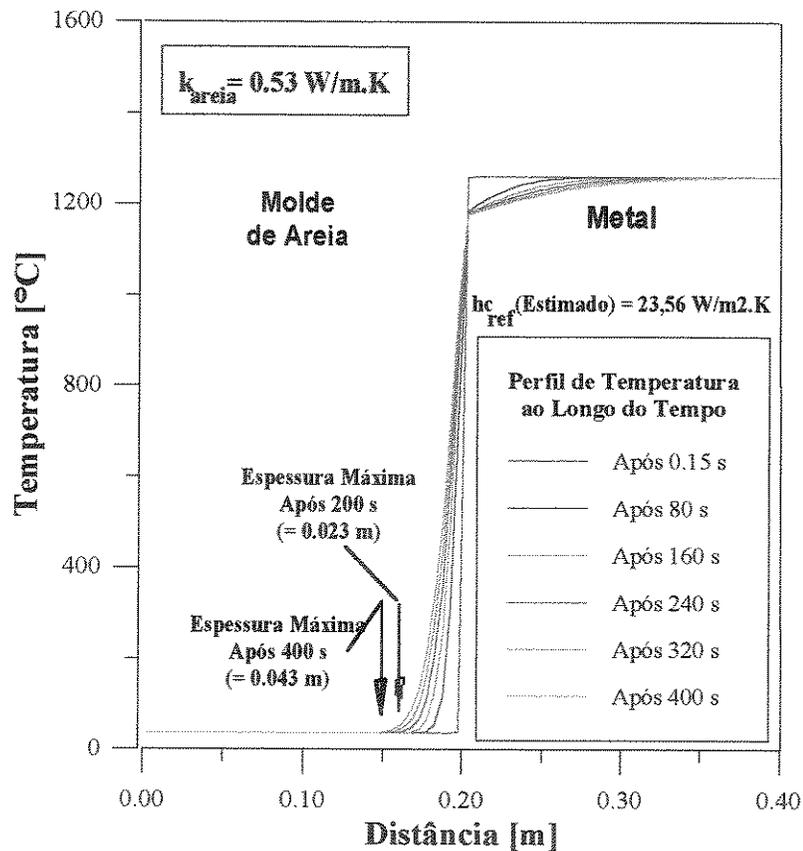


Figura D5 - Estimativa da espessura efetiva no cálculo dos coeficientes de resfriamento envolvidos nos ensaios com moldes de areia ($k_a = 0,53 \text{ W/m}\cdot\text{K}$)

FASA-ZINSER Industrial S.A.

Apêndice 'E'

Simbologia Utilizada

Letras Latinas:

A - Área da secção transversal	[m ²]
c - Calor específico	[J/kg.K]
C - Concentração	[%]
Ct - Capacitância térmica	[W/K]
D - Constante de Difusão	[m ² /s]
f _s - Fração Sólida em peso	[adimensional]
G - Gradiente de temperatura	[K/m]
h - Coeficiente de transferência de calor	[W/m ² .K]
H - Entalpia do processo	[J/m ³]
k - Condutividade térmica	[W/m.K]
k' - Coeficiente de redistribuição do soluto	[adimensional]
k ₀ - Coeficiente de segregação no equilíbrio	[adimensional]
K - Constante de cálculo	[adimensional]
L - Calor Latente de fusão da liga	[J/kg]
m - massa	[kg]

N_0 - Densidade de Pontos de Nucleação	[adimensional]
P - Pressão	[N/m ²]
Q - Termo de geração interna de calor	[J/m ³ .K.s]
Q - Energia de ativação	[cal]
R_t - Resistência térmica	[m ² .K/W]
r = Raio do poro	[m]
S - Sensibilidade do tempo local de solidificação	[s.m ² .K/W]
t = Tempo	[s]
T = Temperatura	[°C]
v = volume	[m ³]
V = Velocidade da isoterma liquidus	[m/s]
x - Coordenada de posição	
y - Coordenada de posição	
z - Coordenada de posição	

Letras Gregas:

σ - Energia interfacial	[cal]
ρ - Densidade	[kg/m ³]
μ_i - Fração volumétrica	
χ - Constituinte de liga (propriedade variante)	
λ - Espaçamento dendrítico local	[m]
λ_2 - Espaçamento dos Braços Dendríticos Secundários	[m]
Σ - Somatório	

Δ - Diferença

∂ - Diferencial parcial

Ω - Parâmetro de ajuste de Clyne-Kurz

Superescritos:

n - tempo

n + 1 - Incremento de tempo

Subscritos:

\square_o - Inicial

\square_s - Sólido

\square_l - Líquido

\square_p - Pastoso

\square_e - Eutético

\square_g - Fração local

\square_i - Posição indicada pelo contador 'i'

Abreviações:

EBD - Espaçamento dos braços dendríticos

MDF - Método de Diferenças Finitas

MEF - Método de Elementos Finitos