

## **APLICAÇÃO DE UM MODELO NUMÉRICO PARA A PREVISÃO DA ESTRUTURA BRUTA DE FUSÃO DE UMA LIGA DE ALUMÍNIO**

**Alexandre Pitol Boeira**

Universidade Federal do Rio Grande do Sul - Departamento de Metalurgia - Laboratório de Fundição  
Av. Bento Gonçalves, 9500, Cx.P.:15.021, CEP 91501-970 - Porto Alegre – RS  
[pitol@vortex.ufrgs.br](mailto:pitol@vortex.ufrgs.br)

**Jaime Alvares Spim Jr.**

Universidade Federal do Rio Grande do Sul - Departamento de Metalurgia - Laboratório de Fundição  
Av. Bento Gonçalves, 9500, Cx.P.:15.021, CEP 91501-970 - Porto Alegre – RS  
[spim@vortex.ufrgs.br](mailto:spim@vortex.ufrgs.br)

**Resumo.** A aplicação de modelos numéricos que possam prever com precisão a formação de estruturas metalúrgicas obtidas, após a solidificação de peças da indústria de fundidos, é fundamental para o controle e melhoria da qualidade. Nas duas últimas décadas inúmeros estudos têm concentrado esforços na obtenção de correlações entre o sistema global de solidificação (tipo de molde, metal, resfriadores, posicionamento de massalotes e canais de alimentação, etc.) com a qualidade final do produto fundido. A maioria destes estudos objetiva compreender o fenômeno da solidificação associado à formação da estrutura e sua relação com a formação de defeitos, características mecânicas, condições de acabamento superficial e, principalmente, condições de otimização do processo, os quais objetivam a minimização dos custos com maximização da qualidade. O presente trabalho tem como objetivo a aplicação de um modelo numérico baseado na técnica de diferenças finitas, para a previsão do mapa térmico de um sistema de solidificação e, através deste, estimar a formação da estrutura bruta de fusão da liga Al-3,5%Cu. Para isto comparam-se os resultados gerados pelo modelo numérico com a análise térmica das curvas de resfriamento experimentais e a análise metalográfica dos lingotes solidificados. O sistema de solidificação, composto por um conjunto de moldes de areia, cobre e aço; acopladas em bases de areia, cobre e aço, permitiu o estudo de diferentes taxas e direções de crescimento da frente de solidificação. Os resultados indicam uma boa correlação entre os resultados de modelo com as estruturas observadas.

**Palavras chave:** Solidificação, Modelo Numérico, Análise Térmica, Estrutura de Fusão.

### **1. Introdução**

Numa análise tecnológica, a abertura global da economia impulsiona o desenvolvimento de ferramentas que auxiliem determinados tipos de produtores e fabricantes na busca pela melhor relação entre qualidade e produtividade. Particularmente, em indústrias que se valem de processos de fusão e solidificação, a busca pela excelência na produção passa obrigatoriamente pelo controle da microestrutura de solidificação. Boettinger et al (2000) definem a microestrutura, não somente como sendo o centro da ciência dos materiais e engenharia, mas como também, a ligação estratégica entre o processamento dos materiais e o comportamento destes. Sendo assim, o seu controle é essencial para qualquer atividade de processamento dos materiais, destacando-se para inúmeros materiais, especialmente metais e ligas, a solidificação. O desenvolvimento microestrutural de um componente fundido depende diretamente da taxa de solidificação (Velasco, 1999) e, sendo ela associada ao fluxo de calor interfacial metal/molde, pode-se estabelecer uma relação direta entre a microestrutura e o tipo de material empregado na produção de uma peça.

O desenvolvimento de processadores cada vez mais poderosos torna a modelagem matemática uma poderosa ferramenta no desenvolvimento de novos produtos ou processos, incrementando a qualidade da parte ou produto com o aumento do conhecimento do processo e diminuição dos custos de produção na medida que a variabilidade do processo diminui (Velasco, 1999). Porém, em processos de fundição, a modelagem torna-se bastante dificultada uma vez que engloba fenômenos físicos complicados, tais como: mecânica de fluidos com variação de fases, contração, porosidade e macrosegregação em ligas, tensões térmicas no lingote solidificado e transferência de calor entre o metal e o molde (Sergey, 2002). Uma das dificuldades na modelagem da transferência de calor durante a solidificação encontra-se na associação dos fenômenos térmicos e microestruturais (Velasco, 1999).

As condições de transferência de calor durante a solidificação são complexas, uma vez que as condições interfaciais entre o metal e o molde variam com o tempo. O resfriamento de um fundido não é homogêneo, pois algumas partes da peça resfriam a taxas diferentes de outras, ocasionando assim, além de tensões térmicas, a formação de gap de ar com diferentes evoluções (Bellet, 1996). A literatura apresenta drástica escassez de informações em relação à evolução do gap. Segundo Sergey et al (2002) e Spim et al (2000), o gap varia em função do tempo na medida que a solidificação esta ocorrendo. Esta variação temporal é associada às condições físicas do molde (geometria, tamanho e condições

superficiais), temperaturas envolvidas no sistema (superaquecimento e temperatura do molde) e do fluxo de líquido no momento do vazamento e enchimento do molde. A influência da evolução do gap de ar na evolução e formação microestrutural aumenta na medida que utilizam-se sistemas que envolvam altos valores de difusividade térmica, tais como: fundição sobre pressão, molde permanente e coquilha (Santos, 2001). Tradicionalmente, a previsão microestrutural em produtos fundidos está definida na correlação de alguns parâmetros medidos experimentalmente, normalmente: taxa de resfriamento, gradiente de temperatura e velocidade de crescimento da interfase sólido/líquido; com parâmetros medidos diretamente nas amostras, comprimentos microestruturais característicos, densidade e distribuição dos grãos e composições (frações) das fases. Outro parâmetro importante a ser relacionado é a eficiência de nucleação, descrito pelo ângulo de contato. Stefanescu et al (1998) associa a taxa de resfriamento e, por consequência, os outros parâmetros experimentais como sendo resultado da associação da macro transferência de calor entre o fundido e a vizinhança, com a evolução térmica relacionada à cinética da transformação.

No presente trabalho objetiva-se implementar um modelo numérico, baseado na técnica de diferenças finitas, que auxilie na previsão do mapa térmico de um sistema de solidificação e, através deste, estimar a formação da estrutura bruta de fusão da liga Al-3,5% Cu.

## 2. Análise matemática da solidificação

Na análise matemática da transferência de calor na solidificação, emprega-se a equação geral da condução de calor em regime transitório, considerando propriedades isotrópicas em relação à condutibilidade térmica (Santos, 1996):

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

onde:  $\rho$  = densidade do material [kg/m<sup>3</sup>];  
 $c$  = calor específico do material [J/kg.K];  
 $T$  = temperatura [K];  
 $x, y$  e  $z$  = coordenadas do espaço vetorial [m];  
 $k$  = condutibilidade térmica do material [W/m.K];  
 $\dot{q}$  = o termo fonte da equação de diferenças parciais

O termo fonte da equação de diferenças parciais, Eq. (1), que representa a geração interna de calor, é associado à liberação de calor latente proveniente da transformação de fase (Quaresma, 1997) e varia em função da temperatura:

$$\dot{q} = \rho.L \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (2)$$

sendo:  $L$  = calor latente do material [J/kg];  
 $f_s$  = fração solidificada [%];  
 $t$  = tempo [s];

Considerando que não há difusão no sólido e mistura completa no líquido e que a variação da fração sólida é função apenas da temperatura, utiliza-se a formulação proposta por Scheil (Garcia, 2001):

$$f_s = 1 - \left( \frac{T_f - T}{T_f - T_L} \right)^{\frac{1}{K_0}} \quad (3)$$

onde:  $T_f$  = Temperatura de fusão [K];  
 $T_L$  = Temperatura liquidus [K];  
 $K_0$  = coeficiente de distribuição do soluto [adimensional]

Em relação à variação das propriedades físicas do material nos diferentes estados (sólido, líquido ou pastoso), é suficientemente aceitável a aproximação do seu valor, quando no estado pastoso, como sendo uma relação percentual entre a quantidade de sólido e líquido relativo ao seus valores quando líquido ou sólido, à exceção do calor específico, que deve ser balanceado com o calor latente, conforme a Eq. (4):

$$c = (c_s - c_L).f_s.c_L - L. \frac{\partial f_s}{\partial T} \quad (4)$$

sendo  $c_s$  e  $c_L$ , o calor latente do material quando no estado sólido e líquido, respectivamente.

Considerando estas relações e admitindo-se fluxo de calor bidirecional pode-se substituir a Eq. (1) por:

$$\rho \left( c - L \frac{\partial f_s}{\partial T} \right) \frac{\partial T}{\partial t} = k \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (5)$$

e considerando o termo  $(L \frac{\partial f_s}{\partial T})$  como sendo um pseudo-calor específico, assim

$$c' = c - L \frac{\partial f_s}{\partial T} \quad (6)$$

é denominado calor específico aparente (Spim, 2000 e Santos, 2001).

A inserção da Eq. (6) na Eq. (5), resulta:

$$\rho c' \frac{\partial T}{\partial t} = k \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (7)$$

## 2.2. Modelo matemático de diferenças finitas e a analogia com circuitos elétricos

A expansão dos termos da Eq. (7), em diferenças, resulta:

$$\rho c' \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} = k \left\{ \left[ \frac{(T_{i+1,j}^{n+1} - 2.T_{i,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1})}{\Delta x^2} \right] + \dots + \left[ \frac{(T_{i,j+1}^{n+1} - 2.T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1})}{\Delta x^2} \right] \right\} \quad (8)$$

onde n representa a indicação do tempo instantâneo e n+1, o tempo instantâneo acrescido de  $\Delta T$ . Valendo-se da abordagem de transformação de uma malha de elementos térmicos em elementos elétricos (Santos, 1996 e Quaresma, 1997), obtem-se a seguinte versão na forma implícita do método de diferenças finitas:

$$T_{i,j}^n = - \frac{\Delta t}{\tau_{i+1,j}} T_{i+1,j}^{n+1} - \frac{\Delta t}{\tau_{i-1,j}} T_{i-1,j}^{n+1} - \dots - \frac{\Delta t}{\tau_{i,j+1}} T_{i,j+1}^{n+1} - \frac{\Delta t}{\tau_{i,j-1}} T_{i,j-1}^{n+1} + \left( 1 + \frac{\Delta t}{\tau_{i,j}} \right) T_{i,j}^{n+1} \quad (9)$$

sendo, o parâmetro  $t$  equivante ao parâmetro de relaxamento de um circuito elétrico passivo (capacitores + resistores), dado por:

$$t = C_t . R_t \quad (10)$$

A solução da Eq. (9) é dada pela montagem de um sistema linear do tipo:

$$\Delta t [M_\tau] \{T_{i,j}\}^{n+1} = \{T_{i,j}\}^n \quad (11)$$

## 3. Metodologia Experimental

Para aferição do modelo numérico proposto, confeccionou-se um jogo de coquilhas e moldes articuláveis, em geometria cilíndrica, Fig. (1), que permitiram um controle qualitativo das taxas e direções de extração de calor. Este controle se fez a partir de bases e moldes de diferentes materiais, cobre eletrolítico (99,45%), Aço AISI1020 e areia, seca AFS 50/60, moldada pelo processo de cura frio. A Tabela (1) representa os valores das propriedades térmicas e físicas, dos moldes e coquilhas, relevantes para o modelo.

Tabela 1. Propriedades termo-físicas dos materiais dos moldes e bases (Spim, 2000 e Metals, 1998)

Propriedades termo-físicas	Areia	Cobre	Aço Baixo Carbono
Condutividade Térmica [W/m.K]	12,55	397,48	50,2
Calor Específico [J/kg.K]	1.050	419	490
Densidade [kg/m <sup>3</sup> ]	1.540	8.960	7.850
Difusividade [m <sup>2</sup> /s]	3e-7	9,8e-5	1,2e-5

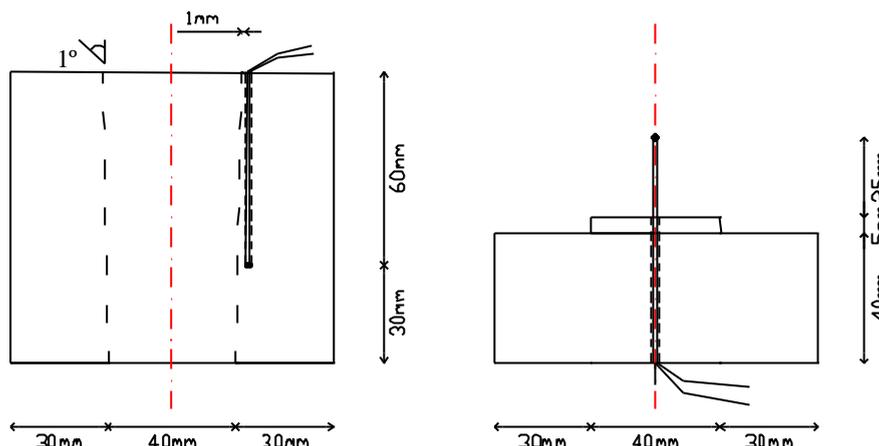


Figura 1. Geometria dos Moldes e Bases Cilíndricas com os respectivos termopares.

Como material de trabalho, utilizou-se a liga Al-3,5%Cu, obtida da fusão, em forno a indução com cadinho de grafite, de alumínio e cobre comercialmente puro. Após a verificação química da liga, em espectrômetro de emissão ótica, realizou-se o vazamento do metal nas coquilhas e moldes com o auxílio de um cadinho de grafite pré-aquecido a 500°C. O superaquecimento utilizado foi de aproximadamente 17%. A Tab. (2) representa os valores das propriedades termo-físicas da liga Al-3,5%Cu.

Tabela 2. Propriedades termo-físicas da liga Al-3,5%Cu (Metals, 1998 e Pehlke, 1982)

Calor específico do líquido [J/kg.K]	1.059
Calor específico do sólido [J/kg.K]	1.092
Densidade do líquido [kg/m <sup>3</sup> ]	2.480
Densidade do sólido [kg/m <sup>3</sup> ]	2.680
Condutividade térmica do líquido [W/m.K]	85
Condutividade térmica do sólido [W/m.K]	193
Calor Latente [J/kg.K]	381.900
Temperatura solidus [°C]	548
Temperatura liquidus [°C]	645

Em relação ao sistema de aquisição e processamento de dados experimentais, foram utilizados termopares tipo K, Chromel/Alumel, inseridos estrategicamente no banho e na coquilha, conforme Fig. 1. As curvas experimentais obtidas foram filtradas com a aplicação da média móvel quadrática dos pontos e então, inseridas numa planilha de visualização gráfica. Após o resfriamento natural dos lingotes, estes foram seccionados longitudinalmente, lixados e atacados com água régia fluorada para a revelação da macroestrutura bruta de solidificação.

Na resolução numérica da solidificação, utilizaram-se as seguintes condições de contorno:

- Ausência de correntes convectivas no metal líquido;
- Fluxo bidirecional de calor;
- Coefficiente de transferência de calor newtoniano constante;
- Propriedades termo-físicas da liga, no intervalo de solidificação, variando de acordo com a equação de Scheil;
- Propriedades do metal sólido e líquido diferentes;

As três amostras obtidas experimentalmente são provenientes de diferentes configurações de moldes e coquilhas, conforme a Tab. (3).

Tabela 3. Distribuição dos materiais dos moldes e das bases para os diferentes sistemas utilizados.

Sistema	Molde	Base
1	areia	areia
2	areia	aço
3	cobre	cobre

#### 4. Resultados e Discussões

A análise química demonstrou a adequação da liga obtida em relação à proposta. Os coeficientes de transferência de calor metal/molde utilizados para os diferentes materiais foram:

Tabela 4. Coeficientes de transferência de calor empregados para os diferentes materiais de molde.

Material	Coefficiente de transferência de calor (W/m.K)
Areia	100
Aço	500
Cobre	2000

Na Figura (2) observam-se as macroestruturas dos lingotes obtidos e na Fig. (3), apresentam-se as curvas de resfriamento e aquecimento, experimentais e simuladas, referentes a cada sistema.

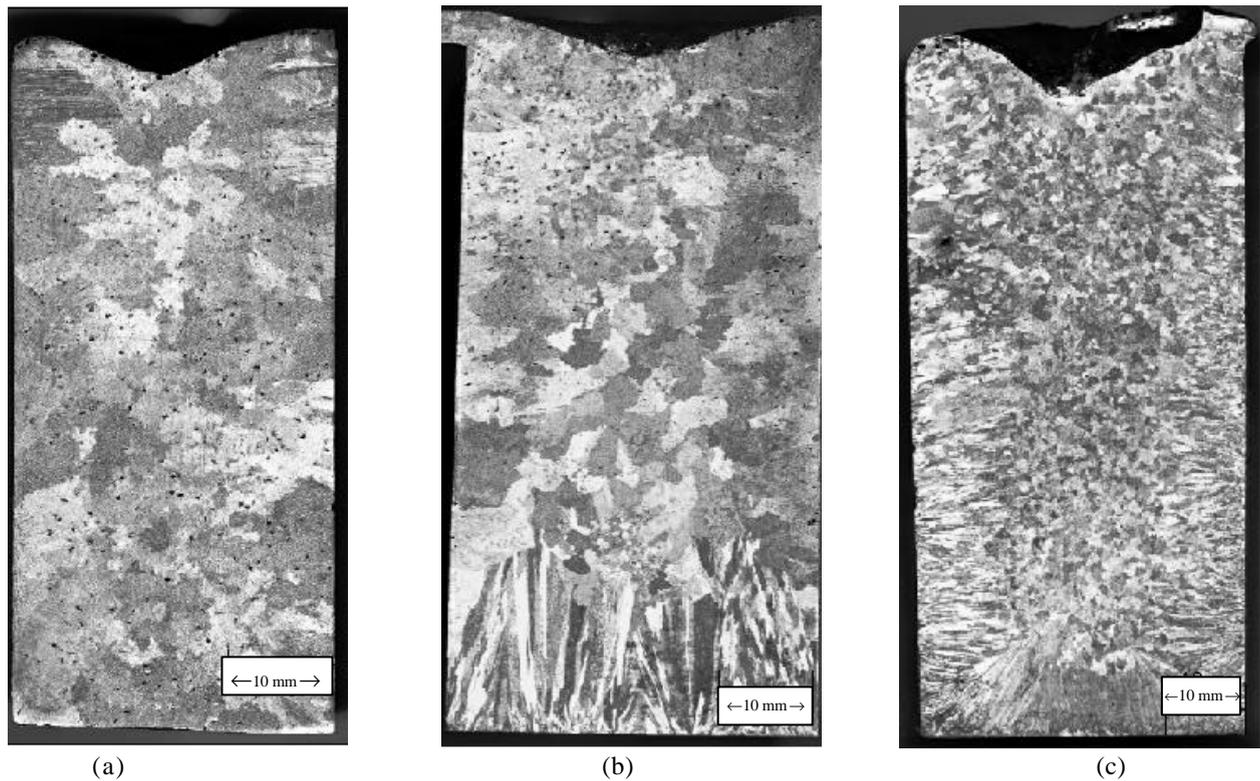


Figura 2. Macrografias das estruturas brutas de fusão dos diferentes Sistemas sendo: (a) Sistema 1: molde totalmente de areia, (b) Sistema 2: molde de areia e base de aço e (c) Sistema 3: molde totalmente de cobre.

A análise macrográfica da Figura (2a) identifica a presença de grãos equiaxiais grandes ao longo de toda a amostra e assim, evidencia uma solidificação lenta e equalizada. Estes fatores associam ao sistema uma forma extensiva de resfriamento. A comparação entre os dados experimentais e simulados, da evolução térmica do sistema composto de molde e base de areia, Fig. 3a, mostra uma discrepância, até a aproximadamente 50 segundos, entre as curvas de resfriamento do metal. Este elevado desvio atingido nos instantes iniciais da solidificação pode estar relacionado ao fato de que, além do modelo desconsiderar a dinâmica de vazamento, assumir coeficiente de transferência de calor constante,  $100 \text{ W/m}^2\text{K}$ , e das baixas taxas de calor envolvidas em sistemas de areia, o modelo considera o resfriamento como sendo progressivo. A associação destes fatores é evidente na medida que a curva experimental decai mais rapidamente que a simulada. A diferença entre o modo de resfriamento do sistema real e do modelo associa um patamar maior de resfriamento para o experimento, conforme a Fig. 3a, e a ausência da dinâmica de vazamento exclui toda a influência das correntes convectivas no resfriamento do lingote. Em relação ao aquecimento do molde, a curva simulada apresenta uma evolução relativamente paralela a experimental. Provavelmente o incremento de condições de contorno específicas para moldes de areia seja adequado.

No sistema 3, coquilha de cobre, correspondente a macrografia da Fig. 2c e às curvas da Fig. 3c, apresenta-se uma situação aproximadamente oposta à anterior. A curva de resfriamento do modelo concorda muito bem com a curva experimental nos instantes iniciais, aproximadamente 15 segundos, e depois desvia-se da curva experimental. Como o tratamento matemático prevê uma condição de resfriamento progressiva e o sistema comporta-se como tal, conforme Fig. 2c, as condições de contorno do modelo são, de uma forma geral, mais adequadas. Porém, a elevada discordância

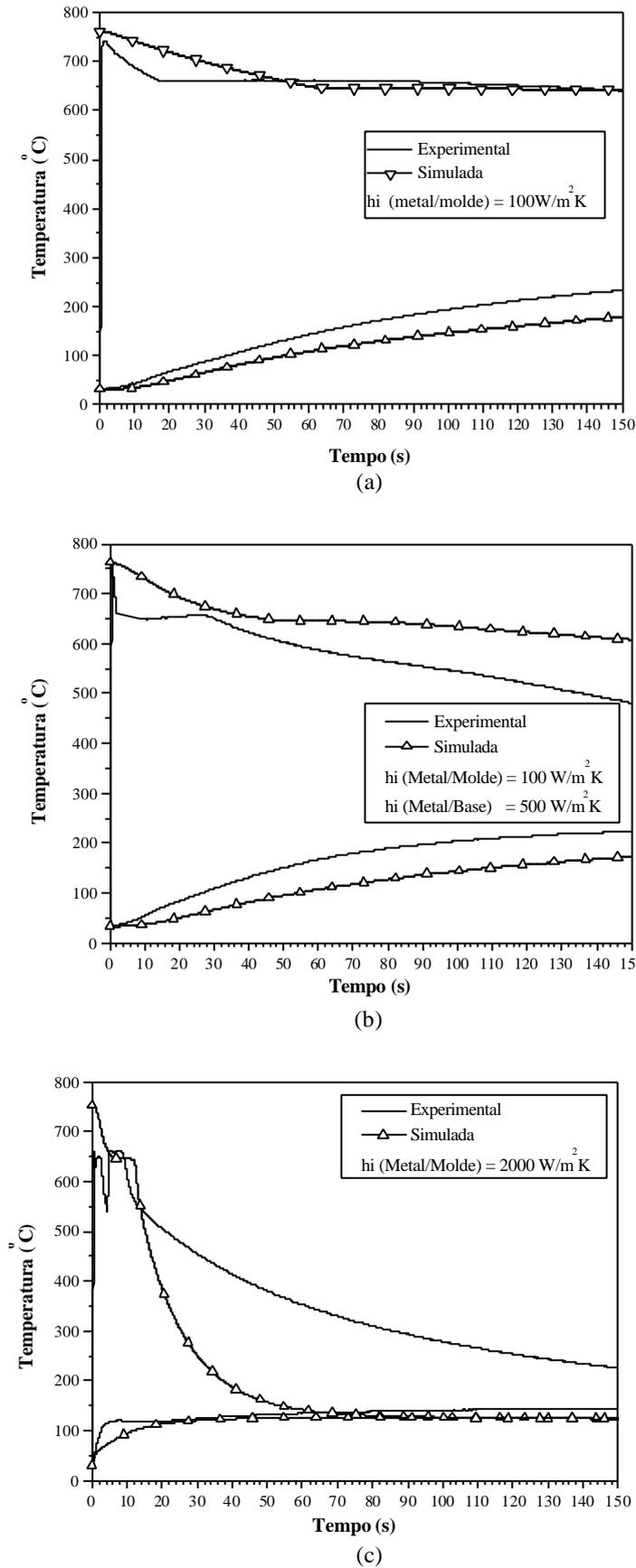


Figura 3. Curvas experimentais e simuladas de resfriamento e aquecimento do metal do molde, respectivamente para os Sistemas (a) 1, (b) 2 e (c) 3.

da curva de resfriamento a partir de um determinado instante, pode estar relacionada a formação de um gap de ar, na interface metal/molde, originado tanto da contração do metal quanto da evolução de gases, o qual reduz drasticamente a eficiência térmica do sistema. Em relação a comparação das curvas de aquecimento do molde, estas mostram uma ótima concordância a partir de aproximadamente 20 s. do início do vazamento. O Sistema 2, conforme observa-se na macrografia da Fig. (2b) e nas curva experimentais e simuladas, Fig. (3b), apresenta-se de uma forma intermediária as duas situações anteriormente descritas, tornando o modelo, de uma forma global, mais representativo em função da melhor adequação do volume de controle e uma condição mais estável de extração de calor bidirecional.

## 5. Conclusões

O modelo mostrou-se bastante adequado na estimativa da solidificação do metal líquido e no resfriamento das coquilhas e dos moldes, validando a sua utilização na previsão da estrutura bruta de solidificação, pois, a variação da estrutura apresenta-se intimamente ligada a taxa de resfriamento do metal e condições de transferência de calor do sistema. Para uma minimização dos erros torna-se evidente a inserção de parâmetros de transferência de calor variáveis com o tempo.

## 6. Agradecimentos

O desenvolvimento deste trabalho contou com o apoio da Fundação Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - CAPES, através de uma bolsa de mestrado e da Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul - FAPERGS.

## 7. Referências

- Bellet, M., Decultieux, F., Ménai, M., Bay, F., Levailant, C., Chenot, J.-L., Schmidt, P. and Svensson, I.L., 1996, "Thermomechanics of the cooling stage in casting processes: three-dimensional finite element analysis and experimental validation", *Metallurgical and Materials Transactions B*, Vol.27B, pp. 81-100.
- Boettinger, W.J., Coriell, S.R., Greer, A.L., Karma, A., Kurz, W., Rappaz, M. and Trivedi, R., 2000, "Solidification Microstructures Recent Developments, Future Directions", *Acta Materialia*, Vol.48, pp. 43-70.
- Metals Handbook, 1998, ASM International, Vol.15, Casting, Metals Park, OH, USA.
- Garcia, A., 2001, "Solidificação: Fundamentos e Aplicações", Ed. Unicamp, SP, Brasil, 399 p.
- Pehlke, R.D., 1982, "Summary of Thermal Properties for Casting Alloys and Mold Materials", University of Michigan, USA.
- Quaresma, J.M.V., Santos, C.A., Spim, J.A. and Garcia, A., 1997, "Influencia do material e da espessura da parede do molde nos coeficientes de transferência de calor nas interfaces metal/molde e molde/ambiente" – Proceedings of Second International Conference on Metallurgic and Materials Technology, São Paulo, Brazil.
- Santos, C.A., Cheung, N., Spim, J.A. and Garcia A., 1996, "Análise tridimensional da solidificação de ligas através de uma abordagem numérica baseada na analogia entre sistemas térmicos e circuitos elétricos", *Proceeding of VI Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences ENCIT*, Santa Catarina, Brazil.
- Santos, C.A., Quaresma, J.M.V. and Garcia, A., 2001, "Determination of transient heat transfer coefficients in chill mold castings", *Journal of Alloys and Compounds*, Vol.319, pp. 174-186.
- Sergey, S.V. and Paolucci, S., 2002, "Numerical simulation of filling and solidification of permanent mold castings", *Applied Thermal Engineering*, Vol.22, pp. 229-248
- Spim, JA. and Garcia A., 2000, "A modified network approach for modeling solidification of complex-shaped domains", *Numerical Heat Transfer Part B Fundamentals*, Vol.38, pp.75-92.
- Spim, Jr. J.A. and Garcia, A., 2000, "Numerical analysis of solidification of complex shaped bodies: coupling of mesh elements of different geometries", *Materials Science and Engineering A*, Vol.277, pp. 198-205
- Stefanescu D.M. and Pang H., 1998, "Modeling of casting solidification Stochastic or Deterministic ?", *Canadian Metallurgical Quarterly*, Vol.37, pp.229-239.
- Velasco, E., Talamantes, J., Cano, S.C., Valtierra, S., Mojica, J.F. and Colas, R., 1999, "Casting-chill interface heat transfer during solidification of na aluminium alloy", *Metallurgical and Materials Transactions B*, V30B, pp.773-778.

## APPLICATION OF A NUMERIC MODEL FOR THE FORECAST OF THE ALUMINUM ALLOY CASTING STRUCTURE

### Alexandre Pitol Boeira

Universidade Federal do Rio Grande do Sul - Departamento de Metalurgia - Laboratório de Fundição  
Av. Bento Gonçalves, 9500, Cx.P.:15.021, CEP 91501-970 - Porto Alegre, RS, Brazil  
[pitol@vortex.ufrgs.br](mailto:pitol@vortex.ufrgs.br)

### Jaime Alvares Spim Jr.

Universidade Federal do Rio Grande do Sul - Departamento de Metalurgia - Laboratório de Fundição

Av. Bento Gonçalves, 9500, Cx.P.:15.021, CEP 91501-970 - Porto Alegre, RS, Brazil  
[spim@vortex.ufrgs.br](mailto:spim@vortex.ufrgs.br)

**Abstract.** *The application of numeric models which can foresee accurately the formation of metallurgical structures it is fundamental for the control and improvement of the quality. In the last two decades a lot of researchers have concentrate efforts to obtaining the right correlation of a solidification global system (mold material, metal, coolers, gating and raising position, etc.) with the final quality of the casting. Most of these studies are to understand the phenomenon of the solidification and the formation of the structure and its relationship with the defects, mechanical characteristics, superficial conditions and mainly optimization conditions of the process. The present work has as objective the application of a numeric model based on the Finite Differences Method, it to the forecast of the solidification thermal map and to understand the formation of the metallurgical structure of the Al-3,5%Cu alloy. The results of the thermal analyze and the cooling curves are compared with the results from numeric model and with the macrostructure of the casting. The solidification system is composed by molds made in sand, copper and steel. The results indicate a good correlation between results from model and from experiments.*

**Keywords:** *Solidification, Numeric Model, Thermal Analysis, Metallurgical Structure*