

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS

MARIANA SOUZA E SANTOS

OTIMIZAÇÃO DOS PARÂMETROS DE SIMULAÇÃO DA
SOLIDIFICAÇÃO DO FERRO FUNDIDO GGG40 PARA A PREVISÃO DA
MICROESTRUTURA E PROPRIEDADES

São Carlos

2018

MARIANA SOUZA E SANTOS

OTIMIZAÇÃO DOS PARÂMETROS DE SIMULAÇÃO DA
SOLIDIFICAÇÃO DO FERRO FUNDIDO GGG40 PARA A PREVISÃO DA
MICROESTRUTURA E PROPRIEDADES

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia de Materiais e Manufatura, da Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para obtenção do título de Engenheira de Materiais e Manufatura.

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Falcão de Oliveira

São Carlos

2018

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO,
POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS
DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Dr. Sérgio Rodrigues Fontes da EESC/USP com os dados inseridos pelo(a) autor(a).

S231o Santos, Mariana Souza e
Otimização dos parâmetros de simulação da
solidificação do ferro fundido GGG40 para previsão da
microestrutura e propriedades / Mariana Souza e Santos;
orientador Marcelo Falcão de Oliveira . São Carlos,
2018.

Monografia (Graduação em Engenharia de Materiais e
Manufatura) -- Escola de Engenharia de São Carlos da
Universidade de São Paulo, 2018.

1. Simulação. 2. Ferro fundido. 3. Fundição. 4.
Microestrutura. 5. Propriedades. I. Título.

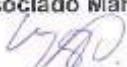
Eduardo Graziosi Silva - CRB - 8/8907

FOLHA DE APROVAÇÃO

Candidato: Mariana Souza e Santos
Título do TCC: Otimização dos parâmetros de simulação da solidificação do ferro fundido GGG40 para previsão da microestrutura e propriedades
Data de defesa: 20/11/2018

Comissão Julgadora	Resultado
Professor Associado Marcelo Falcão de Oliveira (orientador)	Aprovada
Instituição: EESC - SMM	
Professor Associado Haroldo Cavalcanti Pinto	Aprovada
Instituição: EESC - SMM	
Professor Titular Luiz Carlos Casteletti	Aprovada
Instituição: EESC - SMM	

Presidente da Banca: Professor Associado Marcelo Falcão de Oliveira



(assinatura)

DEDICATÓRIA

*Aos meus pais que me deram todo
apoio necessário para seguir esta
jornada e chegar até aqui.*

AGRADECIMENTOS

Primeiramente aos meus pais, por todo amor, amizade e carinho incondicionais que não mediram esforços para eu chegar à esta etapa da minha vida.

Agradeço o companheirismo e a amizade dos meus amigos Bruna Mazzi, Edson Gabriel Santin, Felipe Batistão, Isabela Ygula, Kleber Damasceno, os quais me possibilitaram chegar muito mais longe do que imaginei.

Ao meu namorado, Daniel Santos, por ter estado do meu lado em todos os momentos, por ter me incentivado e me dado forças para seguir em frente.

Aos meus colegas da MAGMA ENGENHARIA, que estiveram ao meu lado, e me fizeram acreditar na minha capacidade.

Ao professor doutor Haroldo Cavalcanti Pinto, pela orientação apoio e confiança.

Ao meu orientador, professor doutor Marcelo Falcão de Oliveira, por me aceitar como orientanda e por compartilhar os seus conhecimentos e ideias.

À Universidade de São Paulo, pelas oportunidades de aprendizados proporcionadas.

RESUMO

SANTOS, M. S. Otimização dos parâmetros de simulação da solidificação do ferro fundido GGG40 para previsão da microestrutura e propriedades. 2018. Monografia – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2018

Atualmente, as fundições de ferro estão inseridas em um ambiente altamente competitivo, no qual não existe espaço para a perda de dinheiro ou tempo com altas taxas de refugo. Diante deste contexto, o uso da simulação se apresenta como uma estratégia bastante interessante simular virtualmente as etapas de fundição pode acarretar redução do refugo, além de diminuir os gastos com insumo e energia. Ocorre que simular o comportamento do ferro fundido não é uma tarefa trivial, devido à forte interdependência entre a composição da liga, inoculação, fases e microestruturas que se formam e as propriedades resultantes deste material. Tendo em vista esse panorama, o objetivo deste trabalho foi apresentar um estudo de correlação da simulação da nodulação de um ferro fundido GGG40 com dados experimentais a partir de um corpo de prova padrão. O desenvolvimento deste estudo se deu em três etapas. A primeira constituiu de revisão bibliográfica do tema. A segunda etapa se baseou na obtenção de dados experimentais, referentes a composição química, microestrutura, propriedades mecânicas, e um planejamento de experimento. Por fim, foi realizada uma avaliação a partir da comparação entre os dados experimentais e os obtidos por meio do planejamento de experimento. O estudo demonstrou a importância de realizar um estudo prévio de correlação para que a simulação do ferro fundido seja útil e represente a realidade. Os desafios encontrados no desenvolvimento deste estudo estiveram relacionados à obtenção das referências e fórmulas utilizadas no interior do software.

Palavras-chave: Simulação, Ferro Fundido, Fundição, Microestrutura, Propriedades.

ABSTRACT

SANTOS, M. S. Optimization of the simulation parameters of GGG40 cast iron for the prediction of microstructure and properties. 2018. Monograph - School of Engineering of São Carlos, University of São Paulo, São Carlos, 2018

Currently, iron foundries are embedded in a highly competitive environment where there is no room for waste of money or time with high scrap rates. In this context, the use of simulation presents itself as a very interesting strategy. Simulating virtually the steps of smelting can lead to reduction of the waste, besides reducing the expenses with input and energy. It occurs that simulating cast iron is not a trivial task due to the strong interdependence between alloy composition, inoculation, phases and microstructures that are formed and the resulting properties of this material. The objective of this work was to present a correlation study of the simulation of the nodulation of a GGG40 cast iron with experimental data from a standard test specimen. The development of this study took place in three stages. The first consisted of bibliographical review of the theme. The second stage was based on experimental data, regarding chemical composition, microstructure, mechanical properties, and experimental design. Finally, an evaluation was made based on the comparison between the experimental data and those obtained through the design of experiment. The study demonstrated the importance of performing a previous correlation study so that the cast iron simulation is useful and represents the reality. The challenges encountered in the development of this study were related to obtaining the references and formulas used inside the software.

Keywords: simulation, cast iron, foundry, microstructure, properties.

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	1
1.1.	Contextualização do tema e sua relevância	1
1.2.	Objetivo	1
2.	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	2
2.1.	Ferros Fundidos.....	2
2.2.	Microestrutura dos ferros fundidos nodulares	3
2.3.	Ferros fundidos nodulares.....	4
2.4.	Obtenção de Grafita Esferoidal em ferros fundidos nodulares	5
2.5.	Inoculação	6
2.6.	Simulação de fundição	7
2.6.1.	Fluidodinâmica computacional	7
2.6.2.	Método dos volumes finitos.....	8
2.6.3.	Malhas Numéricas	9
2.6.4.	Equações Governantes.....	10
2.6.5.	Modelando o ferro fundido na simulação	12
2.7.	Planejamento de experimentos	14
3.	MATERIAIS E MÉTODOS.....	16
3.1.	Composição Química	17
3.2.	Caracterização microestrutural dos materiais	18
3.3.	Ensaio de Tração	19
3.4.	Simulação da fundição	20
4.	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	26
5.	CONCLUSÃO	31
6.	REFERÊNCIAS.....	31

1. INTRODUÇÃO

1.1. *Contextualização do tema e sua relevância*

Muitos afirmam que atualmente a civilização humana atingiu a idade dos materiais de engenharia, mas a importância das fundições de ferro continua a apoiar a tese de que ainda estamos na Idade do Ferro. O ferro fundido, o primeiro compósito feito pelo homem, tem pelo menos 2500 anos de idade, e continua a ser o material de moldagem mais importante, com cerca de 75% da tonelagem mundial total [STEFANESCU, 2005].

As principais razões para a longevidade do ferro fundido são a ampla gama de propriedades mecânicas e físicas, associadas ao seu baixo custo. Entretanto, as fundições de ferro estão inseridas em um ambiente altamente competitivo, sendo pressionadas a fabricar peças com geometrias complexas em prazos muito curtos e preços baixos. Nesse cenário extremamente agressivo não existe espaço para a perda de dinheiro e tempo com altas taxas de refugo, e tentativas e alterações no molde. Dentre as estratégias adotadas pelas fundições para manter-se na competição está o uso da simulação; simular virtualmente as etapas de fundição desde o preenchimento do molde até a solidificação da peça, pode trazer redução do refugo no processo, aumentar o rendimento volumétrico do molde, além de diminuir os gastos com insumos e energia.

No caso específico do ferro fundido a modelagem é um desafio especial devido à forte interdependência entre a composição da liga, metalurgia aplicada e tratamento do metal com a solidificação, fases e estruturas que se formam e as propriedades resultantes do material [STURM, 2018]. Outra dificuldade na modelagem de ferros fundidos refere-se à inoculação, prática comum em fundições.

Este trabalho pretende demonstrar a eficiência da simulação enquanto ferramenta, quando alinhada a dados experimentais confiáveis; ressaltando que o sucesso da implementação e uso desta tecnologia se deve muito mais à forma de como a simulação é tratada do que na qualidade do software. Isto significa dizer que um software de simulação só dará o devido retorno se o usuário do software estiver preparado para aplicá-lo.

1.2. *Objetivo*

O trabalho em questão tem como objetivo principal correlacionar a simulação da nodulização de um ferro fundido com dados experimentais analisando um corpo de prova

padrão. Esta correlação visa prever microestrutura e propriedades mecânicas do ferro fundido GGG40.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. *Ferros Fundidos*

Os ferros fundidos são classificados em diferentes famílias principalmente de acordo com a forma da grafita. O nome de cada família às vezes reflete a forma da grafita (nodular, vermicular), outras vezes tem relação com o aspecto da fratura (cinzento, branco) ou com alguma propriedade mecânica relevante (maleável). Os ferros fundidos brancos não contêm grafita, todo o carbono está na forma de carbonetos. Assim, as principais famílias de ferros fundidos são:

- Ferro fundido cinzento
- Ferro fundido nodular
- Ferro fundido maleável
- Ferro fundido vermicular
- Ferro fundido branco

Os ferros fundidos são ligas Fe-C-Si, contendo ainda Mn, S e P, podendo adicionalmente apresentar elementos de liga diversos. São ligas que apresentam na solidificação, geralmente, uma fase pró-eutética (austenita ou grafita) e que se completa com uma solidificação eutética (austenita + grafita ou austenita + carbonetos). (GUESSER, 2009).

Em ferros fundidos com grafita, a microestrutura apresenta-se como uma matriz similar aos aços (ferrita, perlita, martensita, etc.) e partículas ou um esqueleto de grafita. A grafita possui resistência mecânica muito baixa, de modo que, sob o enfoque de propriedades mecânicas, a sua presença pode ser entendida como uma descontinuidade da matriz, exercendo um efeito de concentração de tensões. A forma desta descontinuidade, isto é, a forma da grafita, tem então profundo efeito sobre as propriedades mecânicas; a forma esférica traduz-se em menor efeito de concentração de tensões, enquanto formas agudas (grafitas em veios) resultam em alta concentração de tensões. Por outro lado, outras propriedades podem ser influenciadas favoravelmente pela forma da grafita em veios, como a condutividade térmica, o amortecimento de vibrações e a usinabilidade.

A matriz metálica pode ser, por exemplo constituída de ferrita; este microconstituente resulta em baixos valores de resistência mecânica, associados a valores relativamente altos de ductilidade. Produzindo-se então misturas de ferrita e perlita obtém-se as diferentes classes de

ferros fundidos, com diferentes combinações de propriedades, cada qual adequada para um a aplicação específica.

2.2. Microestrutura dos ferros fundidos nodulares

Para o entendimento das propriedades mecânicas dos ferros fundidos, é necessário que se compreenda a formação da microestrutura nestes materiais e como as variáveis de processo e de composição química afetam a microestrutura.

Após o término da solidificação, o resfriamento posterior no estado sólido resulta em diminuição do teor de carbono dissolvido na austenita, que se precipita sobre as partículas existentes de grafita. A 723° C a austenita tem então cerca de 0,7% C dissolvido. Nesta temperatura ocorre outra transformação importante, a eutetóide, onde um sólido se transforma em dois outros sólidos, simultaneamente. Nos ferros fundidos existem duas possibilidades de reações eutetóides :

-Reação eutetóide estável:

austenita \rightarrow ferrita + grafita

-Reação eutetóide metaestável

austenita \rightarrow ferrita + cementita (perlita)

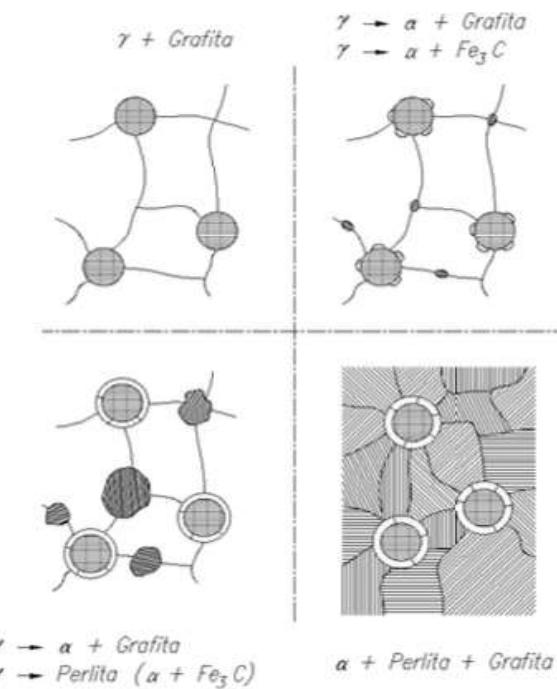


Figura 1: Reação eutetóide estável e metaestável (GUESSER, 2009)

A reação eutetóide estável ocorre em temperaturas um pouco superiores à reação metaestável, porém envolve distâncias de difusão maiores, já que a grafita deposita-se sobre as

partículas existentes, e o invólucro de ferrita formado em torno da grafita aumenta a distância para que novos átomos de carbono se depositem sobre a grafita. A reação eutetóide metaestável é cooperativa, existindo difusão de carbono apenas na austenita, em frente às lamelas de ferrita que estão crescendo de modo que a sua velocidade é alta. A composição química tem profundo efeito sobre as duas reações, com alguns elementos favorecendo a formação de matriz ferrítica, enquanto outros elementos favorecem a presença de matriz perlítica, normalmente dificultado a reação eutetóide estável.

A formação de ferrita é favorecida pelo silício, visto que este aumenta o intervalo de temperatura onde coexistem austenita e ferrita aumentando assim o intervalo de temperatura para a ocorrência da transformação estável. Já a formação de perlita é favorecida por elementos chamados de perlitzantes, tais como Sn, Cu, Mn, os quais dificultam a reação eutetóide estável; seja reduzindo o intervalo de temperaturas de coexistência de austenita e ferrita ou então formando barreiras sobre as partículas de grafita. [GUESSER e HILÁRIO, 1999]

2.3. Ferros fundidos nodulares

Esta classe de ferros fundidos apresenta a grafita em forma de nódulos de modo que a ductilidade é uma propriedade importante deste material. Nodulares com matrizes ferríticas possuem valores de limite de resistência de 380-450 MPa, associados a valores de alongamento de 10-22%, enquanto que em nodulares de matriz perlítica o limite de resistência pode atingir até 900 MPa, com valores de alongamento de 2%. Devido a sua excelente combinação de propriedades, a família dos ferros fundidos nodulares tem ocupado aplicação crescente na engenharia, substituindo componentes de ferro fundido cinzento, ferro fundido maleável, aço fundido e forjado, e estruturas soldadas.

A tabela 1 mostra as diversas classes de ferros fundidos nodulares segundo a norma ABNT NBR 6916 e suas variações de propriedades, segundo esta norma cada classe de ferro fundido é definida como FE XXXYY, os três primeiros números (XXX) indicam limite de resistência à tração mínimo em MPa, já os dois últimos (YY) indicam alongamento mínimo em %. A classe que apresenta o menor custo de fabricação é a FE 50007, por não necessitar de tratamento térmico nem de uso de elementos de liga especiais. Aplicações típicas de ferros fundidos nodulares incluem girabrequins, eixos de comando de válvulas, carcaças de turbocompressores e peças de suspensão de veículos.

Tabela 1 - Propriedades dos ferros fundidos nodulares (GUESSER, 2009)

FE 38017	FE 42012	FE 50007	FE 60003	FE 70002	FE 80002	FE 90002
Limite de Resistência, Limite de Escoamento →						
←Alongamento						
Limite de Fadiga →						
← Resistência ao Impacto						
Dureza →						
Resistência ao desgaste →						
← Usinabilidade						
Resposta a têmpora superficial →						

2.4. Obtenção de Grafita Esferoidal em ferros fundidos nodulares

A grafita tem estrutura hexagonal, e, na solidificação, dependendo da velocidade de crescimento, na direção dos planos basal ou prismático (figura 2), assume as formas nodular ou lamelar, respectivamente. Em ligas Fe-C puras a direção preferida para crescer é a do plano basal, porque este plano tem baixa energia interfacial com o líquido. O crescimento perpendicular ao plano basal resulta em grafita nodular. Entretanto, elementos tensoativos (S, O) tendem a ser adsorvidos no plano prismático, reduzindo a sua energia interfacial, que atinge valores menores que o plano basal. Resulta então em grafita lamelar. Enxofre e oxigênio são elementos sempre presentes nos ferros fundidos comerciais, de modo que a estrutura de grafita lamelar é a mais usual nos ferros fundidos comuns.

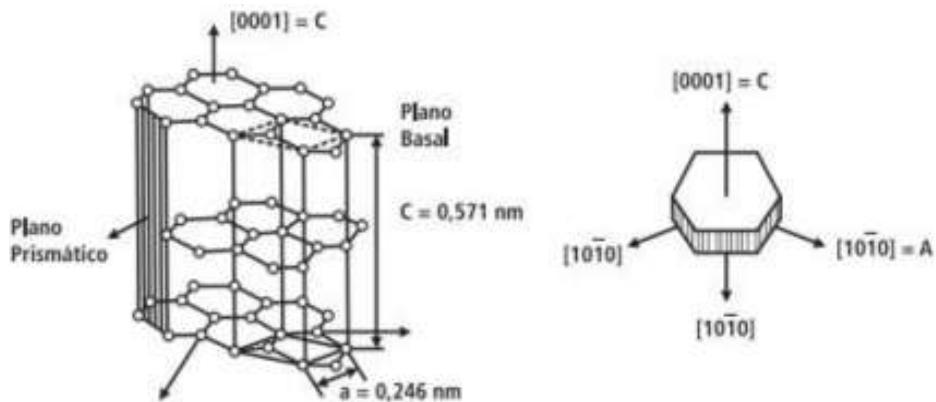


Figura 2: Estrutura hexagonal da grafita. O crescimento preferencial na direção C (perpendicular ao plano basal) resulta em grafita nodular, enquanto crescimento na direção A (planos prismáticos) produz grafita lamelar. (GUESSER, 2009)

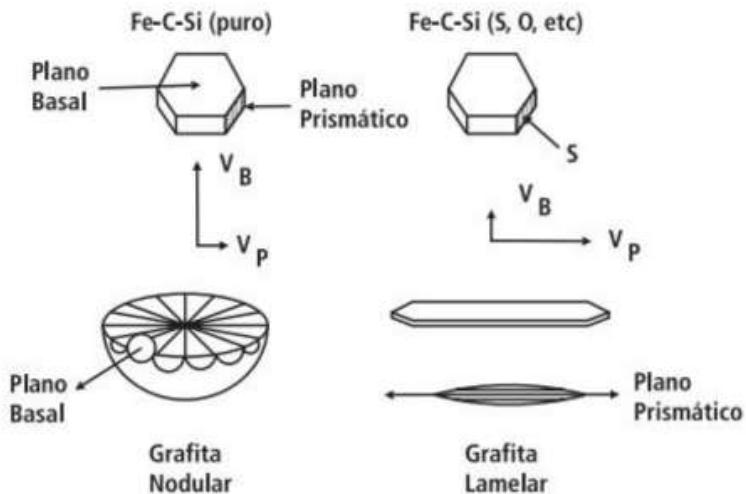


Figura 3: Esquema do crescimento da grafita em veios e em nódulos. (GUESSER, 2009)

Para se alterar a forma da grafita introduz-se importantes elementos no ferro fundido, como o magnésio e o cério. Estes elementos são fortes desoxidantes e fortes dessulfurantes, removendo assim o oxigênio e enxofre de solução. Isto altera as energias interfaciais, favorecendo novamente o crescimento da grafita segundo o plano basal. A nodulação com magnésio/cério é então uma das etapas importantes na produção de ferros fundidos nodulares.

2.5. Inoculação

A inoculação dos ferros fundidos se baseia na introdução de pequenas quantidades de material composto de partículas nucleantes no metal fundido, pouco antes ou durante o vazamento deste, buscando controlar a microestrutura final e, consequentemente, as propriedades mecânicas do material.

Nos ferros fundidos a inoculação é utilizada primeiramente para evitar a formação de carbonetos na estrutura. O efeito da inoculação é muito maior do que poderia se esperar pela simples mudança de composição química causada pela sua adição, e de fato ele proporciona o aumento de núcleos disponíveis para a formação de grafita. Este aumento dos núcleos disponíveis reduz o super-resfriamento necessário na solidificação facilitando a solidificação segundo o eutético estável. [POZZI, 2009]

O objetivo da inoculação é fornecer núcleos extras ao banho. A existência de um número maior de núcleos potenciais para a nucleação e crescimento da grafita permite a obtenção de uma estrutura mais refinada, que resulta em melhores propriedades físicas e mecânicas.

Em ferros fundidos nodulares, onde o número de núcleos é extremamente importante para as propriedades do material, a adição de inoculante no banho tem por objetivo aumentar o

numero de nódulos de grafita e do grau de nodulização, que é uma medida da adequação da grafita à forma de uma esfera perfeita.

O mecanismo de inoculação ainda continua sem um estudo definitivo, porém sabe-se que seu efeito depende da ocorrência de compostos – óxidos, sulfetos, nitretos e carbonetos que promovem a nucleação da grafita e resulta na estabilização do ferro fundido. Após o tratamento de nodularização com Mg, o ferro fundido fica pobre em O, S e N (elementos formadores de substratos) limitando o efeito da inoculação [POZZI, 2009]

Os métodos de inoculação mais utilizados são:

- a) Inoculação na panela: o inoculante é depositado no fundo da panela e o metal derramado por cima deste;
- b) Inoculação no molde: o inoculante em forma de pó ou pastilha é colocado em um ponto específico do canal de alimentação;
- c) Inoculação no jato: o inoculante em pó é adicionado ao metal líquido no momento do vazamento deste no molde. É um sistema muito utilizado em sistemas automáticos. A formação de núcleos e a precipitação da grafita em forma de nódulos, juntamente com o controle do resfriamento ajudam a estabilizar o processo de solidificação.

Dentre os benefícios atribuídos à inoculação tem-se:

- 1) Promove estruturas mais homogêneas;
- 2) Evita formação de carbonetos;
- 3) Reduz a tendência à segregação de elementos de liga;
- 4) Reduz a tendência para a formação de rechupes
- 5) Promove a formação de grafita e ferrita;
- 6) Aumenta a ductilidade e diminui a dureza

2.6. Simulação de fundição

2.6.1. Fluidodinâmica computacional

Segundo Versteeg e Malalasekera (2007), fluidodinâmica computacional (CFD) é o termo que engloba as técnicas matemáticas, numéricas e computacionais utilizadas para simular o escoamento de fluidos. Esta metodologia consiste na construção de modelos numéricos que aproximam modelos matemáticos para escoamentos físicos.

Esta é uma ferramenta útil para auxiliar no entendimento do escoamento, transferência de calor e massa e reações químicas através de milhares de cálculos que são executados para

simular a interação das fases de um determinado volume de controle. A CFD utiliza equações de conservação de grandezas físicas, as quais possuem origem na teoria de fenômenos de transporte.

É importante levar em consideração que simulações CFD, com as adequadas condições de contorno, procuram aproximar os comportamentos reais, ou seja, os dados de entrada dos programas e as equações utilizadas por ele devem atender à maior parte das variáveis envolvidas. Na maioria das áreas ainda é necessário o desenvolvimento de modelos mais precisos para descrever em detalhe a geometria do domínio de cálculo.

A CFD é uma técnica útil para auxiliar na busca de soluções para problemas reais, desde que se conheça suas capacidades e suas limitações. Para o presente trabalho foi utilizado o software de simulação computacional Magma Soft® versão 5.3, desenvolvido pela empresa alemã MAGMA GmbH. A escolha deste software deve-se, principalmente, pela interface voltada para o processo de fundição de ferro fundido em moldes de areia, executada pelo módulo MAGMAiron. O Magma Soft® utiliza o método de volumes finitos.

2.6.2. Método dos volumes finitos

Método dos volumes finitos (MVF) é a técnica na qual podemos discretizar a lei geral da conservação das grandezas físicas diretamente no domínio de um problema, ou seja, considera os princípios físicos da conservação de certa grandeza através de volumes finitos, conseguindo resolver problemas complexos. Em um sistema conservativo, é possível aplicar o método, onde o domínio do problema é dividido em células e aplicada a lei da conservação para cada uma, e assim, o equilíbrio total de todo o problema será atendido.

Apesar da existência de métodos como diferenças finitas e elementos finitos, cada método especializou-se em resolver problemas com características particulares: o método das diferenças finitas trata as não linearidades, como aqueles presentes nas equações de Navier-Stokes, porém não trabalhava com geometrias irregulares. Por outro lado, o método dos elementos finitos especializou-se em problemas onde as não linearidades eram secundárias, mas desenvolveu-se bem em geometrias irregulares. O MVF surgiu na década de 70 como uma ferramenta para solucionar problemas onde termos não lineares, como as acelerações convectivas presentes nas equações de Navier-Stokes estão presentes, mas inicialmente em coordenadas ortogonais e cartesianas.

Este método é aplicado na simulação de mecânica dos fluidos computacional por ser aplicado em malhas não estruturadas. O MVF é baseado no Teorema da Divergência (Equação

1), no qual integrais de volume numa equação diferencial parcial que contenham termos divergentes são convertidas em integrais de superfície e assim avaliados como fluxos na superfície de cada volume, ou seja, permite transformar integrais de contorno em integrais de domínio.

Equação 1

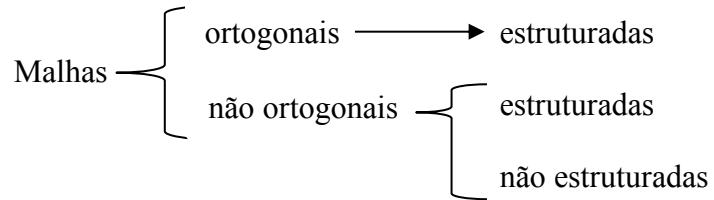
$$\int \vec{\vartheta} \vec{n} dS = \int \vec{\nabla} \vec{\vartheta} dV$$

A base do MVF é a integração da equação da lei geral de conservação, ou seja, de uma determinada grandeza física, que é expressa pelas equações governantes sobre qualquer volume finito do domínio. Este é discretizado através de inúmeros volumes de controle que não se sobrepõem, constituindo assim a chamada “malha” na qual serão executadas as equações algébricas.

2.6.3. Malhas Numéricas

Existem diversas formas de discretizar um domínio físico. Deve-se observar, entretanto, que a escolha da malha influenciará na qualidade do resultado. A malha escolhida deve ser capaz de representar adequadamente as características gerais do problema, bem como se adequar aos contornos ou até mesmo ser refinada localmente para que as particularidades de cada fenômeno estudado possam ser representadas satisfatoriamente.

A malha utilizada na resolução do problema deve ser adequada à geometria de análise, deve envolver todo o domínio e atender aos requisitos gerais do problema. Assim como os métodos, cada malha tem suas vantagens e desvantagens e podem ser divididas conforme o esquema a seguir.



Malhas ortogonais possuem os centros dos volumes de controle perpendiculares às faces dos contornos (figura 4). Podem ser utilizadas em qualquer tipo de domínio, porém em casos com geometrias mais complexas podem não se adaptar nos fechamentos dos contornos.

Malhas não ortogonais (figura 5) possuem adaptabilidade aos contornos de problemas complexos, os centros dos volumes de controle não têm restrição quanto ao paralelismo, atendendo aos requisitos da maioria das geometrias e levando em consideração as condições de contorno que possuem grande influência na resolução dos problemas.

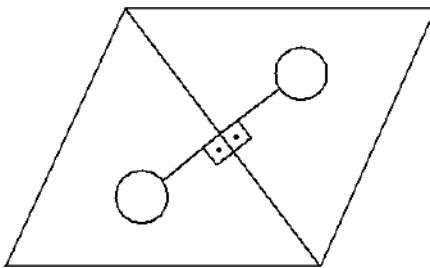


Figura 4: Malha ortogonal

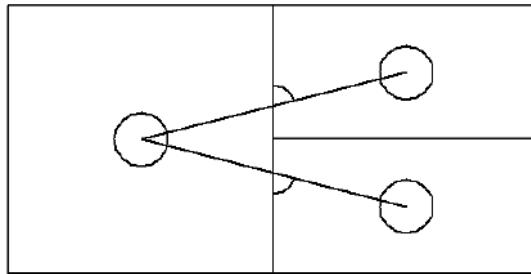


Figura 5: Malha não ortogonal

Malhas estruturadas e não estruturadas diferenciam-se pelo fato de as estruturadas possuírem uma lei de formação entre os volumes e os nós do domínio, tornando a malha mais simples, porém com dificuldade de se adaptar e representar regiões onde a geometria é complexa. As não estruturadas não possuem ordem pré-definida entre os volumes do espaço discretizado, ou seja, o número de vizinhos pode variar de volume para volume.

2.6.4. Equações Governantes

Para poder compreender o funcionamento de um software de simulação através de volumes finitos, deve-se conhecer as equações que regem o seu funcionamento, revisando os conceitos de mecânica dos fluidos. Um software de simulação CFD deve resolver uma série de equações de estado físico e termodinâmicas, a quantidade depende da complexidade da modelagem do problema.

Esta seção tem por objetivo apresentar, brevemente, as principais equações governantes aplicáveis à solução de um problema composto pelas etapas de enchimento e solidificação de

um fluido em uma cavidade sólida, ou seja, equações governantes para a mecânica dos fluidos e a transferência de calor.

As equações governantes na sequência são apresentadas na forma diferencial e para coordenadas retangulares para um volume de controle genérico, como o mostrado na Figura 6, seguindo como referência a estrutura geral para uma equação de transporte genérica, descrita na Equação 2, (PATANKAR, 1980).

Equação 2

$$\frac{\partial(p\bar{\varphi})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (p \cdot \vec{u} \cdot \bar{\varphi}) = \vec{\nabla} \cdot (\Gamma_\varphi \cdot \vec{\nabla} \cdot \bar{\varphi}) + S_\varphi$$

onde ρ é a massa específica do fluido, φ representa uma variável genérica, $\Gamma\varphi$ é o coeficiente de difusividade da variável φ , $S\varphi$ é a taxa de consumo ou produção de φ no volume de controle e $\vec{\nabla}$ é o operador divergente vetorial.

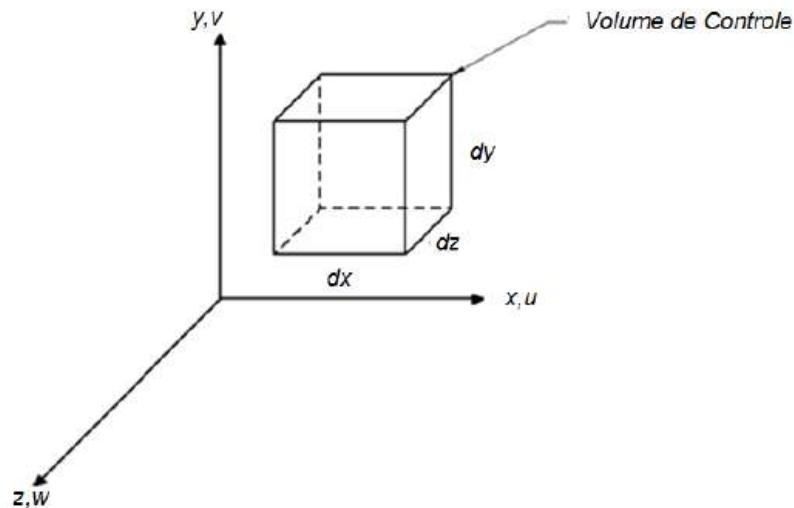


Figura 6: Volume de controle em coordenadas cartesianas

Essas equações podem ser encontradas em diversos textos clássicos de mecânica dos fluidos e transferência de calor computacional, como os de Patankar (1980) e Versteeg e Malalasekera (2007), de onde podem ser obtidas informações mais detalhadas sobre sua derivação.

2.6.5. Modelando o ferro fundido na simulação

A maioria dos programas de simulação é baseada em um tipo de formulação de entalpia que, muitas vezes com boa precisão, pode ser usado para prever a distribuição de temperatura em um fundido em função do tempo.

No entanto, se o objetivo é prever a variação real da estrutura em uma fundição, que pode então ser correlacionada às propriedades mecânicas, é necessário considerar as leis físicas subjacentes às transformações de fase. Uma descrição completa deverá envolver a nucleação e o crescimento de todas as fases relevantes durante a solidificação.

Segundo Wéssen (1997), muito trabalho foi feito na modelagem e simulação do desenvolvimento de estruturas em ferro fundido nodular. Para a nucleação de nódulos de grafita, a maior parte do trabalho baseou-se no ressurgimento do trabalho de Oldfield (1966), que descobriu que o número total de células eutéticas no ferro cinzento poderia estar relacionado ao super-resfriamento eutético de acordo com:

Equação 3

$$N_v = A \cdot \Delta T^n$$

Sendo, N_v o número de núcleos por mm^3 , ΔT o super-resfriamento, n é o expoente empírico e A é uma constante que pode ser relacionada a uma combinação específica de massa fundida e inoculante.

O valor do expoente, n , às vezes foi declarado como sendo 2 e às vezes 1. Várias modificações foram propostas.

Os modelos apresentados resultam em uma densidade fixa de nódulos em cada célula e, para fins de simulação, todos os nódulos tem o mesmo tamanho. Isso é chamado modelagem determinística.

Em ferro fundido nodular, a ferrita se forma em torno da grafita e o crescimento prossegue até que a perlita nucleia e consome a austenita remanescente. Para simular a estrutura, é necessário ter modelos precisos para o crescimento da ferrita. Alguns pesquisadores propuseram que o crescimento é completamente governado pela difusão do carbono através da camada de ferrita. [STEFANESCU, 2005].

Wéssen (1997) propõe que o crescimento de ferrita no ferro fundido nodular seja dividido em três estágios diferentes, conforme a figura 7: (I) nucleação de grãos em nódulos de grafita, seguido de crescimento ao longo da superfície do sólido/líquido até que um invólucro

seja formado; (II) crescimento controlado por uma reação na interface α /grafita; e (III) crescimento controlado por difusão através do invólucro de ferrita.

Na primeira etapa, assumiu-se que a ferrita cresce apenas pela difusão a granel de carbono na austenita. O crescimento da camada de ferrita no esferóide de grafita foi calculado como:

Equação 4

$$\frac{dL_\alpha}{dt} = \left(\frac{D_C^\gamma (C_\alpha^\gamma - C^{\gamma bulk})}{S^\alpha (C_\alpha^\gamma - C^\gamma)} \right)$$

Onde L_α é o comprimento da camada de ferrita, S^α é a sua espessura, D_C^γ é coeficiente de difusão de carbono na austenita, C^γ é a solubilidade da ferrita em equilíbrio com a austenita, C_α^γ é a solubilidade da austenita em equilíbrio com a ferrita, $C^{\gamma bulk}$ é o teor de carbono na austenita.

O crescimento durante o segundo estágio é controlado por uma reação de interface na interface α / Gr. O crescimento da espessura da concha foi calculado como:

Equação 5

$$\frac{dS^\alpha}{dt} = \frac{\rho^\alpha (C^{\alpha i} - C^\gamma)}{\rho^\gamma (C_\alpha^\gamma - C^\gamma)} \left(\frac{r_{gr}}{r_{gr} + S^\alpha} \right) * \mu$$

Onde $C^{\alpha i}$ é a concentração de C na interface, ρ^α é a taxa de crescimento de ferrita primária, ρ^γ é a taxa de crescimento de austenita, r_{gr} é o raio de grafita, e μ é um coeficiente de interface que deve ser avaliado a partir de experimentos.

Finalmente, no terceiro estágio, a taxa de difusão do carbono através da camada de ferrita será o mecanismo de controle da taxa, e pode ser calculado como:

Equação 6

$$\frac{dl^\alpha}{dt} = \frac{\rho^\alpha (C^\gamma - C^{gr})}{\rho^\gamma (C_\alpha^\gamma - C^\gamma)} \left(\frac{r_{gr} \cdot D_C^\alpha}{l^\alpha (r_{gr} + l^\alpha)} \right)$$

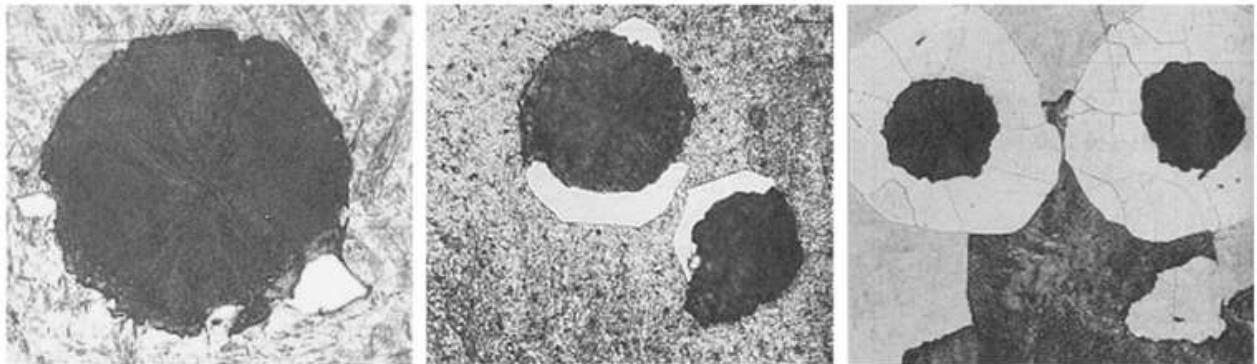


Figura 7: Os três estágios de crescimento da ferrita em nódulos de grafita esferoidal

O modelo adotado por Wessén foi incorporado ao software comercial Magmasoft.

O mapeamento da evolução da microestrutura por meio da modelagem computacional possibilitou o mapeamento das propriedades mecânicas a partir de modelos estatísticos dependendo da composição e da taxa de resfriamento, ou de valores numéricos. Por exemplo, a dureza Brinell pode ser calculada como uma função de fases fracionárias na microestrutura e coeficientes derivados, como é possível observar na equação 7:

Equação 7

$$HB = HB_{gr} \cdot f_{gr} + HB_{\alpha} \cdot f_{\alpha} + HB_p \cdot f_p + HB_{Fe_3C} \cdot f_{Fe_3C}$$

Sendo:

Equação 8

$$HB_{\alpha} = HB_{Fe} \cdot f_{Fe} + \sum C_i \cdot Pct. X_i$$

Equação 9

$$HB_p = C_1 + \sum C_i \cdot Pct. X_i + C_2 \cdot \lambda_p^{-n}$$

Onde HB_{α} , HB_p , HB_{gr} , HB_{Fe_3C} , HB_{Fe} são as durezas da ferrita, perlita, grafita, carboneto e ferro puro, respectivamente; λ_p é o espaçamento lamelar da perlita; C_i e n são constantes que devem ser obtidas experimentalmente.

2.7. Planejamento de experimentos

O Planejamento de Experimentos (em inglês Design of Experiments, DOE) é uma técnica utilizada para se planejar experimentos, ou seja, para definir quais dados, em que quantidade e em que condições devem ser coletados durante um determinado experimento, buscando, basicamente, satisfazer dois grandes objetivos: a maior precisão estatística possível na resposta e o menor custo. É, portanto, uma técnica de extrema importância para a indústria, pois seu emprego permite resultados mais confiáveis economizando dinheiro e tempo,

parâmetros fundamentais em tempos de concorrência acirrada. A sua aplicação no desenvolvimento de novos produtos é muito importante, onde uma maior qualidade dos resultados dos testes pode levar a um projeto com desempenho superior, seja em termos de suas características funcionais, como também sua robustez.

Coleman & Montgomery (1993) propõem as seguintes etapas para o desenvolvimento de um Planejamento de Experimentos na Indústria:

1. Caracterização do problema
2. Escolha dos fatores de influência e níveis
3. Seleção das variáveis de resposta
4. Determinação de um modelo de planejamento de experimento
5. Condução do experimento
6. Análise dos dados
7. Conclusões e recomendações

Um experimento planejado é um teste, ou série de testes, no qual são feitas mudanças propositais nas variáveis de entrada de um processo, de modo a se observar e identificar mudanças correspondentes na resposta. O processo pode ser visualizado como uma combinação de máquinas, métodos e pessoas, que transforma um material de entrada em um produto.

Na prática, geralmente é difícil perceber que existe um problema que exige experimentos planejados formais, de modo que pode não ser fácil obter-se um relato do problema claro, preciso e aceito por todos. No entanto é absolutamente essencial desenvolver completamente todas as ideias sobre o problema e sobre os objetivos específicos do experimento.

Devem ser levados em conta os intervalos sobre os quais os fatores irão variar, e os níveis específicos em que cada rodada será realizada. Quando o objetivo é a varredura dos fatores ou caracterização do processo, é, em geral, melhor manter baixo o número de níveis e fatores.

Na seleção da variável-resposta, o experimentador deve ter certeza de que aquela variável realmente fornece informação útil sobre o processo em estudo. Muitas vezes, a média ou o desvio padrão (ou ambos) da característica medida será a variável-resposta. Respostas múltiplas não são raras.

A escolha do planejamento envolve consideração sobre o tamanho da amostra (número de replicações), seleção de uma ordem adequada de rodadas para as tentativas experimentais, ou se a formação de blocos ou outras restrições de aleatorização estão envolvidas. Dentre os modelos de planejamento de experimento, tem-se: completamente aleatorizado com um único

fator, fatorial, fatorial 2k em blocos, fatorial 2k fracionário, blocos aleatorizados, blocos incompletos balanceados, etc.

No caso deste trabalho utilizou-se o fatorial, este modelo de experimento é apropriado quando vários fatores devem ser estudados em dois ou mais níveis e as interações entre os fatores podem ser importantes. Em cada repetição completa do experimento todas as combinações possíveis dos níveis dos fatores (tratamentos) são estudadas. A alocação das unidades experimentais aos tratamentos e a ordem de realização dos ensaios são feitas de modo aleatório.

3. MATERIAIS E MÉTODOS

A metalúrgica Candeia, situada em Santa Rosa- RS, gentilmente forneceu os materiais utilizados nesse estudo, bem como os resultados dos ensaios.

A fim de se avaliar o efeito da nodulação utilizou-se uma liga da classe GGG40 (FE42012 pela norma ABNT), o material foi escolhido por ser um dos mais utilizados na metalúrgica. Segundo CHIAVERINI (2008) este material não tem uma composição química bem definida por norma, sendo a composição estabelecida como um acordo mútuo entre fornecedor e cliente, mas deve atender a solicitações mecânicas mínimas: limite de resistência à tração 420 MPa e 12% de alongamento.

Com a intenção de conhecer o material: avaliar a composição e verificar propriedades mecânicas, foi confeccionado um modelo de “bloco em Y”, seguindo a norma ASTM A536, pode-se observar um esboço do modelo na figura 8.

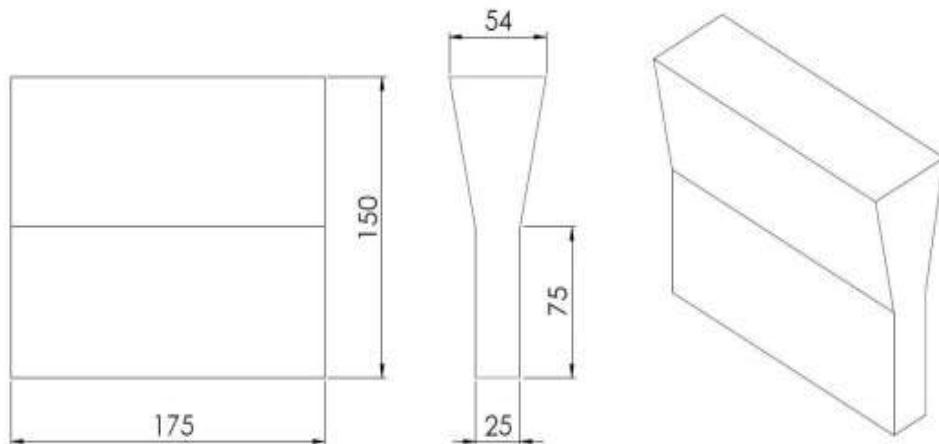


Figura 8: Indicação das dimensões do bloco em Y em milímetros.

O molde foi confeccionado através do processo de cura a frio ou Cold Box. Inicialmente, misturou-se, com o auxílio de um misturador manual, a areia branca junto ao catalisador, a

seguir foi adicionada a resina e verificada a homogeneização da mistura. A mistura pronta foi comprimida dando a forma desejada de acordo com o padrão do bloco Y.

Antes de transferir o metal líquido do forno para a panela, foi adicionada a liga de magnésio com percentual de 1,6 a 1,9% em massa desse elemento. Na etapa seguinte, durante a transferência do metal da panela para a panela de vazamento, ocorreu a inoculação com inoculante a base de Cálcio e Bário da marca Cometa, e nodulização. O inoculante foi colocado sobre o jato do metal, para melhor aproveitamento do mesmo. Feito isso, encaminhou-se para o vazamento em moldes.

Após a confecção do bloco, foram definidas regiões para se realizar os ensaios de dureza, tração e metalografia. As regiões definidas para se realizar os ensaios coincidem com as regiões simuladas no software conforme a figura 9.

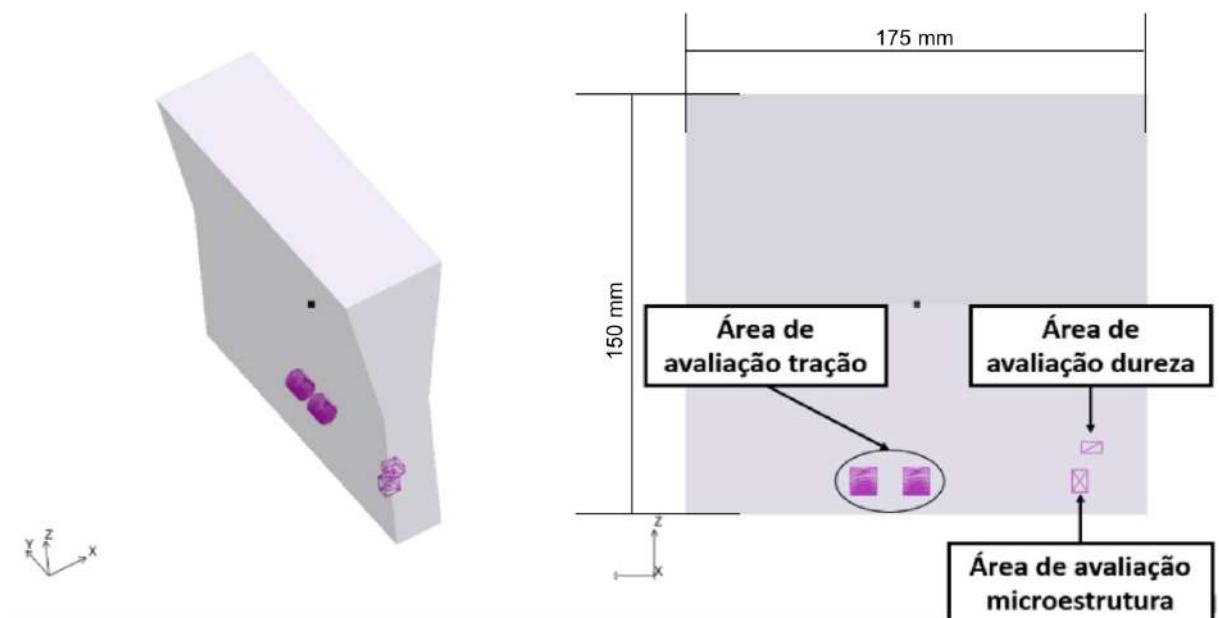


Figura 9: Áreas de avaliação dos ensaios

3.1. Composição Química

A amostra utilizada no ensaio de composição química foi obtida vertendo o metal líquido em uma coquilha refrigerada, como se pode observar na figura 10.



Figura 10: Coquilha refrigerada para obtenção de amostras para análise química

Após a solidificação a moeda coquilhada foi preparada para o ensaio químico com o auxílio de uma retífica.

A composição química foi avaliada com o auxílio de um espectrômetro ICP, modelo SPECTROMAXx, da marca AMETEK.

A amostra com a superfície a ser analisada foi presa contra a mesa cobrindo completamente o orifício da mesma, conforme se observa na figura 11.



Figura 11: Amostra posicionada no aparelho ICP para ensaio de composição química

Ao realizar a análise, efetuou-se de duas a três queimas respeitando a repetibilidade dos resultados dos corpos de prova.

3.2. Caracterização microestrutural dos materiais

A fim de se caracterizar a liga GGG40 utilizou-se a amostra correspondente à área de avaliação da microestrutura (figura 9).

O bloco em Y foi seccionado, com o auxilio de uma Serra de Fita Horizontal da marca FRANHO modelo FM-500A, para a retirada dos corpos de prova necessários à realização dos ensaios.

As amostras utilizadas para a avaliação microestrutural foram lixadas e polidas, com auxílio de uma politriz metalográfica da marca SOLOTEST. O processo de lixamento foi executado em cinco etapas, e em cada etapa utilizou-se uma lixa de SiC de granulometria diferente, foram utilizadas, respectivamente, lixas #mesh 220, 400, 600, 1000, 1200.

O polimento foi realizado utilizando-se pano de polimento e alumina 1 μm . A fim de limpar as superfícies polidas utilizou-se um algodão embebido em álcool, posteriormente as amostras foram secadas com um secador de cabelo doméstico para remoção de qualquer umidade.

No caso, as amostras utilizadas para avaliação de microestrutura, após o polimento, foram atacadas quimicamente com Nital a uma concentração de 2% de HNO_3 .

As imagens foram obtidas por meio de um microscópio óptico da marca TOPCON, com ampliação padrão, segundo a norma ABNT NBR 15454, e auxílio do software computacional Working Advanced Light para a análise das imagens capturadas.

3.3. Ensaio de Tração

A amostra para o ensaio de tração foi usinada em uma empresa do ramo metalmecânico da cidade de Santa Rosa - RS. Foi utilizado um torno convencional da marca NARDINI NODUS modelo ND250. O corpo de prova foi usinado seguindo-se a norma ASTM A536, conforme as dimensões da figura 12.

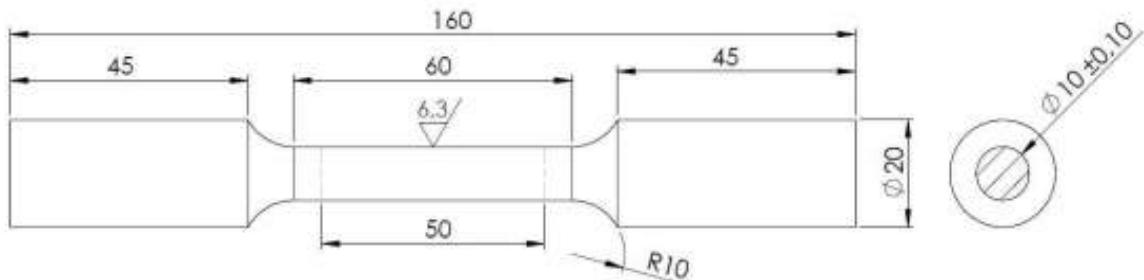


Figura 12: Dimensões do corpo de prova para ensaio de tração em milímetros

Utilizou-se uma máquina de ensaio universal, marca EMIC, modelo DL-30000.

Inicialmente a máquina de ensaios para o teste de tração foi ligada e regulada, antes de colocar o corpo de prova na máquina. O mesmo foi marcado com a medida de 50 mm de

comprimento útil para análise de deformação do material após efetuar o ensaio de tração, conforme ilustra a figura 13.

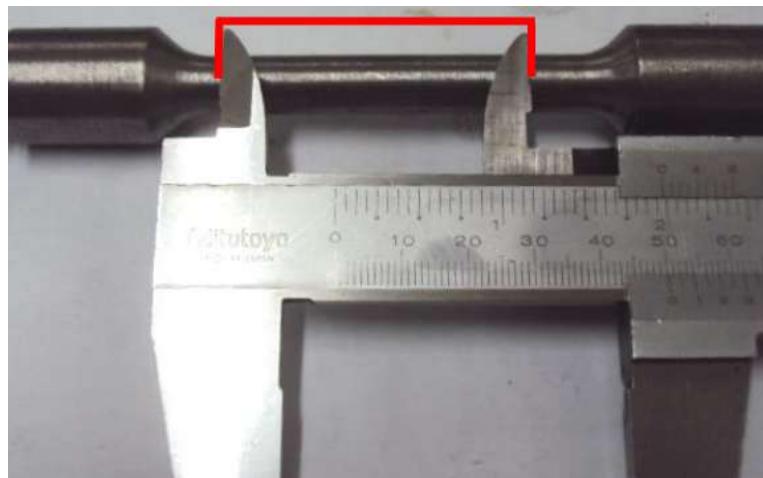


Figura 13: Determinação do comprimento útil para análise de deformação

A seguir, o corpo de prova foi posicionado na máquina. Os dados gerados com o mesmo foram anotados no software que está vinculado à máquina de ensaio de tração e através dele foram obtidos os relatórios para as análises. Utilizou-se a norma ABNT NBR ISO 6892-1 e, antes da realização de cada ensaio, mediu-se o diâmetro menor do corpo de prova para conferir a dimensão da área que sofreria o alongamento e ruptura. Feito isso, o valor do diâmetro verificado foi adicionado ao banco de dados do software.

Após a realização do ensaio mediu-se novamente o diâmetro próximo à área onde o material se rompeu e o valor conferido também foi adicionado ao banco de dados do software para a formulação do relatório final dos corpos de prova ensaiados.

3.4. Simulação da fundição

Neste tópico serão apresentadas as geometrias e os parâmetros envolvidos na simulação. Utilizou-se neste estudo o software comercial da empresa MAGMA, e o módulo utilizado foi o MAGMAiron versão 5.3.1.1.

Inicialmente o bloco em Y já modelado em 3D foi introduzido no software através da geração de arquivos com extensão STL (arquivo de estereolitografia) pelo *Solid Edge*. A seguir definiu-se um molde. As dimensões do molde foram baseadas no molde real, as dimensões da peça e do molde podem ser observadas nas figuras 14 e 15.

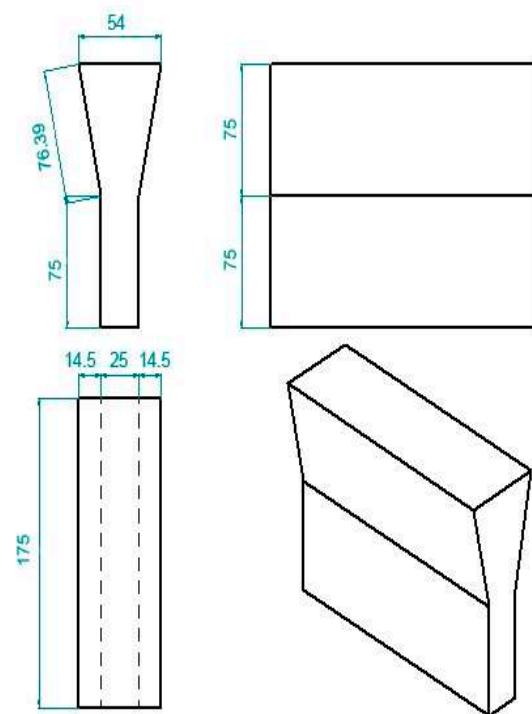


Figura 14: Desenho técnico do corpo de prova em Y

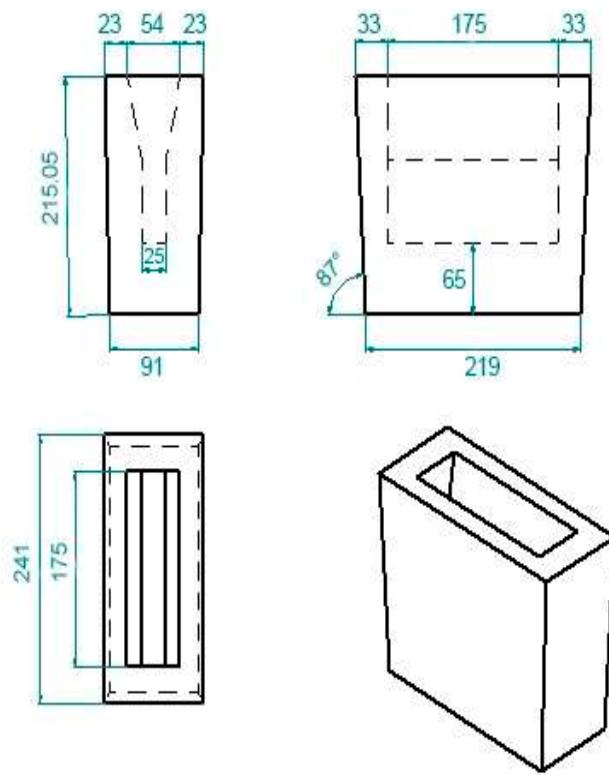


Figura 15: Desenho técnico do molde

Nesta etapa foi necessário definir cada peça do conjunto a ser considerado na simulação, ou seja, cada elemento foi dividido em ID's (identidade para cada arquivo) para que o software identificasse a função de cada geometria. Por se tratar de uma peça única com geometria simples, os ID's considerados foram somente o da peça (casting) e o do molde (sand mold).

O cálculo da simulação foi realizado a partir das inúmeras células em que foi dividido o conjunto peça/molde. O refinamento da malha é proporcional às dimensões dos modelos, pois representa a quantidade de dados em cada volume finito. Neste caso, por se tratar de uma geometria bastante simplificada, não foi necessária uma malha muito refinada.

A malha em questão apresentou aproximadamente 51 mil volumes de controle para a cavidade (figura 16) e aproximadamente 224 mil para o conjunto do molde.

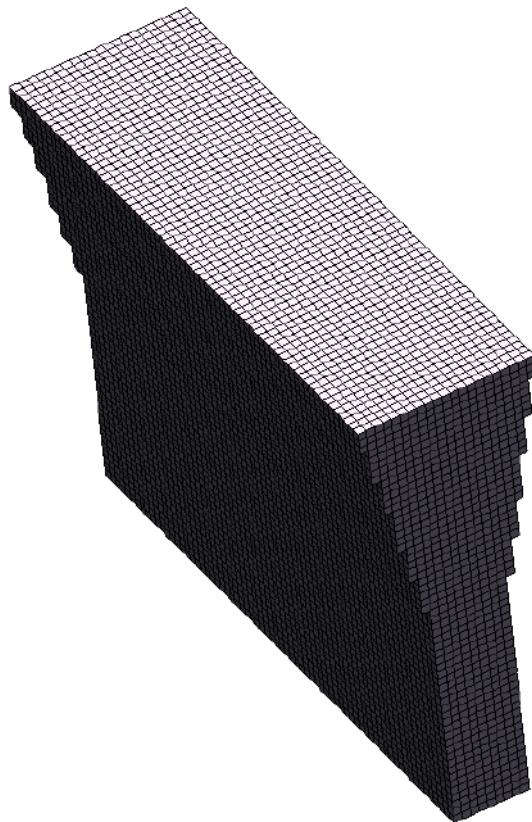


Figura 4: Malha do bloco em Y

Após a geração da malha, foram definidos: composição da liga, temperatura inicial de vazamento, coeficiente de transferência de calor, comportamento da expansão grafítica, deformação do molde, tratamento do banho metálico.

A temperatura inicial de vazamento foi de 1392° C, já a temperatura inicial do molde foi de 30° C.

O tratamento do banho metálico está relacionado à inoculação da liga de acordo com a equação 3.

No software os valores assumidos para n variam segundo a tabela 2:

Tabela 2: valores do expoente n de acordo com o material

Material	n
Ferro fundido nodular	1,26

A constante de nucleação A, pode ser obtida através de uma relação linear segundo WESSÉN (1997). O software utiliza a seguinte relação para definir a constante A:

$$A = m \cdot y$$

Na qual, m está relacionado ao método de inoculação e y está relacionado ao rendimento do tratamento. O parâmetro m assume valores específicos de acordo com o material (ferro fundido cinzento e nodular) e à qualidade da inoculação (fair, good, very good), os valores assumidos por estes parâmetros podem ser observados na tabela 3:

Tabela 3: valores assumidos pelo parâmetro m

m	Ferro fundido nodular
Fair	50
Good	632
Very Good	10000

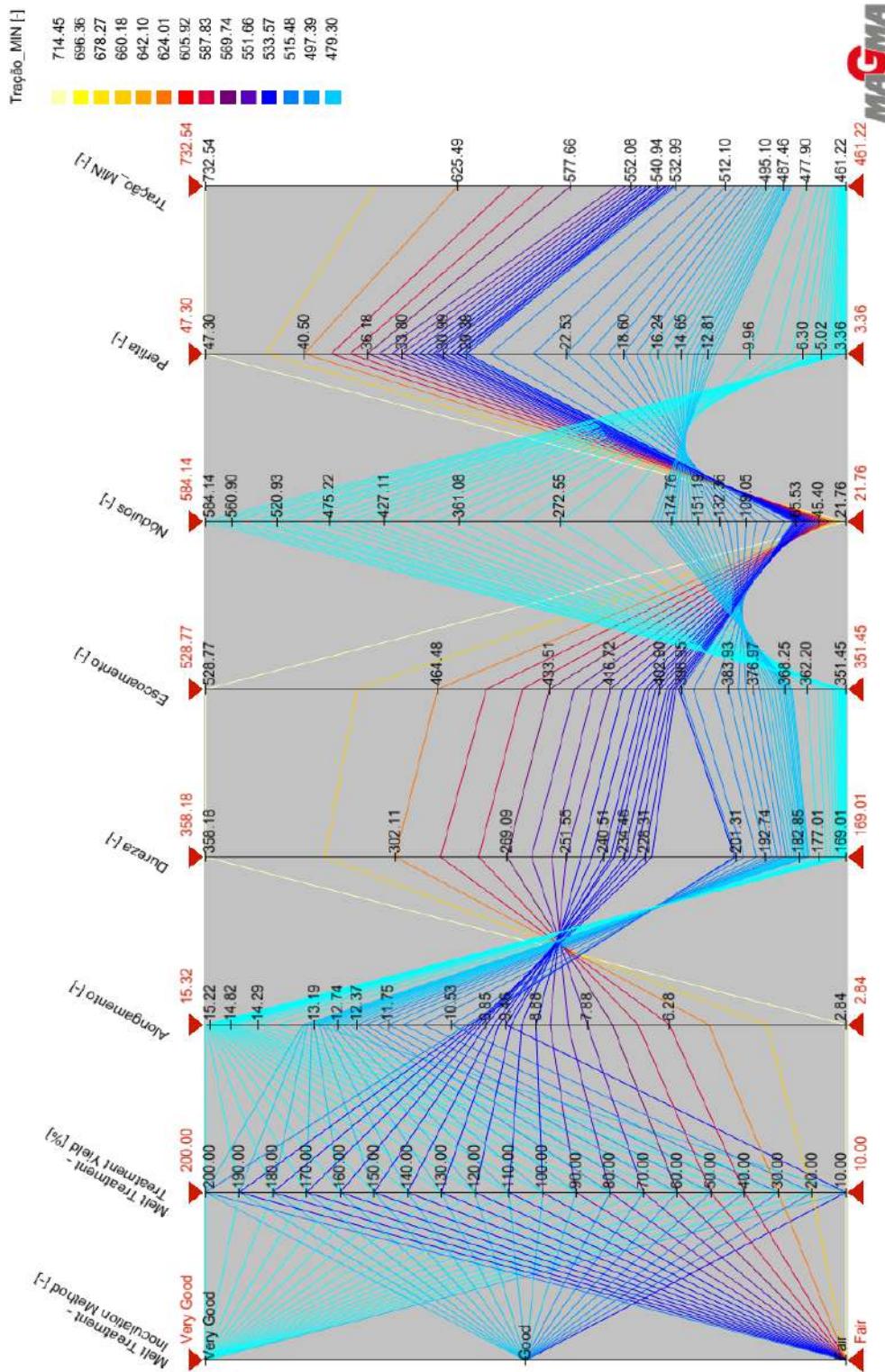
O parâmetro y, é um fator multiplicativo e pode assumir diversos valores, opta-se por variá-lo entre 0.1 e 2.0, sempre em passos de 0.1.

Assim, para definir o valor da constante de nucleação A foi realizado um planejamento de experimento (DoE), no qual variou-se o método de inoculação m em 3 níveis (Fair, Good, Very Good), e o rendimento do tratamento em 20 níveis, de 10% a 200% em passos de 10%.

O objetivo principal deste experimento foi obter os valores de m e y que aproximasse os resultados simulados dos experimentais. Desta forma, definiu-se como objetivos: número de nódulos, quantidade de perlita em %, dureza, limite de resistência à tração, escoamento e alongamento. Os valores alvos dos objetivos são os obtidos experimentalmente.

Dentre os objetivos, optou-se por selecionar os valores mínimos de tração, pois é de interesse saber quais os menores valores no qual o material se rompe, no caso do alongamento optou-se por avaliar o valor máximo. Já os demais objetivos foram avaliados quanto aos valores médios.

A partir dos parâmetros variados, o software gerou todas as combinações possíveis entre eles, cada combinação é chamada de “design”. A partir dos designs gerados o software calculou os objetivos definidos para cada um destes. Após as simulações, obteve-se um gráfico de coordenadas paralelas, como pode ser visto na figura 17, no qual cada linha representa um “design com” valores específicos de m , y , e respostas de alongamento, dureza, escoamento, etc.



4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A partir dos ensaios realizados obtiveram-se os resultados descritos na tabela 4.

Tabela 4: Dados obtido experimentalmente, e valores referentes às médias e desvios padrão, respectivamente

		Valores médios e desvio padrão
Microestrutura	Número de nódulos por mm ³	157,25 ± 11,64
	% Perlita	15,50 ± 2,38
Propriedades Mecânicas	Escoamento (MPa)	345,09 ± 1,93
	Limite de Resistência à Tração (MPa)	476,16 ± 4,17
	Alongamento (%)	17,70 ± 0,71

A fim de se obter a melhor correlação e definir os parâmetros ideais de m e y filtraram-se os resultados dos designs a partir dos resultados práticos. Utilizou-se uma faixa de valores para perlita e número de nódulos, como se pode observar na figura 18.

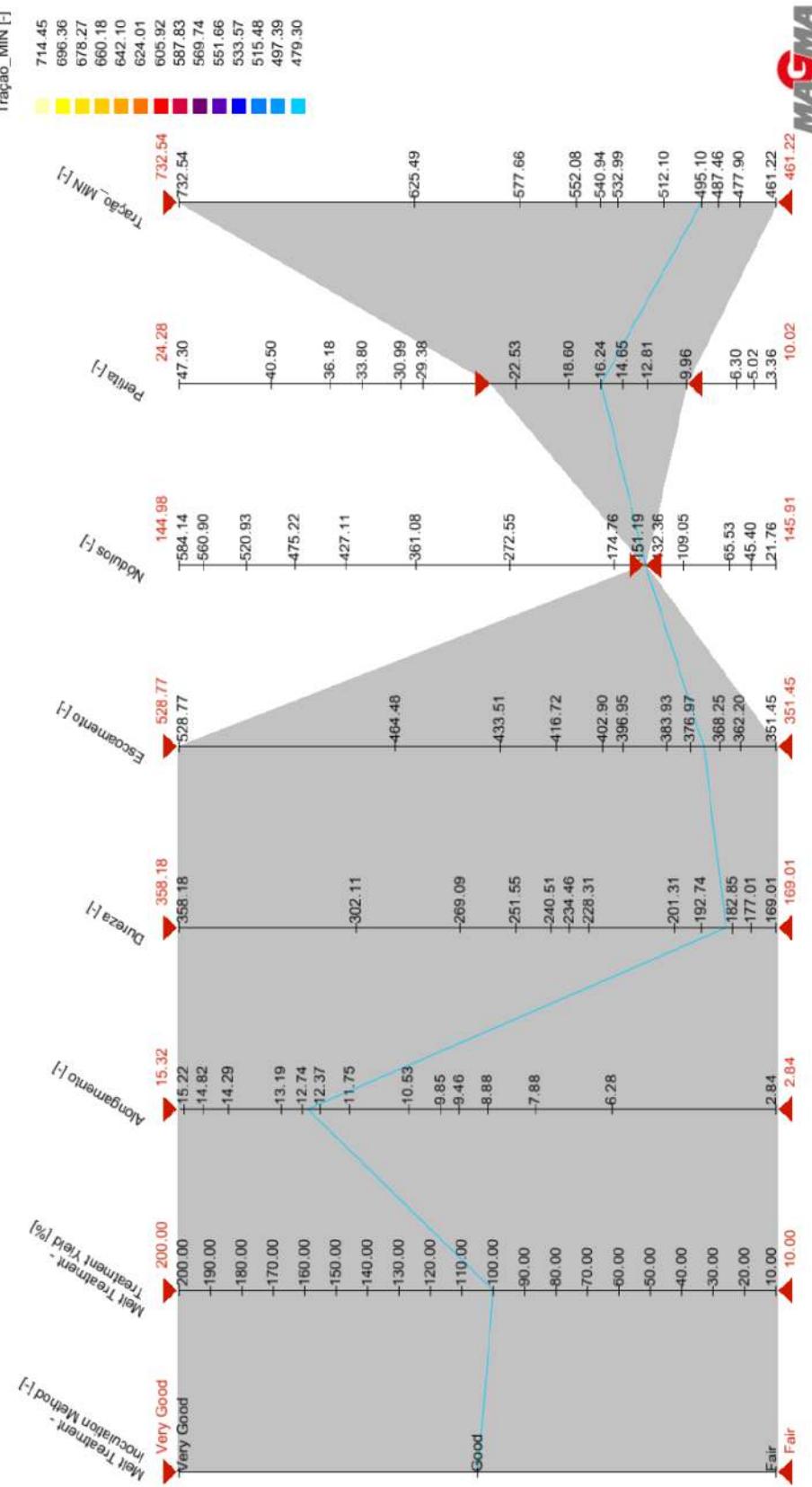


Figura 18: Gráfico de coordenadas paralelas, utilizando filtros na porcentagem de perlita e número de nódulos. Fonte: próprio autor.

Nota-se que utilizando o filtro em apenas 2 dos objetivos já foi possível selecionar o design desejado, clicando sobre a linha, que representa o design, consegue-se obter mais informações, conforme se observa na figura 19.

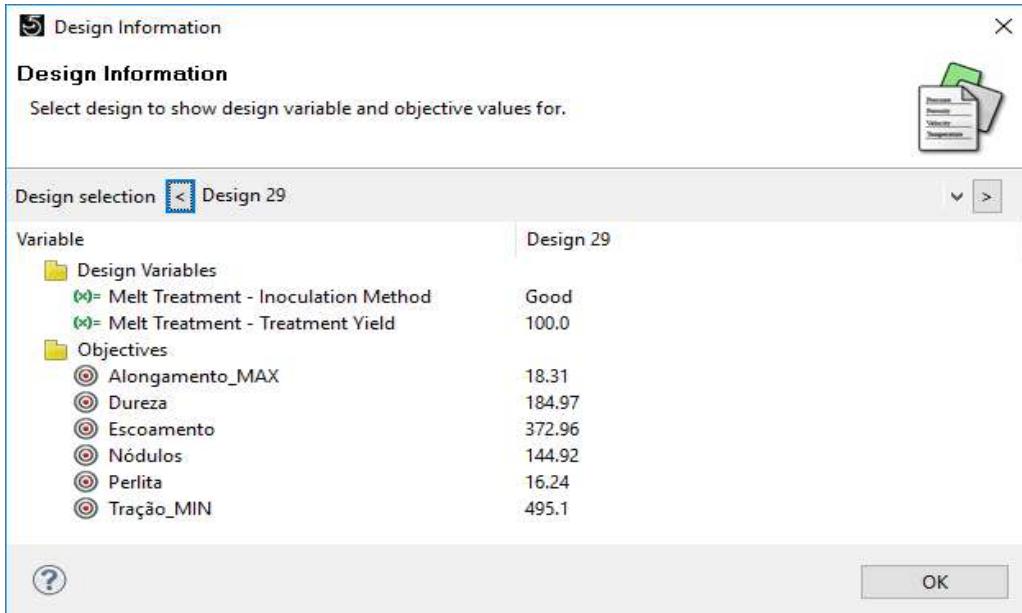


Figura 19: Informações do design selecionado a partir do filtro. Fonte: próprio autor

O design 29 apresentou os resultados mais próximos aos dados experimentais. Comparando-se os dados na tabela 5, nota-se que os valores experimentais e simulados apresentaram uma boa correlação. Os parâmetros utilizados no design selecionado foram: método de inoculação m igual a good (equivalente ao valor 632) e rendimento do tratamento γ igual a 100%.

Tabela 5: Comparativo entre o design selecionado no software de simulação e os resultados experimentais da liga GGG40

	D29	Dados experimentais
Número de nódulos por mm ³	144,90	157 ± 12
% Perlita	16,20	16 ± 2
Escoamento (MPa)	373,00	345 ± 2
Limite de Resistência à Tração (MPa)	495,10	476 ± 4
Alongamento (%)	18,30	17,7 ± 0,7

Um método de inoculação classificado como good com um rendimento de 100% resulta em uma constante de nucleação A igual a 632. O número de nódulos por mm^3 é diretamente proporcional à constante de nucleação. Logo, a equação (3), para esse caso, será:

$$N_V = 632 \cdot \Delta T^{1,26}$$

O valor de N_V é que define, para um dado conjunto de condições, se a solidificação ocorrerá segundo uma transformação estável ou metaestável. A formação da ferrita depende de uma boa inoculação, que ocorre próxima à temperatura do eutético estável, acima da temperatura do eutético metaestável, conforme se observa na figura 20.

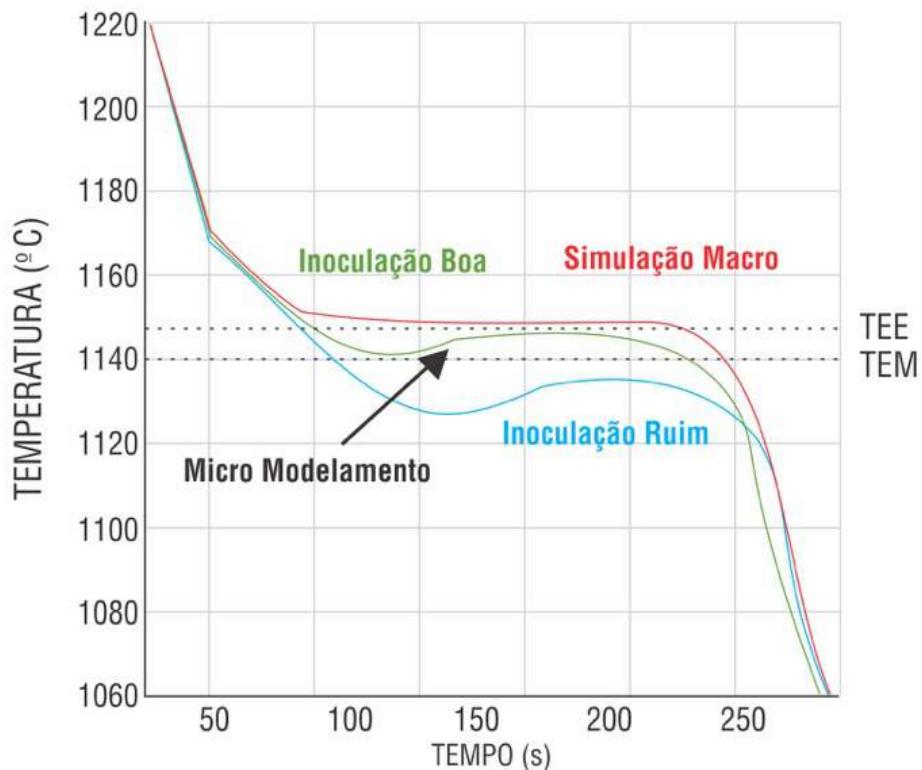


Figura 20: Inoculação boa e ruim conforme influência do micromodelamento na forma da curva de resfriamento. TEE – temperatura do eutético estável TEM -temperatura do eutético metaestável. Fonte: STURM (2018)

Na figura 20 pode-se observar, além das curvas de resfriamento, que representam uma inoculação boa e ruim, a curva de uma simulação que utiliza modelos térmicos macroscópicos (curva em vermelho).

Segundo STURM (2018), nas simulações que utilizam modelos térmicos macroscópicos as propriedades do material (propriedades termofísicas) são fixas para a liga utilizada, em um

micromodelamento essas propriedades são determinadas a cada passo de tempo e para cada ponto da peça como uma função da formação das fases. Isso influencia a liberação do calor latente e, finalmente, a forma das próprias curvas de resfriamento local, conforme figura 20. As temperaturas de super-resfriamento, recalescência e crescimento, que dependem das condições metalúrgicas e térmicas locais, são resultados das simulações. Da mesma forma que uma curva de resfriamento real é usada como uma medida para a qualidade da fusão, a "curva de resfriamento simulada" é uma prova da qualidade dos modelos usados.

Apesar das vantagens da simulação utilizada, o modelo possui algumas limitações, no que tange a resultados qualitativos da microestrutura. A simulação fornece dados da quantidade de nódulos presente em cada região da peça, mas não prevê tamanho e formato desses nódulos.

No caso da liga estudada, por se tratar de uma liga de composição hipereutética, na qual a grafita é a fase primária (a grafita nodular precipita-se no líquido), irá existir uma diferença no tamanho dos nódulos, essa diferença pode ser observada na figura 21. Segundo SANTOS E BRANCO (1989) os nódulos maiores são os correspondentes aos que se formaram entre as temperaturas *liquidus* hipereutética e a do eutético, enquanto os menores são provenientes da reação eutética.

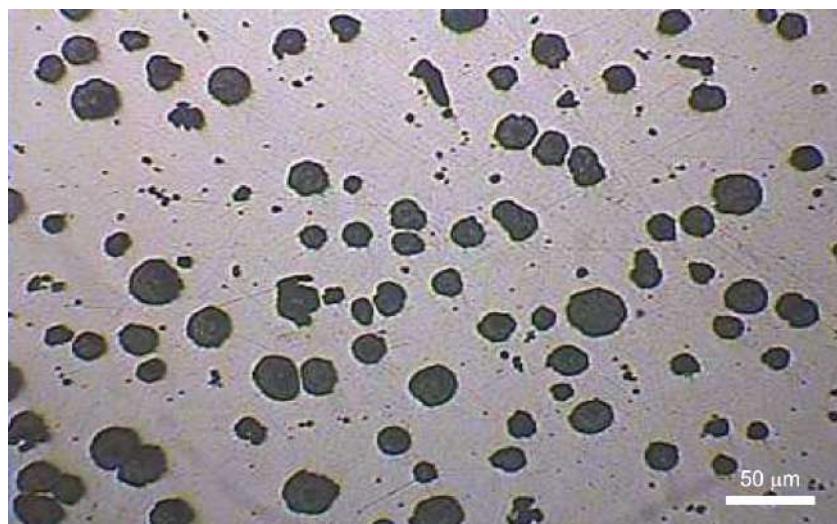


Figura 21: Micrografia mostrando nódulos de grafita de diferentes diâmetros para uma liga hipereutética.

O número de nódulos influencia na razão ferrita/perlita da matriz, e consequentemente nas propriedades mecânicas. Quanto maior o número de nódulos menor a distância média entre eles. Logo, a distância para a difusão do carbono torna-se menor, aumentando a tendência à obtenção de maior porcentagem de ferrita na matriz.

O número de nódulos calculado permite ao software estimar a razão ferrita/perlita, e consequentemente as propriedades mecânicas que dependem da microestrutura. Mas para que os resultados estejam correlatos com a prática foi necessário definir no software os dados referentes à inoculação, os parâmetros m e y respectivamente, encontrados conforme o planejamento de experimentos apresentado.

5. CONCLUSÃO

A partir de dados experimentais de um corpo de prova padrão foi possível obter a nodulação do material. A correlação da nodulação na simulação foi obtida através dos dados experimentais e de um planejamento de experimentos.

O planejamento de experimentos foi uma ferramenta importante para conhecer a influência dos parâmetros m e y , referentes à inoculação. A partir dele pôde-se comparar os resultados e selecionar valores, de m e y , que correspondiam à prática. Os parâmetros estão relacionados ao número de nódulos calculado pelo software, número este que permite estimar a razão entre os microconstituintes ferrita e perlita, e, consequentemente, as propriedades mecânicas que dependem da microestrutura.

Os desafios encontrados no desenvolvimento deste estudo estiveram relacionados à obtenção das referências e fórmulas utilizadas no interior do software. Apesar da dificuldade em obter essas informações, elas auxiliaram na compreensão do funcionamento do software e das teorias utilizadas pelo mesmo.

Devido à forte interdependência entre a composição da liga, inoculação, fases, microestruturas que se formam e as propriedades resultantes do material, simular o ferro fundido não é uma tarefa trivial, e para que a simulação deste material tão largamente empregado seja útil, e represente a realidade, deve ser feito um estudo prévio de correlação.

6. REFERÊNCIAS

CHIAVERINI, V. Aços e ferros fundidos. São Paulo, Associação Brasileira de Metalurgia e Materiais, 2008

COLEMAN, D. E.; MONTEGOMERY, D. C. (1993). A systematic approach to planning for a designed industrial experiment. *Technometrics*, v.35, n.1

GUESSER, W. L. Ferros fundidos nodulares perlíticos. São Paulo, Contribuição ao CONAF 99 - ABIFA, 1999.

GUESSER, W. L; HILÁRIO, D. G. Propriedades mecânicas dos ferros fundidos. São Paulo, Editora Blucher, 2009.

PATANKAR, S. V. Numerical heat transfer and fluid flow. New York, McGraw Hill Book Company, 1980.

POZZI, R. J.; Estudo comparativo de dois incoulantes em ferro fundido nodular. Joinville, Instituto superior Tupy mestrado em engenharia mecânica, 2009.

SANTOS, A. B. S.; BRANCO, C. H. C. Metalurgia dos ferros fundidos cinzentos e nodulares. São Paulo, IPT, 1989.

STEFANESCU, D. M. Modeling of cast iron solidification – The defining moment, Disponível em <
https://www.researchgate.net/publication/225734511_Modeling_of_Cast_Iron_Solidification-The_Defining_Moments > Acesso em Agosto de 2018

STURM, J. C.; SCHAFER, W.; “Cast Iron – A Predictable Material” 25 Years of Modelling the Manufacture, Structures and Properties of Cast Iron, Material Science Forum, vol 925, pp 451-464, 2018.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. An introduction to computational fluid dynamics. Pearson Education Limited, second edition, 2007.

WESSÉN, M.; On the mechanisms of structure formation in nodular cast iron – Doctoral Thesis, Department of Materials Processing, The Royal Institute of Technology, Stockholm, 1997