

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA**  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE MATERIAIS**

**APLICAÇÕES COMPUTACIONAIS NA METALURGIA**

**LARISSA GARCIA SANSONI ARAUJO**

**SÃO CARLOS -SP**

**2023**

# **APLICAÇÕES COMPUTACIONAIS NA METALURGIA**

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Departamento de Engenharia de Materiais da Universidade Federal de São Carlos, como requisito para obtenção do título de bacharel em Engenharia de Materiais.

Orientador: Lucas Barcelos Otani

São Carlos-SP

2023



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE MATERIAIS**  
Telefones: 16 -3351-8244 e 3351-8246  
Endereço eletrônico: demachef@ufscar.br  
Rodovia Washington Luís, km 235 – Caixa Postal 676  
CEP 13565-905 – São Carlos – SP - Brasil



## ATA DE DEFESA DE TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO (TCC)

**NOME:** Larissa Garcia Sansoni Araujo

**RA:** 640239

**TÍTULO:** Aplicações computacionais na metalurgia

**ORIENTADOR(A):** Prof. Dr. Lucas Barcelos Otani

**DATA/HORÁRIO:** 25/08/2023, 9h30

### BANCA – NOTAS:

	Monografia	Defesa
Prof. Dr. Lucas Barcelos Otani	9	9
Dr. Bráulio Salumão de Oliveira	9	9
<b>Média</b>	9	9

### BANCA – ASSINATURAS:

Prof. Dr. Lucas Barcelos Otani

\_\_\_\_\_

Dr. Bráulio Salumão de Oliveira

\_\_\_\_\_

**DEDICATÓRIA**  
À minha mãe, Fernanda.

## AGRADECIMENTO

Gostaria de agradecer a todos que de alguma forma me ajudaram ao longo da minha trajetória acadêmica.

A minha família, por sempre me incentivar e apoiar em todos os momentos, por me darem todo o amor e suporte necessário. Minha mãe Fernanda, minha avó Lúcia, e irmã Maria Eduarda.

Ao meu orientador Lucas Barcelos Otani, pela oportunidade de me orientar e por todo o suporte e paciência ao longo desta etapa.

À Evelyn Iwamoto e Vinicius Nogueira, por terem sido os melhores amigos e companheiros nos anos de universidade.

Ao Pedro por tornar tudo mais leve e por estar sempre comigo, nos momentos bons e nos difíceis.

Por fim, agradeço a todos professores e funcionários do Departamento de Engenharia de Materiais pela dedicação e ensinamentos que foram essenciais para minha formação.

## RESUMO

Atualmente, as simulações e cálculos computacionais têm se destacado, praticamente, em todas as áreas de engenharia. Isto se deve ao desenvolvimento de novos produtos, a busca pela redução de custos, tempo e recursos consumidos em ensaios e testes experimentais. Na metalurgia, as simulações e cálculos computacionais desempenham um papel particularmente importante, devido a capacidade de modelar processos complexos de transformação e tratamento de materiais metálicos, permitindo prever como diferentes variáveis afetam as propriedades finais dos materiais. Isso não só acelera o processo de desenvolvimento, mas também proporciona uma compreensão das relações entre as variáveis envolvidas, além de possibilitar explorar cenários que seriam realizados experimentalmente. Dessa forma, torna-se interessante a existência de um guia prático para a seleção de softwares na metalurgia, com base em uma pesquisa abrangente das ferramentas disponíveis em diferentes etapas do processo. Diante disso, esse trabalho teve como objetivo identificar as funcionalidades de cada software, auxiliando assim os profissionais na escolha das ferramentas mais adequadas às suas necessidades, evitando o desperdício de tempo e recursos em tentativas de encontrar as soluções mais adequadas por meio de tentativa e erro. Destaca-se aqui que as simulações e cálculos computacionais dependem de uma base de dados com informações precisas, pois a qualidade dos resultados obtidos por meio do uso de algum software está diretamente relacionada com a qualidade dos dados de entrada. Para garantir a confiabilidade dos resultados, é essencial que os parâmetros e propriedades utilizados nos modelos reflitam as características reais dos materiais e dos processos sendo analisados.

**Palavras-chave:** Metalurgia. Simulação Computacional. Softwares.

## **ABSTRACT**

Currently, computer simulations and computational calculations have been prominent in virtually every engineering field. This is attributed to the development of new products and the pursuit of cost, time, and resource reduction in trials and experimental tests. In metallurgy, computer simulations and computational calculations play a particularly significant role, owing to their capability to model complex processes of transformation and treatment of metallic materials, enabling the prediction of how different variables affect the final properties of the materials. This not only expedites the development process but also provides an understanding of the relationships among the involved variables, as well as allowing the exploration of scenarios that would be conducted experimentally. Thus, the existence of a practical guide for software selection in metallurgy becomes interesting, based on a comprehensive survey of available tools at different stages of the process. In light of this, the aim of this work was to identify the functionalities of each software, thereby assisting professionals in choosing the most suitable tools for their needs, avoiding the waste of time and resources in attempts to find the most appropriate solutions through trial and error. It is worth noting here that computer simulations and calculations depend on a database with accurate information, as the quality of results obtained with any software is directly linked to the quality of the input data. To ensure the reliability of the results, it is essential for the parameters and properties used in the models to reflect the actual characteristics of the materials and processes being analyzed.

**Key-words:** Metallurgy. Computer Simulation. Software.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1: Fluxograma dos tipos de processo de fabricação. Fonte: Próprio autor ..... 7



## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO .....	1
2	OBJETIVOS .....	3
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	5
3.1	VANTAGENS DO USO DE SOFTWARES.....	5
3.2	BASES DE DADOS .....	6
3.3	CONTEXTUALIZAÇÃO.....	7
4	METODOLOGIA.....	11
5	DESENVOLVIMENTO DO TEMA.....	13
5.1	ANÁLISE DE ESTRUTURAS CRISTALINAS.....	13
5.2	TRATAMENTO DE DADOS DE DIFRAÇÃO DE RAIOS-X (DRX).....	14
5.3	DIAGRAMA DE FASES E TRANSFORMAÇÃO .....	16
5.4	DFT ( <i>DENSITY FUNCTIONAL THEORY</i> ) – CÁLCULOS AB INITIO.....	18
5.5	DINÂMICA MOLECULAR .....	20
5.6	ELEMENTOS FINITOS ESTRUTURAL E/OU GERAL .....	21
5.7	PROPRIEDADES E SELEÇÃO DE MATERIAIS .....	24
5.8	CONFORMAÇÃO MECÂNICA .....	26
5.9	FUNDIÇÃO.....	27
5.10	SOLDAGEM.....	29
5.11	CORROSÃO.....	31
5.12	DESGASTE .....	32
5.13	TRATAMENTO EBSD ( <i>ELECTRON BACKSCATTER DIFFRACTION</i> ).....	33
5.14	ANÁLISE DE IMAGENS.....	34
5.15	CRIAÇÃO DE GRÁFICOS E TRATAMENTO DE DADOS .....	35
5.16	ANÁLISE DE DADOS E TRATAMENTO DE DADOS.....	37
5.17	ANÁLISE DE CICLO DE VIDA .....	38
5.18	GERENCIADORES DE REFERÊNCIAS .....	39
5.19	BASES DE DADOS.....	40
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	41



# 1 INTRODUÇÃO

Freitas Filho (2008) explica o que seria o objetivo central de se fazer uma simulação:

A simulação permite ao analista realizar estudos sobre os correspondentes sistemas modelados para responder questões do tipo “O que aconteceria se?”. O principal apelo ao uso dessa ferramenta, é que tais questões podem ser respondidas sem que os sistemas sob investigação sofram qualquer perturbação, uma vez que os estudos são realizados no computador (FILHO, 2008)

A busca por maior produtividade, redução de custos, agilidade, inovação e sustentabilidade incentiva a indústria a passar por contínuas transformações, muitas vezes impulsionadas pela adoção de tecnologias nos processos industriais. A era da Indústria 4.0 pode ser interpretada como um catalisador para um horizonte industrial inovador, no qual os processos de geração de valor são otimizados de maneira mais inteligente e eficaz (CRISTIAN et al., 2019).

O crescente avanço tecnológico na metalurgia trouxe consigo uma demanda por abordagens mais eficientes e precisas para a análise, simulação e desenvolvimento de materiais. Simulações e cálculos computacionais específicos para a área de metalurgia desempenham um papel essencial nesse cenário, proporcionando vantagens aos pesquisadores e profissionais da área. Como, por exemplo, os softwares de simulação permitem prever o comportamento de materiais e processos metalúrgicos antes de implementá-los fisicamente, economizando tempo, recursos e evitando erros potencialmente caros. Atualmente se busca o desenvolvimento de novas ligas metálicas com propriedades específicas para atender às demandas de diferentes aplicações. Assim, softwares avançados podem auxiliar na seleção e combinação de elementos químicos para criar ligas com características desejadas, de forma a prever o comportamento desses materiais (WAGIH et al., 2020). Existem também os softwares que são utilizados para análise e controle de qualidade dos materiais que permitem o monitoramento de propriedades mecânicas, microestruturas e defeitos em peças metálicas, assegurando que os produtos atendam aos padrões exigidos.

Além disso, softwares de análise de imagens são usados para examinar microestruturas de materiais, e facilitam a medição de tamanhos de grãos, identificação de fases, inclusões e outras características microestruturais, fornecendo informações para otimização de processos e melhoria das propriedades dos materiais

(DIAS, 2008). Pode-se citar também as opções de ferramentas que simulam ensaios mecânicos, como testes de tração e compressão, ajudando a prever o comportamento dos materiais sob diferentes condições de carga e temperatura (MARIM, 2009). Também, com o uso de softwares, é possível realizar análises do ciclo de vida dos materiais, contribuindo para a sustentabilidade e a redução do impacto ambiental de produtos e processos (ZANGHELINI, 2013). Em resumo, o uso de softwares na metalurgia permite maior eficiência, produtividade, redução de custos e otimização dos processos.

Nesse contexto, este trabalho se propõe a realizar um levantamento abrangente dos softwares utilizados na área de engenharia de materiais, com um foco especial na metalurgia e materiais metálicos.

## 2 OBJETIVOS

Este trabalho tem como objetivo o levantamento de softwares da área de engenharia de materiais, focando especialmente na metalurgia e materiais metálicos. Com o propósito de analisar as funcionalidades das principais ferramentas computacionais disponíveis, visando apoiar alunos, pesquisadores e professores na seleção das ferramentas mais adequadas às suas necessidades, pretende-se criar um guia útil de consulta para profissionais da área. Sendo assim, os objetivos principais são:

- Mapear softwares específicos utilizados na metalurgia, abrangendo diferentes etapas dos processos metalúrgicos;
- Descrever as funcionalidades e recursos oferecidos por cada software;
- Proporcionar informações para alunos e profissionais, ajudando-os a tomar decisões sobre a seleção de softwares mais adequados para as suas demandas específicas, fornecendo um panorama das ferramentas tecnológicas disponíveis.

É importante ressaltar que não é objetivo deste trabalho fazer uma comparação dos softwares disponíveis no mercado, tampouco definir qual é a melhor opção para cada área de destaque. O enfoque será dado, principalmente, no levantamento de informações disponíveis nas plataformas de cada um dos softwares citados.



### **3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA**

#### **3.1 VANTAGENS DO USO DE SOFTWARES**

O emprego de simulações computacionais e softwares tem revolucionado profundamente a maneira como encaramos os desafios complexos em diversas áreas da ciência e da engenharia. Essas ferramentas oferecem uma série de vantagens que impulsionam a eficiência, a precisão e a inovação nos processos de análise, projeto e tomada de decisões.

Uma das principais vantagens das simulações computacionais e softwares é a capacidade de criar modelos virtuais que representam sistemas complexos do mundo real. Isso possibilita que cientistas, engenheiros e pesquisadores explorem uma ampla gama de cenários sem a necessidade de realizar experimentos físicos, economizando um tempo considerável. Por exemplo, na indústria aeronáutica, a simulação de condições de voo, turbulência e interações aerodinâmicas pode ser realizada em um ambiente virtual, permitindo testar diferentes configurações de asas, motores e estruturas, sem o custo e o risco associados a testes em voo reais (VARGAS, 2009).

Além da economia de tempo, os usos de softwares também oferecem economia de recursos. A realização de experimentos físicos frequentemente demanda uma quantidade significativa de materiais, mão de obra e equipamentos especializados. Ao utilizar simulações computacionais, é possível reduzir drasticamente a necessidade de recursos físicos, resultando em uma abordagem mais econômica e sustentável. Além da simulação ter um custo menor, também pode ser realizada inúmeras vezes sem custo adicional. Isso é particularmente valioso em setores nos quais prototipagem e testes reais são caros e demorados, como na indústria automotiva (WILTGEN, 2019).

Outro aspecto crucial é a flexibilidade que as simulações proporcionam. Elas permitem a exploração de cenários que podem ser perigosos, impraticáveis ou custosos de serem reproduzidos no mundo físico. Na área da saúde, por exemplo, as simulações podem ser usadas para modelar e entender o comportamento de medicamentos no corpo humano, avaliando eficácia e possíveis efeitos colaterais em uma abordagem segura e controlada (GALLO-NETO, 2012). Entretanto, é importante

mencionar que a precisão das simulações depende da qualidade dos dados de entrada e das suposições adotadas no modelo. Dados imprecisos ou suposições inadequadas podem levar a resultados incorretos ou enganosos.

### **3.2 BASES DE DADOS**

É importante destacar que as simulações computacionais são tão precisas quanto os dados e as suposições que as alimentam. Uma base sólida de informações é essencial para obter resultados confiáveis (LEY et al., 2020). Para garantir a confiabilidade das simulações, é essencial que os parâmetros e propriedades utilizados nos modelos reflitam as características reais dos materiais e dos processos sendo analisados.

A metalurgia é o ramo da engenharia e da ciência dos materiais que se concentra no estudo, no processamento e na manipulação de metais e ligas metálicas, que abrange uma ampla gama de processos e técnicas que visam transformar matérias-primas metálicas em produtos finais com características desejadas (SEABRA, 1981). É possível simular desde o design e seleção de ligas metálicas até o processamento desses materiais, passando pela caracterização da microestrutura até a verificação do comportamento em ensaios mecânicos.

No entanto, a complexidade das bases de dados de softwares para a metalurgia decorre de diversos fatores interligados que precisam ser considerados para garantir a precisão e a utilidade das informações. As propriedades dos materiais podem variar significativamente com fatores como temperatura, pressão, composição química e processos de fabricação, portanto, as bases de dados devem incluir informações considerando uma variedade de condições. Portanto, como as propriedades dos materiais podem ser influenciadas mutuamente, as bases de dados precisam levar em consideração essas interações para fornecer informações completas. Além disso, como a metalurgia abrange uma ampla gama de metais, ligas e materiais compostos, cada um com suas propriedades únicas, as bases de dados precisam abranger essa variedade para garantir que as informações sejam relevantes para diferentes cenários.



### 3.3 CONTEXTUALIZAÇÃO

A metalurgia é um setor crucial na indústria, envolvendo uma série de etapas para transformar a matéria-prima em produtos acabados (Figura 1). As propriedades finais dos materiais estão diretamente relacionadas com a formação da microestrutura e dos processos aplicados ao longo do caminho.

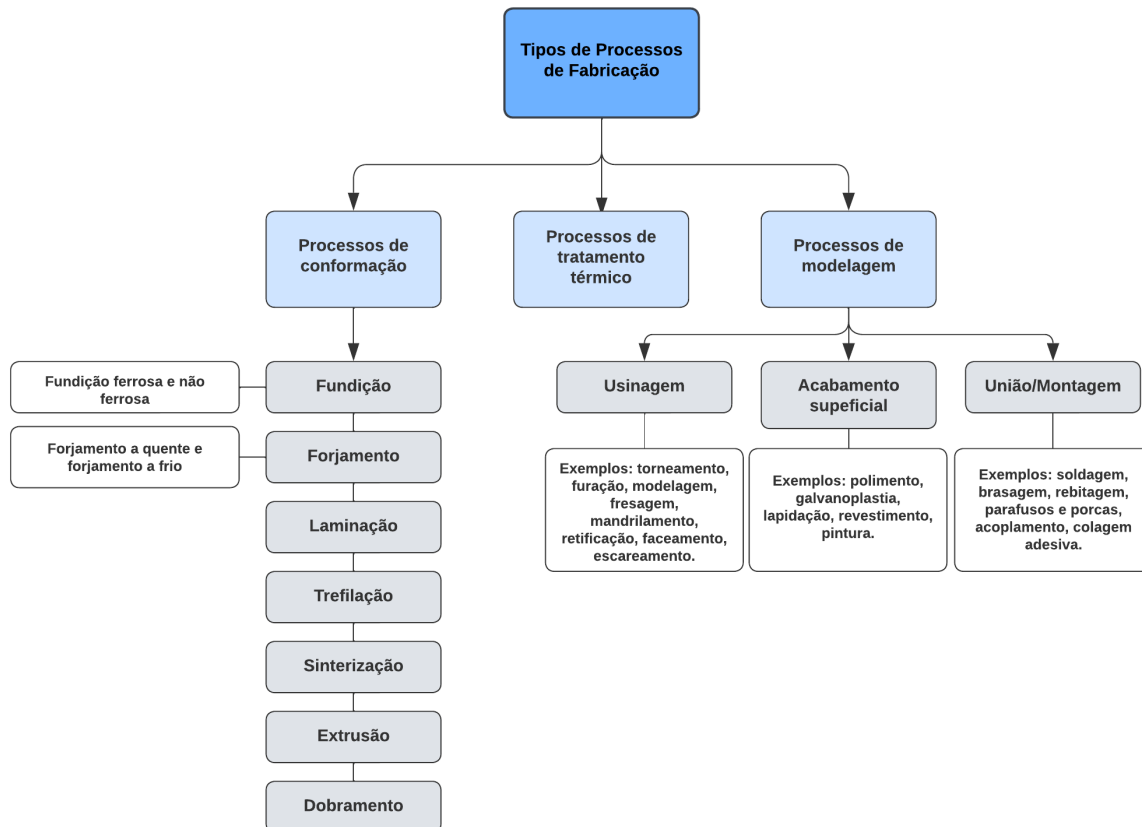


Figura 1: Fluxograma dos tipos de processo de fabricação. Fonte: Próprio autor.

A primeira etapa do processo metalúrgico é o projeto da microestrutura, que envolve a seleção cuidadosa dos materiais e a definição da estrutura atômica que eles terão. A microestrutura influencia diretamente as propriedades mecânicas, térmicas e elétricas dos materiais, tornando essa etapa crítica para atingir características específicas, como resistência mecânica, dureza e ductilidade (CENTENO, 2018).

Ao considerar o design da microestrutura, por exemplo, simulações e cálculos computacionais podem ajudar a visualizar como diferentes tamanhos de grãos,

distribuições de fases e composições químicas afetam as propriedades finais do material. Isso permite que os engenheiros e cientistas explorem virtualmente combinações de elementos e processos, identificando os cenários mais promissores para atender a requisitos específicos.

Após o projeto da microestrutura, a próxima etapa envolve a fusão do material. Nesse estágio, as matérias-primas são aquecidas a temperaturas elevadas para se fundirem e, em seguida, são moldadas em formas desejadas, como lingotes ou peças fundidas. O controle preciso das temperaturas, taxas de resfriamento e composição química é fundamental para garantir uma microestrutura controlada, além de controlar a quantidade de possíveis defeitos internos como inclusões e porosidade em regiões críticas da peça final (BALDAM, 2013).

A conformação é outra etapa crucial, na qual o material é moldado através de processos mecânicos envolvendo deformação plástica como laminação, extrusão, forjamento ou estampagem. A escolha do método de conformação, temperatura, taxa de deformação e forma de aplicação da deformação afetam diretamente a orientação da microestrutura, e, conseqüentemente, a distribuição das propriedades mecânicas (HELMAN, 2005).

Após os processos de fundição e/ou conformação, é possível que seja necessário a realização de tratamentos térmicos, nos quais o material é aquecido e resfriado em diferentes taxas para alterar sua microestrutura e propriedades. O recozimento, por exemplo, visa reduzir a dureza e melhorar a ductilidade, enquanto a têmpera aumenta a resistência mecânica. Esses processos são fundamentais para otimizar as características dos materiais para aplicações específicas (ANAZAWA et al., 2012). Nesse caso, os modelos computacionais podem prever a evolução da microestrutura durante diferentes etapas de aquecimento, resfriamento e têmpera. Isso auxilia na determinação das condições ideais para obter as propriedades desejadas do produto final.

Após a realização das etapas de fabricação, é necessário realizar um controle de qualidade, principalmente em componentes estruturais que exigem propriedades mecânicas especificadas. Nestes casos, os materiais podem ser submetidos a testes de tração, compressão, impacto, fadiga, dentre outros. Esses dados são essenciais para validar o desempenho do material e garantir que ele atenda aos requisitos estabelecidos. As simulações computacionais permitem a análise virtual de ensaios

mecânicos, bem como previsão de seu comportamento ao longo do processo de aplicação de cargas estáticas ou dinâmicas, como testes de tração e impacto, por exemplo. Isso não apenas poupa tempo e recursos, mas também permite uma compreensão mais profunda do comportamento do material sob diferentes condições.

Por fim, o tratamento e análise dos dados coletados durante o processo são cruciais para a melhoria contínua. O uso de simulações e cálculos computacionais nessa fase permite modelar o comportamento do material sob diferentes condições e prever seu desempenho em situações específicas.

A interligação entre o design da microestrutura, processos de fabricação, tratamentos térmicos e ensaios mecânicos desempenha um papel fundamental na metalurgia e na obtenção de materiais com propriedades desejadas. O uso de simulações e cálculos computacionais pode acelerar o entendimento desses processos, permitindo a experimentação virtual de diferentes cenários, o auxílio na busca por materiais otimizados e a previsão de como esses materiais se comportarão em condições de aplicação no mundo real.

Em síntese, a metalurgia é um campo multifacetado que demanda conhecimentos profundos das etapas do processo, desde a concepção da microestrutura até os ensaios mecânicos e a análise de dados. A combinação de práticas tradicionais com o uso de tecnologias avançadas, como simulações e cálculos computacionais, possibilita o desenvolvimento de materiais inovadores com propriedades sob medida para atender às demandas de aplicações cada vez mais exigentes.



## 4 METODOLOGIA

Uma parcela substancial deste TCC foi elaborada com base nas informações e orientações fornecidas pelo professor orientador, que disponibilizou uma lista abrangente de softwares frequentemente empregados na área da metalurgia. Para a obtenção de um panorama mais amplo a respeito de quais softwares seriam citados em cada área abordada neste trabalho, foram priorizados aqueles mais acessados e que possuíam informação de forma mais transparente com relação às suas funcionalidades e características. Assim, a cada busca feita utilizando palavras-chaves relacionadas com a área abordada, era dado prioridade aos que apareciam na primeira página do Google, sendo esses os mais acessados. Após essa etapa, foram coletadas informações detalhadas sobre cada software identificado. A partir disso, ao acessar os sites específicos de cada software, foi possível explorar características, funcionalidades, interface, recursos, aplicações, casos de uso, opiniões de usuários, além de obter, para alguns casos, informações dos parceiros e clientes. Com isso, foi mantido um registro organizado em planilha das informações coletadas, destacando os pontos-chaves de cada software, relacionados a custo, planos disponíveis e principais funções.

A partir do levantamento acima descrito, foram avaliados 57 softwares das seguintes áreas: análise e estrutura cristalina, tratamento de dados de difração de raios-x (DRX), diagrama de fases e transformação, DFT (*Density Functional Theory*) – cálculos ab initio, dinâmica molecular, elementos finitos estrutural e/ou geral, propriedades e seleção de materiais, conformação mecânica, fundição, soldagem, corrosão, desgaste, tratamento EBSD (*Electron Backscatter Diffraction*), análise de imagens, criação de gráficos e tratamento de dados, análise de dados e tratamento de dados, análise de ciclo de vida e gerenciadores de referência.

Por fim, vale destacar dois pontos importantes com relação ao levantamento realizado: mesmo após a utilização da metodologia acima descrita, é possível que alguns softwares de destaque em suas respectivas áreas não tenham sido contemplados neste trabalho. Adicionalmente, conforme descrito, as bases de dados são fundamentais para a correta descrição e previsão do comportamento dos materiais e, devido à sua amplitude e especificidade para cada software/processo, o presente trabalho não possui informações profundas com relação a este aspecto.

É relevante enfatizar que o propósito deste trabalho não visa realizar comparações entre os softwares disponíveis no mercado, tampouco definir qual é a melhor opção para cada área de destaque. O foco será principalmente na coleta de informações disponíveis nas plataformas de cada um dos softwares mencionados, para que os futuros usuários possam ter referências e selecionar, de acordo com suas necessidades, as melhores opções.

## 5 DESENVOLVIMENTO DO TEMA

Explorando cada etapa do processo metalúrgico, foram apresentadas as funcionalidades de todos os softwares escolhidos, destacando suas capacidades específicas e a forma como contribuem para a análise e otimização de alguma(s) das etapas desse processo. Além disso, foram apresentados os planos de assinatura disponíveis para os usuários, bem como os custos associados para garantir acesso ao software.

### 5.1 ANÁLISE DE ESTRUTURAS CRISTALINAS

- PTCLab (*Phase Transformation Crystallography Lab*)

O software PTCLab tem como objetivo calcular as transformações cristalográficas após uma mudança de fase e representar os resultados de maneira gráfica. Além disso, também cria estruturas cristalinas manualmente, atua na determinação de planos e direções, e simula padrões de difração de elétrons e perfis de difração de raios-X. Vale destacar que é possível criar e abrir arquivos com extensão “CIF” (*Crystallographic Information File*) (GU, 2023). Trata-se de um software de código aberto, o que implica que seu código está disponível para download livre, ou seja, qualquer pessoa pode fazer download e utilizar o software.

- VESTA (*Visualization of Electron/Nuclear and Structures*)

O software VESTA mostra a disposição espacial dos átomos na célula unitária do material, e a visualização tridimensional de estruturas cristalinas. É possível interagir com essas estruturas, através de movimentos de rotação, translação e ampliação, de forma a obter uma visão mais detalhada dos arranjos atômicos. O software também é capaz de analisar a estrutura cristalina por meio da medição de ângulos de ligação, comprimentos de ligação e volumes de células unitárias. Também dá a possibilidade de comparação entre estruturas cristalinas, de maneira a compreender diferenças entre materiais e transformações estruturais. Permite o estudo de propriedades eletrônicas e interações atômicas por meio da visualização de mapas de densidade eletrônica. Além disso, possui distribuição gratuita para usuários acadêmicos, científicos, educacionais e não comerciais. Os usuários de

empresas comerciais também podem usar este software sem nenhum custo, até que seja estabelecida uma licença para usuários corporativos (MOMMA, 2023).

## 5.2 TRATAMENTO DE DADOS DE DIFRAÇÃO DE RAIOS-X (DRX)

- PANALYTICAL HIGHSCORE

Este software trata dados experimentais que são obtidos por meio de difração de raios-X. É permitida a indexação de picos, associando os picos obtidos com planos cristalinos específicos de fases mais prováveis que podem estar presentes no material, assim como determina as propriedades da célula unitária da estrutura cristalina, bem como pode ser usado para estabelecer o tamanho médio de cristalitos em amostras. O software também identifica e quantifica as diferentes fases contidas na amostra, e pode atuar no refinamento da estrutura cristalina a partir dos dados experimentais, utilizando características como as posições atômicas, comprimentos e ângulos de ligação. Além disso, é capaz de simular padrões de difração, podendo assim comparar dados experimentais de diferentes estruturas cristalinas, auxiliando na identificação de fases. É utilizado, principalmente, em laboratórios de pesquisa acadêmica, indústria e laboratórios de controle de qualidade, e é frequentemente vendido com um banco de dados integrado, como o banco de dados ICDD (*International Centre for Diffraction Data*), que contém informações sobre uma ampla variedade de materiais cristalinos, facilitando a identificação e quantificação de fases. Para adquirir acesso ao software é necessário solicitar uma cotação ao desenvolvedor (MALVERN PANALYTICAL LTD, 2023).

- MAUD (*Materials Analysis Using Diffraction*)

O MAUD possibilita o refinamento dos parâmetros estruturais, incluindo comprimentos de ligação, ângulos de ligação e posições atômicas, com o objetivo de ajustar os dados experimentais de difração e obter uma representação mais precisa da estrutura cristalina. Também pode ser utilizado para avaliar a microestrutura de materiais cristalinos, como a micro deformação, tamanho de cristalito, e tensões residuais. Além disso, também realiza simulações de padrões teóricos de difração para várias estruturas cristalinas, permitindo uma comparação com os dados experimentais e fornecendo auxílio na identificação de fases e interpretação dos



resultados. O software é capaz de identificar e quantificar diferentes fases presentes em uma amostra, mesmo em casos de sobreposição de picos de difração de fases distintas. É um software gratuito de código aberto que pode ser personalizado pelos próprios usuários (LUTTEROTTI, 2023).

- MATCH

Este software permite o refinamento de parâmetros estruturais, como posições atômicas, comprimentos de ligação e ângulos de ligação. O refinamento é feito comparando os padrões experimentais de difração com padrões teóricos simulados para diferentes modelos estruturais. O programa também permite simular padrões teóricos de difração para diferentes estruturas cristalinas, facilitando a comparação com os dados experimentais e a interpretação dos resultados. O software também auxilia na indexação dos picos de difração observados nos dados experimentais, podendo determinar assim os parâmetros de rede do cristal e a orientação cristalográfica. Além disso, é capaz de identificar e quantificar as diferentes fases presentes em uma amostra a partir dos padrões de difração, e analisar a microestrutura de materiais cristalinos. O MATCH não se restringe apenas a dados de difração de raios-X, pois também possui a capacidade de analisar dados de difração de elétrons para estruturas cristalinas.

Este software possui uma versão de demonstração gratuita para uso por tempo limitado, e há diferentes opções de planos de assinatura tanto provisórios quanto permanentes, tanto para versão acadêmica quanto para uso individual, e os valores variam de 162,00 EUR até 5.192,00 EUR. Por ser uma ferramenta comercial, a versão de demonstração pode ter limitações de algumas funções devido a restrições de propriedade intelectual (BRANDENBURG; PUTZ, 2023).

- FULLPROF

Assim como os softwares anteriormente citados para tratamentos de dados de DRX, o Fullprof também é capaz de fazer um refinamento estrutural, melhorando a descrição da estrutura de um material cristalino, ajustando os detalhes dos seus parâmetros, como comprimentos de ligação, ângulos de ligação, posições dos átomos e ocupações, a partir de dados experimentais. Também é possível identificar e quantificar as diferentes fases cristalinas presentes em uma amostra. O programa

também é utilizado na análise de policristais, e ajuda a compreender a distribuição das diferentes orientações na amostra (detecção de textura), além de simular padrões de difração e fazer tratamento de dados.

O software é desenvolvido pelo Laboratório *Léon Brillouin* (LLB) na França e possui distribuição gratuita. Além de trabalhar com dados de difração de raios-X, o Fullprof também é capaz de analisar dados de difração de nêutrons (RODRIGUEZ-CARVAJAL, 2023).

### 5.3 DIAGRAMA DE FASES E TRANSFORMAÇÃO

- PANDAT

O software PANDAT inclui 6 módulos, a divisão dessa forma permite que os usuários alternem entre os módulos e executem vários tipos de simulações no mesmo espaço de trabalho. O módulo *PanPhaseDiagram* é indicado para o cálculo de equilíbrios de fase e propriedades termodinâmicas de sistemas multicomponentes e multifásicos. Além dos equilíbrios de fase estável e metaestável, podem ser calculadas a temperatura de transformação de fase, a fração de fase e as propriedades termodinâmicas, como energia livre de Gibbs, entalpia, entropia e força motriz. No módulo *PanEvolution* é possível a simulação simultânea de densidade de deslocamento, recristalização, engrossamento de grãos, além da simulação tradicional de precipitação. O *PanDiffusion* é um módulo projetado para simular a difusão elementar sob uma variedade de condições. Já o módulo *PanSolidificação* é projetado para a simulação do comportamento de solidificação de ligas multicomponentes sob uma variedade de condições com diferentes taxas de resfriamento. O *PanOptimizer* representa um módulo projetado para aprimorar a otimização de parâmetros em modelos termodinâmicos, cinéticos e termofísicos, por meio da incorporação de informações de dados experimentais. Esse módulo permite que os usuários criem e ajustem seus próprios bancos de dados ou parâmetros de modelo, adaptando-os às necessidades específicas.

O software possui versão de teste gratuita, e para os demais acessos é necessário solicitar cotação (“Pandat Software”, 2023).

- THERMO-CALC

O Thermo-Calc pode ser utilizado para calcular e prever os equilíbrios de fases em sistemas multicomponentes, incluindo a determinação das fases presentes, composições das fases e condições de temperatura e pressão em que os equilíbrios ocorrem. Também é usado para interpretar diagramas de fases binários, ternários e de sistemas multicomponentes mais complexos, o que auxilia na compreensão das transformações de fases que ocorrem nos materiais. Além das fases estáveis, o Thermo-Calc também permite calcular fases metaestáveis, como fases de precipitação em aços, o que possibilita uma previsão de possíveis fases formadas. É possível também realizar cálculos termodinâmicos, permitindo previsões precisas das transformações de fase e comportamentos dos materiais. O programa pode ser usado para projetar ligas e otimizar processos de tratamento térmico e produção, levando em consideração as fases presentes e as propriedades desejadas, além de auxiliar na seleção de materiais para aplicações específicas, considerando suas propriedades sob diferentes condições.

O software é frequentemente usado em pesquisa acadêmica e em indústrias que trabalham com materiais e ligas, como aeroespacial, automotiva, eletrônica e processamento. Para acesso ao software, existe um pacote educacional voltado para o ensino e aprendizagem de termodinâmica e teoria cinética, com funções limitadas, mas que inclui uma coleção de banco de dados de demonstração e um material educacional para alunos e educadores. Para demais opções de acesso é necessário solicitar cotação (“Computational Materials Engineering - Thermo-Calc Software”, 2023).

- FACTSAGE

O software é desenvolvido para cálculos termodinâmicos e de equilíbrio em sistemas químicos e metalúrgicos. Ele é projetado para modelar e prever as condições de equilíbrio químico e termodinâmico em sistemas complexos envolvendo várias fases, reações químicas e propriedades físicas em diferentes condições de temperatura, pressão e composição. É também utilizado principalmente para entender as condições de equilíbrio em reações químicas, como a formação de óxidos, escórias e outros produtos de reações em altas temperaturas, possuindo assim um maior foco no tratamento de dados de metal líquido e a formação de óxidos,

sulfetos, dentre outros compostos que podem surgir em processos industriais e metalúrgicos. Ele permite aos engenheiros, cientistas e pesquisadores modelar como esses materiais reagem entre si à medida que são aquecidos ou resfriados, e como essas reações podem ser influenciadas por mudanças nas condições de temperatura, pressão e composição química.

O FactSage possui um pacote de demonstração, direcionado para o ensino de termoquímica em universidades, para demais opções de acesso é necessário solicitar orçamento (“FactSage”, 2023).

- MATCALC

O MatCalc é um software voltado para a simulação computacional de transformação de fase e evolução de microestrutura em sistemas metálicos. Tem como características calcular as condições de equilíbrio termodinâmico entre as várias fases de um material ou sistema em diferentes condições. O programa também suporta modelagem cinética, permitindo a simulação de transformações em diferentes taxas de aquecimento e resfriamento. É capaz de simular e modelar processos de difusão de longo alcance em materiais, além de difusão e precipitação simultâneas. Além disso, consegue modelar a evolução da microestrutura de materiais ao longo do tempo, considerando diversos processos como difusão, precipitação, recristalização, crescimento de grãos, dentre outras transformações. O software pode ser adquirido gratuitamente com algumas limitações, e para ter acesso à versão completa é necessário solicitar cotação (“Matcalc - Solid State and Kinetics Precipitation”, 2023).

#### **5.4 DFT (*Density Functional Theory*) – cálculos Ab Initio**

- WIEN2K

O WIEN2k é um software que utiliza uma abordagem de métodos LAPW (*Linear Augmented Plane Wave*), que é uma técnica específica de cálculo de DFT. Isso envolve a expansão da função de onda eletrônica em uma combinação de ondas planas e funções localizadas. O software permite calcular a estrutura eletrônica de materiais sólidos, determinando a distribuição de elétrons e níveis de energia nos estados eletrônicos. Também pode calcular parâmetros estruturais, como

comprimentos de ligação, ângulos de ligação e volumes de células unitárias, a partir da estrutura cristalina dos materiais, além do cálculo das densidades de estados eletrônicos, que descrevem a densidade de elétrons disponíveis em diferentes níveis de energia, o que auxilia no entendimento das propriedades de condução elétrica e magnética dos materiais. O programa pode ser usado para analisar propriedades eletrônicas de superfícies e interfaces de materiais, que são importantes em aplicações de dispositivos eletrônicos e nanotecnologia. Além disso, o software oferece ferramentas de visualização que permitem aos usuários examinar a estrutura eletrônica e as propriedades dos materiais de forma gráfica.

O WIEN2k não é um software gratuito, mas está disponível por uma taxa de licença única, a ser encomendada através do preenchimento de um formulário online de inscrição. O software pode ser obtido por meio de uma licença de grupo, e pode ser utilizado em quantos computadores for necessário, sendo esses usuários participantes do grupo. Nesse contexto, um grupo não se refere necessariamente a um departamento ou instituto inteiro, ou a toda uma universidade, mas sim a um conjunto determinado de usuários participantes. Para usuários comerciais a licença é obtida por 4.000 EUR, para laboratórios governamentais por 1.000 EUR e para instituição acadêmica por 400 EUR (BLAHA; SCHWARZ, 2023).

- *VASP (VIENNA AB INITIO SIMULATION PACKAGE)*

O VASP é um software de simulação de estrutura eletrônica e dinâmica molecular que utiliza uma abordagem de pseudopotenciais e ondas planas para expandir as funções de onda eletrônica. O VASP realiza cálculos de estrutura eletrônica, determinando a distribuição de elétrons e os níveis de energia em sistemas atômicos e moleculares. O software calcula parâmetros estruturais, como geometrias de ligações, ângulos e distâncias, a partir da estrutura atômica dos sistemas. Ele fornece informações sobre as densidades de estados eletrônicos, que descrevem a densidade de elétrons disponíveis em diferentes níveis de energia. Também é possível calcular a energia de ligação entre diferentes átomos e moléculas, fornecendo informações sobre a estabilidade das ligações químicas. O VASP pode calcular propriedades ópticas, como coeficientes de absorção, índices de refração e propriedades de luminescência, além do cálculo de propriedades magnéticas, como

magnetização, anisotropia magnética e estrutura magnética. Adicionalmente, é também possível investigar as propriedades eletrônicas de superfícies e interfaces.

As licenças para acesso ao software são emitidas para grupos de pesquisa, e o preço depende do número de usuários, e necessita de uma solicitação de orçamento que será específica (“VASP - Vienna Ab initio Simulation Package”, 2023).

## 5.5 DINÂMICA MOLECULAR

- LAMMPS (*Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*)

O LAMMPS é um software de simulação molecular usado para modelar e simular sistemas atômicos, moleculares e mesoscópicos, permitindo estudar a evolução das estruturas e as propriedades termodinâmicas dos sistemas. Na área de metalurgia, o software permite realizar simulações que ajudam a compreender e otimizar propriedades e processos.

O software pode ser usado para simular a deformação, elasticidade e resistência de metais, permitindo entender como as propriedades mecânicas emergem a partir do comportamento atômico. O software também investiga como os átomos se difundem dentro dos materiais metálicos, o que auxilia no entendimento de fenômenos como crescimento de grãos, recristalização e envelhecimento. Também permite simular microestruturas de metais, incluindo a formação e a evolução de grãos, contornos de grãos (interface) e defeitos cristalinos, como discordâncias e falhas de empilhamento, por exemplo. Além disso, também pode ser usado para simular o comportamento de ligas metálicas e o processo de solidificação, fornecendo informações sobre como diferentes elementos interagem e influenciam a microestrutura. Assim, ao simular diferentes composições e estruturas atômicas, o LAMMPS pode ajudar a identificar materiais com propriedades desejadas para aplicações específicas.

O LAMMPS não segue um modelo de planos pagos, e sim distribuído sob a Licença Pública Geral GNU (*GNU General Public License*), o que significa que os usuários têm acesso ao código-fonte, podem modificá-lo e distribuir suas próprias versões, desde que sigam as condições estabelecidas na licença. O software é mantido pela comunidade de desenvolvedores e pesquisadores, e sua

documentação, tutoriais e suporte estão disponíveis online para auxiliar os usuários em sua utilização (CROZIER, 2023).

## 5.6 ELEMENTOS FINITOS ESTRUTURAL E/OU GERAL

- ANSYS Mechanical

O Ansys Mechanical permite criar modelos geométricos e definir condições de contorno, materiais e propriedades do material que será analisado. Com ele é possível a criação de malha de forma automática ou personalizada, consistindo na divisão do modelo em elementos menores. Ele também resolve as equações de elementos finitos e fornece os resultados, como tensões, deformações, deslocamentos, que podem ser empregados para avaliar o desempenho do sistema em análise. Além disso, há a possibilidade de avaliação dinâmica de sistemas, o que permite investigar o comportamento sob condições dinâmicas ou em resposta a cargas que variam ao longo do tempo, como a determinação da frequência natural de vibração. No que diz respeito à fase de pós-processamento e à representação visual e interpretação dos resultados, o programa disponibiliza gráficos, animações e relatórios.

O programa possui uma versão educacional gratuita, mas com recursos limitados, e requer a submissão de um formulário de solicitação sujeito à aprovação. Já para os demais planos é necessário solicitar cotação.

Além dos elementos finitos convencionais, o software também efetua análises em elementos estruturais especializados, como cascas, sólidos, térmicos e acústicos, por exemplo. Também possui recursos nas áreas de mecânica estrutural, como análise de fadiga e flambagem, na área de eletromagnetismo, dinâmica de fluidos computacional (CFD), eletrônica e microeletrônica, dentre outros. O software é reconhecido por sua capacidade abrangente e é empregado em diversos setores industriais, incluindo automotivo, aeroespacial, energia, eletrônica e manufatura (JOHN SWANSON, 2023).

- ABAQUS

O Abaqus é um software especializado em análises avançadas de elementos finitos, particularmente em mecânica estrutural complexa e comportamento de

materiais. É frequentemente empregado no campo da engenharia e ciência dos materiais para simular e analisar comportamentos de sistemas e estruturas em cenários reais de aplicação. Ele proporciona um ambiente completo para análise por elementos finitos, abrangendo todas as etapas, desde o pré-processamento até o processamento e pós-processamento.

O software gera automaticamente a malha de elementos finitos a partir do modelo geométrico definido, permitindo uma representação precisa da geometria e a otimização da malha para análise eficiente. Ele também resolve equações de elementos finitos para fornecer resultados detalhados como tensões, deslocamentos, deformações e temperaturas. Há um suporte para análise dinâmica, incluindo frequência natural, resposta em frequência e análise transiente para avaliar o comportamento do sistema sob condições variáveis ao longo do tempo.

Além disso, o software é capaz de conduzir análises não-lineares, contemplando características como plasticidade, grandes deformações, interações de contato, atrito, materiais de comportamento não-linear e geometrias complexas. Também permite a simulação de problemas termomecânicos, como transferência de calor, dilatação térmica e análise de fluxo de fluidos. Adicionalmente, o software proporciona o recurso de realizar acoplamentos entre diferentes análises, como acoplamento termo estrutural, acoplamento fluido-estrutura, e acoplamento eletromagnético-estrutural.

O software possui um plano gratuito, o *ABAQUS Learning Edition*, e oferece suporte a modelos estruturais de até 1.000 nós. Para a obtenção de uma versão completa, é necessário solicitar uma cotação mais específica às necessidades desejadas (3DS, 2023).

- COMSOL MULTIPHYSICS ®

O software COMSOL Multiphysics® é uma plataforma completa de simulação multifísica que utiliza o método de elementos finitos como uma das principais técnicas numéricas para resolver problemas complexos de engenharia e ciências aplicadas. O software oferece ferramentas de modelagem geométrica que permitem criar geometrias complexas para representar estruturas, dispositivos, sistemas e fenômenos físicos diversos. É capaz de gerar automaticamente a malha de elementos finitos a partir da geometria do modelo e a qualidade da malha pode ser ajustada para



obter resultados mais precisos e eficientes. Os usuários podem atribuir propriedades físicas aos materiais e outras condições, como coeficientes de elasticidade, condutividade térmica, permeabilidade magnética, coeficientes de difusão, entre outros. Além disso, o COMSOL permite definir condições de contorno e carregamentos, como fixações, pressões, temperaturas, campos elétricos e campos magnéticos. Além disso, suporta análises estáticas e dinâmicas, permitindo que os usuários estudem o comportamento estrutural e a resposta em frequência de sistemas em diferentes condições de carregamento.

Uma das principais vantagens do COMSOL é a capacidade de resolver problemas de acoplamento multifísico, onde diferentes fenômenos físicos interagem, como análise fluido-estrutura, termo-estrutura, eletromagnético-estrutura, entre outros (COMSOL MULTIPHYSICS, 2023). O software possui uma versão de testes gratuita por período limitado, geralmente por 30 dias. A COMSOL oferece diferentes licenças e opções de assinatura, cada uma com diferentes níveis de funcionalidade e suporte, e para ter acesso aos valores é necessário solicitar cotação.

- SOFTWARES CAD

O SolidWorks, Solid Edge, Autodesk Inventor e Siemens NX são softwares focados em CAD (*Computer-Aided Design*) amplamente utilizados para modelagem 3D, mas também possuem funcionalidades de análise por elementos finitos. É uma opção interessante para engenheiros e projetistas que desejam realizar análises estruturais básicas e rapidamente avaliar o desempenho mecânico de seus projetos diretamente dentro do mesmo ambiente CAD. As funcionalidades de análise por elementos finitos abrangem análises estáticas e de movimento, com o objetivo de avaliar o comportamento estrutural de peças e conjuntos sob diferentes condições de carregamento e restrições. Algumas das capacidades desses softwares relacionadas à análise por elementos finitos incluem a definição de materiais, condições de contorno, fixações, carregamentos e outras propriedades físicas relevantes para a análise, além da criação de malhas a partir dos modelos 3D criados.

O SolidWorks, com o módulo adicional *SolidWorks Simulation*, oferece uma ampla gama de recursos avançados para análises estruturais complexas. O SolidWorks possui opção *SOLIDWORKS Student Edition*, que é uma versão destinada a estudantes e educadores. Esta versão oferece funcionalidades completas

do software, mas é limitada ao uso acadêmico e de pesquisa, e geralmente, os alunos podem obter a *Student Edition* através de suas instituições educacionais. Também existe o plano *Free Trial*, que é oferecido por um período de teste gratuito, permitindo que os usuários utilizem o software por 30 dias. Para os demais planos é necessário solicitar cotação (“SOLIDWORKS”, 2023).

O Solid Edge oferece diferentes planos, como o *Solid Edge Free Trial* que é oferecido um período de teste gratuito por 30 dias. O Solid Edge 2D Drafting, que também é uma versão gratuita focada em desenhos 2D, oferece ferramentas básicas para criar e editar desenhos técnicos em duas dimensões. Além disso, há o *Solid Edge Student Edition* destinado a estudantes e educadores, oferecendo acesso ao software para fins educacionais e de aprendizado, incluindo funcionalidades completas do software para casos específicos (“Solid Edge - Siemens”, 2023).

O software Autodesk Inventor possui a versão de teste por 30 dias, o *Autodesk Inventor Free Trial*, e também oferece opções gratuitas para estudantes e educadores por meio do programa educacional, onde é possível acessar as ferramentas Autodesk, incluindo o Inventor, para fins de aprendizado e ensino. O plano pago possui mensalidade de R\$1.100 ou anuidade de R\$8.825 (“AUTODESK”, 2023).

Com relação ao software Siemens NX, são oferecidas licenças educacionais ou versões de avaliação temporárias para estudantes e educadores que desejam explorar o software por um período limitado ou para fins educacionais, e para os demais planos é necessário solicitar cotação (“NX CAM software”, 2023).

## 5.7 PROPRIEDADES E SELEÇÃO DE MATERIAIS

- JMATPRO®

O JMatPro® combina modelos matemáticos e bancos de dados termodinâmicos para prever propriedades dos materiais e comportamentos em diferentes condições. Com base nos bancos de dados e modelos, o software pode prever uma ampla variedade de propriedades dos materiais, como módulo de elasticidade, coeficiente de expansão térmica, resistência à tração, resistência à fadiga, entre outras. Ele também pode prever a formação de diferentes fases em ligas metálicas, bem como a evolução de microestruturas sob diferentes condições. O software é capaz de simular o comportamento de materiais em temperaturas

elevadas, permitindo avaliar a resistência, a deformação e outras propriedades em condições extremas. Permite simular ciclos térmicos, como tratamentos térmicos, solidificação e resfriamento, para entender como esses processos afetam as propriedades do material. Há também a possibilidade de construção de diagramas de fases que representam as fases presentes em função da temperatura e composição, e também realiza cálculos termodinâmicos complexos para prever equilíbrios de fases e propriedades em sistemas multicomponentes. Assim, com base nas previsões de propriedades, o software ajuda no design de ligas metálicas otimizadas para aplicações específicas.

O software possui uma versão gratuita de demonstração, enquanto a versão paga necessita de solicitação de cotação. Além disso, o JMatPro® oferece a possibilidade de consultoria, caso a necessidade do usuário seja uma função específica do software (“JMatPro®”, 2023).

- ANSYS GRANTA

O Ansys Granta oferece dois tipos de produto, mas que atendem a públicos e finalidades diferentes. O software Granta EduPack é uma ferramenta educacional projetada para auxiliar educadores e estudantes na compreensão do processo de decisão em seleção de materiais para projetos de engenharia, design e ciência dos materiais. O software fornece um banco de dados abrangente de materiais, incluindo informações sobre propriedades mecânicas, térmicas, elétricas, magnéticas, dentre outras. Este software auxilia na compreensão dessas propriedades e em como as variações dessas influenciam na aplicação e uso do material.

O Granta EduPack permite que os usuários pesquisem, comparem e selecionem materiais adequados para aplicações específicas, e isso é feito levando em consideração a possível utilização de índices de mérito, incluindo propriedades como resistência, dureza, durabilidade, além de parâmetros de custo e sustentabilidade. Os usuários podem comparar propriedades de diferentes materiais lado a lado, facilitando a visualização das vantagens e desvantagens de cada opção. O software inclui informações sobre a sustentabilidade dos materiais, permitindo que os usuários avaliem o impacto ambiental ao longo do ciclo de vida dos produtos. Além disso, oferece recursos educacionais, como estudos de caso, exemplos e exercícios, para auxiliar educadores na apresentação de conceitos de ciência dos materiais. O

Ansys Granta EduPack fornece uma versão de demonstração gratuita com funcionalidades limitadas, de forma que para demais acessos é necessário solicitar cotação (“Ansys Granta EduPack”, 2023).

O ANSYS Granta Selector é uma ferramenta mais avançada projetada para apoiar a seleção de materiais em contextos de engenharia e design de produtos. Oferece uma plataforma de análise avançada e seleção de materiais com base em requisitos específicos de projeto, permitindo a comparação de materiais, levando em consideração múltiplos critérios técnicos, econômicos e ambientais. É usado em empresas e indústrias para tomar decisões informadas sobre a escolha de materiais em projetos de engenharia e design de produtos, levando em conta fatores técnicos e de negócios. Para acessar o ANSYS Granta Selector é necessária a solicitação de orçamento. (“Ansys Granta Selector”, 2023).

## 5.8 CONFORMAÇÃO MECÂNICA

- DEFORM 3D E QFORM

O DEFORM-3D possui como aplicações típicas o forjamento em matriz fechada, forjamento em matriz aberta, usinagem, laminação, extrusão, trefilação e compactação. O QForm destina-se à simulação e otimização de forjamento a frio, morno e quente, forjamento em matriz aberta, laminação, extrusão de perfil e outros processos de conformação metálica. Uma variedade de módulos especiais adicionais, como previsão de microestrutura, simulação de tratamento térmico, dentre outros, podem ser implementados no programa. O programa possui interface direta com o software JMatPro para criação de modelos reológicos de materiais e criação de diagramas TTT (*Time-Temperature-Transformation*) e CCT (*Continuous Cooling Transformation*) para simulação de tratamento térmico.

O DEFORM 3D e o QForm são ambos softwares de simulação numérica usados na indústria de fabricação para modelar processos de conformação plástica de metais e ligas. Estes softwares são amplamente utilizados na indústria de fabricação, especialmente na produção de componentes metálicos e de ligas, para prever e otimizar o comportamento do material durante processos de deformação plástica. Os softwares permitem criar modelos virtuais tridimensionais de processos de conformação mecânica, incluindo a descrição das peças, das ferramentas e das

máquinas envolvidas nos processos. Eles simulam a deformação plástica do material durante o processo de conformação e calculam as mudanças na forma, tamanho e distribuição de tensões e deformações ao longo do material. Também consideram a geração de calor decorrente do processo de deformação e calculam a distribuição de temperatura no material e nas ferramentas.

Com base nas simulações, os softwares podem prever o tamanho de grão final, as propriedades mecânicas resultantes, e, também podem calcular as tensões residuais presentes no material após o processo de deformação, parâmetro importante para prever a estabilidade dimensional e o comportamento subsequente da peça. Além disso, também rastreiam o fluxo de material durante o processo, permitindo identificar regiões de desgaste das ferramentas, potenciais problemas de formação e possíveis defeitos na peça.

O DEFORM 3D oferece uma versão com tempo de uso e funções limitadas mediante solicitação por meio do preenchimento de um formulário. A licença educacional permanente é possível obter por 9.000 USD e, para as demais licenças não foram encontradas as informações até a finalização deste trabalho (“DEFORM 3D - Simulação de Fluidos & Forjamento”, 2023).

O QForm fornece serviço de consultoria em que os valores são definidos por meio de negociação, e também possuem treinamentos e a *QForm Online School* destinada a engenheiros envolvidos em processos de conformação de metais, com eventos online e cursos para prática de simulação com licença de teste. O curso introdutório é gratuito e o básico tem o valor de 200,00 EUR. Para obtenção da licença para utilização do software e teste gratuito é necessário solicitar cotação (“QForm - Metal Forming Simulation Software”, 2023).

## **5.9 FUNDIÇÃO**

Cada um dos softwares relacionados com fundição - Magmasoft®, Click2Cast, SolidCast, QuickCast e Flow-3D - desempenha um papel essencial na indústria, permitindo a simulação e otimização de processos complexos de moldagem e solidificação de materiais metálicos. Eles capacitam os engenheiros a preverem problemas potenciais, aprimorar o projeto dos moldes, otimizar as configurações do

processo e melhorar a qualidade dos produtos finais, resultando em eficiência aprimorada, redução de custos e maior confiabilidade nos resultados.

- MAGMASOFT ®

O Magmasoft é uma ferramenta avançada que se concentra em simulações detalhadas de fundição dos mais diversos tipos. Ele prevê o comportamento do metal fundido desde o enchimento do molde até o resfriamento e solidificação, permitindo a identificação de possíveis defeitos, como porosidade e rechupe, com o objetivo de otimizar as configurações do processo para melhorar a qualidade do produto final.

Para as licenças do software é necessário solicitar cotação. A Magma oferece a *MAGMAacademy* para usuários do MAGMASOFT®, um programa com treinamentos técnicos para o uso da simulação em processos de fundição específicos (“MAGMASOFT®”, 2023).

- CLICK2CAST

O Click2Cast também é usado para simulação de fundição, fornecendo uma interface amigável e análise rápida de diferentes cenários de projeto. Ele permite a visualização em 3D do fluxo de metal fundido, solidificação e identificação de defeitos potenciais, auxiliando na tomada de decisões informadas para otimizar o processo de fundição. Para adquirir informações sobre os preços e licenças é necessário solicitar orçamento (“Click2Cast - RESCANM”, 2023).

- SOLIDCAST

O SolidCast também é voltado para simulações do processo de fundição, com enfoque em fundição em moldes de areia. Ele aborda o fluxo do metal líquido e o preenchimento do molde, além da solidificação e contração do material. Isso auxilia na previsão de possíveis problemas de enchimento e resfriamento, permitindo ajustes no projeto do molde. O software possui um módulo extra, o FLOWCast que permite a visualização de uma simulação do processo de vazamento de metal no molde. Para obter detalhes acerca dos valores e licenças, é necessário requisitar um orçamento (“Casting Simulation”, 2023).

- QUICKCAST

O QuickCast é um software direcionado para a criação de padrões de fundição, que são os modelos usados para criar moldes e machos. Ele é capaz de simular todo o processo de fundição, desde o preenchimento até a solidificação, incluindo a previsão de defeitos. Ele ajuda na geração rápida de padrões precisos, considerando fatores como encolhimento e características de fluxo do metal fundido, contribuindo para uma produção eficiente e com menos desperdício. Informações sobre as licenças e valores para ter acesso ao software não foram encontradas até o fechamento deste trabalho (“QuikCAST”, 2023).

- FLOW-3D

O Flow-3D, embora seja utilizado em diversas áreas, também tem aplicações na simulação de processos de fundição. Ele permite modelar o fluxo do metal líquido no molde, considerando aspectos como turbulência e interações fluidas, auxiliando na otimização do processo de enchimento. Para receber informações sobre os preços e licenças, é preciso solicitar um orçamento (“FLOW-3D”, 2023).

## **5.10 SOLDAGEM**

- SIMUFACT WELDING

O software tem a finalidade de simplificar a detecção de possíveis irregularidades frequentes durante o processo de soldagem, como a formação de tensões residuais que podem resultar em deformações nas áreas soldadas de placas e tubos, entre outros exemplos. Além disso, as informações obtidas por meio da simulação de soldagem podem ser aplicadas na simulação de outros processos aos quais as peças soldadas serão submetidas. A ferramenta possibilita a interconexão de dados originados de diversas simulações, apresentando a capacidade de sequenciar soluções. O software é apropriado para a execução de simulações envolvendo diferentes técnicas de soldagem, incluindo soldagem a arco elétrico, processos com ou sem fixação e soldagem por ponto, entre outras abordagens.

O software Simufact também possibilita a criação de modelos 3D das peças, em que é possível escolher e especificar os materiais envolvidos na soldagem, considerando suas propriedades térmicas, mecânicas e metalúrgicas. Ele simula o

processo de aquecimento, fusão e resfriamento durante a soldagem, fornecendo informações sobre a distribuição de temperatura nas peças e ao redor das zonas de soldagem, além de avaliar deformações e tensões resultantes, e também prever possíveis defeitos, considerando mudanças metalúrgicas que ocorrem na região de soldagem (HEXAGON, 2023). Para esse software, até o fechamento deste trabalho, não foram encontradas informações específicas dos planos de assinatura disponíveis.

- **SYSWELD**

O Sysweld é um software que oferece recursos para modelar, simular e analisar processos de soldagem. Ele permite considerar diversos aspectos, como os efeitos térmicos, mecânicos e metalúrgicos resultantes da soldagem. Com ele é possível simular uma variedade de técnicas de soldagem, incluindo arco elétrico e laser, por exemplo. Também é possível definir geometrias, materiais, parâmetros de processo e condições de contorno, e considera fenômenos físicos, como condução de calor, transferência de massa e mudanças de fase. Ele também é capaz de prever a deformação, tensão residual e distorção resultantes do processo de soldagem. Assim, o software pode ser utilizado para avaliar a qualidade das juntas soldadas, otimizar os parâmetros de processo, prever defeitos potenciais e garantir a integridade estrutural após a soldagem. Para acesso ao software é necessário solicitar orçamento (ESI GROUP, 2023).

- **ANSYS WELDING**

O *ANSYS Welding* é uma extensão da plataforma ANSYS, focada em simulações de processos de soldagem. Ele oferece uma abordagem abrangente para modelagem e análise de processos de soldagem, considerando efeitos termomecânicos e metalúrgicos. O software permite simular diferentes técnicas de soldagem, como arco elétrico, laser e fricção. O programa analisa a distribuição de temperatura, taxa de resfriamento, deformação, tensão residual e comportamento da junta soldada. Além disso, ele suporta a análise de acoplamento de fenômenos físicos, como condução de calor e transferência de massa, o que possibilita a avaliação dos efeitos da soldagem em componentes e estruturas.



Como informado anteriormente, o software possui uma versão educacional gratuita, mas com recursos limitados, de forma que requer a submissão de um formulário de solicitação sujeito a aprovação. Já para os demais planos é necessário solicitar cotação (JOHN SWANSON, 2023).

## 5.11 CORROSÃO

- COMSOL MULTIPHYSICS

O *COMSOL Multiphysics* possui um módulo específico para análise e modelagem de corrosão, que permite modelar processos eletroquímicos, como corrosão galvânica e corrosão por pites, considerando fatores como potencial eletroquímico, distribuição de corrente e interações entre diferentes materiais. O software oferece a opção de considerar múltiplos fenômenos físicos, como transporte de íons, fluxo de fluidos e transferência de calor, o que possibilita análises mais precisas. Como informado anteriormente, o software possui uma versão de testes gratuita por período limitado, geralmente disponível por 30 dias (COMSOL MULTIPHYSICS, 2023).

- ABAQUS

O software ABAQUS oferece um módulo específico para a modelagem e análise de corrosão, chamado *ABAQUS/Corrosion*. Com esse módulo é possível simular e avaliar os efeitos da corrosão eletroquímica em materiais e estruturas, além de oferecer opções de modelar diferentes tipos de corrosão. O software permite a definição de taxas de corrosão, distribuição de potenciais eletroquímicos, interações entre diferentes materiais, efeitos mecânicos da corrosão e outros fatores. Ele também pode ser acoplado a outras análises, como análise estrutural e térmica, permitindo uma abordagem mais abrangente da influência da corrosão nas propriedades e desempenho dos materiais. Conforme informado anteriormente, o software possui um plano gratuito, o *ABAQUS Learning Edition*, que oferece suporte a modelos estruturais de até 1.000 nós (3DS, 2023).

- THERMOCALC

O Thermo-Calc tem a capacidade de ser empregado na análise da susceptibilidade de ligas a diferentes formas de corrosão, contribuindo para o desenvolvimento de novas ligas ou o desenvolvimento de barreiras para reduzir a existência dessa suscetibilidade. Para acesso ao software, como descrito anteriormente, a ferramenta oferece um pacote educacional voltado para o ensino e aprendizagem de termodinâmica e teoria cinética, com funções limitadas, mas que inclui uma coleção de banco de dados de dez demonstrações e um material educacional para alunos e educadores. Para demais opções de acesso é necessário solicitar cotação (“Computational Materials Engineering - Thermo-Calc Software”, 2023).

## 5.12 DESGASTE

- LAMMPS

O LAMMPS é um software de simulação molecular que permite simular o comportamento de sistemas atômicos ou moleculares, incluindo a interação entre átomos e moléculas, e também pode ser utilizado para análise de desgaste de materiais. Para essa análise, ele pode ser utilizado para simular interações de superfícies em movimento relativo, estudando como as forças interatômicas afetam a fricção, desgaste e propriedades de deslizamento entre materiais. Também pode ser empregado para modelar a evolução de superfícies em micro e nanoescalas, podendo analisar os fenômenos de atrito e desgaste. O software possui distribuição gratuita e os usuários possuem acesso ao código fonte (CROZIER, 2023).

- ANSYS MECHANICAL

O *ANSYS Mechanical*, como já descrito em tópicos anteriores, é uma ferramenta de simulação de elementos finitos que permite modelar e analisar o comportamento de estruturas e materiais sob diferentes condições de carga, temperatura e ambiente. Para a análise de desgaste de materiais, o *ANSYS Mechanical* pode ser utilizado para simular o contato entre superfícies em movimento, considerando fenômenos como atrito e desgaste. O software permite modelar interações entre superfícies sólidas, analisar as distribuições de tensão e deformação

resultantes do contato e identificar regiões propensas a desgaste excessivo. Além disso, o *ANSYS Mechanical* oferece a capacidade de aplicar diferentes tipos de cargas, ciclos de carregamento e condições ambientais para avaliar o desempenho de materiais em situações reais, a análise pode incluir a previsão de desgaste abrasivo, e outros tipos de desgaste que possam afetar componentes em operação (JOHN SWANSON, 2023).

### **5.13 TRATAMENTO EBSD (*Electron Backscatter Diffraction*)**

- MTEX

O MTEX é uma biblioteca de software de código aberto usada para análise e visualização de dados obtidos pela técnica de EBSD. Ele oferece uma ampla gama de ferramentas para processar, analisar e interpretar dados de orientação cristalina e microestrutura. O MTEX permite a visualização de mapas de orientação, figuras de polo, análises estatísticas de dados e modelagem de texturas, com isso é possível entender as características da microestrutura, como a distribuição de orientações, orientação dominante e possíveis deformações cristalinas (“MTEX”, 2023).

- ATEX

O ATEX é um software especializado na análise e interpretação de dados de EBSD em amostras de materiais anisotrópicos. Ele auxilia na reconstrução precisa de orientações cristalinas e mapeamento de tensões através de técnicas de EBSD. O ATEX oferece ferramentas para calcular campos de tensões a partir de informações de difração, permitindo a análise de variações locais de deformação em materiais. O software é gratuito para uso não comercial, e o orçamento para empresas privadas precisa ser solicitado (B. BEAUSIR, 2023).

- EDAX APEX™

O EDAX APEX™ é um software usado para análise e interpretação de dados de EBSD, especialmente na caracterização de materiais cristalinos. Ele oferece ferramentas para identificação de fases e inclusões, análise de textura, mapeamento de orientações, e análise de distribuição, contornos e os limites relacionados aos grãos do material. Também é usado para investigar o comportamento de grãos

individuais e avaliar padrões de crescimento cristalino, além da caracterização de deformações e tensões e simulação de difração. Para ter acesso ao software é necessário solicitar orçamento aos planos disponíveis. Normalmente, o software APEX é fornecido como parte dos sistemas EDX da EDAX e está vinculado ao hardware específico fabricado por essa empresa. Isso significa que, em muitos casos, a utilização do software APEX está associado ao uso dos equipamentos da EDAX, que é uma empresa fabricante de detector EBSD (“APEX Software”, 2023).

- AZtechHKL

O AZtechHKL é um software de análise de dados de EBSD que se concentra na identificação de fases e análise de texturas em amostras policristalinas. Ele permite a análise de dados de difração para identificar as diferentes fases presentes na amostra e avaliar suas orientações cristalinas. Além de avaliar as transformações de fases, possibilita o estudo dos limites de grão e contornos de grão e análise de deformação dos materiais. Para obter acesso ao software, é preciso requisitar um orçamento (“AZtechHKL - Nanoanalysis - Oxford Instruments”, 2023).

## 5.14 ANÁLISE DE IMAGENS

- IMAGEJ

O ImageJ é uma plataforma de processamento de imagem de código aberto que oferece uma variedade de ferramentas para análise e manipulação de imagens. Ele permite a realização de operações básicas, como ajuste de contraste e filtragem, bem como análises mais avançadas, como medições quantitativas de objetos, análise de textura e segmentação de imagens. O software permite a análise detalhada de microestruturas de materiais metálicos. Isso inclui a medição de tamanhos de grãos, a identificação de fases e inclusões, e a quantificação de porosidade, além de análise de rugosidades e texturas de superfície (“ImageJ”, 2023).

- MIPAR

O MIPAR é um software específico para análise de imagens metalográficas, especialmente em metalurgia e ciência dos materiais. Ele oferece ferramentas especializadas para segmentar fases, medir tamanhos de grãos, analisar distribuição

de porosidade e identificar inclusões. O MIPAR é capaz de medir tamanhos de grãos em amostras metalográficas, permite identificar diferentes fases presentes em uma amostra de material metálico, como diferentes ligas ou constituintes cristalinos, e também é usado para quantificar a porosidade e analisar a distribuição de poros. O software também permite a análise de texturas cristalinas em materiais metálicos, fornecendo informações sobre a distribuição de orientações dos grãos, além de ser capaz de analisar imagens em três dimensões, permitindo a caracterização detalhada da microestrutura em amostras complexas. O software possui uma versão de acesso livre de 14 dias, e para demais formas de licença é necessário solicitação de orçamento (MIPAR, 2023).

- **OPENCV**

O OpenCV é uma biblioteca de código aberto utilizada para visão computacional e processamento de imagens. Com o software é possível inspecionar visualmente peças e componentes metálicos em busca de defeitos, como rachaduras, desgastes e irregularidades, podendo ser usado para avaliar a textura e a rugosidade da superfície desses materiais. Além disso, pode ser utilizado para reconhecer e classificar objetos e características, como identificação de diferentes tipos de materiais ou peças e amostras metalúrgicas. Também é possível segmentar imagens para isolar áreas de interesse, como partículas, grãos ou inclusões em materiais metálicos, e contar elementos específicos em uma imagem (BRADSKI, 2023).

## **5.15 CRIAÇÃO DE GRÁFICOS E TRATAMENTO DE DADOS**

- **ORIGIN LAB**

O Origin é um software dedicado à análise de dados e criação de gráficos complexos e personalizados. Ele é amplamente usado em pesquisa científica e engenharia para visualização de dados complexos e criação de gráficos personalizados. Possui recursos estatísticos avançados, incluindo ajuste de curvas, regressão, testes de hipóteses, análise de variância (ANOVA), análise de séries temporais, entre outros. Oferece o recurso de integrar com outras ferramentas, como MATLAB e Excel, para importar e exportar dados e resultados de análises.

O software oferece diversas opções de assinatura, tanto para estudantes, professores e funcionários de instituições acadêmicas em que a anuidade varia de 210 USD até 900 USD. Existe também uma versão para estudante com funções limitadas por 69 USD a anuidade, além da versão *Learning Edition*, também voltada para estudantes e gratuita por 6 meses. A versão comercial e individual surge partir de 465 USD. Para demais assinaturas é necessário solicitar cotação (“OriginLab”, 2023).

- MICROSOFT EXCEL

O software Microsoft Excel é uma ferramenta de planilha eletrônica que oferece recursos de plotagem gráfica para visualização e análise de dados. Ele permite criar uma variedade de tipos de gráficos para representar informações de forma mais compreensível, e possui funções e ferramentas estatísticas básicas que permitem realizar análises simples, como cálculos de média, desvio padrão e gráficos básicos, também possui recursos estatísticos avançados, mas com limitações.

O Excel fornece diferentes planos, existe o *Microsoft 365 Personal* por R\$ 17,00 por mês para universitários, o *Microsoft 365 Family* de R\$449,00/ano, além dos *Microsoft 365 Business Basic* por R\$ 27,43 usuário/mês, e o *Microsoft 365 Business Premium* por R\$ 140,80 usuário/mês. Também é possível utilizar o plano gratuito durante 1 mês (“Microsoft Excel”, 2023).

- LABPLOT

O LabPlot é um software de código aberto, e é extensível por meio do suporte a plugins e scripts, permitindo que os usuários personalizem o software de acordo com suas necessidades específicas. É focado na criação de gráficos e análise de dados, especialmente para fins acadêmicos e de pesquisa. Oferece recursos específicos para análises científicas, que inclui ajustes de curvas, análises estatísticas, ajuste de dados experimentais e criação de gráficos técnicos. Possui uma ampla gama de ferramentas de análise estatística que permitem realizar cálculos, ajustes de curvas, regressões, estatísticas descritivas, dentre outros para extrair informações relevantes dos dados (“LabPlot – Scientific plotting and data analysis”, 2023).

## 5.16 ANÁLISE DE DADOS E TRATAMENTO DE DADOS

- MATLAB (*Matrix Laboratory*)

O MatLab (abreviação de *Matrix Laboratory*) é uma plataforma de programação e ambiente de desenvolvimento projetado para a computação numérica e análise técnica. Ele oferece uma ampla variedade de ferramentas e funcionalidades para análise e tratamento de dados em diferentes áreas, incluindo ciência, engenharia e módulo voltado à pesquisa.

Pode ser utilizado para executar operações numéricas com grandes conjuntos de dados. Ele oferece funções avançadas para operações matemáticas, como cálculos matriciais, álgebra linear e transformações de Fourier. Além disso, o programa permite a criação de gráficos e plotagens para representar visualmente os resultados de análises, ajudando a entender padrões, tendências e informações relevantes nos dados. Também possui funções estatísticas embutidas, como cálculos estatísticos básicos, como médias e desvios padrão, além de histogramas e gráficos de distribuição, testes de hipóteses, regressão e análise de variância. Também oferece bibliotecas e ferramentas para desenvolver algoritmos de aprendizado de máquina e realizar análises de dados preditivos e classificatórios.

O MATLAB oferece diferentes tipos de licença, desde a anual estudantil por 55 USD, a licença individual não estudantil por 95 USD, além da acadêmica para instituições por 275 USD (THE MATHWORKS, 2023).

- PYTHON

O python é uma linguagem de programação utilizada para desenvolvimento de softwares, análise de dados, automação e aprendizado de máquina. É uma linguagem de código aberto, conhecida por sua sintaxe legível e fácil de aprender. É equipada com uma série de bibliotecas e frameworks voltadas para análise e tratamento de dados.

Possui bibliotecas de análises de dados como Pandas e *NumPy* que fornecem estruturas de dados eficientes para manipulação, análise e processamento de dados tabulares e matriciais. Para visualização de dados, há bibliotecas como *Matplotlib* e *Seaborn* que permitem criar gráficos e visualizações que ajudam a entender padrões e tendências nos dados. Também é possível fazer análises estatísticas descritivas

básicas, como média, mediana, desvio padrão, quartis e percentis, para entender a distribuição e tendências dos dados, com a biblioteca *SciPy* é possível realizar testes estatísticos mais avançados como hipóteses estatísticas. Além disso, através de bibliotecas para aprendizado de máquina, como o *Scikit-learn* permite realizar análises estatísticas avançadas, testes de hipóteses, ajuste de curvas e regressões (SCHWARZ; CHAPMAN; MCDONNELL FEIT, 2023).

## 5.17 ANÁLISE DE CICLO DE VIDA

- OPENLCA

O OpenLCA é um software de código aberto dedicado à análise de ciclo de vida de materiais e produtos. Ele é projetado para avaliar os impactos ambientais de diferentes estágios do ciclo de vida, desde a extração de matérias-primas até o descarte final. Uma das principais características do OpenLCA é sua capacidade de modelar fluxos de materiais, energia e processos industriais em uma estrutura de análise de ciclo de vida. Ele permite a criação de inventários de ciclo de vida detalhados, que incluem dados sobre emissões, consumos de recursos, uso de energia e demais indicadores ambientais.

O software oferece uma interface gráfica intuitiva para criar e editar modelos de análise de ciclo de vida. Os usuários podem definir diferentes cenários de análise, alternativas de produtos e opções de processamento. Possui uma ampla biblioteca de categorias de impacto ambiental e modelos de caracterização, permitindo avaliar uma variedade de aspectos ambientais, como mudança climática, uso de recursos naturais e poluentes ("openLCA", 2023).

- SIMAPRO

O SimaPro é utilizado para avaliar o desempenho ambiental e social de materiais, produtos e processos ao longo de todo o ciclo de vida. Os usuários podem criar modelos de análise de ciclo de vida que abrangem desde a extração de matérias-primas até a fabricação, uso, descarte e reciclagem. É possível definir diferentes cenários e considerar diversas variáveis como processos de produção, transporte, consumo de energia, emissões atmosféricas e uso de recursos naturais.



O SimaPro oferece diferentes categorias de impacto ambiental e métodos de caracterização, permitindo avaliar os aspectos ambientais associados à produção e uso de materiais metálicos. Ele também permite comparar diferentes alternativas, como diferentes tipos de materiais, processos de produção ou estratégias de reciclagem, para entender o impacto ambiental relativo, auxiliando assim na tomada de decisões.

O software oferece diferentes tipos de licença, como o *SimaPro Classroom* destinado para múltiplos usuários e vitalício por 6.790 EUR, o *SimaPro Faculty* ideal para o ensino por 3.750 EUR anualmente (PRÉ SUSTAINABILITY, 2023).

## 5.18 GERENCIADORES DE REFERÊNCIAS

- ENDNOTE/ENDNOTE BASIC

O EndNote e sua versão mais simplificada, o *EndNote Basic*, são ferramentas de gerenciamento de referências projetadas para auxiliar na organização e citação de fontes bibliográficas. O EndNote permite importar e armazenar referências de diversas fontes, como bases de dados acadêmicas e bibliotecas online. Ele oferece recursos para classificar e categorizar as referências, criar bibliografias automáticas e inserir citações em documentos de pesquisa de maneira adequada, seguindo os estilos de citação padrão. O *EndNote Basic* é uma versão baseada na web que oferece ferramentas para gerenciamento de referências, permitindo a sincronização de referências entre diferentes dispositivos e a criação de bibliografia. O EndNote possui licença estudantil por R\$757,00 e licença individual não estudantil por R\$ 1389,00 (ENDNOTE, 2023).

- ZOTERO

O Zotero é uma ferramenta de gerenciamento de referências de código aberto que oferece uma abordagem integrada para coletar, organizar e citar fontes bibliográficas. Ele permite aos usuários salvar referências diretamente de páginas da web, importar bibliografias de bases de dados acadêmicas e organizar as referências em coleções. Além disso, também oferece recursos de anotação e marcação de documentos, facilitando a identificação de informações relevantes. A integração com

processadores de texto permite a inserção de citações e criação de bibliografia de forma automática, conforme o estilo de citação escolhido (“Zotero”, 2023).

- **MENDELEY**

O Mendeley é um software que combina gerenciamento de referências com recursos de uma rede social acadêmica, e não possui custo de aquisição. Ele permite importar e organizar referências, bem como PDFs associados, além de fornecer recursos de anotação e marcação de documentos. O destaque do Mendeley é sua capacidade de criar perfis de pesquisadores e interagir com outros usuários, permitindo compartilhamento de referências, grupos de pesquisa e discussões colaborativas. Também possui a função de inserir citações e criar bibliografias em documentos de pesquisa, facilitando a escrita acadêmica (“Mendeley”, 2023).

## **5.19 BASES DE DADOS**

- **TOTAL MATERIA**

O Total Materia é um software que possui uma extensa base de dados que abrange uma ampla gama de materiais metálicos. Essa base de dados contém informações detalhadas sobre a composição química, propriedades mecânicas e propriedades físicas dos materiais. Os usuários podem procurar materiais por nome, composição química, propriedades específicas ou normas industriais. Uma das principais funcionalidades do Total Materia é a capacidade de comparar diferentes materiais lado a lado. Isso permite que engenheiros e projetistas escolham os materiais mais adequados para suas aplicações com base em critérios específicos, como resistência mecânica, ductilidade, condutividade térmica, etc. O software também fornece acesso a uma ampla gama de normas e especificações relacionadas a materiais, permitindo que os usuários encontrem facilmente informações sobre como os materiais são definidos e regulamentados em diferentes setores e países. A sua base de dados é atualizada regularmente para refletir as últimas informações e avanços em materiais, o que garante que os usuários tenham acesso a dados precisos e atualizados.

É possível ter acesso gratuito ao software durante 60 dias. O plano básico, destinado a um único usuário, tem um custo de 1.170 EUR, enquanto que para planos

de grupos e corporativos, é necessária uma solicitação de cotação (“Total Materia”, 2023).

- MATWEB

O MatWeb é um recurso online que oferece uma extensa base de dados de propriedades de materiais de forma gratuita, contém informações em forma de folhas de dados (datasheets) para mais de 170.000 materiais. Oferece uma ampla gama de informações e dados técnicos detalhados sobre diversos tipos de metais e ligas metálicas, e permite que os usuários acessem essas informações de várias maneiras diferentes. Os dados podem ser consultados sequencialmente, por tipo de material, com base em faixas de valores de propriedades, pela composição química, nome comercial ou fabricante. (“MatWeb”, 2023).

- MAKEITFROM

O MakeltFrom é um site gratuito, que oferece informações sobre as propriedades de materiais. Todos os dados fornecidos são de materiais genéricos amplamente reconhecidos internacionalmente. Isso implica que os materiais incluídos na base de dados são tipos de materiais que são comumente conhecidos e utilizados em escala global, em oposição a materiais especializados ou exclusivos. Esses materiais genéricos são aqueles que têm propriedades e características típicas para sua categoria e são frequentemente referenciados em normas e especificações da indústria. Para encontrar informações sobre um material específico no MakeltFrom, os usuários podem navegar na lista de materiais disponíveis ou usar a função de pesquisa no menu disponível. Além de buscar pelo nome do material, os usuários também podem pesquisar com base em valores específicos de propriedades, o que é útil ao procurar materiais que atendam a critérios de desempenho específicos. Uma característica útil é a capacidade de fazer comparações lado a lado entre dois materiais diferentes, permitindo que os usuários analisem e tomem decisões informadas ao escolher entre diferentes opções de materiais para suas aplicações específicas. (“MakeltFrom”, 2023).

## 6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Como visto no presente trabalho, a indústria metalúrgica desempenha um papel importante na produção de uma vasta gama de materiais e produtos essenciais para diversas aplicações. No âmbito dessa indústria, a otimização de processos, a análise de propriedades dos materiais e o desenvolvimento de ligas avançadas são fatores críticos para alcançar produtos de alta qualidade e desempenho. Nesse contexto, a utilização de softwares especializados desempenha um papel importante, pois melhora os fluxos de trabalho e potencializa a eficiência em várias etapas do ciclo produtivo. Ao adotar esses softwares, os usuários podem aprimorar a precisão das análises de propriedades dos materiais, simular condições complexas de processamento e modelar o comportamento dos diferentes cenários. Isso não apenas agiliza o processo de desenvolvimento, mas também reduz potencialmente os custos e os desperdícios.

Cada software possui suas próprias funcionalidades, vantagens e limitações. Diante disso, este trabalho teve como objetivo compilar as informações disponíveis, para que os profissionais da área possam economizar tempo e recursos na busca por uma ferramenta que atenda às suas exigências e necessidades. É importante observar que o objetivo central não envolveu uma análise comparativa entre os diferentes softwares. Em vez disso, o propósito foi fornecer um guia que permitisse aos leitores encontrar a ferramenta mais adequada às suas necessidades atuais.

Além disso, é relevante enfatizar a necessidade de manter a pesquisa em websites sendo constantemente atualizada. Isso se deve ao fato de que novas versões de softwares podem ser lançadas e informações atualizadas podem se tornar disponíveis ao longo do tempo.

Uma das principais barreiras encontradas neste trabalho reside no fato de que uma parte dos softwares investigados não apresentaram informações claras e concretas a respeito das licenças disponíveis e dos custos associados. A falta de informação nesse sentido limitou a capacidade de avaliar de maneira abrangente a viabilidade econômica e financeira dessas ferramentas. Além disso, vale destacar que não foi objetivo deste trabalho testar e utilizar todos os softwares em simulações ou estudos de casos, assim, não sendo possível fornecer uma avaliação prática das funcionalidades e eficácia de cada ferramenta citada.

Adicionalmente, destaca-se de que a qualidade das simulações e análises dependem intrinsecamente da precisão das informações contidas em suas bases de dados. As simulações de materiais, por exemplo, dependem da obtenção de dados confiáveis sobre propriedades fundamentais como condutividade térmica, coeficientes de expansão, módulos elásticos e propriedades mecânicas, entre outros. Uma base de dados que seja não apenas confiável, mas também abrangente, é fundamental para garantir que os valores utilizados nas simulações representam dados reais. Logo, a confiabilidade dos resultados obtidos através dessas ferramentas está intrinsecamente ligada à qualidade dos dados subjacentes. A busca por fontes confiáveis e a verificação da precisão dessas informações devem ser um aspecto central no processo de utilização dessas ferramentas.

Dessa forma, esse guia com exemplos de softwares para diferentes áreas do processo metalúrgico se mostrou importante para auxiliar profissionais, pesquisadores, estudantes e professores desse campo. Ao fornecer uma visão abrangente das opções disponíveis, desde a modelagem de processos até a análise de propriedades dos materiais, o guia ajuda os envolvidos a tomar decisões informadas e estratégicas na seleção das melhores soluções para suas necessidades específicas.

## REFERÊNCIAS

3DS. **Abaqus - Mechanical and Civil Engineering Simulation**. Disponível em: <<https://www.3ds.com/products-services/simulia/products/abaqus/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

ANAZAWA, R. M.; ABDALLA, A. J.; HASHIMOTO, T. M.; PEREIRA, M. S., “**Estudo comparativo das propriedades mecânicas em aços 4340 e 300M submetidos a tratamentos térmicos isotérmicos e intercríticos**”, Revista Brasileira de Aplicações de Vácuo, v.31 n.1-2, 2012.

**Ansys Granta EduPack**. Disponível em: <<https://www.ansys.com/products/materials/granta-edupack>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

**APEX Software**. Disponível em: <<https://www.edax.com/products/ebsd/apex-software-for-ebsd>>. Acesso em: 3 jul. 2023.

**AUTODESK**. Disponível em: <<https://www.autodesk.com.br/products/revit/overview?term=1-YEAR&tab=subscription>>. Acesso em: 12 jun. 2023.

A.V. Seabra, "**Metalurgia Geral - Vols. I e II**", ed. Laboratório Nacional de Engenharia Civil, Lisboa 1981.

**AZtechKL - Nanoanalysis - Oxford Instruments**. Disponível em: <<https://nano.oxinst.com/products/aztec/aztechkl>>. Acesso em: 3 ago. 2023.

B. BEAUSIR, J.-J. **ATEX**. Disponível em: <<http://www.atex-software.eu/>>. Acesso em: 25 jul. 2023.

BALDAM, Roquemar, VIEIRA, Estefano **Fundição: Processos e tecnologia correlatas**; São Paulo: Érica, 2013, 384 p.

BECERRA-VARGAS, M. **Controle de uma plataforma de movimento de um simulador de voo**. Tese (Doutorado) — Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

BLAHA, P.; SCHWARZ, K. **WIEN2k**. Disponível em: <<http://www.wien2k.at>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

BRADSKI, G. **OpenCV: Open Computer Vision Library**. Disponível em: <<http://opencv.willowgarage.com/wiki/>>. Acesso em: 25 jul. 2023.

BRANDENBURG, K.; PUTZ, H. **Match! - Phase Analysis using Powder Diffraction**. Disponível em: <<https://www.crystalimpact.com/match/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

**Casting Simulation**. Disponível em: <<https://www.castingsimulation.com/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

CENTENO, D. M. **Estudo das microestruturas e propriedades obtidas por tratamentos intercríticos e por tratamento de estampagem a quente em um aço Dual Phase classe 600**. Tese de Doutorado; Escola Politécnica da Universidade de São Paulo; São Paulo, 2018.

**Click2Cast - RESCANM**. Disponível em: <<https://rescanm.com.br/click2cast/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

**Computational Materials Engineering - Thermo-Calc Software**. Disponível em: <<https://thermocalc.com/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

COMSOL MULTIPHYSICS. **COMSOL - Software for Multiphysics Simulation**. Disponível em: <<https://www.comsol.com/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

CRISTIAN, B. et al. Approaches for the planning and implementation of Industry 4.0. **Periodicals of Engineering and Natural Sciences**, v. 7, n. 1, p. 375–380, 2019.

CROZIER, P. S. **LAMMPS Molecular Dynamics Simulator**. Disponível em: <<https://lammps.sandia.gov/index.html>>. Acesso em: 25 jul. 2023.

**DEFORM 3D - Simulação de Fluidos & Forjamento**. Disponível em: <<https://www.simulacoesprojetos.com.br/deform3d>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

DIAS, F. C. **Uso do software Image J para análise quantitativa de imagens de microestruturas de materiais**. Dissertação de Mestrado; INPE; São José dos Campos, 2008.

ENDNOTE. **EndNote**. Disponível em: <<https://endnote.com/>>. Acesso em: 28 jul. 2023.

ESI GROUP. **Welding & Assembly Simulation Software**. Disponível em: <<https://www.esi-group.com/products/sysweld>>. Acesso em: 10 ago. 2023.

**FactSage**. Disponível em: <<https://www.factsage.com/>>. Acesso em: 12 jun. 2023.

FILHO, P. J. DE F. **Introdução à modelagem e simulação de sistemas**. 2ª ed ed. [s.l: s.n.].

**FLOW-3D**. Disponível em: <<https://www.flow3d.com/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

GALLO-NETO, M. **Modelagem Farmacocinética e Análises de Sistema Lineares para a Predição de Concentração de Medicamentos no Corpo Humano**. Dissertação de Mestrado; Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2012.

GU, X. **PTCLabUserManual**. 2014.

HELMAN, H. e CETLIN, P. R., **Fundamentos da Conformação Mecânica dos Metais**, Ed. Artliber, 2005.

HEXAGON. **Simufact Welding**. Disponível em: <<https://www.simufact.com/simufactwelding-welding-simulation.html>>. Acesso em: 7 ago. 2023.

**ImageJ.** Disponível em: <<https://imagej.net/ij/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

**JMatPro®.** Disponível em: <<https://www.sentessoftware.co.uk/jmatpro>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

JOHN SWANSON. **Ansys - Engineering Simulation Software.** Disponível em: <<https://www.ansys.com/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

**LabPlot – Scientific plotting and data analysis.** Disponível em: <<https://labplot.kde.org/>>. Acesso em: 25 jul. 2023.

LEY, C., TIBOLT, M. FROMME, D. **Data-Centric Engineering in modern science from the perspective of a statistician, an engineer, and a software developer.** <https://doi.org/10.1017/dce.2020.2>

LUTTEROTTI, L. **MAUD - Materials Analysis Using Diffraction.** Disponível em: <<https://luttero.github.io/maud/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

**MAGMASOFT®.** Disponível em: <<https://www.magmasoft.com.br/pt/solucoes/magmasoft/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

**MakeItFrom.** Disponível em: < <https://www.makeitfrom.com/>>. Acesso em: 03 set. 2023.

MALVERN PANALYTICAL LTD. **HighScore Plus | XRD Analysis Software.** Disponível em: <<https://www.malvernpanalytical.com/en/products/category/software/x-ray-diffraction-software/highscore>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

MARIM, M. **Utilização do método dos elementos finitos para o cálculo da durabilidade de componentes mecânicos.** Dissertação de Mestrado; Universidade de São Paulo; São Carlos, 2009.

**Matcalc - Solid State and Kinetics Precipitation.** Disponível em: <<https://www.matcalc.at/index.php/about/features>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

**MatWeb.** Disponível em: < <https://www.matweb.com/>>. Acesso em: 03 set. 2023.

**Mendeley.** Disponível em: <<http://www.mendeley.com>>.

**Microsoft Excel.** Disponível em: <<https://www.microsoft.com/pt-pt/microsoft-365/excel>>. Acesso em: 28 jul. 2023.

MIPAR. **Image Analysis Software.** Disponível em: <<https://www.mipar.us/>>. Acesso em: 25 jul. 2023.

MOMMA, K. **VESTA - Visualization for Electronic and Structural Analysis.** Disponível em: <<https://jp-minerals.org/vesta/en/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

**MTEX.** Disponível em: <<https://mtex-toolbox.github.io/index>>. Acesso em: 25 jul. 2023.



**NX CAM software.** Disponível em: <<https://plm.sw.siemens.com/en-US/nx/manufacturing/cam-software/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

**openLCA.** Disponível em: <<https://www.openlca.org/>>. Acesso em: 25 jul. 2023.

**OriginLab.** Disponível em: <<http://www.originlab.com/>>. Acesso em: 26 jul. 2023.

**Pandat Software.** Disponível em: <<https://computherm.com/software>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

PRÉ SUSTAINABILITY. **SimaPro LCA.** Disponível em: <<https://simapro.com/>>. Acesso em: 29 jul. 2023.

**QForm - Metal Forming Simulation Software.** Disponível em: <<https://www.qform3d.com/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

**QuikCAST.** Disponível em: <<https://www.esi.com.au/software/quickcast>>. Acesso em: 20 ago. 2023.

RODRIGUEZ-CARVAJAL, J. **FullProf Suite Homepage.** Disponível em: <<https://www.ill.eu/sites/fullprof/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

RÜSSMANN, M. ET AL. **Future of Productivity and Growth in Manufacturing.** Disponível em: <[https://www.bcg.com/publications/2015/engineered\\_products\\_project\\_business\\_industry\\_4\\_future\\_productivity\\_growth\\_manufacturing\\_industries](https://www.bcg.com/publications/2015/engineered_products_project_business_industry_4_future_productivity_growth_manufacturing_industries)>. Acesso em: 12 jul. 2023.

SCHWARZ, J. S.; CHAPMAN, C.; MCDONNELL FEIT, E. **Python.** Disponível em: <<https://www.python.org/>>. Acesso em: 25 jul. 2023.

**Solid Edge - Siemens.** Disponível em: <<https://solidedge.siemens.com/pt-br/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

**SOLIDWORKS.** Disponível em: <<https://www.solidworks.com/pt-br>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

THE MATHWORKS. **MathWorks.** Disponível em: <<https://www.mathworks.com>>. Acesso em: 28 jul. 2023.

**Total Materia.** Disponível em: <<https://www.totalmateria.com/page.aspx?ID=Pricing&LN=PT>>. Acesso em: 03 set. 2023.

**VASP - Vienna Ab initio Simulation Package.** Disponível em: <<https://www.vasp.at/>>. Acesso em: 12 jul. 2023.

Wagih, M., Larsen, P.M. & Schuh, C.A. **Learning grain boundary segregation energy spectra in polycrystals.** *Nat Commun* 11, 6376 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41467-020-20083-6>

WILTGEN, Filipe. **Protótipos e prototipagem rápida aditiva sua importância no**

**auxílio do desenvolvimento científico e tecnológico.** In: Anais do 10º Congresso Brasileiro de Engenharia de Fabricação (COBEF), São Carlos-SP. 2019.

ZANGHELINI, G. M. **ESTUDO DE CENÁRIOS PARA O PÓS-USO DE UM COMPRESSOR DE AR BASEADO NA AVALIAÇÃO DO CICLO DE VIDA.** Dissertação de Mestrado; Departamento de Engenharia Sanitária Ambiental, Universidade Federal de Santa Catarina., Florianópolis, 2012.

**Zotero.** Disponível em: <<https://www.zotero.org>>. Acesso em: 25 jul. 2023.