

SIMULAÇÃO NUMÉRICA POR ELEMENTOS FINITOS DA SOLIDIFICAÇÃO DE AÇOS INOXIDÁVEIS

NUMERICAL SIMULATION BY FINITE ELEMENT OF STAINLESS-STEEL SOLIDIFICATION

SIMULACIÓN NUMÉRICA POR ELEMENTOS FINITOS DE LA SOLIDIFICACIÓN DEL ACERO INOXIDABLE

Luiz Gustavo Kobilacz¹
Moisés Meza Pariona²

Resumo: A classe dos aços inoxidáveis é conhecida por sua resistência a corrosão e oxidação em altas temperaturas em meios aquosos, assim como ao impacto e também por possuir uma boa durabilidade. O processo da solidificação foi simulado em modo transiente por elementos finitos das amostras de aços inoxidáveis, onde as propriedades termofísicas tanto do molde de areia e do aço foram em função da temperatura, cujo resultado foi a distribuição das isoterms e gradiente térmico em função da temperatura, sendo que estes fenômenos podem influenciar na segregação dos elementos da liga e na estrutura das fases formadas, sendo os resultados obtido computacionalmente foram satisfatórios comparados aos resultados experimentais da literatura.

Abstract: The stainless-steel class is known for its resistance to corrosion and oxidation at high temperatures in aqueous media, as well as to impact, and also for its good durability. The solidification process was simulated in transient mode by finite elements of the stainless steel samples, where the thermophysical properties of both the sand mold and the steel were a function of temperature, whose result was the distribution of isotherms and thermal gradient as a function of temperature, and these phenomena can influence the segregation of alloying elements and the structure of the phases formed, and the results obtained computationally were satisfactory compared to experimental results in the literature.

Key-words: Numerical simulation, FEM, solidification, stainless steels.

Resumen: La clase de acero inoxidable es conocida por su resistencia a la corrosión y a la oxidación a altas temperaturas en medios acuosos, así como a los impactos y también por tener una buena durabilidad. En este trabajo se simuló el proceso de solidificación en modo transitorio mediante elementos finitos de las muestras de acero inoxidable, donde las propiedades termofísicas tanto del molde de arena como del acero fueron en función de la temperatura, cuyo resultado fue la distribución de las isoterms y el gradiente térmico en función de la temperatura, siendo que estos fenómenos pueden influir en la segregación de los elementos de aleación y en la estructura de las fases formadas. Cuyo resultado obtenido computacionalmente fueron satisfactorios en comparación con los resultados experimentales de la literatura.

Palabras-clave: Simulación numérica, MEF, solidificación, aceros inoxidables.

Submetido 10/02/2021

Aceito 25/06/2021

Publicado 28/06/2021

¹ Aluno do Departamento de Computação, Universidade Estadual de Ponta Grossa.

² Doutor. Departamento de Matemática e Estatística. Universidade Estadual de Ponta Grossa-PR, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4811-5080>. E-mail: mmpariona@uepg.br

Introdução

A solidificação é a transformação de uma fase líquida para sólida, envolvendo a passagem de interfaces que mantêm um equilíbrio local através de um volume que estava inicialmente em equilíbrio, mas pode resultar em uma distribuição fora de equilíbrio dos elementos de liga, ou seja, microsegregação. A solidificação irá ocorrer se, ao fazê-lo, o sistema (fechado) em questão puder perder energia (Howe, 1991)

A solidificação de um aço pode ser entendida como um problema de condutividade térmica, uma vez que a taxa do processo é controlada pela remoção do calor libertado durante a solidificação (Jacobi, 1978)

Os aços inoxidáveis no estado bruto de fundição são geralmente classificados como resistentes à corrosão (utilizados em ambientes aquosos) ou resistentes ao calor (apropriados para temperaturas elevadas), porém esta designação nem sempre é distinta. A distinção habitual entre aços fundidos resistentes à corrosão e resistente ao calor é baseada no teor de carbono. A aplicação de aços fundidos resistentes à corrosão é muito dependente da ausência de carbono, e, especialmente, da ausência da precipitação de carbeto na microestrutura da liga (Ferreira, 2015). Portanto, aços fundidos resistentes à corrosão têm baixa concentração de carbono, geralmente inferior a 0,20 %. Aços fundidos resistentes ao calor se assemelham aos aços resistentes à corrosão, exceto pelo seu maior teor de carbono que confere maior resistência a temperaturas elevadas. Outra maneira de classificação é com base na microestrutura. As microestruturas podem ser austeníticas, ferríticas, martensíticas, ou ferrítica austenítica (Blair, 1993).

Os elementos de liga presentes nos aços inoxidáveis fundidos estão em concorrência para promover a formação da fase austenita ou ferrita na microestrutura da liga. A microestrutura de uma classe em particular é determinada principalmente pela composição química. Cromo, silício, molibdênio e nióbio promovem a presença de ferrita na microestrutura da liga enquanto que níquel, carbono, nitrogênio e manganês promovem a presença de austenita. O controle da fração dos elementos que formam ferrita e austenita dentro dos intervalos especificados para os elementos de uma determinada liga possibilitam o controle da quantidade de ferrita presente na matriz austenítica. A liga pode ser constituída inteiramente de austenita ou com teores superiores a 40 % de ferrita na matriz austenita. Em geral, as classes de aços inoxidáveis fundidos de alta liga de cromo apresentam microestrutura martensítica ou ferrítica,

as classes onde o cromo está em maior quantidade que o níquel apresentam microestrutura ferrítica-austenítica ou austenítica, e as classes com teores maiores de níquel do que cromo são totalmente austeníticas (Blair, 1993).

Os aços inoxidáveis pertencem à classe de aços de alta liga e apresentam elevadas resistências à corrosão e oxidação, obtidas, basicamente, pela presença de cromo em solução sólida. Essa classe de aço é vastamente utilizada em meios aquosos e em serviço a altas temperaturas. O cromo em solução sólida confere passividade a estas ligas ferrosas quando está presente em quantidade igual ou superior a 11%, se as condições forem fortemente oxidantes. A característica inoxidável é dada pela formação de um filme de óxido superficial rico em cromo, invisível e aderente. Esta camada de óxido se forma e se regenera na presença de oxigênio. Por consequência, aços com mais de 11% de cromo são definidos como aços inoxidáveis. Outros elementos podem ser adicionados para melhorar características particulares desses aços, como níquel, molibdênio, cobre, titânio, alumínio, silício, nióbio, nitrogênio, enxofre e selênio. O carbono está normalmente presente em quantidades que variam de menos de 0,03%, como no caso dos aços inoxidáveis austeníticos da classe L, até mais de 1,0% (em peso), em certas classes martensíticas (Communities, 1977)

As duas principais rotas de processamento de aços inoxidáveis são a fundição e o trabalho a quente. Em geral, os aços inoxidáveis fundidos e forjados possuem resistências equivalentes em meios corrosivos, porém, existem diferenças entre aços inoxidáveis fundidos e seus similares forjados. As microestruturas dos aços inoxidáveis podem ser austeníticas, ferríticas, martensíticas ou austeníticas-ferríticas, sendo esta última a mais frequentemente observada em peças fundidas. Uma diferença significativa é a microestrutura dos aços inoxidáveis fundidos. Geralmente, há uma quantidade maior de ferrita presente nos aços inoxidáveis fundidos austeníticos em relação às ligas forjadas (Smallman e Ngan, 2013).

As ligas CF constituem o segmento tecnológico mais importante e de maior produção entre as ligas fundidas resistentes à corrosão. Elas são equivalentes a série de aços inoxidáveis forjados AISI 300. Em geral, as ligas fundidas e forjadas possuem resistência equivalente a meios corrosivos, e são frequentemente utilizadas em conjunto umas com as outras. A principal diferença entre as ligas fundidas da série CF e as ligas forjadas AISI é a microestrutura da liga na condição final de utilização. As ligas fundidas da série CF têm estruturas austeníticas e, geralmente, contêm 5 a 40 % de ferrita, dependendo da liga em particular. Em contrapartida, as

ligas AISI são totalmente austeníticas. Esta diferença de microestrutura é atribuível ao fato de que a composição química das ligas fundidas e das ligas forjadas não é idêntica. A ferrita presentes nas ligas CF é magnética (Svoboda, 1992)

A microestrutura austenítica é gerada pela adição de teores elevados de níquel e outros elementos que promovem a estabilização desta fase. Dentre as ligas austeníticas fundidas pode-se destacar as ligas CF-3, CF-8, CF-3M e CF-8M. As ligas fundidas austeníticas CF- 8M, são modificações das ligas CF-8, apresentando adição de molibdênio, de 2% a 3% (em peso), com o intuito de melhorar a resistência à corrosão por soluções de cloreto. Peças fundidas oferecem grande economia de custos quando comparado a fabricação via soldagem junto a módulos usinados a partir de grandes peças forjadas (Allan, 1995).

A ferrita está presente de forma intencional nos aços inoxidáveis fundidos da série CF por três razões principais: proporcionar aumento de resistência mecânica, melhorar a capacidade de soldagem, e maximizar a resistência à corrosão em determinados ambientes. O aumento de resistência mecânica nas ligas da série CF se limita essencialmente da incorporação da fase ferrita na matriz austenita. Estas ligas não podem ser tratadas termicamente ou serem trabalhadas a quente ou a frio. O reforço por precipitação de carbeto também é inviável, devido ao efeito prejudicial de carbeto na resistência à corrosão na maioria dos ambientes aquosos. Assim, as ligas são reforçadas pelo equilíbrio da composição química para produzir uma microestrutura composta por ferrita (até 40 % em volume) distribuída numa matriz de austenita. A incorporação de ferrita em aços fundidos CF aumenta a resistência mecânica e a resistência ao impacto sem que ocorra perda de ductilidade a temperaturas inferiores a 425 °C (Smallman e Ngan, 2013).

Peças fundidas de aço inoxidável são utilizadas em tubulações e válvulas sujeitas a altas pressões e temperaturas. O sistema de refrigeração primário de uma usina de energia nuclear é feito de um aço inoxidável fundido e as temperaturas de operação estão na faixa de 290 a 330 °C e pressões de 50MPa ou superior, e espera-se que permaneçam em serviço por mais de 100 mil horas 15, 16. As mudanças das propriedades mecânicas estão associadas com as alterações das configurações de discordâncias na austenita, a precipitação de fases intermetálicas nas linhas de discordâncias e na fase ferrita, a decomposição espinodal que é o engrossamento da estrutura espinodal decomposta em ferrita após diferentes tempos de envelhecimento térmico (Yao, 2012).

Peças fundidas oferecem grande economia de custos quando comparado a fabricação via soldagem junto a módulos usinados a partir de grandes peças forjadas. No entanto, devido ao tamanho de grão grande, a baixa densidade de discordâncias e a grande segregação de elementos de liga, as propriedades mecânicas dos componentes fundidos são frequentemente inferiores às dos componentes convencionalmente forjados e recozidos. Para melhorar e validar aço inoxidável moldado como um substituto para o aço inoxidável forjado para aplicações em módulo escudo, um programa de desenvolvimento e teste foi iniciado. Várias ligas de teste foram projetadas e fabricadas utilizando adições de N e Mn para um melhor desempenho mecânico (Busby et al., 2011). Peças fundidas de aços inoxidáveis oferecem a possibilidade de produzir diretamente estruturas grandes e/ou relativamente complexas. As ligas CF-8M são usualmente aplicadas em módulos de escudo e vasos de pressão em reatores de fusão nuclear

Peças fundidas apresentam gradientes térmicos ao longo de todo seu volume durante a solidificação, esses gradientes são gerados pela taxa de resfriamento proveniente do molde e da geometria de ambos. Os gradientes influenciam na segregação dos elementos de liga durante a solidificação e afetam, por exemplo, a morfologia das fases formadas e o tamanho das dendritas para a morfologia dendrítica. Há influência marcante também na partição de elementos de liga e nas transformações no estado sólido após o término da solidificação (Won et al., 2001).

A composição química dos aços inoxidáveis pode alterar o modo de solidificação e a morfologia das fases no estado sólido. De forma semelhante, a condição de resfriamento interfere nas transformações no estado sólido e, conseqüentemente na microestrutura final e nas propriedades mecânicas das peças fundidas (del Coz Díaza et al., 2010).

Os aços inoxidáveis durante a solidificação apresentam um gradiente térmico durante todo seu processo de solidificação e este é por sua vez influenciado pela taxa de resfriamento e pela característica da geometria do molde. Esse gradiente influencia na segregação dos elementos da liga durante o processo de solidificação ao qual está submetido e conseqüentemente afeta a estrutura das fases formadas, bem como o tamanho das dendritas (Daha et al. 2012). Este processo pode ser observado experimentalmente e também pela simulação computacional, através de softwares específicos usando o método dos elementos finitos (Pariona et al. 2018).

Na última década uma enorme quantidade de softwares tem auxiliado cada vez mais projetistas e engenheiros a solucionar os mais complexos problemas e neste aspecto os softwares que utilizam o **Método dos Elementos Finitos (MEF)** tem um destaque especial. A aplicação deste método na engenharia **consiste em discretizar em malha a geometria**, que por sua vez se resume em dividir uma geometria complexa em muitas outras geometrias menores de menor complexidade, isto leva a montar um sistema de equações diferenciais parciais, o número de sistemas está relacionado ao número de malha da geometria, podendo ser em 2-D ou 3-D. A análise de elementos finitos pode ser aplicada em diversas áreas da engenharia, como por exemplo, problemas acústicos, térmicos, eletromagnéticos e estruturais. O MEF passou a ganhar força com a ascensão dos computadores, pois com o auxílio dos mesmos é possível realizar cálculos complexos. Com a evolução dessas máquinas e o desenvolvimento de softwares especializados, tornou-se viável a realização de simulações para os mais variados problemas, obtendo-se resultados bastante satisfatórios quando confrontados com os obtidos experimentalmente (Pariona et al. 2016).

Neste trabalho a simulação numérica por MEF foi realizada em forma transiente em 3D, considerando as propriedades termofísicas em função da temperatura, tanto no aço e no molde de areia verde.

Material e métodos

Foram utilizadas as referências bibliográficas para pesquisa e obtenção de conhecimento acerca do projeto a ser desenvolvido e a utilização dos computadores disponíveis, os quais dispõem dos softwares Ansys e Comsol para a realização de simulações numéricas por elementos finitos e também do software Inventor para desenhar as geometrias, as geometrias que consistem em um molde de areia e três pinos onde os corpos de prova são vazados. Esses corpos de prova são cilíndricos e possuem 30 milímetros de diâmetro e 150 milímetros de comprimento. O molde de areia assemelha-se a uma caixa, contendo 480 milímetros de comprimento, 320 milímetros de altura, na parte de cima 215 milímetros de largura e na parte de baixo 180 milímetros de largura, como tal mostrado na Figura 1 com várias vistas, onde entre linhas são os corpos de prova. Para facilitar a simulação, o afunilamento foi retirado, ficando apenas 215 milímetros de largura e as demais medidas foram mantidas. Na Figura 2 é

apresentado com mais detalhe as dimensões da geometria das peças de aço inoxidável e a base do molde.

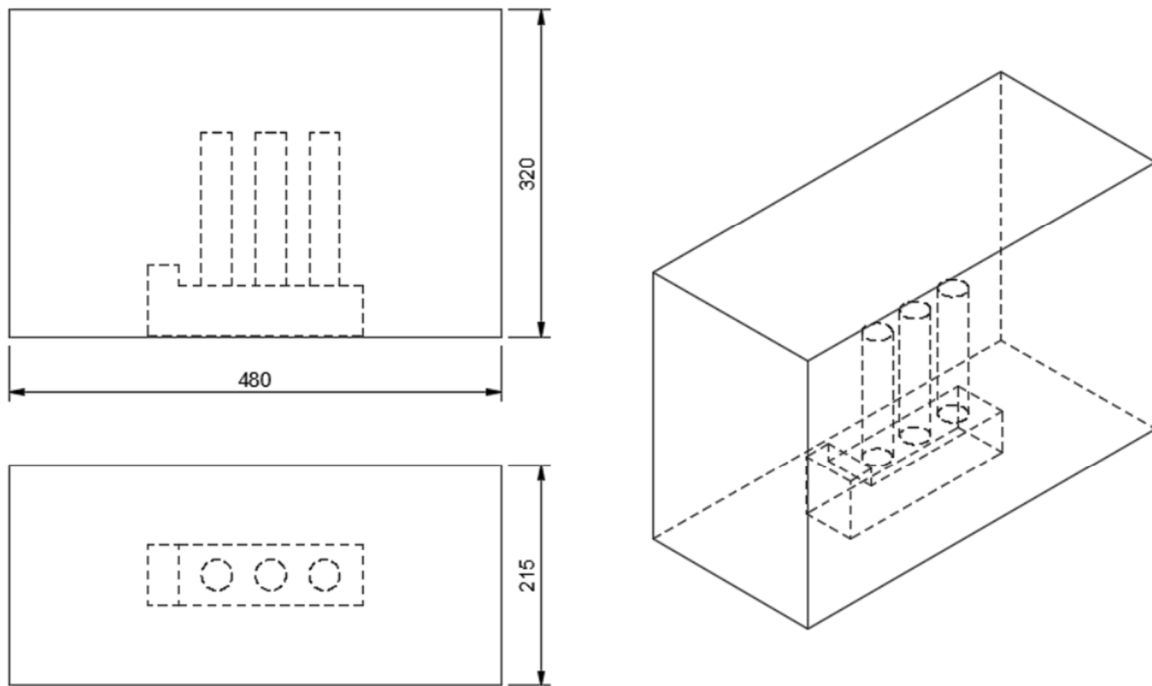


Figura 1. Geometria do molde com as peças de aço inoxidável a ser solidificada entre linhas

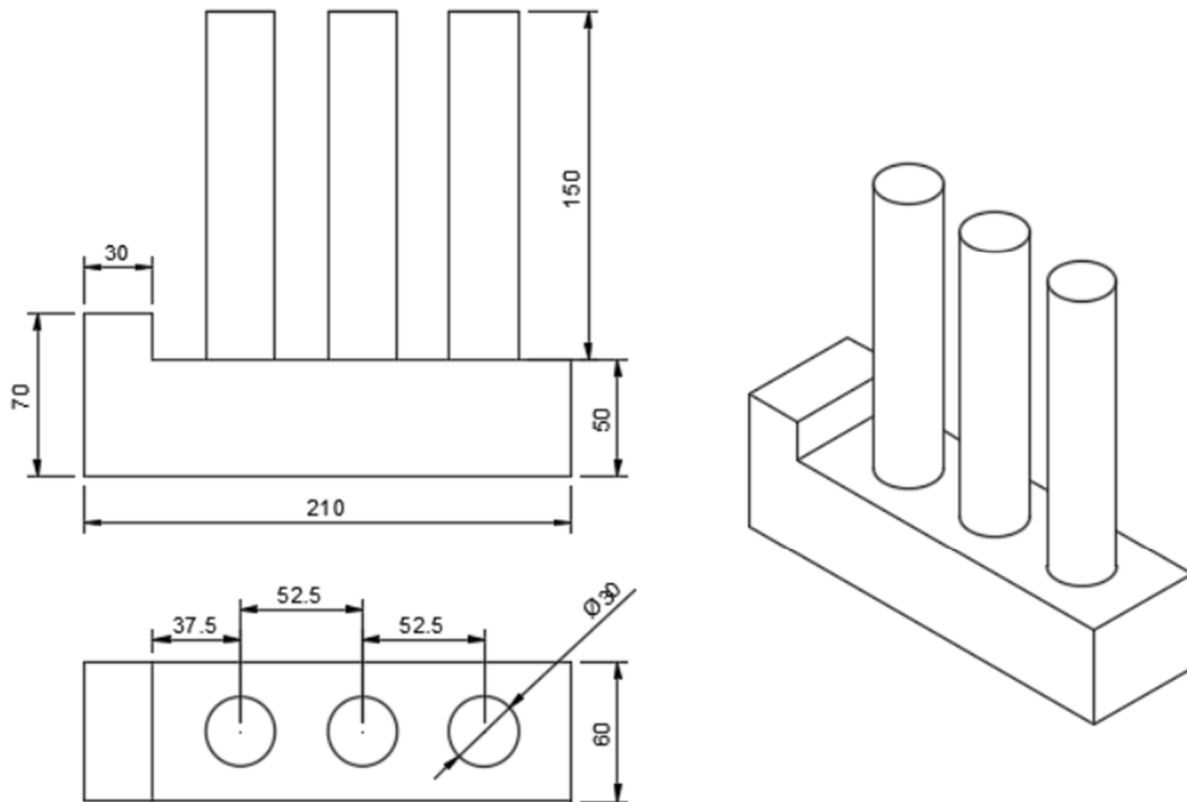
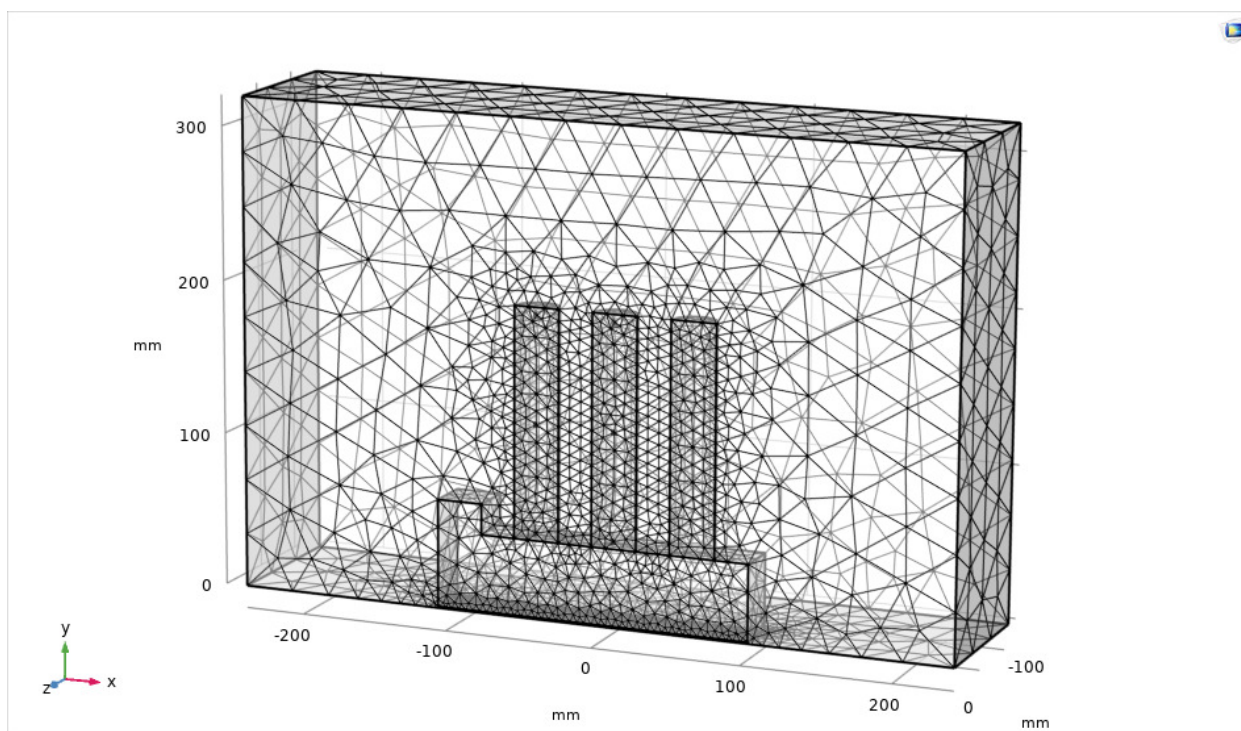


Figura 2. Geometria com configuração de simetria do molde e das peças a serem solidificadas

Previamente para executar a simulação foi feita a geometria do molde, logo, foi aplicada a malha, na sequencia as condições iniciais e de contorno foram alimentadas, bem como foi alimentado as propriedades termofísicas em função da temperatura da areia verde e do aço inoxidável classe CF-8M, com variação apenas da relação Cromo/Níquel, disponíveis na biblioteca do Comsol (Comsol, 2018) (densidade do molde, calor específico do molde, condutividade térmica do molde, densidade do metal, condutividade térmica do material do metal, calor específico do material do metal). Esta classe dos aços inoxidáveis apresenta uma composição 2% a 3% de Molibdênio, o que confere a esses aços uma grande resistência a corrosão. O processo da solidificação foram apresentados em 2D e 3D pelo software Comsol (Comsol, 2018).

A física para este estudo foi escolhida a transferência de calor em sólidos e fluídos. A condição inicial foi de 300 K, ou 27 °C e a temperatura inicial do aço fundido dos corpos de prova foi de 1704 K, ou 1430,85 °C. O molde na base inferior foi fixado. Como condição de contorno, foi o fluxo de calor convectivo, com o coeficiente de transferência de calor de 50 W/(m².K). A superfície com radiação térmica foi definida em todos os lados da caixa, exceto a base onde foi fixada os corpos de prova, cuja emissividade da superfície foi de 0,3. Na face simetria foi considerado que não há fluxo de calor. A seguir foi feito a criação da malha na geometria como é visualizada na Figura 3, com maior concentração da malha em torno dos corpos de prova.

Figura 3 - Malha no molde e nos corpos de prova



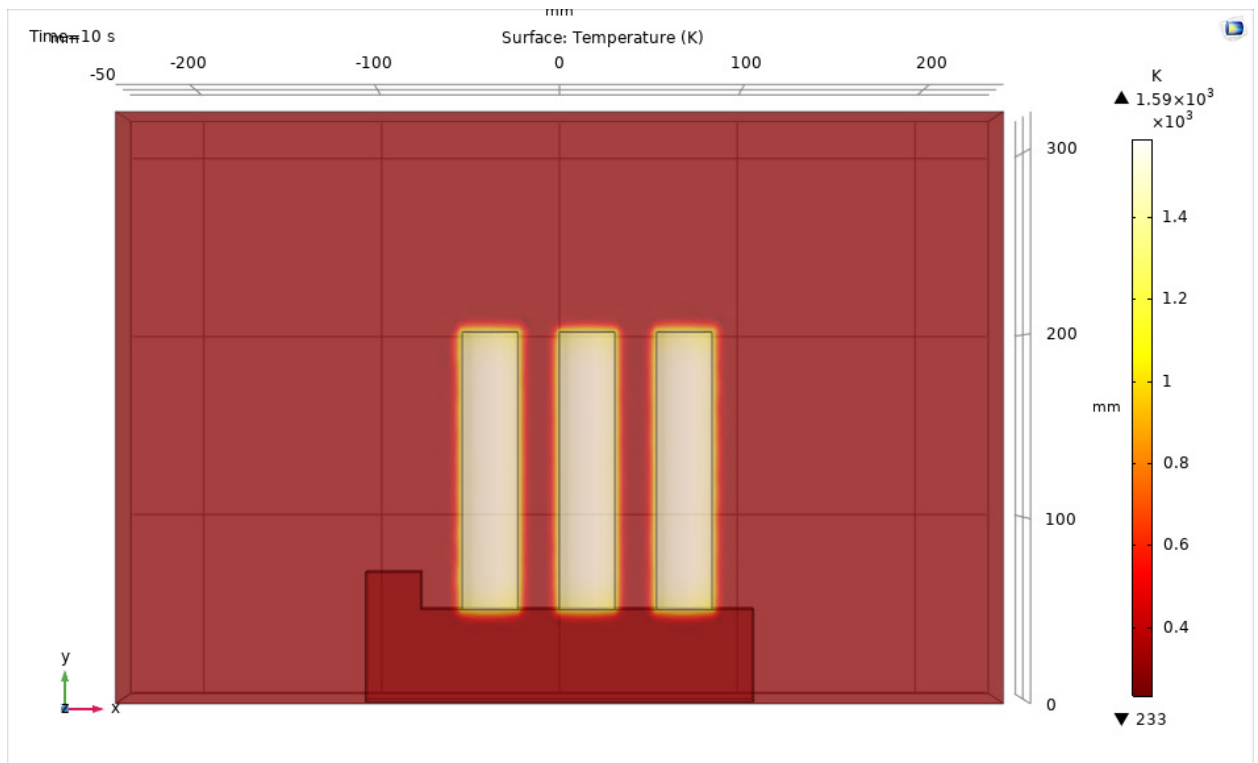
Resultados e discussão

A simulação foi feita em modo transiente, sendo o tempo de simulação foi definido em 7000 segundos, o passo do tempo foi de 10 segundos. Esse tempo possibilitou que a simulação fosse executada de forma rápida, durante 8 minutos e 52 segundos.

Na Figura 4 é apresentado o resultado da variação da temperatura de solidificação durante os 10 primeiros segundos de solidificação. Onde as amostras apresentam maior

temperatura de maneira uniforme que o molde, sendo que o molde está a uma temperatura próxima do ambiente.

Figura 4 Distribuição de temperatura em 10 segundos



A próxima análise foi feita no tempo de 100 segundos. Na Figura 5, observa-se a presença do isoterma em torno dos corpos de prova, bem como o aquecimento do molde durante o processo de solidificação. A temperatura mais alta encontra-se no meio das peças, na parte inferior das peças e a menor temperatura ocorre na periferia, assim como o molde início o aquecimento nas proximidades das peças.

Na Figura 6 apresenta-se o gradiente de temperatura em 100 segundos de solidificação, sendo que este gradiente é uma grandeza que descreve a direção e a taxa de variação de temperatura em uma área em particular. Observa-se nesta figura que a maior taxa de variação ocorre nas partes laterais das peças e com maior ênfase nas partes superior e inferior das peças.

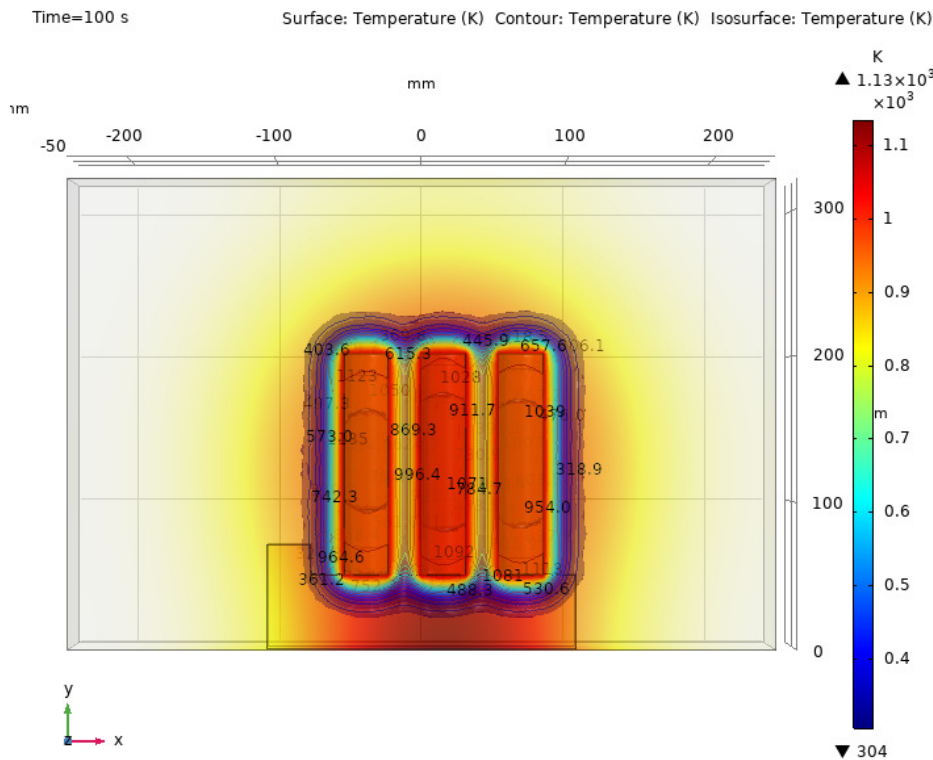


Figura 5. Distribuição da temperatura em 100 segundos

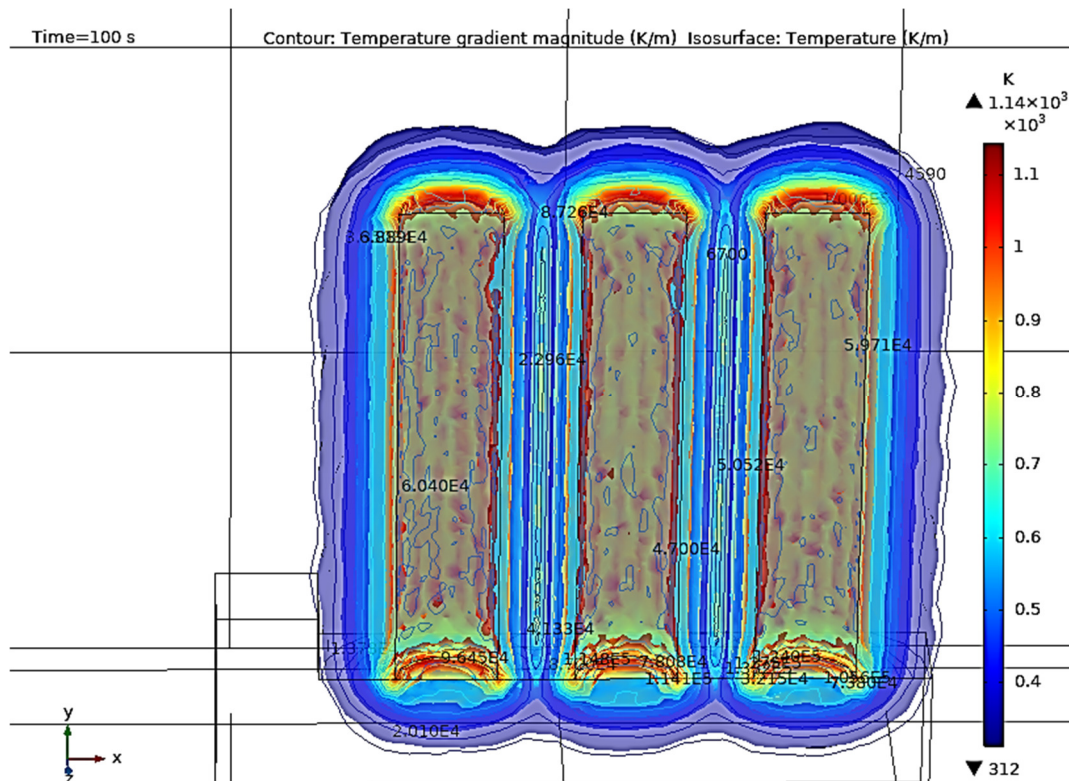


Figura 6. Magnitude do gradiente de temperatura em 100 segundos

Outra análise realizada foi em 3500 segundos. Na Figura 7 a distribuição de temperatura está próxima do ambiente, observa-se as isoterms de temperatura e o fluxo de calor de forma mais abrangente em todo o sistema pode ser observado. Também é visto uma maior temperatura na base do sistema e seguindo no corpo de prova da parte central, entretanto na periferia a temperatura é menor.

Na Figura 8. Têm-se ilustrado o gradiente de temperatura em 3500 segundos. Nota-se que uma maior taxa de variação de temperatura ocorre na base do sistema e no corpo de prova do meio, sendo esta área é o último a se solidificar. A menor taxa de variação ocorre nos corpos de prova dos lados e nas periferias. Também as isoterms são apresentadas no molde.

Figura 7. Temperatura de solidificação em 3500 segundos

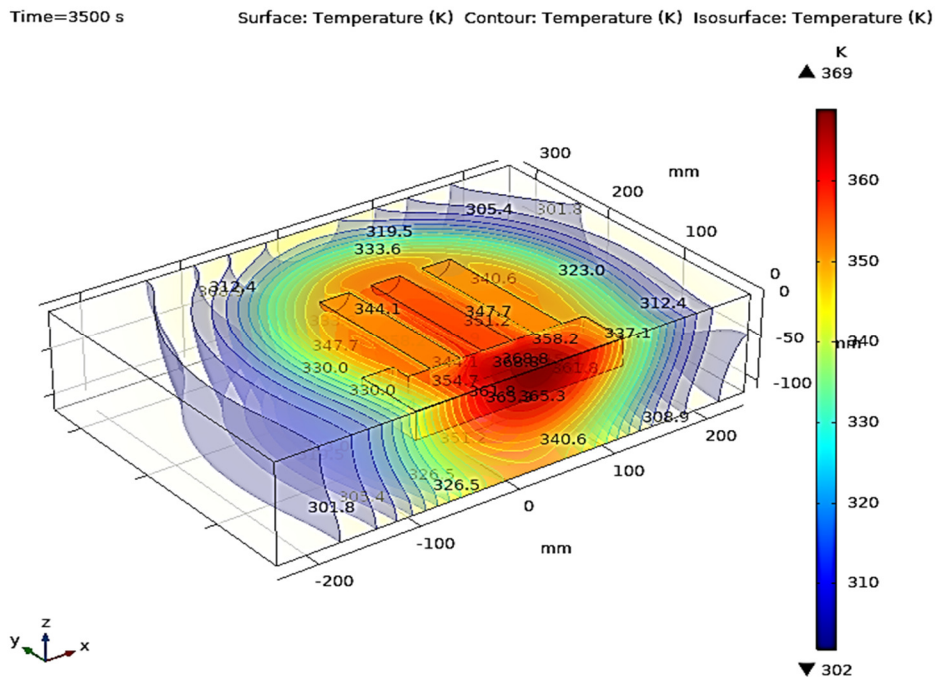
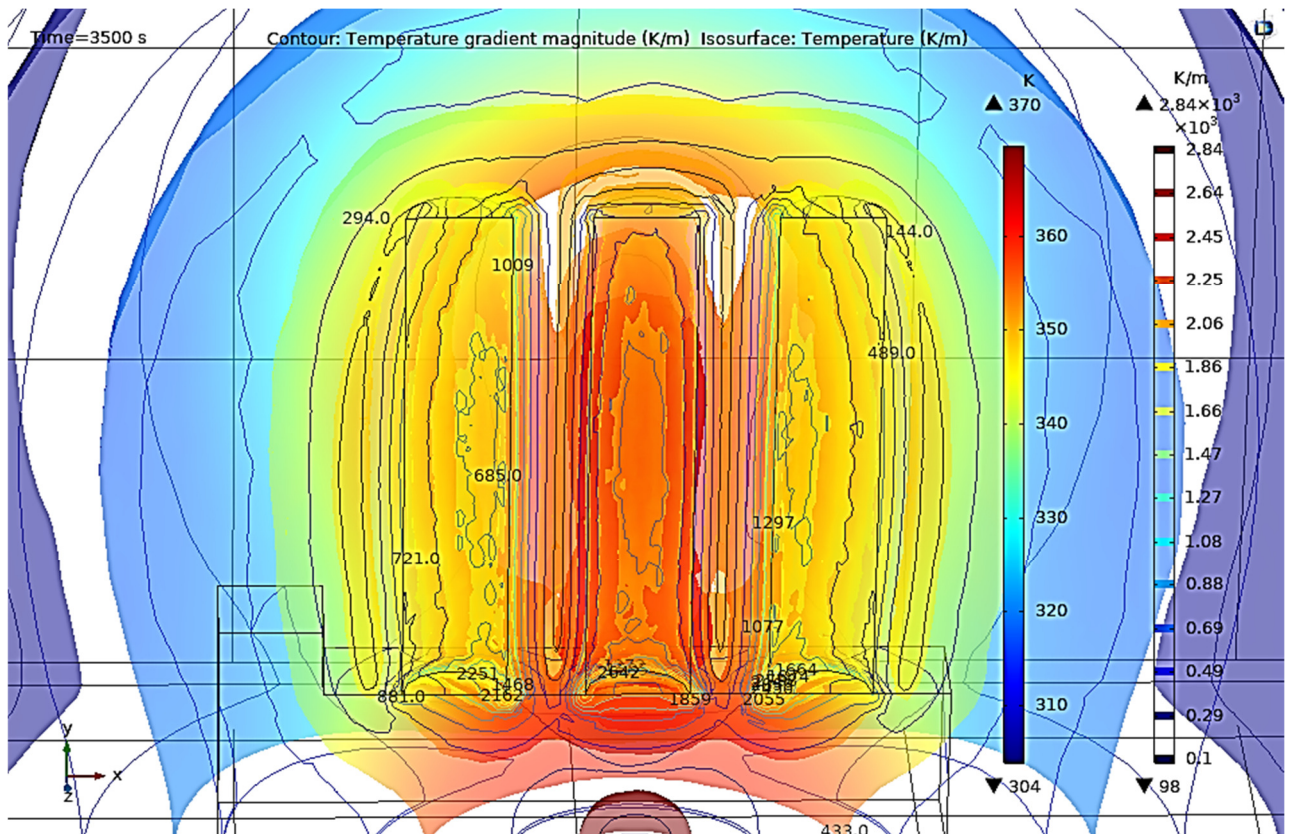
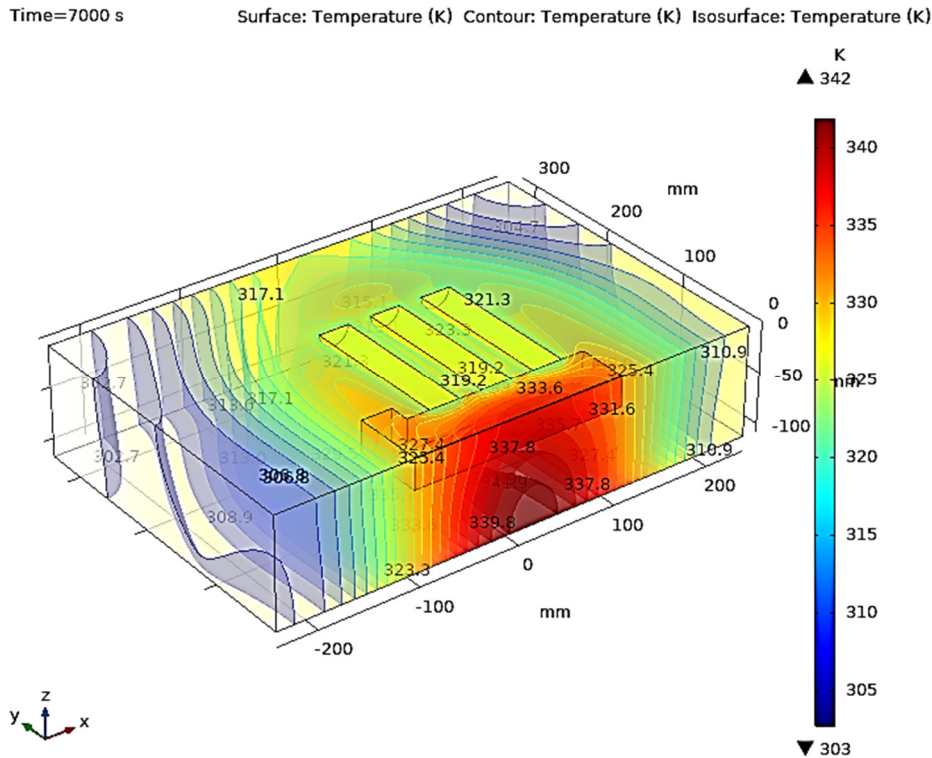


Figura 8. Magnitude do gradiente de temperatura em 3500 segundos



Finalmente a última análise foi realizada em 7000 segundos. É possível observar, na Figura 9, as isotermas estão próximas da temperatura ambiente, sendo que a maior faixa de temperatura se encontra na base do sistema. Na Figura 10 encontra-se o gradiente de temperatura para o mesmo tempo de solidificação, sendo possível observar uma maior taxa de variação de temperatura na base do sistema e nas partes laterais do corpo de prova da parte central, sendo estas áreas são as últimas a se solidificar. Com certeza a microestrutura dos corpos de prova será diferente em cada região, tanto nos corpos de prova laterais quanto no corpo de prova da parte central.

Figura 9. Distribuição de temperatura em 7000 segundos



Conclusões

A simulação foi feita em forma transiente considerando que as propriedades termofísicas em função da temperatura, tanto no aço e no molde e a simulação foi realizada em modo transiente em 3D. A partir da simulação numérica por elementos finitos foi possível mapear em função do tempo as isotermas e os gradientes de temperatura dos corpos de prova durante o processo de solidificação, para aços inoxidáveis da classe CF-8M. As características das isotermas e do gradiente de temperatura podem influenciar na formação das dendritas e na segregação dos elementos de liga, assim, as características microestruturais serão diferentes em cada região das peças, sendo que o corpo de prova da parte central é o último a solidificar, pois este corpo de prova recebe a influência térmica dos corpos de prova vizinhos. Dessa forma, a simulação numérica do processo de solidificação fornece uma previsão dos diferentes fenômenos físicos que ocorrem e assinalam as regiões específicas de maior variação das isotermas, de fluxo de calor e a taxa de variação da temperatura. Comparados com os resultados experimentais de outros autores, os resultados encontrados são bastante satisfatórios.

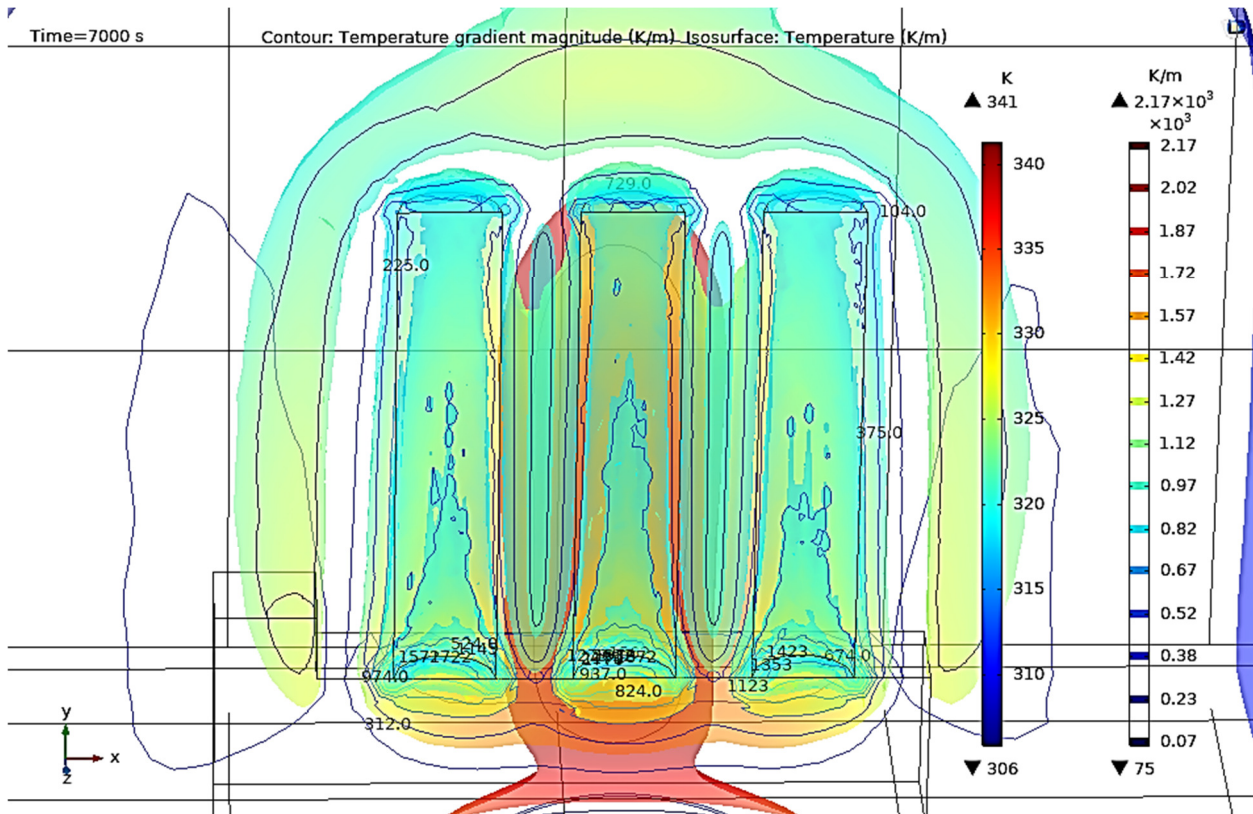


Figura 10. Magnitude do gradiente de temperatura em 7000 segundos

Agradecimentos

A Fundação Araucária pela bolsa de estudos. Ao Prof. Dr. Moises Meza Pariona pela oportunidade, orientação e amizade.

Referências

- HOWE, A. A. Segregation and Phase Distribution During Solidification of Carbon Alloy Stainless. Office for Official Publications of the European Communities., Luxembourg: Office for Official Publications of the European Communities, 1991, p. 20-35.
- JACOBI, H. Casting and Solidification of Steel v. 1. Dusseldorf, Germany: Institut für Eisenforschung 1978, p.10-20.

BLAIR, M.. Properties and Selection: Irons Steels and high performance alloys. v. 1, ASM Handbook, ASM International, 10^a. Ed. Ohio,USA.1993.

FERREIRA, D. E. M. Estudo da solidificação de aços inoxidáveis fundidos da classe CF-8M. 2015. Dissertação de Mestrado em Engenharia e Ciência de Materiais. Ed. Universidade Estadual de Ponta Grossa, Ponta Grossa-PR, 2015.

COMMUNITIES, C. O. T. E. Casting and Solidification of Steel: Information Symposium v. 2: Luxembourg: IPC Science and Technology Press, 1977.

SMALLMAN R. E. NGAN A. H. W. Modern Physical Metallurgy. Oxford (UK): **Butterworth-Heinemann**, 2013.

SVOBODA, J. M., Casting: Ferrous casting alloys, v. 15, 9^a. Edição, Ohio, USA: ASM Handbook, ASM International, 1992.

ALLAN, G. K. Solidification of austenitic stainless steels. Ironmaking & steelmaking. v. 22, n. 15, p. 465-477, 1995.

YAO, Y. H.; WEI, J. F.; WANG, Z. P. Effect of long-term thermal aging on the mechanical properties of casting duplex stainless steels. Materials Science and Engineering: A. v. 551, p. 116-121, 2012.

BUSBY, J. T.; MAZIASZ, P. J.; ROWCLIFFE, A. F.; SANTELLA, M.; SOKOLOV, M. Development of high performance cast stainless steels for ITER shield module applications. Journal of Nuclear Materials. v. 417, p. 866-869, 2011.

WON, Y. M.; THOMAS, B. G. Simple model of microsegregation during solidification of steels. Metallurgical and Materials Transactions A. v. 32, p.1755-1767, 2001.

del COZ DÍAZA J.J., RODRÍGUEZA P.M., NIETOB P.J.G., Castro-Fresn D. Comparative analysis of TIG welding distortions between austenitic and duplex stainless steels by FEM. Applied Thermal Engineering, v.30, p. 2448-2459, 2010.

DAHA M.A., NASSEF G.A., ABDALLAH I.A., ABOU SEEDA H.M. Three-Dimensional Thermal Finite Element Modeling for Keyhole Plasma Arc Welding of 2205 Duplex Stainless Steel Plates. International Journal of Engineering and Technology, v..2, p. 720-728, 2012.

PARIONA, M. M.; TAQUES, A. F.; WOICIECHOWSKI, L. A. The Marangoni effect on microstructure properties and morphology of laser-treated Al-Fe alloy with single track by

FEM: Varying the laser beam velocity. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v.119, p. 10-19, 2018.

PARIONA, M. M.; OLIVEIRA, F.; TELEGINSKI, V.; MACHADO, S.; PINTO, M. A. V. Simulation and optimization of Al-Fe Aerospace alloy processed by laser surface remelting using geometric Multigrid solver and experimental validation. *Heat Mass Transfer*, v. 52, p.1037-1049, 2016.

COMSOL Software, Stockholm, Sweden, 2018.