

Modelos matemáticos para a relação entre composição química, microestrutura e propriedades mecânicas de ligas de alumínio fundidas hipoeutéticas e eutéticas

Mathematical models for the chemical composition, the microstructure and the mechanical property relationship of hypoeutectics and eutectics aluminium foundry alloys

Christiano Alves de Lima
Corradi

M.Sc., Faculdade de Engenharia de
Produção, Universidade de Itaúna -
UIT/ MG
E-mail: calccs@gmail.com

Gray Farias Moita

Ph.D., Mestrado em Modelagem
Matemática e Computacional, Centro
Federal de Educação Tecnológica de
Minas Gerais - CEFET/MG
E-mail: gray@dppg.cefetmg.br

Elenice Biazi

Ph.D., Mestrado em Modelagem
Matemática e Computacional, Centro
Federal de Educação Tecnológica de
Minas Gerais - CEFET/MG
E-mail: ebiazi@terra.com.br

Resumo

Para realização de qualquer projeto mecânico, é necessário conhecer as características do material que será utilizado e projetar o equipamento, de tal maneira que qualquer tensão resultante não seja excessiva e não provoque falha. As propriedades mecânicas dos materiais são verificadas pela execução de experimentos ou ensaios de laboratório cuidadosamente programados, que reproduzem, o mais fielmente possível, as condições de serviço. Entretanto esses ensaios mecânicos são destrutivos. Essa característica destrutiva do ensaio pode ser um problema, quando as peças que precisam de ser testadas não podem ser danificadas. Um outro complicador é a determinação de propriedades mecânicas em pontos específicos da peça, que se justifica, principalmente, em peças fundidas, onde as condições de resfriamento, as microsegregações e a ocorrência de defeitos se distribuem de maneira heterogêneas ao longo da peça. Uma vez que o processo de determinação da composição química e da estrutura metalográfica é realizado através de ensaios não destrutivos, eles poderiam substituir os ensaios mecânicos, se fosse estabelecida uma relação entre eles. Esse trabalho apresenta alguns modelos matemáticos gerados através de técnicas estatísticas de regressão linear múltipla, para a determinação das propriedades mecânicas de ligas de alumínio fundidas hipoeutéticas e eutéticas, a partir da realização de ensaios não destrutivos de microscopia e análise química.

Palavras-chave: Ligas de alumínio, propriedades mecânicas, modelo matemático.

Abstract

For the satisfactory accomplishment of any mechanical project, it is essential to know the characteristics of the materials that will be applied in the manufacturing process, in such a way that the resulting tension should not cause failure. The mechanical properties of the materials are established by the use of experiments or laboratory tests, carefully programmed, that reproduce, as accurately as possible, the real working conditions. However, these mechanical tests are destructive. The destructive characteristic of the experiments can be a problem when the parts that need to be tested cannot be damaged. Another complexity is

the determination of mechanical properties in specific points of the assembly, which is justified mainly in foundry pieces where the cooling conditions, the microsegregations and the occurrence of defects are distributed in a heterogeneous way along the part. Moreover, since the determination of the chemical composition and the microstructure is performed using non-destructive tests, they should be able to substitute the mechanical experiments, if a relationship between them could be established. This work presents mathematical models generated through statistical techniques of multiple linear regression, for the determination of the mechanical properties of hypoeutectic and eutectic aluminium foundry alloys using no destructive analyses, microstructure and chemical composition.

Keywords: Aluminum alloys, mechanical properties, mathematical model.

1. Introdução

Engenheiros de materiais e metalúrgicos estão sempre preocupados com a produção de materiais que atendam as exigências de serviços conforme previsto pelas análises de tensão. Isso envolve, necessariamente, uma compreensão profunda da relação entre a composição química, a estrutura metalográfica e as propriedades mecânicas dos materiais. Sabe-se que existe uma relação entre a composição química e a estrutura metalográfica das ligas e as suas propriedades mecânicas, no entanto, essa relação não é direta, ela depende de muitos fatores complexos combinados, inclusive defeitos inerentes ao processo de fabricação por fundição.

Tradicionalmente, a determinação das propriedades mecânicas dos materiais é realizada pela execução de experimentos ou ensaios de laboratório cuidadosamente programados, que reproduzem, o mais fielmente possível, as condições de serviço. No entanto, os ensaios para determinação das propriedades mecânicas dos materiais são, geralmente, destrutivos, ou seja, o corpo-de-prova utilizado, durante a realização do ensaio, é destruído. Obviamente, o corpo-de-prova que melhor representa as propriedades da peça é a própria peça. Mas, para isso, seria necessária a destruição da mesma. Essa característica destrutiva dos ensaios pode ser um problema, quando as peças que precisam de ser testadas não podem ser danificadas. Esse é o caso, por exemplo, de peças que já passaram por vários processos de fabricação, como fundição, acabamento, usinagem e montagem, ou que já estejam em funcionamento, e, por algum motivo, precisam de ter suas propriedades mecânicas determinadas.

Outro complicador é a determinação de propriedades mecânicas em pontos específicos da peça. Essa necessidade se justifica, principalmente, em peças fundidas, onde as condições de resfriamento, as microsegregações e os defeitos se apresentam de maneira heterogênea ao longo da mesma.

Outro aspecto amplamente pesquisado diz respeito à correlação quantitativa dos parâmetros térmicos dos processos com os espaçamentos dendríticos, ou seja, a microestrutura.

É sabido que espaçamentos dendríticos menores proporcionam melhores propriedades mecânicas nos produtos fundidos. Vale ressaltar que a maioria dos trabalhos encontrados na literatura são realizados para condições de extração de calor em regime estacionário, sendo necessários maiores esforços de pesquisa para condições de solidificação transitória.

Uma interessante forma de estudar o crescimento de dendritas em peças fundidas é através da análise de estruturas brutas obtidas a partir de sistemas de solidificação unidirecional (Garcia, 2001). Modelos teóricos, fundamentados nesses sistemas de solidificação, foram desenvolvidos para examinar a influência dos parâmetros térmicos da solidificação sobre os espaçamentos dendríticos primários e secundários (Hunt, 1996 e Bouchard, 1997).

Somente os modelos de Hunt-Lu e Bouchard-Kirkaldy são aplicáveis a condições de solidificação em regime transitório de extração de calor. Os demais são para regime estacionário. Esses estudos têm estabelecido um relacionamento direto desses parâmetros estruturais com os parâmetros térmicos de solidificação mostrados de forma generalizada pela Equação 1:

$$\lambda_c, \lambda_1, \lambda_2 = C (G_L, V_L, \dot{T})^n \quad (\text{Eq. 1})$$

onde C é uma constante que depende do tipo de liga e n é um expoente que tem sido determinado, experimentalmente, na literatura para uma série de ligas. Já λ_c , λ_1 e λ_2 , são, respectivamente, os espaçamentos celulares e dendríticos primários e secundários, G_L é o gradiente de temperatura frente à isoterma líquidas, V_L é a velocidade de deslocamento da isoterma líquidas e $\dot{T}(G_L, V_L)$ é a taxa de resfriamento.

A seguir os modelos de Hunt-Lu e Bouchard-Kirkaldy são explicitados, respectivamente:

• Modelo de Hunt-Lu:

$$\lambda'_1 = 0.07798 V'^{(a-0.75)} (V'_L - G')^{0.75} G'^{-0.6028} \quad (\text{Eq. 2})$$

onde:

$$a = -1.131 - 0.1555 \log_{10} (G') - 0.007589 [\log_{10} (G')]^2$$

$$\lambda'_1 = \frac{\lambda \Delta T}{\Gamma k_0}$$

$$V' = \frac{\Gamma k_0}{D \Delta T}$$

$$G' = \frac{G_L \Gamma k_0}{\Delta T^2} \quad (\text{Eq. 3})$$

Modelo de Bouchard-Kirkaldy:

$$\lambda_1 = a_1 \left(\frac{16C_0^{1/2} G_0 \epsilon \Gamma D}{(1-k_0) m_L G_L V_L} \right)^{1/2} \quad (\text{Eq. 4})$$

onde C_0 é o teor de soluto, Γ é o coeficiente de Gibbs-Thomson, D é a difusividade de soluto no líquido, ΔT é a diferença entre as temperaturas liquidus (T_l) e solidus (T_s) de equilíbrio, $G_0 \epsilon$ é um parâmetro característico $\cong 600 \times 6 \text{ K.cm}^{-1}$, valor esse definido para compostos orgânicos (Bouchard, 1997), T_F é a temperatura de fusão do solvente, m_L é inclinação da linha liquidus, k_0 é o coeficiente de partição do soluto, λ_1 é o valor adimensional do raio da ponta da dendrita e a_1 e a_2 são fatores de calibração utilizados para corrigir os modelos correspondentes.

O valor de λ_1 , descrito no modelo de Hunt-Lu, é o comprimento em metros (SI) do raio da ponta da dendrita, o qual ainda deve ser multiplicado por dois ou por quatro para gerar os valores mínimo e máximo equivalentes ao espaçamento dendrítico primário teórico. Dessa forma, os valores calculados a partir das respectivas equações podem ser comparados com resultados experimentais. Os valores de G_L experimentais utilizados no cálculo dos modelos teóricos foram obtidos a partir da relação de $\dot{T}(G_L \cdot V_L)$.

No presente trabalho, um dos objetivos foi correlacionar a taxa de resfriamento (\dot{T}) com os espaçamentos dendríticos primários (λ_1) para condições de solidificação em regime transitório de extração de calor, para um conjunto de ligas de alumínio cobre e alumínio silício.

A Equação 5 mostra os resultados da correlação entre as propriedades mecânicas e o espaçamento dendrítico primário λ_1 para a liga Al 4,5%Cu (Garcia, 2005).

$$\sigma_u = 56.7 + 1713 * (1/\lambda_1)^{0.5} \quad (\text{Eq. 5})$$

A interligação de leis de crescimento dendrítico, expressões derivadas de um modelo analítico de solidificação (Garcia, 2001), e as equações experimentais relacionadas às propriedades mecânicas e espaçamentos dendríticos primários permitem estabelecer equações correlacionando-se diretamente propriedades com as variáveis de solidificação, como apresentado nas equações que se seguem para a liga Al 4,5 % Cu (Garcia, 2005), conforme mostram as equações 6 e 7.

$$\sigma_u = 46 + 145 \left(\frac{21\phi_2^2}{S_L + 0.07415 \frac{\phi_2}{\exp(\phi_1^2) [M + \text{erf}(\phi_1)] h_i}} \right)^{1/3} \quad (\text{Eq. 6})$$

$$\delta = 0.034 + 0.179 \left(\frac{21\phi_2^2}{S_L + 0.07415 \frac{\phi_2}{\exp(\phi_1^2) [M + \text{erf}(\phi_1)] h_i}} \right)^{1/3} \quad (\text{Eq. 7})$$

Nessas equações, observam-se a dependência das propriedades mecânicas, o limite de resistência à tração - σ_u (MPa) e o alongamento específico - δ (%), com a posição na peça a partir da sua superfície, representada por S_L .

O tipo do molde que se utiliza para sua fabricação está refletido no parâmetro M . O superaquecimento no líquido e as características termofísicas da liga e do material do molde estão inseridos nos parâmetros ϕ_1 e ϕ_2 , enquanto h_i traduz a eficiência da troca térmica entre a superfície da peça e o molde.

Estabelecido um vínculo entre as propriedades mecânicas e os parâmetros da rede dendrítica, notou-se que outras características importantes sob ponto de vista de aplicação também poderiam ter forte influência da estrutura de solidificação, tais como a taxa de resfriamento e a composição química.

Sendo assim, os modelos propostos, nesse trabalho, apresentam, de forma eficiente, essa relação, fato que pode contribuir como subsídio para o desenvolvimento de trabalhos futuros.

A Equação 8, a seguir apresentada, mostra os resultados obtidos para ligas hipoeutéticas Al-Si solidificadas na forma vertical ascendente (nesse caso, não são induzidas correntes convectivas). Pode-se notar que um expoente -0,55 caracteriza bem a variação λ_1 com \dot{T} .

$$\lambda_1 = 220(\dot{T}_L)^{-0.55} \quad (\text{Eq. 8})$$

Esse valor concorda com as observações de Bouchard e Kirkaldy (1997), que relatam que uma lei do tipo $\lambda_1 = \text{constante} (\dot{T}_L)^{-0.55}$ representaria, adequadamente, os espaçamentos primários para solidificação em regime transitório. Esse mesmo expoente experimental foi também verificado em outros trabalhos realizados para ligas Al-Cu (Rocha et al., 2003).

Nos trabalhos examinados pela literatura, observa-se que o teor de soluto da liga (C_0) parece não afetar, de forma significativa, os valores dos espaçamentos primários, podendo-se estabelecer uma lei de variação de λ_1 com \dot{T} comum para todas as ligas hipoeutéticas.

Foram encontrados, na literatura, vários modelos teóricos, desenvolvidos para solidificação em condições de regime estacionário de fluxo de calor, confrontando os espaçamentos dendríticos primários experimentais para a liga Al-3%Si. Pôde-se observar que nenhum deles mostra uma boa concordância com os resultados experimentais, principalmente considerando-se a sensível diferença na inclinação das retas típicas de cada mo-

delo e a inclinação da reta representativa dos pontos experimentais (Hunt, 1979; Kurz & Fisher, 1992; Trivedi, 1984).

Essa conclusão se estende a todas as composições de ligas Al-Si investigadas e a todos os outros sistemas binários examinados pela literatura (Garcia, 2005). Em síntese, ao contrário do que se afirmava na literatura, esses modelos não refletem as situações experimentais da solidificação transitória. Por outro lado, os modelos de Bouchard-Kirkaldy (solidificação transitória) (Bouchard & Kirkaldy, 1997) e de Hunt-Lu (solidificação transitória e estacionária) (Hunt & Lu, 1996) foram confrontados com resultados experimentais de várias ligas de sistemas binários (Garcia, 2005) e tiveram sempre suas expectativas teóricas próximas dos dados experimentais.

Nesse trabalho, utilizando as relações entre taxa de resfriamento e espaçamento dendrítico primário desenvolvidas, alguns modelos matemáticos foram realizados para que se pudesse modelar a relação entre as propriedades mecânicas, microestrutura e composição química.

2. Modelagem matemática dos dados

O presente trabalho procura tratar de um problema conhecido entre os metalurgistas e engenheiros de materiais, que é o estabelecimento de uma relação através de modelos matemáticos, entre propriedades mecânicas, composição química e estrutura metalográfica das ligas metálicas.

Para tratamento desse problema, foram escolhidas neste trabalho, as ligas hipoeutéticas alumínio silício e alumínio cobre fundidas, nas classes 2xxx, 3xxx e 4xxx, segundo a AA (American Association).

Vale ressaltar que essas ligas respondem por mais de 95% da produção de peças fundidas, sendo, sem dúvida, as de maior importância comercial, devido à boa combinação de propriedades

mecânicas, usinabilidade, resistência à corrosão e propriedades de fundição que exibem. Por fim, essas classes de ligas de alumínio foram escolhidas por apresentarem um conjunto mais amplo de dados na literatura, o que possibilitou a construção da base de dados e a geração dos modelos matemáticos.

2.1 Construção da base de dados

O desenvolvimento aqui proposto utilizou dados bibliográficos e aplicou técnicas estatísticas através do método de regressão linear, utilizando-se para tal o software estatístico Minitab R14, para a criação dos modelos matemáticos propostos. Para aplicação das técnicas de regressão linear, um trabalho exaustivo foi feito para construção de uma base de dados organizada, através de levantamento bibliográfico. Os dados foram, então, estatisticamente, tratados e utilizados pelo software estatístico para geração dos modelos.

Os modelos matemáticos aqui propostos podem ajudar a poupar muito tempo e recursos no processamento de informações, pois podem fornecer uma aproximação muito boa das propriedades mecânicas, sem a necessidade da realização de ensaios destrutivos, muitas vezes dispendiosos.

O tratamento da relação proposta, nesse trabalho, é complexo, pois a quantidade de variáveis envolvidas é grande. Por isso o estabelecimento das relações entre essas variáveis é, também, complexo. Tal fato requer uma escolha criteriosa de quais variáveis seriam fundamentais, de modo a simplificar, o máximo possível, a modelagem da solução.

O primeiro passo para a realização dessa modelagem foi, então, a definição das variáveis que seriam importantes para o estabelecimento da relação entre a composição química, a estrutura metalográfica e as propriedades mecânicas.

Como variável independente, foi escolhida a “Composição Química”,

composta pelos elementos silício, ferro, cobre, manganês, magnésio, cromo, níquel, zinco, titânio e estrôncio. A variável “Taxa de Resfriamento - \dot{T} ” foi escolhida, de modo a representar a influência do processo de fabricação no tratamento do problema proposto. A variável “espaçamento dendrítico primário - λ_1 ” foi escolhida para representar a estrutura metalográfica formada após a solidificação.

Por último, foi escolhida a variável “Tratamento Térmico”, que exerce uma grande influência na estrutura metalográfica e, conseqüentemente, nas propriedades mecânicas.

Nessa modelagem, o tratamento térmico foi considerado como uma variável qualitativa e assumiu os seguintes valores: “Fabricated” (bruto de fundição), quando nenhum tratamento foi realizado; T2, para o tratamento de alívio de tensões; T4, para o tratamento de solubilização; T5, T51 e T55, para tratamento de envelhecimento artificial ou precipitação; T6, T61 e T62, para tratamento de solubilização e posterior envelhecimento artificial; e T7 e T71, para tratamento de solubilização e posterior superenvelhecimento. Ressalta-se que é importante considerar o tratamento térmico para a realização do modelo matemático, uma vez que este exerce uma forte influência sobre a estrutura metalográfica da liga que foi termicamente tratada.

Como variáveis dependentes foram escolhidas o “Limite de Resistência a Tração - LRU”, a “Tensão de Escoamento - LES”, o “Alongamento - ALG”, a “Dureza - DUR” e o “Modulo de Elasticidade - MOE”, que são as propriedades tipicamente utilizadas na formulação matemática para realização de projetos mecânicos.

Com o objetivo de organizar e possibilitar uma melhor visualização utilizando os dados bibliográficos (Jorstad et al., 1993; ASM, 1988), uma base de dados foi construída, utilizando-se as variáveis que foram definidas. No presente trabalho, as seguintes ligas foram utilizadas para a construção da base de

dados: “201”, “204”, “A206.0”, “206”, “208”, “213”, “222”, “224”, “238”, “240”, “242”, “A242.0”, “243”, “249”, “295”, “296”, “308”, “319”, “B319.0”, “B320.0”, “324”, “328”, “332”, “333”, “336”, “354”, “355”, “C355.0”, “356”, “A356.0”, “357”, “A357.0”, “358”, “359”, “360”, “A360.0”, “364”, “380”, “A380.0”, “383”, “384”, “A384.0”, “413”, “A413.0”, “443”, “C443.0” e “A444.0”. A base completa com todos os dados está disponível em Corradi (2006).

2.2 Construção dos modelos matemáticos

De modo a simplificar a modelagem matemática, optou-se pela construção dos modelos individuais para cada variável dependente, através de técnicas de redução linear utilizando-se o software estatístico Minitab Release 14. Os modelos foram ajustados pelo método de mínimos quadrados, como se sabe, com as suposições iniciais usuais de erros independentes e normalmente distribuídos, com média zero e variância um e independência das variáveis.

Como o objetivo de melhorar os resultados, foram gerados modelos separados para as classes de ligas de alumínio cobre e alumínio silício.

Uma das condições iniciais para um bom modelo matemático pelo método de mínimos quadrados exige que as variáveis explicativas não tenham correlação entre si. Sendo assim, para a construção do modelo, foi retirada a variável taxa de resfriamento, que tem uma grande correlação com o espaçamento dendrítico primário.

Para todas as equações geradas, os símbolos utilizados são definidos como: **LRU** - limite de resistência à tração (MPa), **LES** - tensão-limite de escoamento (MPa), **ALG** - alongamento (%), **DUR** - dureza (HB), **MOE** - módulo de elasticidade (GPa), **Si** - silício (%); **Fe** - ferro (%), **Cu** - cobre (%), **Mn** - manganês (%), **Mg** - magnésio (%), **Cr** - cromo (%), **Ni** - níquel (%), **Zn** - zinco (%); **Ti** - titânio (%), **Sn** - estanho (%);

λ_1 - espaçamento dendrítico primário (μ); **F** - ausência de tratamento térmico, **T2** - tratamento térmico de alívio de tensões, **T4** - tratamento térmico de solubilização e envelhecimento natural, **T5** - tratamento térmico de envelhecimento artificial, **T51** - primeira variação do tratamento térmico de envelhecimento artificial, **T55** - segunda variação do tratamento térmico de envelhecimento artificial, **T6** - tratamento térmico de solubilização e envelhecimento artificial, **T61** - primeira variação do tratamento térmico de solubilização e envelhecimento artificial, **T62** - segunda variação do tratamento térmico de solubilização e envelhecimento artificial, **T7** - tratamento térmico de solubilização e superenvelhecimento artificial, **T71** - variação do tratamento térmico de solubilização e superenvelhecimento artificial. Em todas as equações, para todos os tratamentos térmicos deve, ser utilizado “0”, caso o tratamento não exista na liga e “1”, nas situações em que exista.

A Equação 9 mostra o modelo que foi gerado para a relação entre o limite de resistência à tração, a composição química, a estrutura metalográfica e o tratamento térmico, para as ligas alumínio cobre.

$$\text{LRU} = -784 - 150 \cdot \text{Si} - 828 \cdot \text{Fe} + 360 \cdot \text{Cu} - 547 \cdot \text{Mn} + 548 \cdot \text{Mg} + 182 \cdot \text{Cr} - 289 \cdot \text{Ni} + 1,76 \cdot \text{Zn} + 691 \cdot \text{Ti} - 33 \cdot \text{Sn} + 2,89 \cdot \lambda_1 + 18,8 \cdot \text{F} - 9,2 \cdot \text{T2} + 39,9 \cdot \text{T4} + 23,5 \cdot \text{T55} + 65,0 \cdot \text{T6} + 100 \cdot \text{T62} + 55,8 \cdot \text{T7} + 50,5 \cdot \text{T71} + 40,0 \cdot \text{Si}^2 + 748 \cdot \text{Fe}^2 - 29,0 \cdot \text{Cu}^2 + 62 \cdot \text{Mn}^2 - 78,3 \cdot \text{Mg}^2 - 0,0189 \cdot \lambda_1^2 \quad (\text{Eq. 9})$$

A Equação 10 traz o modelo que foi gerado para a relação entre a tensão-limite de escoamento, a composição química, a estrutura metalográfica e o tratamento térmico, para as ligas alumínio cobre.

$$\text{LES} = 491 - 584 \cdot \text{Si} - 1448 \cdot \text{Fe} + 359 \cdot \text{Cu} - 2303 \cdot \text{Mn} + 68,8 \cdot \text{Mg} - 1132 \cdot \text{Cr} + 48 \cdot \text{Ni} - 63,9 \cdot \text{Zn} - 1585 \cdot \text{Ti} - 3282 \cdot \text{Sn} + 2,22 \cdot \lambda_1 - 14,1 \cdot \text{F} - 108 \cdot \text{T2} - 84,9 \cdot \text{T4} - 15,7 \cdot \text{T55} - 16,4 \cdot \text{T6} + 37,4 \cdot \text{T62} - 9,4 \cdot \text{T7} - 13,8 \cdot \text{T71} + 87,0 \cdot \text{Si}^2 + 1563 \cdot \text{Fe}^2 - 36,2 \cdot \text{Cu}^2 + 2934 \cdot \text{Mn}^2 - 0,0131 \cdot \lambda_1^2 \quad (\text{Eq. 10})$$

O modelo gerado para a relação entre alongamento, a composição química, a estrutura metalográfica e o tratamento térmico, para as ligas alumínio cobre, é mostrado na Equação 11.

$$\text{Log ALG} = 1,12 + 0,199 \cdot \text{Si} - 0,626 \cdot \text{Fe} + 0,0156 \cdot \text{Cu} - 0,508 \cdot \text{Mn} - 0,0486 \cdot \text{Mg} + 2,00 \cdot \text{Cr} - 0,331 \cdot \text{Ni} + 0,0117 \cdot \text{Zn} + 0,43 \cdot \text{Ti} - 0,19 \cdot \text{Sn} - 0,000978 \cdot \lambda_1 - 0,286 \cdot \text{F} - 0,288 \cdot \text{T2} + 0,073 \cdot \text{T4} - 0,325 \cdot \text{T55} - 0,077 \cdot \text{T6} - 0,190 \cdot \text{T62} - 0,068 \cdot \text{T7} - 0,345 \cdot \text{T71} \quad (\text{Eq. 11})$$

A Equação 12 mostra o modelo que foi gerado para a relação entre dureza, a composição química, a estrutura metalográfica e o tratamento térmico, para as ligas alumínio cobre.

$$\text{DUR} = 58,4 + 23,3 \cdot \text{Si} - 205 \cdot \text{Fe} + 33,7 \cdot \text{Cu} - 178 \cdot \text{Mn} - 321 \cdot \text{Mg} + 1384 \cdot \text{Cr} + 85 \cdot \text{Ni} + 22,9 \cdot \text{Zn} + 493 \cdot \text{Ti} - 964 \cdot \text{Sn} - 0,0691 \cdot \lambda_1 + 37,6 \cdot \text{F} - 18,2 \cdot \text{T2} - 12,2 \cdot \text{T4} + 4,8 \cdot \text{T55} + 5,0 \cdot \text{T6} + 24,0 \cdot \text{T62} + 5,3 \cdot \text{T7} - 2,2 \cdot \text{T71} \quad (\text{Eq. 12})$$

Por fim, a Equação 13 mostra o modelo que foi gerado para a relação entre o módulo de elasticidade e a composição química, para as ligas alumínio cobre.

$$\text{MOE} = -285 - 258 \cdot \text{Si} + 258 \cdot \text{Fe} - 73,5 \cdot \text{Cu} + 103 \cdot \text{Mn} + 69,7 \cdot \text{Mg} - 7462 \cdot \text{Cr} + 812 \cdot \text{Ni} + 150 \cdot \text{Zn} + 2483 \cdot \text{Ti} \quad (\text{Eq. 13})$$

Conforme apresentado em Corradi (2006), as equações 14 e 15 mostram, respectivamente, o modelo que foi gerado para a relação entre o limite de resistência à tração e a tensão-limite de escoamento, a composição química, a estrutura metalográfica e o tratamento térmico, para as ligas alumínio silício.

Em todas as equações geradas, as variáveis referentes aos tratamentos térmicos devem assumir o valor “1”, quando o tratamento existir e “0”, quando o tratamento não existir.

$$\text{LRU} = 253 + 42,1*\text{Si} + 139*\text{Fe} + 54,2*\text{Cu} - 178*\text{Mn} + 74,3*\text{Mg} + 190*\text{Cr} - 76,4*\text{Ni} - 32,7*\text{Zn} - 2122*\text{Ti} - 2245*\text{Sn} + 0,352*\lambda_1 - 34,3*\text{F} - 32,2*\text{T4} - 12,8*\text{T5} - 27,7*\text{T51} + 38,8*\text{T6} + 52,2*\text{T61} + 65,0*\text{T62} + 33,4*\text{T7} + 10,5*\text{T71} - 2,01*\text{Si}^2 - 39,0*\text{Fe}^2 - 9,48*\text{Cu}^2 + 155*\text{Mn}^2 + 36,6*\text{Mg}^2 - 669*\text{Cr}^2 + 10,2*\text{Ni}^2 + 6,57*\text{Zn}^2 + 3837*\text{Sn}^2 - 0,00745*\lambda_1^2 \quad (\text{Eq. 14})$$

$$\text{LES} = 214 + 50,7*\text{Si} + 122*\text{Fe} + 34,0*\text{Cu} - 88*\text{Mn} + 67,6*\text{Mg} + 199*\text{Cr} - 75,0*\text{Ni} - 55,2*\text{Zn} - 3456*\text{Ti} - 3580*\text{Sn} - 0,127*\lambda_1 + 4,8*\text{F} - 1,0*\text{T4} - 68,1*\text{T5} + 40,7*\text{T51} + 83,3*\text{T6} + 111*\text{T61} + 145*\text{T62} + 101*\text{T7} + 71,3*\text{T71} - 2,67*\text{Si}^2 - 36,4*\text{Fe}^2 - 4,55*\text{Cu}^2 + 79*\text{Mn}^2 + 55*\text{Mg}^2 - 730*\text{Cr}^2 + 12*\text{Ni}^2 + 12,4*\text{Zn}^2 + 7772*\text{Ti}^2 + 7439*\text{Sn}^2 - 0,00042*\lambda_1^2 \quad (\text{Eq. 15})$$

O modelo gerado para a relação entre alongamento, a composição química, a estrutura metalográfica e o tratamento térmico, para as ligas alumínio silício, é mostrado na Equação 16.

$$\text{ALG} = -14,7 + 3,49*\text{Si} - 4,57*\text{Fe} - 0,778*\text{Cu} + 21,4*\text{Mn} - 26,8*\text{Mg} - 34,9*\text{Cr} - 12,2*\text{Ni} - 3,88*\text{Zn} + 186*\text{Ti} + 123*\text{Sn} - 0,0834*\lambda_1 + 0,264*\text{F} + 1,56*\text{T4} - 0,67*\text{T5} - 1,59*\text{T51} - 0,264*\text{T6} - 0,43*\text{T61} - 1,81*\text{T62} - 0,905*\text{T7} + 0,033*\text{T71} - 0,224*\text{Si}^2 + 0,83*\text{Fe}^2 - 0,046*\text{Cu}^2 - 15,2*\text{Mn}^2 + 29,5*\text{Mg}^2 + 140*\text{Cr}^2 + 28,8*\text{Ni}^2 + 1,01*\text{Zn}^2 - 530*\text{Ti}^2 - 259*\text{Sn}^2 + 0,000443*\lambda_1^2 \quad (\text{Eq. 16})$$

A Equação 17 mostra o modelo que foi gerado para a relação entre dureza, a composição química, a estrutura metalográfica e o tratamento térmico, para as ligas alumínio cobre.

$$\text{DUR} = 212 - 18,3*\text{Si} - 5,9*\text{Fe} + 26,6*\text{Cu} - 113*\text{Mn} + 82,0*\text{Mg} - 69,3*\text{Cr} + 10,6*\text{Ni} + 3,8*\text{Zn} - 902*\text{Ti} - 638*\text{Sn} - 0,271*\lambda_1 - 4,28*\text{F} - 4,07*\text{T5} - 4,32*\text{T51} + 7,97*\text{T6} + 15,3*\text{T61} + 18,8*\text{T62} - 1,81*\text{T7} - 0,29*\text{T71} + 1,11*\text{Si}^2 + 1,7*\text{Fe}^2 - 7,83*\text{Cu}^2 + 77,7*\text{Mn}^2 - 63,2*\text{Mg}^2 + 135*\text{Cr}^2 - 2,93*\text{Ni}^2 - 1,02*\text{Zn}^2 + 2764*\text{Ti}^2 + 1351*\text{Sn}^2 - 0,00014*\lambda_1^2 \quad (\text{Eq. 17})$$

Por fim, a Equação 18 mostra o modelo que foi gerado para a relação entre módulo de elasticidade, a composição química, para as ligas alumínio silício.

$$\text{MOE} = 71,2 + 0,142*\text{Si} - 0,252*\text{Fe} + 0,314*\text{Cu} - 2,14*\text{Mn} - 1,39*\text{Mg} - 5,23*\text{Cr} + 0,586*\text{Ni} + 0,570*\text{Zn} + 3,55*\text{Ti} - 7,06*\text{Sn} \quad (\text{Eq. 18})$$

2.3 Modelagem da taxa de resfriamento, composição química e espaçamento dendrítico primário

Uma maneira conveniente de medir os efeitos das condições de solidificação e resfriamento, na estrutura metalográfica da liga é através do espaçamento dendrítico primário, uma vez que existe, para cada liga, uma relação entre a taxa de resfriamento e o espaçamento dendrítico primário gerado após a solidificação.

A taxa de resfriamento é uma variável que está relacionada com o processo de fabricação utilizado na fundição. Essa taxa será maior, se for utilizado um processo de fabricação que conduza a uma maior velocidade de resfriamento.

Os processos de fabricação que foram levados em consideração, nesse estudo, são: fundição em moldes de areia, fundição em coquilha por gravidade e fundição sob pressão. Cada um destes processos tem taxas de resfriamento que variam de 0,1 a 1,0°C/s para moldes de areia, 0,3 a 10°C/s, para moldes metálicos, em fundição por gravidade, e 50 a 500 °C/s, para moldes metálicos, em fundição sob pressão. Para esse trabalho, foram consideradas as seguintes taxas de resfriamento: 0,7°C/s, para moldes de areia, 4°C/s, para fundição em coquilha, e 50°C/s, para fundição sob pressão (Backerud et al., 1990).

Utilizando os valores de taxa de resfriamento e espaçamento dendrítico primário, foram geradas, para cada liga em estudo, equações que modelassem essa relação, conforme mostra a Tabela 1.

É de conhecimento dos metalurgistas que existe uma relação entre a composição química, a taxa de resfriamento e o espaçamento dendrítico primário. Sabe-se, também, que, quanto menor o intervalo de solidificação, menor será, também, o espaçamento dendrítico primário. Como o intervalo de solidificação depende da composição química da liga e da taxa de resfriamento, pode-se estabelecer uma relação entre essas variáveis e o espaçamento dendrítico primário.

A relação com o espaçamento dendrítico primário foi estabelecida através do somatório da composição química multiplicado pelo efeito da taxa de resfriamento, segundo a Equação 18,. Nessa equação, o coeficiente de determinação (R²) é de 0,9364.

$$\lambda_1 = 131,39 * (\text{SCC} * \dot{T})^{-0,34} \quad (\text{Eq. 19})$$

onde: λ_1 = espaçamento dendrítico primário (μm).

SCC = Somatório da composição química da liga (%).

\dot{T} = Taxa de resfriamento (°C/s).

2.4 Análise por componentes principais

A técnica de análise por componentes principais permite reduzir o número de variáveis (Lemos, 2003), que necessitam ser consideradas, a um número pequeno de índices, componentes principais, que são combinações lineares das variáveis originais. Nessa análise, procura-se um mínimo de combinações lineares, que possam ser usadas para resumir os dados, perdendo-se, no processo, um mínimo de informações.

A análise por componentes principais é muito útil para tentar encontrar grupos (clusters) nos dados. As variáveis precisam de ser correlacionadas, no início do processo, e não é necessário fazer suposições iniciais a respeito da distribuição de probabilidade das variáveis originais. Numa descrição mais matemática, diz-se que esta é uma transformação ortogonal de um conjunto de variáveis correlacionadas em um novo conjunto de novas variáveis não correlacionadas. A falta de correlação dos índices possibilita medir “dimensões” diferentes nos dados. O primeiro componente principal (Z_1) mostra o maior percentual de variação nos dados observados, o segundo componente (Z_2) mostra a segunda maior variação e, assim, sucessivamente.

Com o objetivo de classificar as duas classes de ligas modeladas, alumínio silício e alumínio cobre, foi utilizada a técnica de análise de componentes principais. Para tanto, foram utilizados o

silício, o ferro, o cobre, o manganês e o magnésio, que são os principais elementos que compõem a composição química dessas classes de liga. Assim, em função da composição química, a liga poderá ser classificada, utilizando-se um ou mais componentes principais, que representam a combinação linear dos elementos químicos.

As equações 20 e 21 mostram os coeficientes dos dois componentes principais de maior importância. Pode-se observar que os coeficientes para o componente 1 apresentam valores com sinal e valores contrários para o silício e para o cobre e poderiam, portanto, apresentar valores que possibilitariam a classificação das ligas que tivessem esses elementos em maior quantidade.

$$Z_1 = -0,587*Si + 0,174*Fe + 0,720*Cu + 0,319*Mn + 0,068*Mg \quad (Eq. 20)$$

$$Z_2 = 0,462*Si + 0,685*Fe - 0,003*Cu + 0,527*Mn - 0,197*Mg \quad (Eq. 21)$$

Utilizando-se os componentes de maior importância, foram calculados os valores para todas as ligas, de modo a verificar se os componentes gerados são capazes de classificar as ligas modeladas.

Em relação aos valores do componente 1, se o valor for superior a 0.352, a liga pode ser classificada como alumínio cobre e, se for inferior, pode ser classificada como alumínio silício.

3. Análise dos resultados

Verificando-se a adequação dos modelos gerados, pôde-se observar que eles apresentaram-se bem ajustados, conforme mostram os resultados de coeficiente de determinação “R²” e o teste “F” (Manly, 1986). Os coeficientes, para cada equação, foram Eq. 7 (R² = 96,8 e F = 74,51), Eq. 8 (R² = 97,9 e F = 87,29), Eq. 9 (R² = 94,8 e F = 45,02), Eq. 10 (R² = 92,4 e F = 22,23), Eq. 11 (R² = 91,3 e F = 25,00), Eq. 12 (R² = 83,9 e F = 13,97), Eq. 13 (R² = 91,7 e F = 22,73), Eq. 14 (R² = 90,7 e F = 19,47), Eq. 15 (R² = 85,3 e F = 50,88) e Eq. 16 (R² = 100,0 e F = ----).

Os coeficientes foram significativos, quando analisados pelo teste “t - Student” (Manly, 1986). Entretanto alguns apresentam magnitude e/ou sinais não condizentes com o esperado e, por isso, estão sendo tratados para a melhoria da qualidade dos modelos.

Em relação à correlação entre taxa de resfriamento e o espaçamento dendrítico primário, foi encontrado, na literatura, a mesma conclusão para resultados com ligas hipoeutéticas Al-Cu (Garcia, 2005, Sharp & Hellawell, 1969). Nessa literatura, vê-se que o teor de soluto tem pouca influência sobre λ_1 . Entretanto a maioria dos trabalhos

Tabela 1 - Modelagem da relação entre taxa de resfriamento (\dot{T}), e espaçamento dendrítico primário λ_1 .

Liga	201.2	204.2	A206.2	319.1	B319.1	332.1	C355.2	A413.1
Equações por tipo de liga	$\lambda_1=85,88(T)^{-0,59}$	$\lambda_1=101,1(T)^{-0,36}$	$\lambda_1=108,1(T)^{-0,40}$	$\lambda_1=58,45(T)^{-0,32}$	$\lambda_1=57,77(T)^{-0,38}$	$\lambda_1=42,87(T)^{-0,36}$	$\lambda_1=74,80(T)^{-0,30}$	$\lambda_1=57,64(T)^{-0,33}$
Equações por família de liga	$\lambda_1=97,44(T)^{-0,44}$			$\lambda_1=58,11(T)^{-0,35}$		$\lambda_1=42,87(T)^{-0,36}$	$\lambda_1=74,80(T)^{-0,30}$	$\lambda_1=57,64(T)^{-0,33}$
Liga	356.1	A356.1	A357.2	380	A380.1	B380.1	512.0	518.0
Equações por tipo de liga	$\lambda_1=56,73(T)^{-0,33}$	$\lambda_1=64,24(T)^{-0,31}$	$\lambda_1=63,58(T)^{-0,35}$	$\lambda_1=46,56(T)^{-0,30}$	$\lambda_1=46,93(T)^{-0,33}$	$\lambda_1=43,48(T)^{-0,35}$	$\lambda_1=51,39(T)^{-0,30}$	$\lambda_1=51,90(T)^{-0,28}$
Equações por família de liga	$\lambda_1=61,47(T)^{-0,33}$			$\lambda_1=45,60(T)^{-0,33}$			$\lambda_1=51,57(T)^{-0,29}$	

afirmam que, para as ligas hipoeutéticas Al-Cu, o espaçamento dendrítico primário (λ_1) aumenta com o aumento de C_0 .

A relação entre o aumento da quantidade de soluto (C_0), a taxa de resfriamento (\dot{T}) e o espaçamento dendrítico primário (λ_1), foi, inclusive, tratada, formalmente, nesse trabalho, através da Equação 17.

Ressalta-se que, no presente trabalho, os valores da constante C e do expoente n foram bem diferentes dos encontrados na literatura, conforme pode ser visto na Tabela 1, e o aumento de C_0 , fez aumentar o espaçamento dendrítico primário (λ_1). Os dados bibliográficos encontrados apresentam um estudo para ligas binárias Al-Cu e Al-Si e não para uma liga fundida comercial, que é o caso desse trabalho. Nessa situação, a presença dos demais elementos, influencia de maneira significativa em comparação com a bibliografia em relação aos valores, mas confirma a equação geral proposta $\lambda_1 = C(\dot{T})^n$ como sendo a mais adequada para a modelagem das variáveis envolvidas.

3.1 Análise das variáveis nos modelos propostos

Analisando os fenômenos físicos, no comportamento das correlações matemáticas obtidas, vale ressaltar que, tanto o cobre, quanto o silício, promovem um aumento da resistência à tração, à dureza, mas prejudicam o alongamento, o que pode ser observado nas equações apresentadas.

De maneira geral, as adições de magnésio promovem a resistência mecânica e a ductilidade.

O ferro, presente em porcentagem maior que 1,5%, pode causar uma estrutura grosseira e quebradiça e, quando combinado com o silício (FeSiAl_3), precipita-se na forma de placas, o que causa a deterioração da resistência mecânica (Gruzleski, 1990).

Sendo assim, pode-se observar que, nas equações 14, 15, 16, 17 e 18, o ferro apresenta um coeficiente negativo, para a relação com o alongamento e o módulo de elasticidade, e positivo, para o limite de resistência à tração e a tensão-limite de escoamento, apresentando pouca influência na dureza nas porcentagens estabelecidas pela composição química utilizada na modelagem. Em porcentagens inferiores a 1,5%, os principais compostos formados pelo ferro são finas agulhas como cristais de FeAl_3 , o que torna a liga mais resistente e dura, mas diminui, severamente, o alongamento. O ferro, ainda, pode ser encontrado na forma de um composto conhecido por “Escrita Chinesa”, combinado com o manganês, o que promove uma melhoria da resistência à tração e da dureza e uma diminuição do alongamento.

O cromo, o níquel e o manganês são, usualmente, adicionados para a melhoria da resistência à tração, principalmente a elevadas temperaturas (Corradi, 2001). Entretanto a porcentagem de manganês deve ser controlada em combinação

com o ferro, pois, do contrário, o efeito pode ser a formação de grandes partículas que reduzem a resistência e anulam o benefício da adição desse elemento.

O zinco adicionado em quantidades excessivas torna a liga muito frágil a quente (Corradi, 2001). Adições de zinco em combinação com o magnésio produzem aumento na resistência à tração e aumento no escoamento e no alongamento.

O estrôncio é adicionado como elemento modificador da morfologia do agregado eutético de silício da forma acicular ou lamelar grosseira para a forma fibrosa, o que resulta em melhoria nas propriedades mecânicas, principalmente do alongamento (Corradi, 2001). Entretanto a característica de modificação morfológica da microestrutura não foi tratada nesse trabalho.

O titânio e o boro são adicionados como refinadores de grão, diminuindo o espaçamento dendrítico e melhorando as propriedades mecânicas (Corradi, 2001).

Frequentemente, podem ser obtidas propriedades mecânicas aceitáveis de peças brutas de fundição, entretanto, na maioria das vezes, a estrutura metalográfica apresenta-se instável e com tensões residuais indesejáveis, que podem provocar até a quebra da peça, quando em serviço. Metalurgicamente, o silício, o cobre e magnésio são elementos importantes, pois, combinados entre si, tornam a liga tratável, termicamente, pela precipitação dos compostos eutéticos Mg_2Si e CuAl_2 , que melhoram, significativamente, as propriedades mecânicas.

Sendo assim, os tratamentos térmicos considerados nesse trabalho, têm o objetivo de melhorar as propriedades mecânicas, através da estabilização e homogeneização da estrutura metalográfica bruta de fundição e ou da precipitação de constituintes de maneira refinada e adequada, tais como o Mg_2Si e o CuAl_2 .

4. Considerações finais

Pode-se concluir que os modelos gerados são válidos e úteis para o que se propõe, que é a determinação das propriedades mecânicas de ligas de alumínio fundidas, hipoeutéticas e eutéticas, a partir da realização de ensaios não destrutivos de microscopia e análise química.

Os dados utilizados, para a construção da base de dados, são bibliográficos e foram gerados a partir de ensaios e análise em corpos-de-prova completamente isentos de defeitos do processo de fundição. É importante ressaltar que os modelos gerados utilizam uma base de dados teórica e não foram testados na prática. Em situações práticas, existem variáveis importantes referentes aos defeitos de fundição, tais como microporosidades por bolhas de hidrogênio, microrrechupes e inclusão de óxidos, que são inerentes ao processo e irão influenciar, diretamente, nas propriedades mecânicas das peças fundidas.

5. Referências bibliográficas

- ASM. ASM Handbook Volume 15: Casting. *ASM International*, 1988. 937p.
- BACKERUD, L., CHAI, G., TAMMINEN, J. Solidification Characteristics of Aluminum Alloys. v.2. Foundry Alloys. Des Plaines, IL: AFS/Skanaluminium, p.71-229, 1990.
- BOUCHARD, D., KIRKALDY, J. S. Prediction of dendrite arm spacings in unsteady and steady-state heat flow of unidirectionally solidified binary alloys. *Metallurgical and Materials Transactions B*, v. 28B, p. 651-663, 1997.
- CORRADI, C. A. L. *Metalurgia das ligas de alumínio e tratamentos no metal líquido*. Itaúna, Minas Gerais: SENAI-DR, 2001. 122p.
- CORRADI, C. A. L. *Modelagem matemática da relação entre composição química, microestrutura e propriedades mecânicas de ligas de alumínio fundidas hipoeutéticas e eutéticas*. Belo Horizonte: Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais - CEFET/MG, 2006. 132p. (Dissertação de Mestrado em Modelagem Matemática e Computacional).
- GARCIA, A. *Influência das variáveis térmicas de solidificação na formação da macroestrutura e da microestrutura e correlação com propriedades decorrentes*. São Paulo: Ed. Unicamp, Projeções, v.23, p. 13-32, jan./dez, 2005.
- GARCIA, A. *Solidificação: fundamentos e aplicações*. São Paulo: Ed. Unicamp, 2001.
- GRUZLESKI, J.E., CLOSSET, B.M. *The treatment of liquid aluminum - silicon alloys*. American Foundrymen's Society Inc - AFS, Des Plaines, Illinois, USA, 1990. 256p., il.
- HUNT, J.D. *Int. Conf. on Solidification and Casting of Metals*. London: The Metals Society, 1979. p. 3-9.
- HUNT, J.D., LU, S.Z. Numerical modeling of cellular/dendritic array growth: spacing and structure predictions. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 27A, p. 611-623, 1996.
- JORSTAD, J. L., RASMUSSEN, W. M. *Aluminum casting technology*. American Foundrymen's Society Inc - AFS, Des Plaines, Illinois, USA, 1993. 368p.
- KURZ, W., FISHER, J.D. *Fundamentals of Solidification*, Trans Tech Publications, Aedermannsdorf, Switzerland, 1992, p. 85-90.
- LEMONS, M. B., MORO, S., BIAZI, E., CROCCO, M. A Dinâmica urbana das regiões metropolitanas brasileiras. *Revista de Economia Aplicada*, Departamento de Economia FEA-USP/ FIPE, São Paulo, v. 7, n. 1, p. 213-244, 2003.
- MANLY, B. F. J. *Multivariate statistical methods - a primer*. Chapman & Hall/CRC, 1986. 208p.
- SHARP, R.M., HELLAWELL, A. J. *Cryst. Growth*. v. 5, p. 155-161, 1969.
- ROCHA, O. F. L., SIQUEIRA, C., GARCIA, A. Heat flow parameters affecting dendrite spacings during unsteady-state solidification of Sn-Pb and Al-Cu alloys. *Metallurgical and Materials Transactions. A, Physical Metallurgy and Materials Science*, v. 34A, p. 995-1006, 2003.
- TRIVEDI, R. Interdendritic spacing: II. A comparison of theory and experiments. *Metall. Mater. Trans. A*, v. 15A, p. 977-982, 1984.

Artigo recebido em 10/11/2008 e aprovado em 17/03/2010.

A REM tem novo endereço:

FUNDAÇÃO GORCEIX - REM
Rua Carlos Walter Marinho Campos, 57
Bairro: Vila Itacolomy
35400-000 - Ouro Preto - MG

(31) 3551-4730 (31) 3559-7408

www.rem.com.br