

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
Escola de Engenharia

Departamento de Metalurgia

DESENVOLVIMENTO DE SOFTWARE PARA A ANÁLISE DA DIFUSÃO DE HI-
DROGÊNIO EM AÇO NA ZONA DE RESFRIAMENTO TERCIÁRIA DO LINGOTA-
MENTO CONTÍNUO

LISIANE TREVISAN

Trabalho de Diplomação

Orientador: Prof. Dr. Jaime Alvares Spim Júnior

Porto Alegre

2005

“Todos os nossos sonhos podem se tornar verdadeiros se tivermos a coragem de buscá-los”

Walt Disney

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, gostaria de agradecer a Deus por todas as oportunidades que apareceram na minha vida, pela inteligência em saber aproveitar todas as que estavam ao meu alcance, pela saúde e todas as lições que aprendi até o momento na minha vida.

Gostaria também de agradecer principalmente aos meus familiares, minha mãe e pai (Maria e Beto) por todo o apoio que eles me ofereceram e me ajudam até hoje, conseguir realizar o meu sonho: ser Engenheira, que vocês tenham forças para ajudar aos outros filhos que também vão passar por momentos difíceis e cheios de alegria dentro da graduação. Que eles transmitam todo o conhecimento de vida que possuem para as outras pessoas, princípios de honestidade e trabalho. Aos meus irmãos, Suzana e João Pedro, pela ajuda de cada dia, muito obrigado a todos vocês, continuem batalhando pois um dia vocês chegarão lá. Ao meu namorado, Vinicius, por todo o apoio que ele me deu, ajuda a conquistar todos os meus objetivos, principalmente nas horas difíceis, obrigado.

Aos meus familiares, que sempre me deram força para conseguir concluir o meu curso. Aos meus amigos, muitos estiveram longe em alguns momentos, mas não esqueci de nenhum deles, todos fazem parte desta conquista. Aos amigos que conquistei na faculdade, convivência de muitas aulas e trabalhos foi possível conquistar amigos de verdade.

Aos professores da Universidade Federal, obrigado pelos conhecimentos adquiridos, pela ajuda a alcançar o conhecimento, fundamentais para a minha formação em Engenharia Metalúrgica, incluindo o Prof. Jaime Spim, meu orientador, pela oportunidade em desenvolver um trabalho muito importante para a minha formação.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	13
2.1.	Máquina de Lingotamento Contínuo.....	14
2.1.1	Distribuidor.....	15
	2.1.2 Molde	15
2.1.3	Agitação Eletromagnética.....	17
2.1.4	Resfriamento secundário	17
2.1.5	Unidade de extração e desempenho	18
	2.1.6 Oxicorte	19
2.1.7	Resfriamento terciário	19
2.2.	Solidificação.....	20
2.2.1	Transferência de massa e calor.....	20
2.2.2	Modos de transferência de calor.....	21
2.2.3	Solidificação de aço baixo carbono.....	23
2.3.	Simulação Numérica.....	24
2.3.1	Modelagem Matemática	25
2.4.	Difusão de hidrogênio no aço.....	29
2.4.1	Teoria da difusão	29
2.4.2	Teoria da difusão do aço	30
3	METODOLOGIA	34
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	41
5	CONCLUSÕES.....	47
6	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	48
7	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	49

LISTA DE FIGURAS

Figura 2-1: Esquemático da máquina de lingotamento contínuo,incluindo as principais regiões de resfriamento	14
Figura 2-2 : Simulação das isotermas de um tarugo submetido ao resfriamento primário, submetido a diferentes velocidades de lingotamento.(Shi,2003).....	16
Figura 2-3: Esquema do molde, enfatizando a região do menisco, posicionamento da válvula submersa e comportamento das camadas de pó fluxante.(ABM,2005).....	17
Figura 2-4: Mapeamento térmico da casca esférica do tarugo formado durante resfriamento secundário.C.A . Santos et.al. (2003).....	18
Figura 2-5 : Máquina de lingotamento contínuo – demonstrando a influencia do comprimento metalúrgico. Dvorkin,Eduardo N. et.al (2003)	20
Figura 2-6:Modos de transferência de calor atuantes no sistema metal/molde.(Garcia,2001)	21
Figura 2-7: Representação esquemática do perfil térmico do sistema metal/molde, destacando as formas de transferência de calor e coeficientes de extração de calor. (Garcia,1983).....	22
Figura 2-8: Diagrama de fase para a liga binária Ferro-Carbono . ASM Handbook	24
Figura 3-1 : Referencias para as coordenadas no tarugo, utilizado para os cálculos de temperatura e de concentração de hidrogênio	35
Figura 3-2 : Sistema de conversão entre sistema bidimensional e tridimensional, Figura esquerda representa sistema bidimensional (coordenadas x e y).....	36
Figura 3-3 : Representação esquemática do referencial tridimensional utilizado para a montagem da matriz tridimensional.....	36
Figura 3-4 : Fluxograma resumido da estrutura lógica de processamento da rotina desenvolvida	37
Figura 3-5 : Dimensões e instrumentação do tarugo ensaiado.....	38
Figura 3-6 : Fotografia do experimento realizado, a esquerda, instrumentação do tarugo dentro do forno, e a direita, mostrando como foi realizado o resfriamento.....	39
Figura 4-1 : Gráfico de resultados experimentais adquiridos para o primeiro ensaio realizado.....	41
Figura 4-2 : Dados obtidos experimentalmente para o segundo ensaio.....	42
Figura 4-3 : Gráfico de ajuste do valor do coeficiente de transferência de calor ,valor constante utilizado ao longo da simulação	43
Figura 4-4 : Comparação entre os dados experimentais e dados simulados.....	43
Figura 4-5 : Gráfico com resultados da simulação executada , $h = 20 \frac{W}{m^2.K}$	44
Figura 4-6 : Gráfico de concentração de hidrogênio para cada termopar monitorado.....	45
Figura 4-7 : Detalhe do gráfico anterior, mudando-se o intervalo de análise do tempo	46

LISTA DE TABELAS

Tabela 2-1: Modos de transferência de calor sob a quais o aço é submetido durante o lingotamento contínuo	22
Tabela 2-2: Modos de transferência de calor existentes durante o processo de lingotamento contínuo	23
Tabela 3-1 : Posição dos termopares monitorados durante o resfriamento.(mm)	38
Tabela 3-2 : Características do aço ensaiado, incluindo dados como corrida e qualidade...	39
Tabela 3-3 : Tabela de constante utilizadas no calculo de difusão de hidrogênio.....	40

LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS

Abreviatura do Símbolo	Descrição	Unidade
$\frac{\partial T}{\partial t}$	Taxa de resfriamento	$^{\circ}\text{C}/\text{seg}$
	Massa específica do material	$\frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$
c	Calor específico do material condutor	$\frac{\text{J}}{\text{Kg.K}}$
k	Condutividade térmica do material ao longo da linha de condução	$\frac{\text{W}}{\text{m}^2.\text{K}}$
$\frac{\partial T}{\partial t}$	Taxa de variação de temperatura (sinal depende de ser resfriamento ou aquecimento)	$\frac{\text{K}}{\text{seg}}$
$\frac{\partial T}{\partial x}$	Gradiente térmico	$\frac{\text{K}}{\text{m}}$
$\frac{\partial}{\partial x} \left\ \frac{\partial T}{\partial x} \right\ ; \frac{\partial}{\partial y} \left\ \frac{\partial T}{\partial y} \right\ ; \frac{\partial}{\partial z} \left\ \frac{\partial T}{\partial z} \right\ $	Varição do gradiente térmico ao longo dos eixos	$\frac{\text{K}}{\text{m}^2}$
q	Geração interna de calor, associado a transformação de fase	J
H	Calor latente de fusão	$\frac{\text{J}}{\text{Kg}}$
$\zeta_{i,j,k}$	Capacidade térmica do elemento	
d.	Distância percorrida pelo fluxo entre os pontos vizinhos	m
J	Primeira lei de Fick	
D	Coeficiente de difusão	$\frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$
R	Constante Universal dos gases	$8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol.K}}$
Concentração Inicial H ₂	Concentração de hidrogênio no aço líquido	%
D ₀ (Austenita)	Constante característica do sistema de difusão na Austenita	$\frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$
Q (Austenita)	Energia de ativação do hidrogênio dissolvido na Austenita	$\frac{\text{cal}}{\text{mol}}$

D_0 (Ferrita)	Constante característica do sistema de difusão na ferrita	$\frac{cm^2}{s}$
Q (Ferrita)	Energia de ativação do hidrogênio dissolvido na Ferrita	$\frac{cal}{mol}$
T	Temperatura absoluta	K
A_t	Área de extração de calor.	cm^2
$\frac{\partial f_s}{\partial t}$	Taxa de fração solidificada	
$A_t \cdot \Delta x$	Equivale ao volume do elemento (i,j,k)	m^3

RESUMO

A produção mundial de aço, atualmente situa-se em torno de 1 bilhão de toneladas, dos quais acima de 90 % são produzidos por lingotamento contínuo. Sendo assim, é de fundamental importância assegurar qualidade satisfatória do aço produzido, garantir produtividade e principalmente redução de defeitos da liga produzida, obtendo um produto com características metalúrgicas mais uniformes possíveis.

Sabendo-se que determinadas impurezas existentes no aço prejudicam significativamente as propriedades mecânicas, foi desenvolvida uma rotina numérica para simular o resfriamento do aço e principalmente quantificar a concentração de hidrogênio na estrutura cristalina do aço sólido na zona de resfriamento terciário no processo de Lingotamento Contínuo, partindo-se do valor de concentração de hidrogênio no distribuidor.

O hidrogênio interage com a maioria dos metais devido a uma série de mecanismos, resultando em modificações das propriedades mecânicas que levam a fraturas e trazem grandes problemas. Sua incorporação dentro da estrutura ocorre durante o processamento e processo de fabricação sob o qual o metal está submetido.

Como a realização de medidas que quantificam a concentração de hidrogênio no aço sólido é complicada e acarretam alto custo, a rotina desenvolvida está baseada na aferição do modelo térmico. Assegurando um modelo térmico eficaz, é possível através da discretização da Lei de Fick, quantificar a concentração de hidrogênio na matriz metálica.

ABSTRACT

The world production of steel is around 1 billion of ton, to which continuous casting produces 90%. Therefore, it is very important to assure a good quality of steel, obtaining a good number of products that have uniform metallurgical characteristics.

Some impurities, which are in the steel, impair significantly the mechanical properties so it was developed software to simulate the steel cooling in the continuous casting.

The hydrogen reacts with most of the metal due to there be many mechanisms physicals, resulting changes in mechanical properties like breaking or another problem. This incorporation inside the lattice occurs during the making up and the manufacture process.

Making the measure hydrogen's diffusion in the solid steel is complicated and it is very expensive. The routine is based on the thermic model, if it is correct, based on the Fick's Law, it will be possible to know the quantity of hydrogen in the solid metal.

1 INTRODUÇÃO

Atualmente a indústria metal-mecânica tem exigido cada vez mais materiais que suportem diversas condições de serviço, submetidas a diferentes tipos de esforços mecânicos. Por estes motivos, é necessário adquirir conhecimento pleno sobre a fabricação do metal e determinar claramente quais são os parâmetros determinantes no processo, buscando maximizar produtividade e qualidade do produto final.

Sendo assim, o desenvolvimento de rotinas numéricas são de suma importância no contexto científico, aliando a teoria e a prática (minimizando custos relativos a testes pelo método tentativa e erro). Através da simulação, onde os resultados podem ser apresentados pela forma gráfica, é possível mudar características do projeto, compreender os fenômenos, possibilitando desenvolver novos produtos, reduzir de custos, prever defeitos, entre outros.

O trabalho desenvolvido descreve o processo de solidificação do aço na região terciária do lingotamento contínuo baseado no mapeamento térmico. Partindo-se da Segunda Lei de Fick, lei que descreve a variação de concentração de um soluto em função do tempo dentro da estrutura cristalina do metal, obteve-se as equações matemáticas representativas da difusão de hidrogênio no aço sólido.

O hidrogênio quando presente no aço, mesmo em concentrações da ordem de ppm, prejudica a resistência mecânica do aço, fragilizando-o. A concentração de hidrogênio dissolvido no metal depende de vários fatores metalúrgicos pertencentes ao processo de fabricação. A simulação numérica possibilita descrever o movimento interno do mesmo na microestrutura do material, determinando quais as condições ótimas de tempo e temperatura para que possa ser maximizado a difusão obtendo-se um aço, obtendo aço com alta qualidade microestrutural.

Entretanto, a medida de concentração do hidrogênio no estado sólido é difícil de ser realizada e alguns testes são caros e passíveis a erros. Na prática industrial, o monitoramento de difusão de hidrogênio não pode ser quantificado sendo apenas relacionado a concentração de hidrogênio que parte do aço líquido com a porcentagem de refugo apresentado pelo processo de laminação. Esta metodologia é passível a erro, pois existem outros problemas que podem ocasionar trincas também. Assim, o objetivo principal do trabalho desenvolvido é quantificar o perfil de concentração de hidrogênio dentro da microestrutura do aço solidificado, a partir da região de resfriamento terciária.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O método de obtenção do aço para a fabricação de “produtos industriais” (em tempo de guerras) eram obtidos por tarugos fundidos. Estes produtos tinham que ser suficientemente grandes para serem transformados em armas e ferramentas, por exemplo.

No século XIX apareceram as primeiras idéias envolvendo lingotamento contínuo de aços, que apresentaram várias vantagens quando comparado ao lingotamento contínuo convencional, como ganho em rendimento (grande quantidade de toneladas de aço), eliminação de algumas etapas de processo e uniformidade da qualidade do produto.

Podemos citar vários motivos que impulsionaram para o desenvolvimento acelerado da implantação do processo de lingotamento contínuo nas usinas siderúrgicas: as crises energéticas, a redução significativa de custos e a possibilidade de lingotamento de aço com características metalúrgicas mais exigentes impulsionaram o método para a utilização mundial. E conforme a tendência mundial, cada vez mais, o processo LC (Lingotamento Contínuo) vem sendo implantado com sucesso.

Dentre as principais vantagens do processo podemos citar: facilidade de controle do processo, repetibilidade, rendimento, economia de energia e mão-de-obra e menores emissões nocivas para o meio ambiente, minimização de perdas de material (com perdas por carepa e por corte e também sistema oxicorte).

Desde os primeiros projetos desenvolvidos, vários estudos foram executados para a melhora do processo e até estudos para viabilizar a produção de tiras, tarugos e blocos, não somente de aço mas também de outros materiais não-ferrosos. Como exemplo prático: produção de tiras e placas finas em cobre; agitador eletromagnético para o controle da solidificação, desenvolvimento de moldes curvos, e principalmente oscilação do molde.

2.1. Máquina de Lingotamento Contínuo

Em uma classificação simplificada, as máquinas de LC podem ser diferenciadas pelas seções permitidas pelo molde (formas do molde) e velocidades permitidas dentro do processo. Os tarugos são lingotados em moldes de cobre refrigerados a água, em formas geométricas diferentes. Como diferenças básicas entre os equipamentos podemos citar: configuração geométrica do equipamento (vertical e horizontal), condições de resfriamento do tarugo, prática de desoxidação do metal líquido no distribuidor, entre outros.

O lingotamento contínuo consiste resumidamente em um processo de extração de calor no qual o metal fundido é convertido em um produto sólido (tarugo), através de diferentes etapas de resfriamento: molde (resfriamento primário), região de sprays (resfriamento secundário) e região de radiação livre (resfriamento terciário). A máquina de lingotamento contínuo pode ser descrita esquematicamente pela Figura 2.1, onde destaca-se as regiões de resfriamento sofridos pelo tarugo.

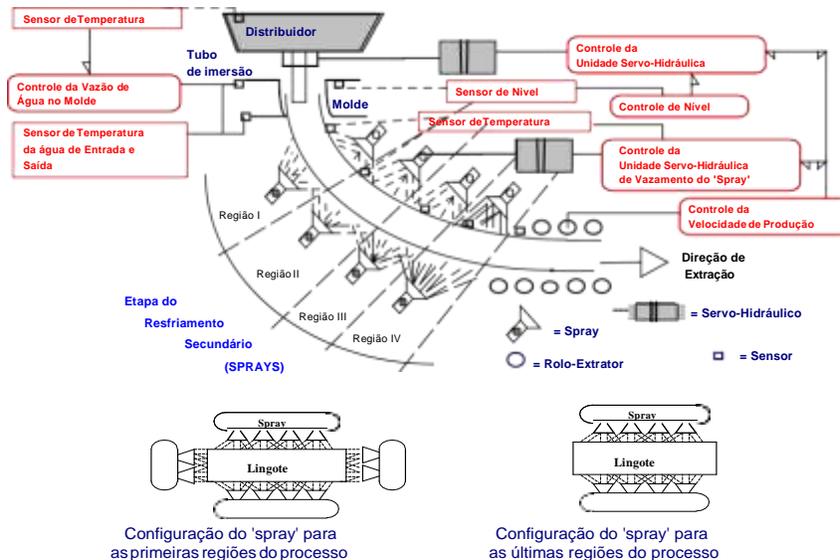


Figura 2-1: Esquemático da máquina de lingotamento contínuo, incluindo as principais regiões de resfriamento (Spim,96).

2.1.1 Distribuidor

O distribuidor é o equipamento intermediário entre a panela vinda do forno e o molde, distribui o aço líquido entre os múltiplos veios, proporcionando a flotação das inclusões e permitindo um fluxo constante de aço líquido no molde e também serve de reservatório para que sejam abastecidas as várias panelas (ABM,2005).

Dentro do distribuidor existe várias outras variáveis que devem ser controladas como tipo de válvula (a função principal da válvula é uniformizar o jato, evitando o turbilhamento), uso do pó lubrificante (evitar perda de calor por radiação), tempo mínimo de residência do aço (tempo que permite a flotação de inclusões) e também a proteção do fluxo de aço (deve ser evitado o turbilhamento interno ao aço para facilitar a flotação das inclusões).

As inclusões de óxido ou produtos de reoxidação são produtos gerados que devem ser controlados, pois podem causar sérios problemas durante a laminação ou nas propriedades finais do produto. É possível que ocorra com a incorporação de gases contidos na atmosfera como O₂, N₂, H₂, no banho, devido ao contato do aço com a atmosfera nesta etapa.

2.1.2 Molde

É a parte mais importante da máquina de lingotamento, quanto considerado o fenômeno de solidificação, por ser também a única parte mecânica da máquina que esta exposta ao metal líquido. Sua função é criar uma camada homogênea solidificada através de transferência de calor uniforme e eficiente (casca sólida – resfriamento primário). Entre os parâmetros mais importantes do processo de resfriamento primário, pode se destacar o nível e flotação do metal líquido no molde, características como composição, conicidade, espessura, condições de refrigeração, e principalmente a espessura mínima da casca solidificada na saída do molde.

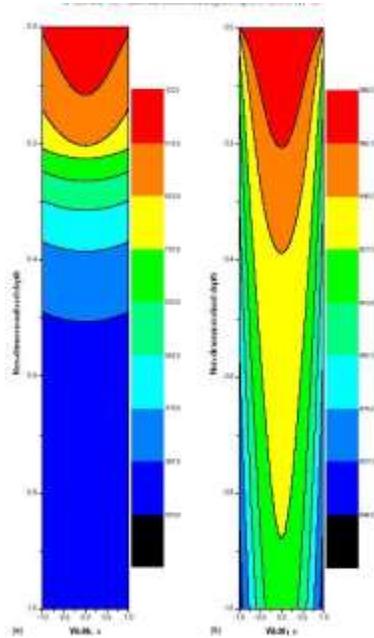


Figura 2-2 : Simulação das isotermas de um tarugo submetido ao resfriamento primário, submetido a diferentes velocidades de lingotamento.(Shi,2003).

Os moldes são fabricados de cobre ou ligas de cobre refrigerados por água através de um sistema de resfriamento adequado. As ligas de cobre são mais utilizadas porque possui boa condutividade térmica, mas deve minimizar as distorções permanentes no molde. São utilizados elementos de liga para potencializar as características necessárias para trabalhar sob estas condições severas de trabalho. A água de refrigeração pode trabalhar sob pressão também, fato que potencializa as características do resfriamento.

Durante o processo, o molde sofre um movimento oscilatório para evitar a aderência entre a camada solidificada e o molde de cobre. Esta oscilação está voltada para a eliminação de defeitos na casca solidificada.

A obtenção de produtos com qualidade superior, livre de defeitos e com boa forma dimensional requer a minimização das distorções térmicas ao longo do molde, uniformidade no comportamento termo-mecânico das faces e prevenção da formação de bolhas no canal de refrigeração. Como a forma do molde e a interação da casca sólida com a parede são governadas pela distribuição no molde, características como velocidade da água, qualidade e pressão, espessura do canal são fundamentais para um fluxo de calor uniforme e constante no sistema.

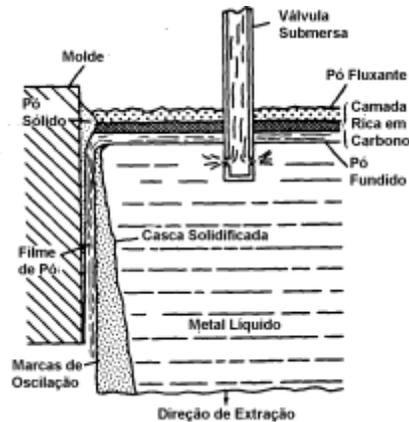


Figura 2-3: Esquema do molde, enfatizando a região do menisco, posicionamento da válvula submersa e comportamento das camadas de pó fluxante.(ABM,2005).

2.1.3 Agitação Eletromagnética

A agitação eletromagnética (SEM), é usada no lingotamento contínuo para movimentar o aço líquido através de campos magnéticos rotativos, com objetivo de aumentar a qualidade do aço lingotado. Os agitadores podem ser posicionados tanto no veio quanto no molde, sendo que na posição do molde representa um ganho significativo, devido a uniformidade microestrutural resultante no metal solidificado.

2.1.4 Resfriamento secundário

O resfriamento secundário consiste na região do LC ao qual o aço é submetido a troca de calor forçada por um fluxo de ar e água (região dos chuveiros), com objetivo de promover a solidificação e minimizar os riscos de “break-out” no oxicorte (solidificação incompleta). O spray de ar e a distribuição de água na superfície são de extrema importância no controle de temperatura na superfície e também controle da qualidade superficial. Deve garantir um resfriamento uniforme, já na região do resfriamento terciário a variação de temperatura depende apenas da perda de calor por radiação.

Como as regiões atingidas pela água apresentam alta taxa de extração de calor, é importante evitar valores de reaquecimento da superfície do tarugo acima de 100 a 50° C, para evitar tensões térmicas. Por isso, o tarugo deve ser uniformemente resfriado em toda sua largura até a saída da zona de resfriamento.

Segundo a literatura, as principais características dentro do processo de resfriamento secundário devem ser seguidas são as seguintes:

- Capacidade de extração de calor - a completa solidificação do tarugo deve ocorrer antes da região de início do processo de desempenho, pois a existência de regiões líquidas no interior do tarugo nesse ponto representa um agravante na formação de defeitos devido aos esforços que o tarugo está submetido;
- Comportamento térmico da superfície ao longo de todas as zonas de resfriamento - objetiva um comportamento mais homogêneo, diminuindo o gradiente térmico no interior do tarugo, reduzindo a possibilidade da formação de defeitos oriundos do processo de solidificação, bem como diminuindo tensões internas que podem favorecer a formação de trincas internas e externas;
- Aplicação uniforme da água de refrigeração em toda a largura do tarugo - evitando gradientes térmicos ao longo da mesma superfície;
- Capacidade e extração de calor semelhante para a região superior e inferior do tarugo - regiões superiores apresentam acúmulo de água próximo aos roletes;

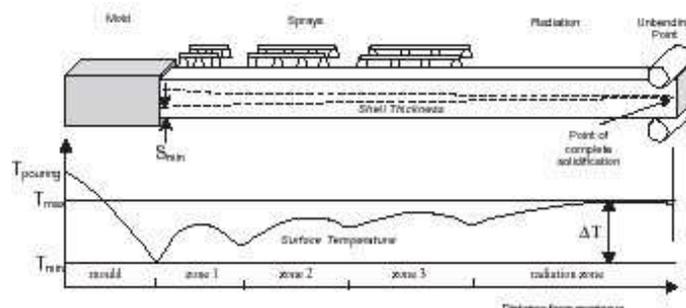


Figura 2-4: Mapeamento térmico da casca esférica do tarugo formado durante resfriamento secundário. C.A. Santos et.al. (2003).

Já foram desenvolvidos vários trabalhos baseados na metodologia de resfriamento do tarugo durante esta etapa do processo, desenvolvimento de rotinas numéricas inclusive, fig 2.4. Variações nas condições de resfriamento podem resultar em diferentes parâmetros que influenciam no coeficiente de transferência de calor entre metal/água direta ou indiretamente.

2.1.5 Unidade de extração e desempenho

A unidade de extração e desempenho é o equipamento responsável pela extração do tarugo lingotado do molde e pelo endireitamento do mesmo em máquinas curvas.

Durante o endireitamento dos tarugos, tensões de tração e compressão são geradas na superfície do tarugo, estas trincas geradas (internas e superficiais) podem ultrapassar o

número aceitável de problemas para cada tipo de aço. Posteriormente, na prática industrial, será verificado que as tensões existentes dentro da estrutura cristalina são significativas para o aprisionamento do hidrogênio dentro da estrutura cristalina.

2.1.6 Oxicorte

O processo de oxicorte tem a função principal de cortar os tarugo pela aplicação de uma chama de pré – aquecimento com posterior injeção de um jato de oxigênio puro, que por reação química, promoverá a oxidação do ferro, chamada oxidação catastrófica, rompendo o tarugo em tamanho definido.

O jato de oxigênio também tem a função de expulsar o material oxidado da região de corte. A vazão de oxigênio é importante no processo, pois se vazão for pequena, os óxidos não são formados e o corte fica incompleto: com oxigênio em excesso, metal é resfriado (impedindo o corte), sendo que o oxigênio só iniciará a oxidação a partir do ponto em que o material estiver na temperatura crítica.

2.1.7 Resfriamento terciário

Quando se aumenta a velocidade de lingotamento, o tarugo chega com maior temperatura na região de radiação livre ou resfriamento ao ambiente. Já com o acréscimo no comprimento da região de *sprays*, a temperatura da superfície será maior na região quando é resfriado por água e menor na região resfriada por ar.

Variações nas condições de resfriamento são resultados que influenciam na taxa de extração de calor. As condições de extração de calor são geralmente expressas em termos do coeficiente de transferência de calor para cada região, podendo esse ser considerado constante para cada zona, ou variável com a distância ao longo da zona em função da presença de roletes, distância entre bicos e tarugo, entre outros.

A região do resfriamento terciário consiste na região posterior ao oxicorte, onde o aço está submetido apenas a perda de calor por radiação, onde é necessário assegurar a retirada homogênea de calor de tarugos até que atinja a temperatura ambiente. É nesta região que pode ser alterado as condições para a difusão de hidrogenio ser maximizada.

2.2. Solidificação

A estrutura que se forma imediatamente após a solidificação determina as propriedades do produto final, dependendo da estrutura cristalina, do tamanho de grão, proporção entre as fases (resfriamento rápido). Se a composição química estiver fixa, o processo de solidificação determinará a microestrutura resultante do metal.

As práticas operacionais são normalmente desenvolvidas com o apoio de modelos matemáticos ou físicos, do fluxo de massa e calor na solidificação. Simulações destes modelos descrevem o histórico térmico do processo, sendo este de suma importância para o monitoramento das propriedades metalúrgicas, permitindo conclusões sobre o processo.

Um resfriamento deficiente implica na presença de um poço de metal líquido (comprimento metalúrgico) muito longo, enquanto que o resfriamento excessivo pode conduzir a formação de trincas, como mostra a figura 2.5. A extração de calor através dos chuveiros de resfriamento deve ser estabelecida de modo a não provocar a variação brusca na temperatura da superfície do tarugo na passagem entre os conjuntos de chuveiros. Por isso torna-se fundamental a análise sistemática da transferência de calor neste processo, permitindo obter as informações essenciais para o dimensionamento do projeto.

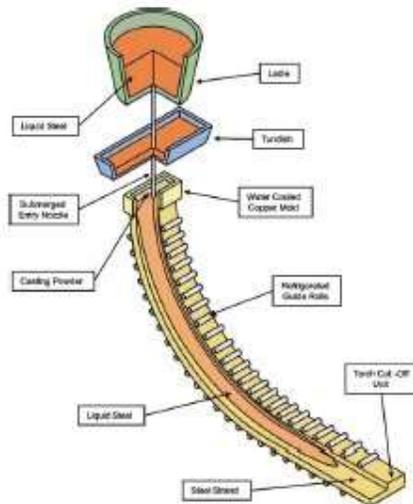


Figura 2-5 : Máquina de lingotamento contínuo – demonstrando a influencia do comprimento metalúrgico. Dvorkin, Eduardo N. et.al (2003).

2.2.1 Transferência de massa e calor

A solidificação dos metais pode ser considerada fisicamente como um processo de transferência de massa e calor que ocorre internamente ao material. Entre as etapas de res-

friamento encontradas no lingotamento contínuo, é fundamental destacar que as condições de extração de calor de cada etapa do processo é em função das condições operacionais do processo.

A transformação líquido / sólido é caracterizada pela liberação de energia térmica, onde existe uma fronteira separando as duas fases distintas. Através do mapeamento térmico durante essa mudança de fase é possível verificar a cinética de solidificação, distribuição de soluto entre outros parâmetros importantes.

Na prática, o vazamento do metal líquido em tarugorias é realizado a temperatura acima da temperatura de fusão (superaquecimento), sendo o molde o principal dissipador de calor durante a formação da casca solidificada. A Figura abaixo mostra todos os modos de transferência de calor que ocorre na interface metal/molde que durante a solidificação. Segundo Garcia, a solidificação é condução térmica que ocorre no metal e no molde sendo determinada pela transferência newtoniana na interface metal/molde, como convecção no metal líquido, radiação térmica do molde par ao meio ambiente. Alguns modos de transferência de calor são permanentes enquanto outros são transitórios.

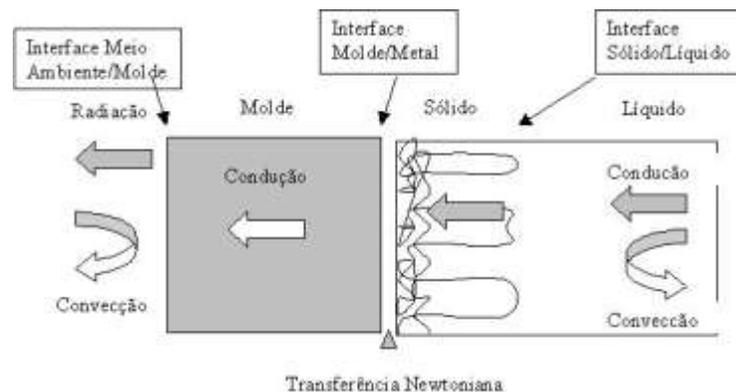


Figura 2-6: Modos de transferência de calor atuantes no sistema metal/molde. (Garcia, 2001)

2.2.2 Modos de transferência de calor

Durante o processo de solidificação, todos os modos de transferência de calor podem ocorrer isolados ou simultaneamente. O calor é transferido através de 3 mecanismos básicos: condução, convecção e radiação. No contexto da solidificação dos materiais, a condução é o tipo de transferência de calor que ocorre internamente no material e no molde separados. A convecção está relacionada as perdas de calor entre molde e o meio ambiente, da superfície com paredes do molde, expressa a tendência a

equalização da temperatura dentro do material líquido. A radiação está associada as perdas de calor para o meio ambiente e representa importância fundamental em processos sobre o qual o lingotamento contínuo é fundamentado em etapas onde o tarugo não possui mais contato com o molde. Na interface entre o material solidificado e o molde, existe resistência térmica que decorre da transferência newtoniana.

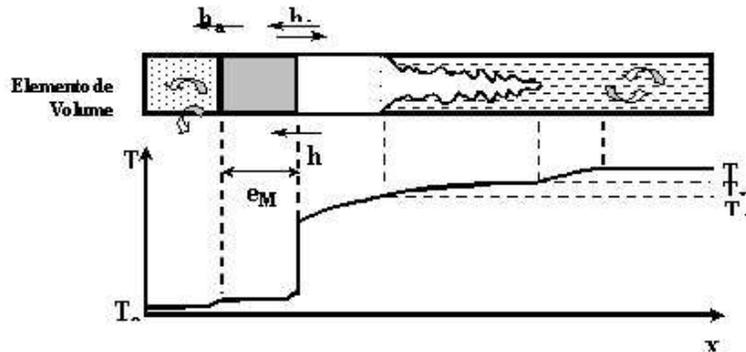


Figura 2-7: Representação esquemática do perfil térmico do sistema metal/molde, destacando as formas de transferência de calor e coeficientes de extração de calor. (Garcia,1983).

Tabela 2-1: Modos de transferência de calor sob a quais o aço é submetido durante o lingotamento contínuo.

Modos de condução de calor	Área submetida
Convecção e condução	Metal líquido enquanto há superaquecimento.
Condução	Camada de metal solidificada.
Convecção, radiação e condução	Camada de ar entre o metal e o molde.
Condução	Paredes do molde.
Convecção, radiação e condução	Superfície externa molde/meio ambiente.

Contudo pode-se observar que para efeito de projeto, algumas formas de transferência de calor podem ser desprezadas ou seu valor é desprezível quando comparado aos valores mais significativos. Com base no elemento de referencia, todo o processo de transferência de calor do sistema global é determinar as taxas de resfriamento do sistema e a determinar o perfil térmico durante a solidificação.

Existe várias etapas de extração de calor internamente ao processo de lingotamento contínuo, a tabela 2.2 relaciona as principais zona de resfriamento e modos de extração de calor aos quais estão submetidos.

Tabela 2-2: Modos de transferência de calor existentes durante o processo de lingotamento contínuo.

Região de Resfriamento	Transferência de calor	Controle de Qualidade	Parâmetros importantes
Molde - Resfriamento Primário	Primeira etapa de solidificação, formação da casca sólida. A casca sólida constitui uma barreira para transferência de calor latente de solidificação. No metal líquido, convecção é responsável por eliminar os gradientes térmicos gerados, homogeneidade de temperatura.	Espessura camada sólida, deve ser tal que não ocorra ruptura ou trincas superficiais.	Temperatura de entrada do metal líquido. Velocidade de produção. Taxa de resfriamento do tarugo. Nível de metal no molde. Composição química do aço.
Resfriamento Secundário	Segunda etapa do processo. Resfriamento realizado através da combinação de água + ar.	Análise do perfil térmico, relacionando a temperatura da superfície e o valor máximo de resquecimento de cada região, cálculo de extração de calor eficiente.	Comportamento térmico na superfície do tarugo. Vazão da água de refrigeração uniforme, evitar gradientes térmicos. Velocidade de lingotamento. Quantidade e tipo de rolos. Comprimento da zona de chuveiros.
Resfriamento Terciário	Transferência de calor para meio ambiente-radiação e convecção e por condução através do contato com rolos extratores.	Controle de troca térmica com meio ambiente através a temperatura da superfície	Transferência de calor é regida por um coeficiente h global que inclui a parcela relativa à radiação livre e uma parcela devido à convecção.

2.2.3 Solidificação de aço baixo carbono

A estrutura cristalina formada durante a solidificação de um aço baixo carbono depende de vários fatores, alteração da proporção entre as fases existentes, dimensões de microestruturas internas ao material, arranjo e formato de grão. Estes fatores alteram significativamente as propriedades mecânicas do material sob serviço.

Partindo-se da temperatura em que aço encontra-se líquido, ao ser resfriado, este atinge a temperatura em que inicia a solidificação, definida pelo diagrama de fase. Todo o aço com menor 0,77% de C, abaixo de 723 °C, resfriado lentamente, será constituído de ferrita e perlita. A porcentagem de perlita será tanto menor quanto menor for o teor de carbono existente na liga.

Dependendo da situação, a dimensão do molde deve ser modificada, o sistema de refrigeração deve ser reprojetoado ou temperatura de processo ser alterada. É devido a todos estes fatores que a simulação numérica é um processo importante, pois evita o método tentativa e erro, permitindo testes antes de ser implementado na indústria.

A simulação pode ser incluída em várias etapas durante o processo, incluindo principalmente o comportamento da solidificação do metal, desde resfriamento primário (líquido ->sólido), resfriamento secundário e resfriamento terciário. O trabalho foi desenvolvido baseado na região do resfriamento terciário.

De fato a distribuição térmica do tarugo depende da composição química, temperatura de fusão, intervalo de solidificação, principais elementos de liga. O tarugo de aço lingotado não será homogêneo quimicamente, mas apresentará diferentes distribuições de soluto e solvente, sendo assim existem transformações no estado sólido(difusão) durante o resfriamento.

2.3.1 Modelagem Matemática

Para o desenvolvimento do modelo matemático, foi seguida a seqüência lógica para a resolução do problema. O tratamento matemático do problema corresponde ao modelo do problema físico ao qual será utilizada para a realização dos cálculos.

Existem diversos métodos de cálculos para descrever a transferência de massa e calor interno ao metal, porem a escolha do método deve-se observar o tempo de calculo e as condições limites (interfaces limites extremos). Sabe-se que estas condições não são constantes ao longo do processo, além da influencia dos fenômenos de condução e radiação.

Baseado nos inúmeros métodos existentes na literatura utilizado para desenvolver a simulação de forma eficiente e rápida, o trabalho foi baseado no *método de diferenças finitas* (MDF). Esta escolha está baseada na minimização da velocidade do processamento, as necessidades exigidas pelo programa, e facilidade de manipulação das equações numéricas.

Estruturação do Modelo Matemático

Todo o processo de solidificação de metais parte da Equação Geral de Condução de Calor em regime transitório, é dado pela equação:

$$\rho.c. \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ K(t) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right\} + q \quad \text{Equação 2-1}$$

Pode-se considerar com uma boa aproximação que a condutividade térmica média do material é constante ao longo da linha de condução, a sua variação é insignificante em relação aos eixos de direção x, y, z, assim matematicamente

$$K = K(x) = K(y) = K(z) \quad \text{Equação 2-2}$$

O termo q da equação representa a geração interna de calor, valor este que representa a taxa de fração solidificada (caso de solidificação de ligas binárias), a equação 2-4 descreve matematicamente esta relação:

$$q = \rho.H. \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad \text{Equação 2-3}$$

Substituindo a equação 2-4 na Equação Geral de Condução de calor 2-1, obtemos a equação abaixo 2-5:

$$\rho.c. \frac{\partial T}{\partial t} = K \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + \rho.H. \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad \text{Equação 2-4}$$

Segundo a literatura pode ser realizada a seguinte aproximação, para o termo $\frac{\partial f_s}{\partial t}$:

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = \frac{\partial f_s}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \quad \text{Equação 2-5}$$

Finalmente, a equação geral de condução de calor tridimensional de pode ser reescrita pela equação 2-7 :

$$\rho.c. \frac{\partial T}{\partial t} = K \left\{ \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right\} \quad \text{Equação 2-6}$$

sendo:

$$c' = \left\{ c - H \cdot \frac{\partial f_s}{\partial T} \right\} \quad \text{Equação 2-7}$$

O termo $H \cdot \frac{\partial f_s}{\partial T}$ pode ser compreendido com pseudo calor específico, onde a velocidade de solidificação é controlada pela relação entre pseudo calor específico que representa a liberação de calor latente do material na transferência de fase, assim c' representa o calor específico aparente do material.

A equação 2-5 representa a equação geral de condução de calor tridimensional considerando o efeito da taxa de fração solidificada com liberação de calor latente do material na transformação de fase líquida / sólido ao longo da solidificação de uma liga binária. Como na região de resfriamento terciário, o tarugo está no estado sólido, a equação 2-5 pode ser simplificada (equação 2-9):

$$\rho \cdot c \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = K \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] \quad \text{Equação 2-8}$$

Aplicando o método matemático de resolução para equações diferenciais parciais, Método de Diferenças Finitas (MDF), podemos reescrever a equação 2-9, com erro de truncamento em relação ao terceiro termo:

$$\rho \cdot c' \cdot \left[\frac{T_{i,j,k}^n - T_{i,j,k}^{n-1}}{\Delta t} \right] = K \cdot \left[\frac{T_{i+1,j,k}^n - 2T_{i,j,k}^n + T_{i-1,j,k}^n}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j-1,k}^n - 2T_{i,j,k}^n + T_{i,j+1,k}^n}{\Delta y^2} + \frac{T_{i,j,k-1}^n - 2T_{i,j,k}^n + T_{i,j,k+1}^n}{\Delta z^2} \right] \quad \text{Equação 2-9}$$

cada termo pode ser descrito por :

$$T_{i,j,k}^{n+1} = T(t + \Delta t, (i, j, k)) \quad \text{Equação 2-10}$$

$$T_{i,j,k}^n = T(t, (i, j, k)) \quad \text{Equação 2-11}$$

$$T_{i-1,j,k}^n = T(t, (i-1, j, k)) \quad \text{Equação 2-12}$$

$$T_{i+1,j,k}^n = T(t, (i+1, j, k)) \quad \text{Equação 2-13}$$

$$T_{i,j-1,k}^n = T(t, (i, j-1, k)) \quad \text{Equação 2-14}$$

$$T_{i,j+1,k}^n = T(t, (i, j+1, k)) \quad \text{Equação 2-15}$$

$$T_{i,j,k-1}^n = T(t, (i, j, k-1)) \quad \text{Equação 2-16}$$

$$T_{i,j,k+1}^n = T(t, (i, j, k+1)) \quad \text{Equação 2-17}$$

Analogia Sistema Térmico e Sistema Elétrico

Utilizando a terminologia para a resolução de sistema elétricos é possível relacionar a metodologia de resolução de problemas também para descrever o fluxo de calor internamente ao metal existente durante a solidificação (Spim,96).

O acúmulo de energia do elemento finito(i,j,k) é caracterizado pela sua capacidade térmica, dado pela relação:

$$C_{i,j,k} = (A_t \cdot (\Delta x)) \cdot \rho_{i,j,k} \cdot \zeta_{i,j,k} \quad \text{Equação 2-18}$$

O fluxo térmico entre os pontos vizinhos é expresso pela resistência de passagem de calor. O valor de resistência térmica é proporcional ao inverso da condutividade, dado pela equação genérica:

$$R_{i,j,k} = \frac{\Delta d}{K \cdot A_t} \quad \text{Equação 2-19}$$

A resistência elétrica calculada interna ao ponto deve ser também especificada para cada ponto adjacente do ponto em questão considerado-se cada distância dos elementos finitos individuais, assim:

$$R_{(i-1,j,k)} = \frac{\Delta x}{2.K(i-1,j,k).A_t} \quad \text{Equação 2-20}$$

$$R_{(i+1,j,k)} = \frac{\Delta x}{2.K(i+1,j,k).A_t} \quad \text{Equação 2-21}$$

$$R_{(i,j-1,k)} = \frac{\Delta y}{2.K(i,j-1,k).A_t} \quad \text{Equação 2-22}$$

$$R_{(i,j+1,k)} = \frac{\Delta y}{2.K(i,j+1,k).A_t} \quad \text{Equação 2-23}$$

$$R_{(i,j,k-1)} = \frac{\Delta z}{2.K(i,j,k-1).A_t} \quad \text{Equação 2-24}$$

$$R_{(i,j,k+1)} = \frac{\Delta z}{2.K(i,j,k+1).A_t} \quad \text{Equação 2-25}$$

Realizando todas as operações matemáticas necessárias, ou seja substituindo todas as equações citadas anteriormente na equação 2-10, chega-se a seguinte equação descrita abaixo:

$$T_{i,j,k}^{n+1} = C \left[\left(\left\| \left\{ \begin{array}{c} T_{i-1,j,k}^n \\ T_{i,j,k}^n \\ T_{i+1,j,k}^n \\ T_{i,j,k}^n \end{array} \right\} \right\| + \left\| \left\{ \begin{array}{c} T_{i-1,j,k}^n \\ T_{i,j,k}^n \\ T_{i+1,j,k}^n \\ T_{i,j,k}^n \end{array} \right\} \right\| + \left\| \left\{ \begin{array}{c} T_{i-1,j,k}^n \\ T_{i,j,k}^n \\ T_{i+1,j,k}^n \\ T_{i,j,k}^n \end{array} \right\} \right\| \right) \right] \quad \text{Equação 2-26}$$

2.4. Difusão de hidrogênio no aço

2.4.1 Teoria da difusão

Dentro da estrutura cristalina de um metal, os átomos dispersam de sua posição de equilíbrio em condições diversas. Apenas submetendo metal a temperatura zero absoluta, os átomos permanecem na posição correspondente ao mínimo de energia.

O movimento atômico é caracterizado por ser realizado entre interstícios, ou seja, nos pontos em que existem defeitos na estrutura cristalina: defeitos pontuais (pontos de falha na estrutura), defeitos em linha (discordâncias). Estes defeitos acarretam um aumento de energia, devido a formação de zonas de tração e compressão gerados na rede cristalina.

A difusão atômica é a movimentação dos átomos dentro da rede cristalina cujo objetivo é a equalização do potencial químico, ocorre somente quando existe um gradiente de concentração entre átomos adjacentes. Este processo depende de vários fatores como raio

atômico, ligação química, ponto de fusão do material, entre outros. A difusão é descrita matematicamente pela Lei de Fick:

$$J = -D \cdot \frac{\partial c}{\partial x} \quad \text{Equação 2-27}$$

A Segunda Lei de Fick relaciona a variação de concentração com o tempo com derivada segunda da posição do átomo, matematicamente temos:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad \text{Equação 2-28}$$

O coeficiente de difusão é uma variável importante a ser determinada, este varia com a natureza dos átomos do soluto, como tipo de estrutura e com a temperatura. Várias são as relações que podem ser descritas:

- Quanto maior for a temperatura, maior será o coeficiente de difusão, porque os átomos possuem maior energia térmica, sendo assim terão maior facilidade para romper a barreira de energia;
- Quanto menor for o tamanho dos átomos (diâmetro), maior será a facilidade para ser movimentarem;
- Difusão na estrutura CCC é diferente de CFC.

2.4.2 Teoria da difusão do aço

O hidrogênio é responsável por uma série de defeitos e falhas durante o processo de fabricação de aços, além de outros problemas como facilitar corrosão no material, entre outros. A distribuição do hidrogênio dentro da estrutura cristalina pode ser alterada através de um resfriamento controlado e uniforme para todo o tarugo.

O hidrogênio possui maior facilidade de movimentar-se dentro da microestrutura, quando comparado a outros elementos, devido ao tamanho ser reduzido. Os fenômenos de difusão, descrevem como átomos movimentam-se e como estão distribuídos na matriz metálica, não são completamente conhecidos, mas estão relacionados a velocidade com que ocorre a difusão em regiões altamente tensionadas (aprisionamento) e microestrutura da matriz.

A difusão de hidrogênio ocorre entre os espaços intersticiais da estrutura cristalina na forma atômica. A força motriz para a difusão do hidrogênio é função do potencial químico.

mico e também do gradiente térmico. Assim, o gradiente de tensão pode ser produzido por um degrau na estrutura, defeitos pontuais (trincas ou inclusões), tensões devido a discordâncias; todos estes fatores podem ser citados como força motriz da difusão. O fluxo da difusão de hidrogênio pode ser descrita por:

$$D = D_0 \cdot e^{\frac{-Q}{R^*T}} \quad \text{Equação 2-29}$$

O valor da difusividade efetiva, D^* , pode ser diferente do valor de difusão calculado, D . Sendo que a equação acima representa o valor de D^* . A energia de ativação da difusão na ferrita $Fe - \alpha$ é representada por dois segmentos bem definidos: temperatura abaixo e acima de 200°C . Valores abaixo da “difusibilidade efetiva”, a energia de ativação é alta, o que podem ser explicados com base na difusão intersticial e pela presença de sítios de captura, atrapalhando a movimentação dos átomos de hidrogênio na estrutura cristalina. No entanto, acima da difusividade efetiva, o valor exato depende da densidade de sítios de baixa energia existentes na estrutura como discordâncias, interface ferrita-cementita, inclusões. Estes sítios de baixa energia servem como aprisionadores de hidrogênio na estrutura.

Aprisionamento e solubilidade do hidrogênio

A Lei de Sievert descreve matematicamente a relação entre a solubilidade do gás hidrogênio dissolvido em uma estrutura metálica:

$$c_H = K \cdot \sqrt{pH_2} \quad \text{Equação 2-30}$$

Cada variável pode ser descrita por:

c_H = Concentração do gás hidrogênio dissolvido no metal;

K = Constante que depende da temperatura e da estrutura do cristal;

pH_2 = Pressão parcial molecular de hidrogênio;

Segundo a literatura, a solubilidade do hidrogenio em aço líquido é aproximadamente 30 ppm, para o aço sólido não completamente resfriado é 14 ppm e 2 ppm para um aço sólido a temperatura ambiente. Sabe-se também que a solubilidade em diferentes estruturas são diferentes e que principalmente a solubilidade decresce com a redução da temperatura.

Resumidamente, a difusividade do hidrogênio no aço é fortemente influenciada pela presença de falhas ou não homogeneidades estruturais internas como contorno de grão, discordâncias, carbonetos e até partículas não metálicas, pois os mesmos são sítios de aprisionamento devido a diferença de energia potencial existente entre os sítios e energia normal da estrutura.

A energia necessária para o aprisionamento do hidrogênio é proporcional ao incremento de tensão existente na estrutura. A temperatura do material é muito importante para a solubilidade na estrutura, para temperatura abaixo de 400°C, observa-se que o hidrogênio encontra-se em sítios, a concentração encontrada nos sítios pode ser apenas um pequena fração do verdadeiro valor da concentração total. Características da estrutura como a presença de inclusões metálicas, tende a aumentar o número de sítios, ou área e volume de vazios intersticiais, por isso pode aumentar marcadamente a solubilidade aparente.

A tendência de aprisionar o átomo de hidrogênio está relacionado com a energia de aprisionamento (ΔE) e da natureza do sítio, que pode ser de duas formas distintas:

- Sítio sob estado de atração (Reversível) : a região da estrutura cristalina onde os átomos de hidrogênio são submetidos a uma força de arraste, ou seja, os átomos são atraídos para o centro da região;
- Sítios físicos (Irreversível) : é a modificação da estrutura cristalina ideal, resultado de um sítio mais energético mais favorável para acomodar a átomo de hidrogênio. Exemplo são contornos de grão, incoerência entre interface partícula / matriz e vazios;

Apesar de existir interação entre H dissolvido e H aprisionado por um sítio, a difusão aparente é distinta da difusão real. Para sítios irreversíveis, a difusibilidade aparente aumenta em relação a difusibilidade ideal, já que os sítios reversíveis existe um equilíbrio dinâmico entre difusibilidade aparente e real.

Modelagem matemática – Concentração de Hidrogênio

Partindo da Segunda Lei de Fick, para um sistema tridimensional, temos a seguinte distribuição de concentração, dada pela equação

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D(t) \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad \text{Equação 2-31}$$

Aplicando método de Diferenças Finitas para a equação 2-32, temos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^n}{\Delta t} \quad \text{Equação 2-32}$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = D \left(\frac{C_{i-1,j,k}^n - 2C_{i,j,k}^n + C_{i+1,j,k}^n}{\Delta x^2} \right) \quad \text{Equação 2-33}$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} = D \left(\frac{C_{i,j-1,k}^n - 2C_{i,j,k}^n + C_{i,j+1,k}^n}{\Delta y^2} \right) \quad \text{Equação 2-34}$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = D \left(\frac{C_{i,j,k-1}^n - 2C_{i,j,k}^n + C_{i,j,k+1}^n}{\Delta z^2} \right) \quad \text{Equação 2-35}$$

Substituindo as equações 2-34,2-35,2-36 na Equação 2-32:

$$\frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^n}{\Delta t} = D \left(\frac{C_{i-1,j,k}^n - 2C_{i,j,k}^n + C_{i+1,j,k}^n}{\Delta x^2} + \frac{C_{i,j-1,k}^n - 2C_{i,j,k}^n + C_{i,j+1,k}^n}{\Delta y^2} + \frac{C_{i,j,k-1}^n - 2C_{i,j,k}^n + C_{i,j,k+1}^n}{\Delta z^2} \right) \quad \text{Equação 2-36}$$

$$C_{i,j,k}^{n+1} = \Delta t \cdot D \left(\frac{C_{i-1,j,k}^n + C_{i+1,j,k}^n}{\Delta x^2} + \frac{C_{i,j-1,k}^n + C_{i,j+1,k}^n}{\Delta y^2} + \frac{C_{i,j,k-1}^n + C_{i,j,k+1}^n}{\Delta z^2} \right) + C_{i,j,k}^n \left(1 - 2\Delta t \cdot D \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right) \right) \quad \text{Equação 2-37}$$

Finalmente, a equação 2-38 mostra a variação de concentração de hidrogênio em função do tempo para cada ponto da malha. Juntamente com modelo térmico desenvolvido, é possível descrever a difusão do hidrogênio internamente ao tarugo na zona de resfriamento terciário.

3 METODOLOGIA

Atualmente, o emprego de rotinas numéricas utilizadas nos processos metalúrgicos é cada vez mais crescente. Estes programas auxiliam na busca de soluções de problemas pertencentes ao processo, possibilitando aumento de produtividade e redução de custos.

Com o objetivo de descrever matematicamente a evolução térmica do tarugo durante o resfriamento terciário, foi desenvolvido um programa que trabalha com método de diferenças finitas, baseado no princípio de associação de componentes elétricos (Spim,96).

Para que seja validado o resultado obtido pelo software, é preciso que seja aferido o modelo térmico, posteriormente será calculada a concentração de hidrogênio dissolvido no aço. Por isso, a aferição térmica é um passo necessário, pois baseado no mesmo, é possível descrever as equações que regem a difusão de hidrogênio no aço solidificado. A metodologia para a aferição do hidrogênio é difícil e de alto custo sua realização, por isso a aferição térmica será suficiente para validar os resultados do software.

O experimento consistiu resumidamente em instrumentar um tarugo de aço com 4 termopares distribuídos ao longo da diagonal principal do mesmo. A tarugo foi aquecido até uma temperatura de 700°C durante 3 horas em um forno mufla, posteriormente monitorado o resfriamento, curvas de resfriamento, para cada termopar.

As curvas adquiridas durante os ensaios serão posteriormente comparadas com os resultados simulados pela rotina, permitindo assim o ajuste do valor do coeficiente de transferência de calor (h). Os valores dos coeficientes de transferência de calor para a simulação foram inicialmente utilizados valores teóricos, por isso necessita ajuste para os cálculos.

A modelagem numérica descreve os parâmetros que influenciam o processo de forma clara, atendendo sempre aos critérios metalúrgicos exigidos pelo processo. Permitindo demonstração clara dos resultados e facilita a mudanças de parâmetros experimentais.

Tomando como ponto de partida a análise de um sistema completo de solidificação, dentro da representação estrutural de um molde que contém em seu interior uma liga metálica qualquer e que sofre o processo de transferência de calor do interior do metal para a superfície do molde, o procedimento geral para o conhecimento base do problema, e o seu mapa de trabalho para a geração de um programa numérico de simulação é descrito pela literatura.

Inicialmente, para a realização dos cálculos, é necessário a criação de malha numérica, descrevendo as coordenadas tridimensionais do sistema (x,y,z) , figura 3.1 representa esboço de como foi criada:

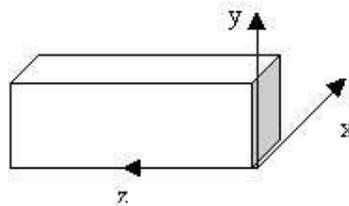


Figura 3-1 : Referencias para as coordenadas no tarugo, utilizado para os cálculos de temperatura e de concentração de hidrogênio.

A rotina desenvolvida para simular o resfriamento terciário está baseada no programa utilizado pela siderúrgica Gerdau chamado Inalc. O Programa simula a solidificação sofrida pelo aço desde o molde até a zona de oxicorte.

A rotina desenvolvida utiliza-se dos valores de temperatura simulado, que serão utilizados como dados de entrada para a simulação do resfriamento na região terciária. Como Inalc trabalha com malha bidimensional ,será necessário o desenvolvimento de um acoplamento de conversão entre malha numérica bidimensional e tridimensional. A figura 3.2 mostra esquematicamente como foi desenvolvido o sistema de conversão.

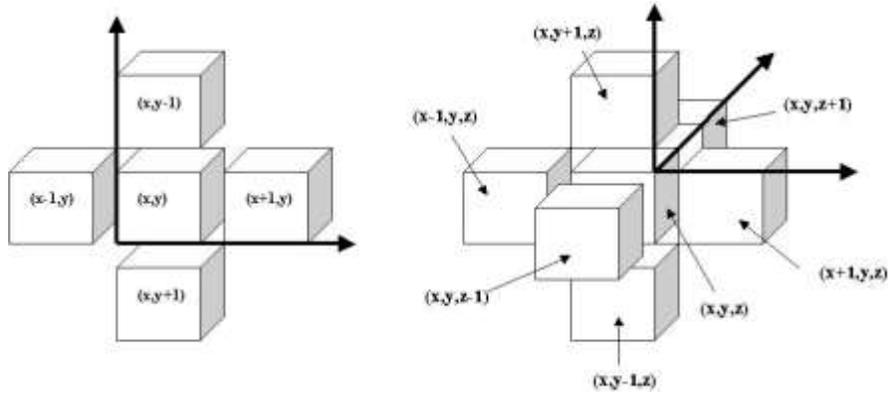


Figura 3-2 : Sistema de conversão entre sistema bidimensional e tridimensional, Figura esquerda representa sistema bidimensional (coordenadas x e y).

A rotina monitora o resfriamento do tarugo na região terciária, sendo assim oxicorte foi considerado referencial para monitorar o comprimento total do tarugo, fig. 3.3. A partir de um valor constante (dz), em função da velocidade de lingotamento, quando completa espessura, a rotina adiciona um novo módulo de informações (matriz de entrada) que será acoplado ao longo do tarugo tridimensional (montagem da matriz tridimensional).

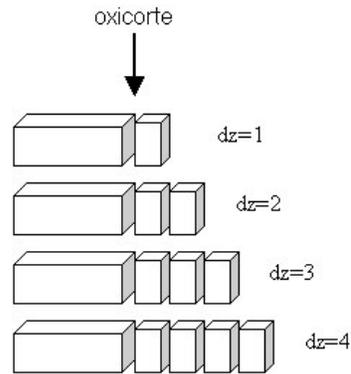


Figura 3-3 : Representação esquemática do referencial tridimensional utilizado para a montagem da matriz tridimensional.

Considerando toda a lógica desenvolvida (fig.3.4) para a descrever o resfriamento tridimensional do tarugo, todos os cálculos de difusão de hidrogênio estão baseados no modelo térmico. Como parâmetro inicial de concentração, foi utilizado valor de concentração no distribuidor, e a partir do contador de tempo, o seu valor é recalculado pelas equações descritas anteriormente.

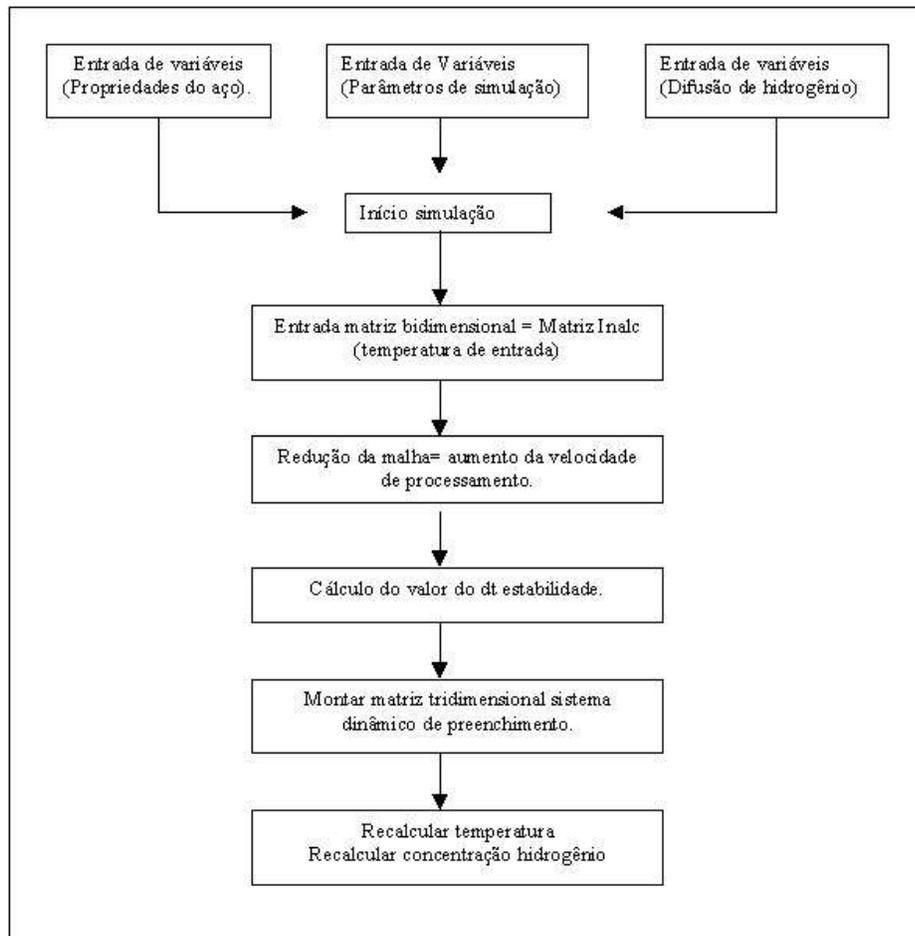


Figura 3-4 : Fluxograma resumido da estrutura lógica de processamento da rotina desenvolvida.

É importante destacar que esta metodologia pode ser utilizada para qualquer tipo de aço, desde que as suas propriedades físico-químicas sejam conhecidas, como: Calor Específico, Condutividade Térmica, entre outros. Para o cálculo da difusão também é necessário o conhecimento das constantes que descreve as mesmas equações.

O software permite, a partir de uma tela de interface com o usuário, a visualização dos resultados de forma gráfica, a evolução da temperatura nos pontos monitorados e a concentração de hidrogênio ao longo do tempo. Internamente, o programa cria um arquivo.dat) para que sejam armazenados os resultados, possibilitando que dados sejam utilizados por outro programa. Todas as rotinas foram desenvolvidas em C++, ambiente Windows para facilitar o uso do software.

O processo de simulação numérico é um método de análise bastante eficaz para a engenharia, mas é necessário a aferição do modelo, o relacionando a teoria e a prática para que possam assegurar que os valores calculados são o mais próximo possível do valor prático operacional.

O experimento realizado constituiu em instrumentar um tarugo de aço com as dimensões de 60mm x 75mm x 150mm aproximadamente, com quatro termopares tipo Alumel-Cromel tipo K (diâmetro = 0,256 mm), distribuídos ao longo de sua diagonal principal (Tabela 3.1), como é descrito esquematicamente pela figura 3.5.

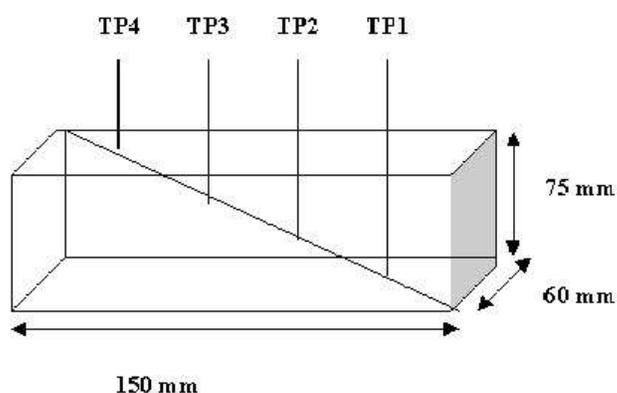


Figura 3-5 : Dimensões e instrumentação do tarugo ensaiado.

Tabela 3-1 : Posição dos termopares monitorados durante o resfriamento.(mm).

Termopar	Posição (x)	Posição (y)	Posição (z)
TP1	12	60	30
TP2	24	45	60
TP3	36	30	90
TP4	48	15	120

O ensaio foi realizado no Laboratório de Fundição (LAFUN), com auxílio de um computador e uma placa de aquisição de dados (SAD) pertencente a Universidade - UFRGS, utilizados respectivamente para o registro e aquisição dos dados. Para a realização do aquecimento do tarugo, foi utilizado em conjunto com o forno tipo mufla do mesmo laboratório, fig. 3.6.

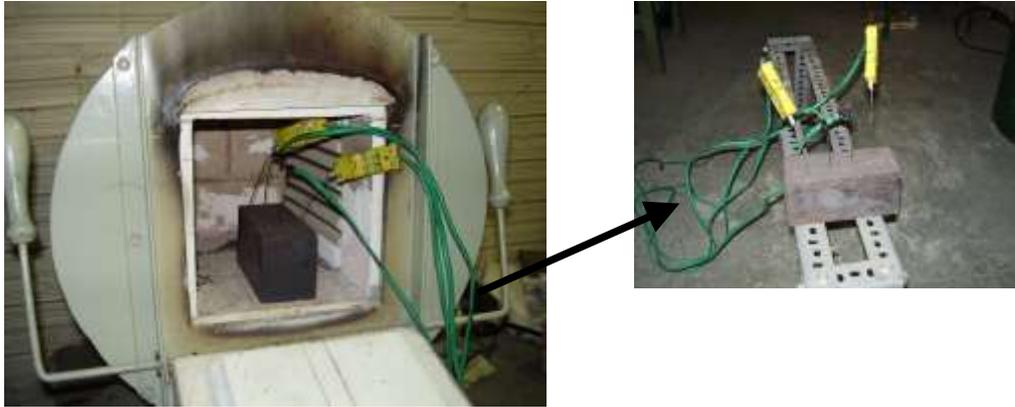


Figura 3-6 : Fotografia do experimento realizado, a esquerda, instrumentação do tarugo dentro do forno, e a direita, mostrando como foi realizado o resfriamento.

Para que seja realizada a parte experimental, foi realizado o aquecimento de dois tarugos, características descritas pela tabela 3.2, até a temperatura de 700° C durante 3 horas, cada tarugo foi retirado do forno e colocado sob uma superfície que simula as condições operacionais de lingotamento (resfriamento a temperatura ambiente) até a temperatura de 200° C.

Tabela 3-2 : Características do aço ensaiado, incluindo dados como corrida e qualidade.

Corrida	4382
Qualidade	46234
Composição Química	
% C	0,17
% Cr	1,07
% Cu	0,17
% Mn	0,75
% Mo	0,21
% P	0,019
% S	0,028
% Si	0,3

Considerando que as equações que descrevem o movimento de hidrogênio no aço sólido necessitam da definição de algumas constantes. Foram utilizados os seguintes valores, consultando literatura técnica, descrito na tabela 3.3:

Tabela 3-3 : Tabela de constante utilizadas no calculo de difusão de hidrogênio.

Constante	Valor numérico
R (Constante universal)	$8,314 \frac{J}{mol.K}$
Concentração Inicial H ₂ (tundish)	0,003 %
D ₀ (austenita)	$0,63 \frac{mm^2}{seg}$
Q (austenita)	$43200 \frac{J}{mol}$
D ₀ (ferrita)	$0,1 \frac{mm^2}{seg}$
Q (ferrita)	$15100 \frac{J}{mol}$

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

A partir dos resultados obtidos através dos ensaios experimentais, baseado no monitoramento do resfriamento do tarugo aquecido 700 °C até a temperatura de aproximadamente 300 °C, é possível determinar as seguintes curvas de resfriamento descrito pelas figs. 4.1 e 4.2:

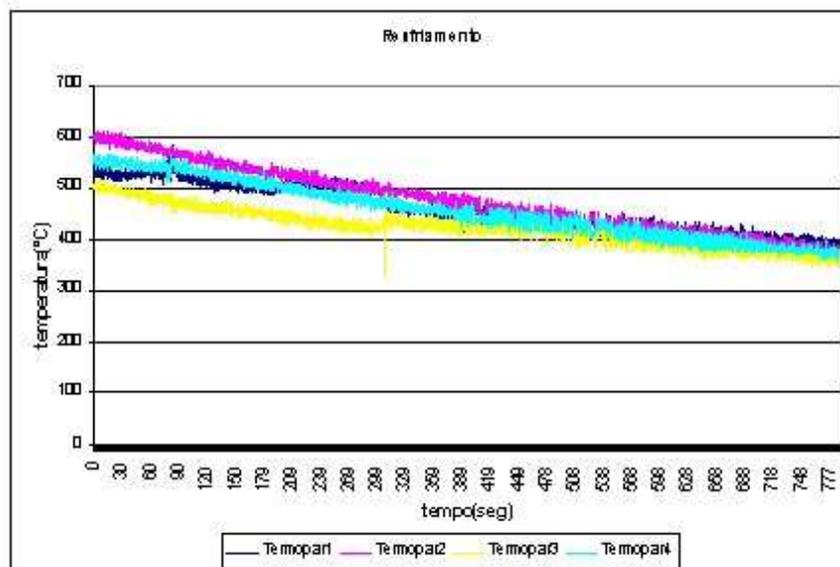


Figura 4-1 : Gráfico de resultados experimentais adquiridos para o primeiro ensaio realizado.

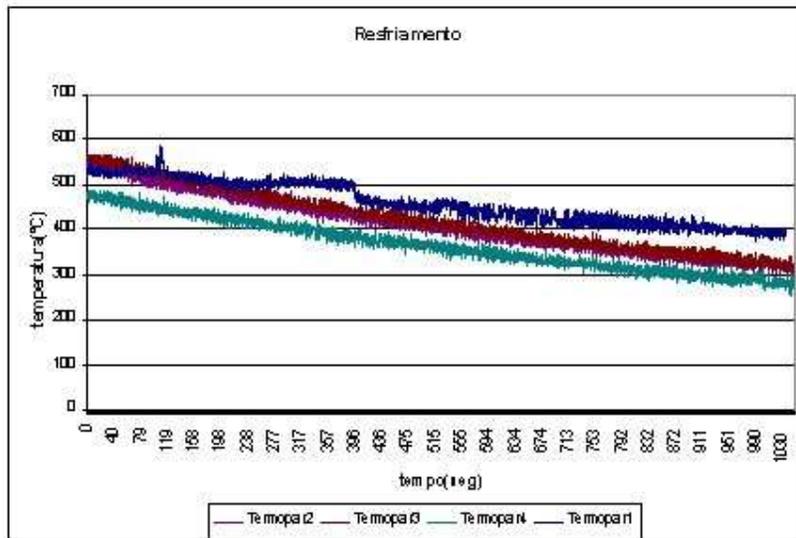


Figura 4-2 : Dados obtidos experimentalmente para o segundo ensaio.

A confiabilidade do modelo matemático está apoiado na maior precisão possível dos dados de entrada do problema, como propriedades termo-físicas do sistema metal / molde; o coeficiente de transferência de calor é muito importante, pois consultando literatura é possível verificar que seu valor depende da temperatura, condições de resfriamento, variáveis do processo, entre outras.

A aproximação do coeficiente de transferência de calor foi feita através do método de confronto de perfis de temperatura teórico / experimental (fig. 4.3), devido a maior facilidade experimental e confiabilidade na análise de resultados (Quaresma,et.al.,1998). Assim, através de amostragem, foi escolhido termopar para realizar o ajuste de h, como mostra a fig. 4.4:

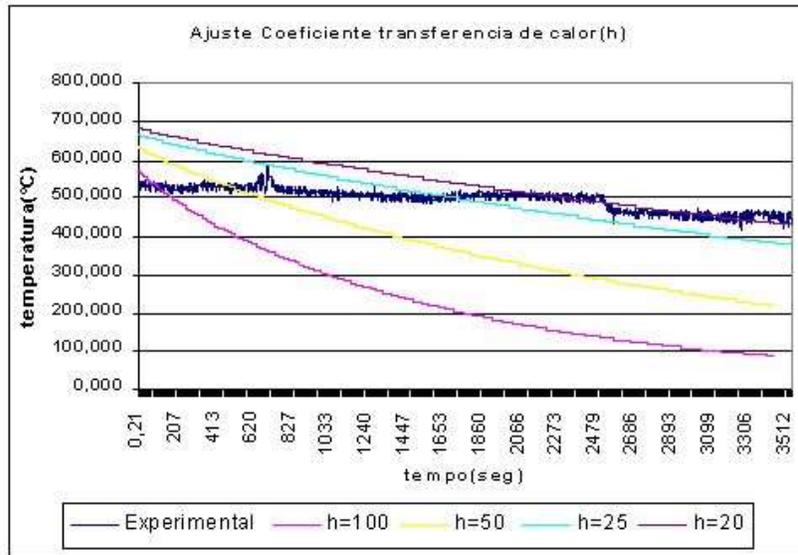


Figura 4-3 : Gráfico de ajuste do valor do coeficiente de transferência de calor ,valor constante utilizado ao longo da simulação.

Como pode ser observado no gráfico da figura 4.3,foi simulado a rotina de resfriamento para diferentes valores de h, para que consiga aproximar a curva teórica da curva experimental. Como será utilizado um valor de h constante para toda a simulação, este passo é fundamental para a aproximação dos resultados experimental/teórico.

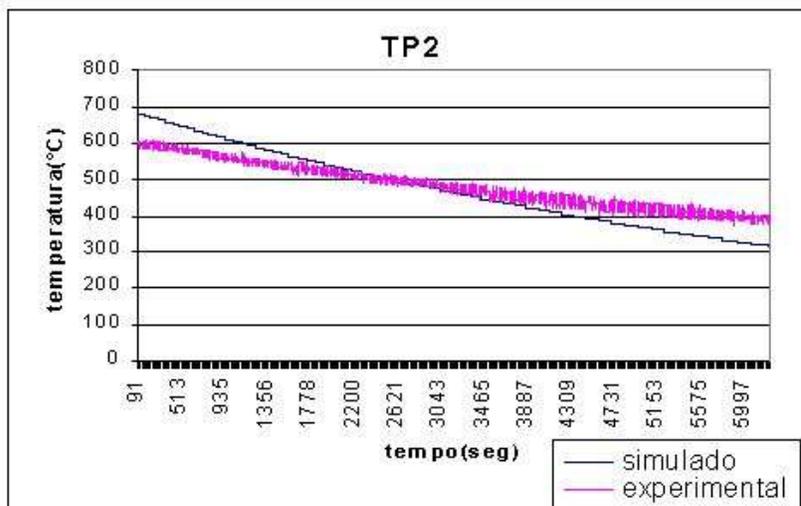


Figura 4-4 : Comparação entre os dados experimentais e dados simulados.

É possível notar também que a curva simulada inicialmente apresenta-se acima da experimental, posteriormente há cruzamento entre as duas curvas e depois a curva simulada apresenta-se abaixo da curva experimental.

A partir da análise dos gráficos acima, foi possível concluir que o valor do coeficiente de transferência de calor (h) que mais se aproxima dos resultados experimentais é $20 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$, valor que foi utilizado para a simulação de todos os pontos monitorados, conforme fig.4.5.

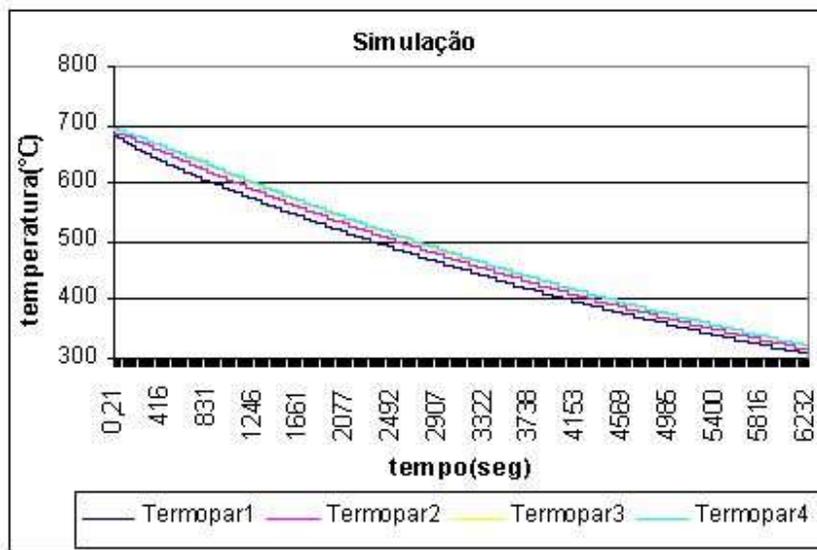


Figura 4-5 : Gráfico com resultados da simulação executada , $h = 20 \frac{W}{m^2 \cdot K}$.

Partindo-se do modelo térmico aferido, a concentração de hidrogênio no tarugo foi calculado partindo de um valor inicial de concentração de 0,003 % no aço líquido. Seu gráfico é demonstrado na figura 4.6. O gráfico descreve a concentração de hidrogênio em porcentagem em relação a concentração inicial para a posição de cada termopar.

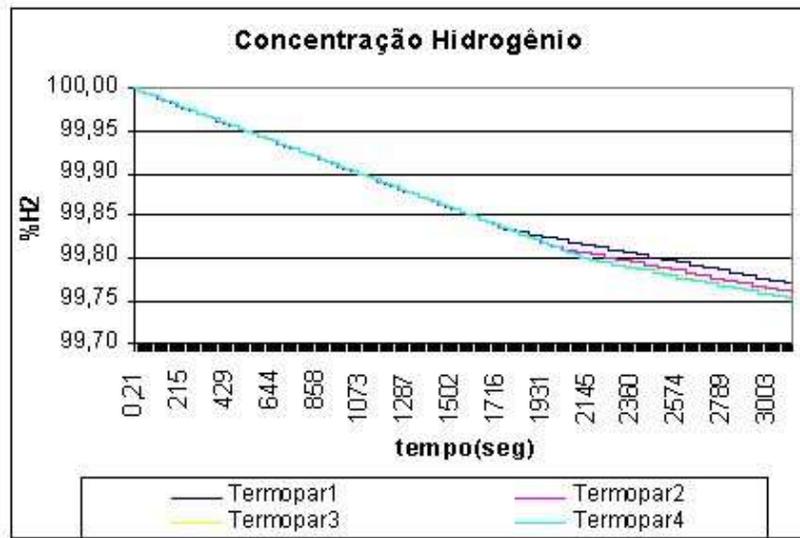


Figura 4-6 : Gráfico de concentração de hidrogênio para a posição de cada termopar monitorado.

Podemos observar que a concentração de hidrogênio para cada curva mantêm-se muito próximo até aproximadamente 1600 segundos, onde ocorre separação das curvas como demonstra a figura 4.7.

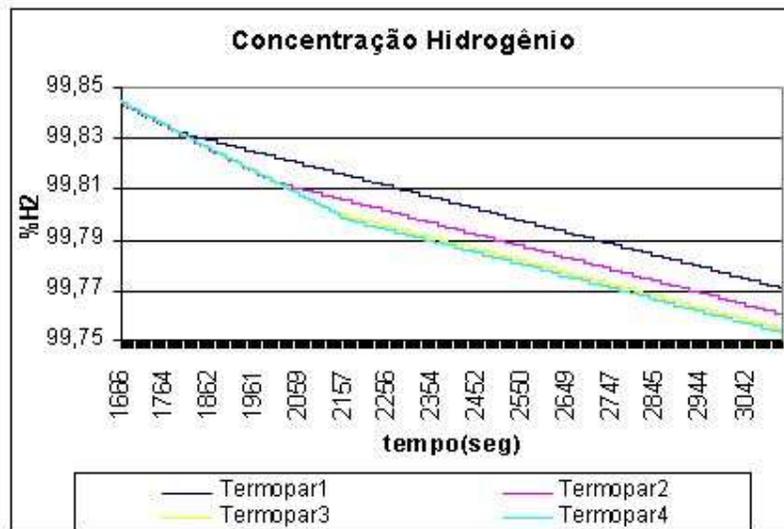


Figura 4-7 : Detalhe do gráfico anterior, mudando-se o intervalo de análise do tempo.

5 CONCLUSÕES

Durante o desenvolvimento do trabalho foi possível discutir as técnicas empregadas para o desenvolvimento de um programa computacional em uma área específica da metalurgia, o resfriamento do tarugo no lingotamento contínuo e como é o comportamento do hidrogênio dentro da estrutura cristalina do aço sólido.

O comportamento físico do sistema é complexo, visto que diversas variáveis envolvidas interagem-se entre si, gerando muitas vezes fenômenos que não foram descritos matematicamente no problema. Por isso o modelo matemático descrito é uma aproximação, mas com desempenho satisfatório, por descrever o processo com erro minimizado.

Assim, a partir da comparação entre os resultados experimentais e simulados, foi possível verificar que estão próximos e que realmente, a rotina desenvolvida representa os dados adquiridos durante os ensaios. Afirmando assim que, o modelo desenvolvido está dentro do esperado inicialmente.

Este trabalho foi de grande importância para minha formação acadêmica, pois possibilitou o desenvolvimento de um projeto de grande importância na indústria metalúrgica, aliando os conceitos aprendidos durante a graduação e também parte operacional.

6 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Considerando que o trabalho foi desenvolvido baseado em simulação numérica, é amplo o campo de trabalho nesta área. Atualmente, cada vez torna-se mais importante esta metodologia na indústria, pois possibilita ajuste de alguns parâmetros, que na prática exigiriam tempo e custo elevado.

Por todos estes motivos, o desenvolvimento de simulação é uma fonte de informações possibilita a continuação do trabalho tanto neste assunto, mas também possibilita relacionar com outros problemas dentro da própria siderúrgica.

Como continuação do trabalho podemos citar linhas de estudo: calcular as condições mais favoráveis que maximizam a difusão de hidrogênio, condições de tempo e temperatura, para que sejam utilizados equipamentos que mantenham estas mesmas condições, possibilitando a fabricação de aço de alta qualidade.

7 REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] DVORKIN, Eduardo, CAVALIERE, Miguel A., GOLDSCHIMIT, Marcela B. **Finite element models in the steel industry.Part I : Simulation of flat product manufacturing processes.** Computers and structures. 81. p.559-573.2003.
- [2] GARCIA, Amauri. **Solidificação : Fundamentos e aplicações .** 1.ed.Campinas : Unicamp, 2001.
- [3] GRIFFITHS,A.J. ,TURNBULL,A. **On the effective diffusivity of hydrogen in low alloy steels.** Corrosion Science. Vol.37, No.11, p.1879-1881,1995.
- [4] JANIK,M., DYJA,H., **Modelling of three-dimensional temperature field inside the mould during continuous casting of steel.** Journal of materials processing technology. p.177-182. 2004.
- [5] **Metals handbook :** formerly edition ASM handbook. Materials Park, Ohio: ASM International, 1991- . []v. : il.
- [6] QUARESMA,J.M.V.,SANTOS,C.A.,SPIM,J.A.,GARCIA,A. **Transfêrência de calor na interface metal / molde na fundição de metais.** In: V CEM – Congresso de Engenharia mecânica Norte-Nordeste, Fortaleza.p.9-16.1998.
- [7] SANTOS, C.A. ,SPIM, J.A. ,GARCIA,A. **Mathematical modeling and optimization stragies (genetic algorithm and knowledge base) applied to the continuous casting of steel.** Elsevier Science. p.511-516.2003.
- [8] SANTOS, C.A., SPIM, J.A. , GARCIA, A. **Estratégias de otimização e modelagem matemática aplicados ao lingotamento contínuo de aços**

- (Programação Inteligente no lingotamento contínuo).** In: 55º.Congresso Anual da ABM, Rio de Janeiro. p. 2459-2467. 2000.
- [9] SANTOS,C.A.,MACHADO,T.F. , SOTELO,M.O. , SPIM, J.A. **Desenvolvimento de um algoritmo computacional na forma de um software para o lingotamento contínuo de tarugo de aços.** In: XXXIII Seminário de Fusão, Refino e solidificação dos metais, Santos. p.333-342. 2002.
- [10] SHI,Z.,GUO,Z.X. **Numerical heat transfer modeling for wire casting.** Materials science and engineering. p.311-317. 2003.
- [11] SPIM,J.A.SANTOS,C.A.,GARCIA,A. **Aplicação de um programa numérico inteligente no otimização operacional do lingotamento contínuo de aços.** In:51º.Congresso Anual da ABM, São Paulo. p.707-726.1996.
- [12] THOMAS, Richard L.S., LI, Daoming, GANGLOFF, Richard P. ,SCULLY, John R. **Trap-governed hydrogen diffusivity and uptake capacity in ultrahigh-strength AERMET 100 steel.** Metallurgical and Materials Transactions.33A,7.p.1991.2002.
- [13] YAMAGUCHI, Tamaki,. NAGUMO, Michihiko. **Simulation of hydrogen thermal desorption under reversible trapping by lattice defects.** ISIJ International. vol.43, n.4. p.514-519. 2003.