

ESTUDO DOS PARÂMETROS DO MODELO DO CAMPO DE FASE NA MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE SOLIDIFICAÇÃO DE UMA SUBSTÂNCIA PURA NUM DOMÍNIO COMPUTACIONAL SUPER- RESFRIADO

Abner da Costa Assis, abner@metal.eeimvr.uff.br¹

Alexandre Furtado Ferreira, furtado@metal.eeimvr.uff.br²

Ingrid Meirelles Salvino, ingridsalvino@metal.eeimvr.uff.br³

¹ Universidade Federal Fluminense, EEIMVR, Av. dos Trabalhadores, 420, 27225-125, Volta Redonda, RJ, Brasil,

² Universidade Federal Fluminense, EEIMVR, Av. dos Trabalhadores, 420, 27225-125, Volta Redonda, RJ, Brasil,

³ Universidade Federal Fluminense, EEIMVR, Av. dos Trabalhadores, 420, 27225-125, Volta Redonda, RJ, Brasil.

Resumo: Modelos numéricos que possam simular o fenômeno de solidificação são importantes, visto que a solidificação está presente em quase todo o processo de fabricação de materiais. Entre estes modelos o Campo de Fase ficou conhecido como sendo uma técnica capaz de simular interfaces complexas, num sistema super-resfriado. Este trabalho tem como objetivo o estudo do Modelo do Campo de Fase, pois este tem se tornado uma ferramenta popular para a simulação e modelagem de estruturas dendríticas. Estruturas que influenciam fortemente as propriedades dos produtos obtidos pelo processo de solidificação. Para uma substância pura o modelo utiliza duas equações de estado: equação de fase e energia, que são acopladas pelos seus termos fontes. Neste trabalho, serão apresentadas diversas simulações do crescimento dendrítico, objetivando uma relação qualitativa entre as formas das dendritas apresentadas e os parâmetros físicos do Modelo do Campo de Fase. Entre estes estudos devemos citar a importância da fonte de ruídos para as ramificações laterais das dendritas em algumas simulações.

Palavras-chave: Campo de Fase, solidificação, dendrita, modelagem.

1. INTRODUÇÃO

A produção de quase todos os objetos produzidos pelo homem envolve a solidificação em algum estágio do seu processo de fabricação. A solidificação é importante, porque é o principal fenômeno do processo de fundição, o qual é um método muito econômico. As estruturas que são resultantes desse processo: as dendritas influenciam drasticamente as propriedades dos produtos obtidos via processo de solidificação.

Como todas as transformações de fase, a solidificação se processa em duas etapas sucessivas: nucleação e crescimento da nova fase em meio à anterior. Assim sendo, o termo nucleação traduz o modo pelo qual a fase sólida surge de maneira estável, no seio da fase líquida, sob a forma de pequenos núcleos. Por outro lado, o termo crescimento traduz o modo pelo qual esses núcleos crescem sob a forma de cristais ou grãos cristalinos. A nucleação pode acontecer sob as duas seguintes condições:

a) Nucleação heterogênea – a fase sólida surge em meio à fase líquida, contando com a contribuição energética de agentes estranhos ao sistema, tais como impurezas, inclusões sólidas, paredes do molde, inoculantes e aditivos que correspondem aos casos mais frequentes na prática.

b) Nucleação homogênea - a nucleação da fase sólida em meio à fase líquida, sem que haja interferência ou contribuição energética de elementos ou agentes estranhos ao sistema.

O método do Campo de Fase, foco deste trabalho, não inclui o tipo de nucleação (heterogênea ou homogênea). Admite-se que um núcleo adicionado previamente ao sistema será estável e dependendo das condições do sistema, como por exemplo, o super-resfriamento (ΔT), poderá o núcleo desenvolver-se.

A maneira pela qual o núcleo sólido cresce durante a solidificação vai depender da estrutura atômica da interface sólido/líquido, que pode ser dividida em dois tipos segundo (Furtado, 2005):

a) Interface difusa, que se caracteriza pela separação entre o sólido (região ordenada atômica) e o líquido (região desordenada atômica) por meio de uma faixa mista de regiões ordenadas e desordenadas com espessura de aproximadamente algumas dezenas de átomos.

b) Interface facetada, que se caracteriza pela separação entre a fase sólida e a líquida por meio de uma faixa abrupta e nítida com não mais que 5 átomos.

A interface difusa é normalmente encontrada nos metais, enquanto a interface facetada é típica dos cerâmicos, segundo (Furtado, 2005).

No método do Campo de Fase, a espessura da interface é uma questão importante, pois o método correlaciona um parâmetro ε_θ com a espessura real da interface. Este parâmetro tem uma ordem de grandeza superior à da espessura da interface; isso permite que se utilizem, durante as simulações, malhas mais grosseiras com um número menor de volumes de controle, minimizando, portanto, o esforço computacional.

Devido à importância do processo de solidificação muitos pesquisadores têm focado os seus estudos nesta área utilizando-se de novas técnicas computacionais que possam realizar a modelagem e simulação deste processo. Neste sentido, surgiu o método do campo de fase que simula o processo de solidificação com interface sólido/líquido complexas.

2. O MÉTODO DO CAMPO DE FASE

Em muitas situações práticas é impossível a determinação de uma solução analítica pelos modelos matemáticos tradicionais para tratar os processos de solidificação. Os métodos tradicionais de simulação, baseados em equações de transporte clássicas, tornam-se ineficientes para o tratamento de fenômenos onde devem ser considerados regimes de solidificação metaestáveis como, por exemplo, no caso de substâncias puras, onde a frente da solidificação avança através de uma fase líquida super-resfriada. Nestes casos a interface sólido/líquido pode adquirir uma geometria complexa, que depende localmente da curvatura, da velocidade de solidificação e, ainda, sob a influência da anisotropia. Por esta razão um considerável esforço tem sido empregado no desenvolvimento de métodos numéricos. Deste esforço surgiu o Método do Campo de Fase, uma técnica matemática baseada na termodinâmica, para descrever o processo de transformação de fase, por exemplo, de um líquido a sólido. Uma das características do Método do Campo de Fase é a idéia de uma interface difusa entre as fases. O parâmetro Campo de Fase (ϕ) foi introduzido ao modelo, e podem deter os valores a partir de 0 (líquido puro) até 1 (sólido puro), para cada ponto do volume de material, a sua transição entre 0 e 1 determina a região da interface. No caso de materiais cristalinos puros o método do campo de fase se caracteriza pela solução simultânea das equações de energia e fase.

2.1. Equações Governantes

A equação do Campo de Fase foi representada em recente trabalho (Furtado, 2005), da seguinte forma:

$$\frac{1}{M(\theta)} \frac{\partial \phi}{\partial t} = (\nabla \cdot (\varepsilon(\theta)^2 \nabla \phi) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon(\theta) \varepsilon'(\theta) \frac{\partial}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon(\theta) \varepsilon'(\theta) \frac{\partial}{\partial y} \right) - \omega g'(\phi) - h'(\phi) \frac{\Delta H}{T_m} (T - T_m) \quad (1)$$

O primeiro termo do lado esquerdo da Eq. (1), representa o termo transiente. A variável do método do campo de fase é definida como já foi dito em $\phi = 0$ no estado líquido e $\phi = 1$ para a região do sólido. Todos os termos da equação de fase têm valores diferentes de zero na região da interface, ou seja, quando a variável ϕ está entre 0 e 1. O primeiro termo do lado direito da equação representa o termo difusivo. As derivadas cruzadas (segundo e terceiro termo) representam o fator de anisotropia do crescimento dendrítico. O quarto termo representa a tensão superficial da interface, ou seja, este termo inibe o avanço da interface para dentro da região líquida. O quinto e último termo representa a força motriz do processo de solidificação, que é obtido pela relação $(T - T_m)/T_m$ onde T_m é a Temperatura de fusão do metal e T é a temperatura calculada no ponto pela equação de energia. $M(\theta)$ é o parâmetro que determina a mobilidade da equação de fase e, portanto controla o termo transiente da Eq. (1). A interface difusa é controlada pelo parâmetro $\varepsilon(\theta)$. O ângulo θ é o ângulo de orientação do vetor normal à interface com relação ao eixo x. O parâmetro w corresponde à densidade de energia associada à frente de solidificação, enquanto que ΔH representa o calor latente liberado na transformação de fase. A função $g(\phi)$ é nula em 0 e +1, isto garante que a densidade de energia terá valores diferentes de zero somente na região da interface. Para um comportamento suave de ϕ dentro dos valores limites (0 e 1), se faz necessário o uso de uma função suavizante $h(\phi)$.

Os valores das funções $g(\phi)$ e $h(\phi)$ descritas por (Boettinger, 2002) são os seguintes:

$$g(\phi) = \phi^2 (1 - \phi)^2 \quad (2)$$

$$h(\phi) = \phi^3 (10 - 15\phi + 6\phi^2) \quad (3)$$

Os parâmetros $M(\theta)$ e $\varepsilon(\theta)$ descritos por (Boettinger, 2002) são obtidos através das seguintes equações:

$$M(\theta) = M_0 [1 + \delta_M \cos j(\theta - \theta_0)] \quad (4)$$

$$\varepsilon(\theta) = \varepsilon_0 [1 + \delta_\varepsilon \cos j(\theta - \theta_0)] \quad (5)$$

Onde $M(\theta)$ e $\varepsilon(\theta)$ são constantes anisotrópicas, θ_0 é orientação da interface com máxima anisotropia e j controla o número de ponta da dendrita, que crescerão a partir do núcleo solidificado. O j vale 0 no caso isotrópico, e 4 para anisotropia de 4 direções e 6 para 6 direções.

Outras três relações descritas por (Boettinger, 2002) fornecem os valores dos parâmetros M_0 , ε_0 e w :

$$\varepsilon_0 = \sqrt{2,73\lambda_0\sigma_0} \quad (6)$$

$$w = 6,6 \frac{\sigma_0}{\lambda_0} \quad (7)$$

$$M_0 = \frac{T_m \mu_0^k}{2,73\Delta H \lambda_0} \quad (8)$$

Onde $2\lambda_0$ é a espessura da interface e μ_0^k é o coeficiente linear cinético da interface.

Além disso, deve ser adicionado ao lado direito da Eq. (1) de um termo referente à fonte de instabilidade da frente de solidificação, conhecida como fonte de ruídos. Este termo favorece a obtenção de uma estrutura dendrítica assimétrica em relação às ramificações primárias, estes ruídos têm como objetivo representar as perturbações ocorridas na interface durante o processo de solidificação. A equação que representa estes ruídos foi descrita por (Warren & Boettinger, 1995):

$$Noise = 16.a.r.\phi^2(1-\phi)^2 \quad (9)$$

O r é o número aleatório gerado entre -1 e $+1$, e a é o fator de amplitude do ruído. Pela Eq. (9), pode-se observar que o ruído tem o seu valor máximo em $\phi = 0,5$, sendo nulo em $\phi = 0$ e $\phi = 1$, ou seja, os ruídos são gerados na região interfacial.

A Equação de energia representada por (Furtado, 2005) tem a seguinte forma:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D\nabla^2 T + \frac{\Delta H}{cp} h'(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (10)$$

O primeiro termo do lado esquerdo representa o termo transiente da equação de energia. O primeiro termo do lado direito representa o termo difusivo, D é a difusividade térmica. O segundo representa o termo fonte, onde cp é o calor específico.

Se considerarmos uma substância pura, a Eq. (1) será acoplada à Eq. (10), através do termo fonte.

Neste trabalho toda simulação se concentrará em materiais cristalinos puros, no caso o níquel. A espessura da interface é definida pela distância entre ϕ que varie de 0.1 a 0.9. Os dados usados neste trabalho foram retirados de (Kim, 1999). Assumindo $\delta_M = 0$ e $\delta_\varepsilon = 0,025$, e usando $\sigma_0 = 0,37 \text{ J/m}^2$ e $\mu_0^k = 2 \text{ m/s K}$ para a fusão do níquel puro e $2\lambda_0 = 8 \times 10^{-8} \text{ m}$ por conveniência numérica. Com $T_m = 1728 \text{ K}$ e $\Delta H = 2,35 \times 10^{-9} \text{ J/m}^3$, onde obtemos $\varepsilon_0 = 2,01 \times 10^{-4} (\text{J/m})^{1/2}$, $w = 0,61 \times 10^8 \text{ J/m}^3$ e $M_0 = 13,47 \text{ m}^3/\text{s J}$. Os outros parâmetros na Eq. (1) são $D = 1,55 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ e $c_p = 5,42 \times 10^6 \text{ J/m}^3 \text{ K}$.

3. MÉTODO NUMÉRICO

Para a solução das equações de fase e energia será utilizado um esquema de diferenças finitas explícito. E para garantir essa convergência será adotada duas condições de estabilidade que devem ser respeitadas, que foram descritas por (Kim, 1999) como $\Delta t < \Delta x^2 / 4D$ e $\Delta t < \Delta x^2 / (4M\varepsilon^2)$. A distância entre os pontos do grids vale $\Delta x = \Delta y = 2 \times 10^{-8} \text{ m}$; já o Δt vale $7,74 \times 10^{-12} \text{ s}$, o que garante obedecer a uma das condições de convergência. O núcleo solidificado será adicionado no meio do domínio computacional e há condições adiabáticas em suas fronteiras.

Toda os cálculos foram desenvolvidos num computador Intel Dual Core, 3,00 GHz e 8,00 GB de RAM.

4. RESULTADOS

Através do método do Campo de Fase foi possível gerar uma dendrita conforme a fig. (1). Essa dendrita foi gerada num grid 1000x1000, com $j = 4$ (quatro pontas), super-resfriamento de $\Delta T = 528$ K e crescimento preferencial num ângulo de 45° . Na fig. 1 observa-se braços primários bem desenvolvidos, e braços secundários que cresceram perpendicularmente a partir dos braços primários. Alguns pequenos braços terciários começaram a se desenvolver a partir dos braços secundários. Esses braços terciários cresceram paralelamente aos braços primários, com uma particularidade, os braços cresceram em um lado dos braços secundários. Isto é explicado pela distribuição do campo térmico, a ramificação prefere a direção da liberação de calor.

Outro fenômeno que pode ser observado na fig. (1), é que o comprimento dos braços secundários aumenta à medida que se afastam das pontas das dendritas. Este fenômeno acontece em dois estágios. Primeiro, perto da ponta da dendrita os pequenos braços secundários que surgem competem entre si, e alguns crescem mais rápido que outros, e os que crescem primeiro inibem o crescimento dos outros. E depois, não há grande competição entre braços desenvolvidos, isto acontece devido ao espaçamento que existe entre eles.

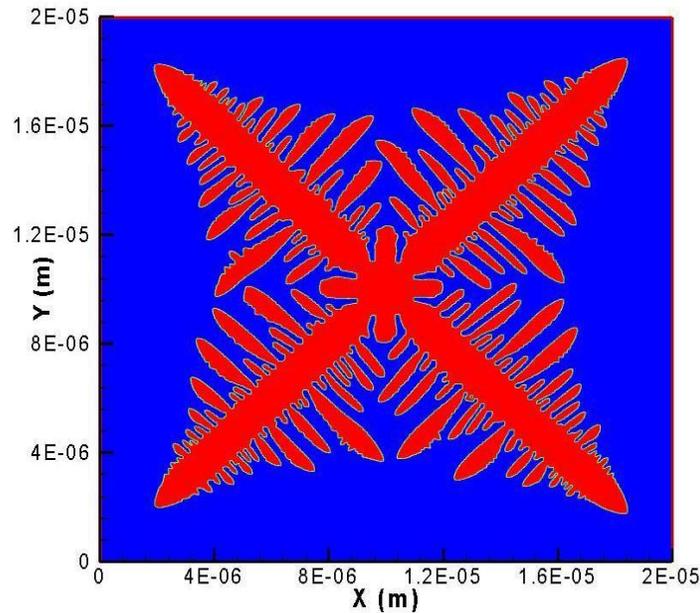


Figura 1. Dendrita gerada de um núcleo solidificado no centro domínio computacional.

A fig. (2) representa o perfil térmico da dendrita mostrada na fig. (1), como a figura mostra o líquido longe da interface não foi alterada significativamente, e a região já solidificada apresenta o maior gradiente de temperatura, isto se deve ao fato de liberação do calor latente durante a mudança de fase. A região da interface possui uma temperatura intermediária entre a região solidificada e a região não solidificada. Devido ao efeito da difusividade térmica, as mudanças de temperatura ocorrem primeiro, e logo após a transformação de fase. Isto é uma condição para ocorrer às ramificações na estrutura dendrítico, caso este fenômeno não ocorra, a interface sólido/líquido avança para dentro do líquido na forma de uma superfície plana.

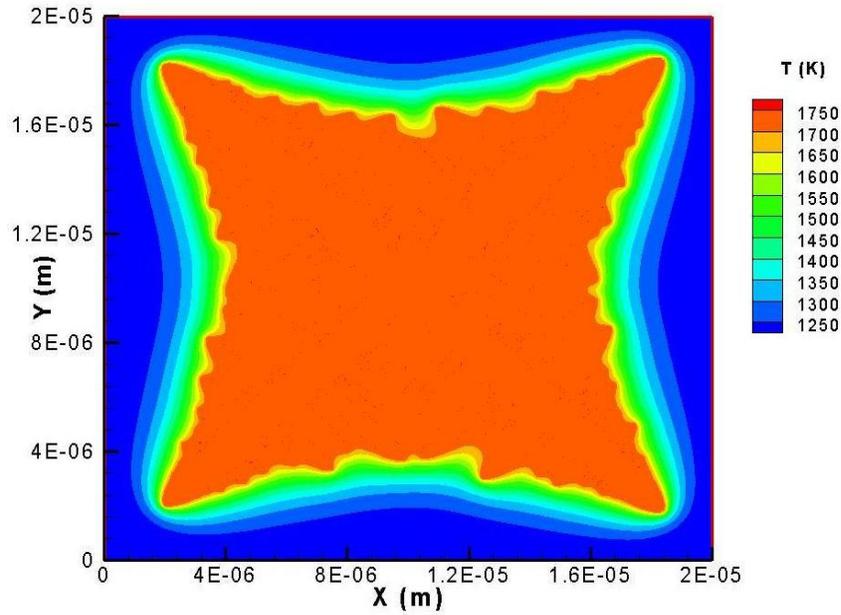


Figura 2. Perfil de temperatura de uma dendrita de grid 1000x1000.

Na fig. (3) duas dendritas com diferentes ângulos de orientação de crescimento são representados. A fig. (3).a mostra uma dendrita com direção de crescimento preferencial $\theta_0=45^\circ$, já na figura (3).b a dendrita tem $\theta_0=90^\circ$.

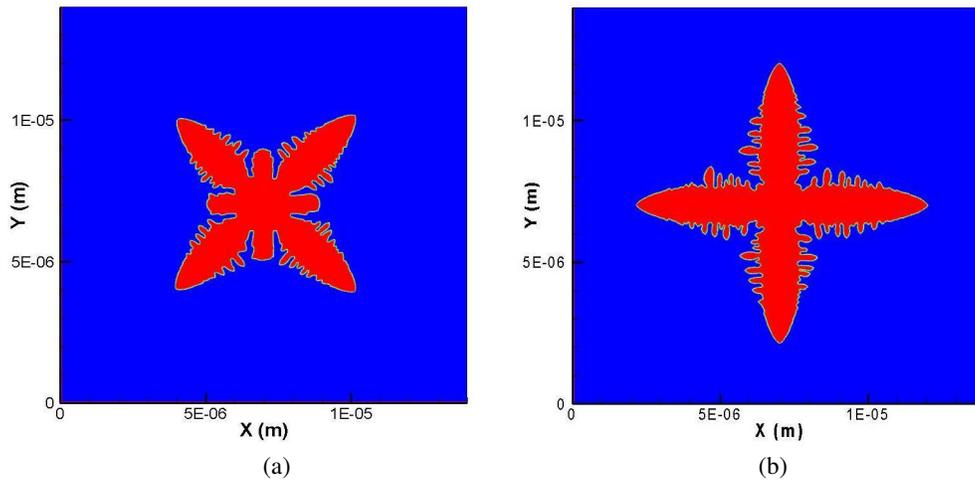


Figura 3. Influência do ângulo preferencial de crescimento na formação da dendrita. (a) $\theta_0=45^\circ$ e (b) $\theta_0=90^\circ$.

Na fig. (4) três dendritas com diferentes números de pontas são mostrados. A fig. (4).a representa um caso isotrópico em que a dendrita possui número de pontas igual a $j = 0$, nas fig. (4).b e (4).c representam casos anisotrópicos onde o número de pontas são respectivamente, $j = 4$ e $j = 6$.

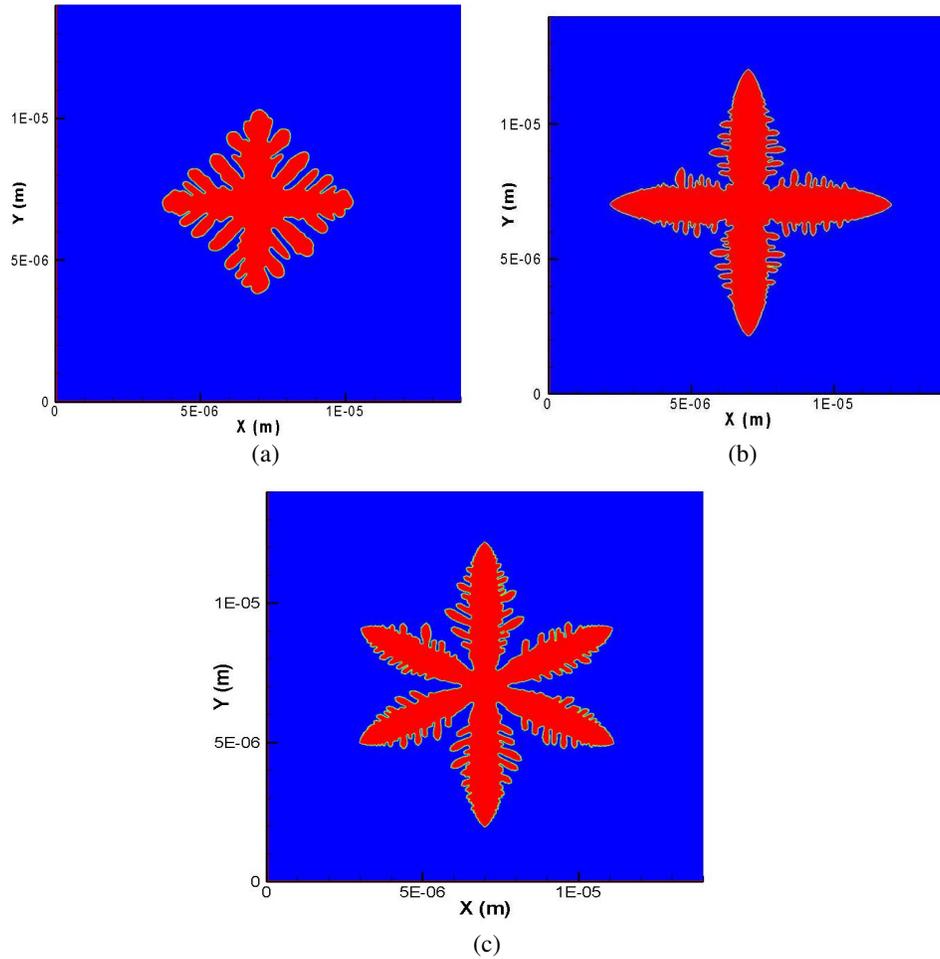


Figura 4. Influência do número de pontas na formação da dendrita. (a) $j = 0$, (b) $j = 4$ e (c) $j = 6$.

Na fig. (5) três dendritas com diferentes valores de amplitude de ruídos são mostrados. Quanto maior o valor da amplitude de ruído, maior será a assimetria entre ramificações da dendrita, já que os ruídos representam perturbações durante a solidificação. E essas perturbações simulam o caso real, onde a solidificação não é totalmente simétrica.

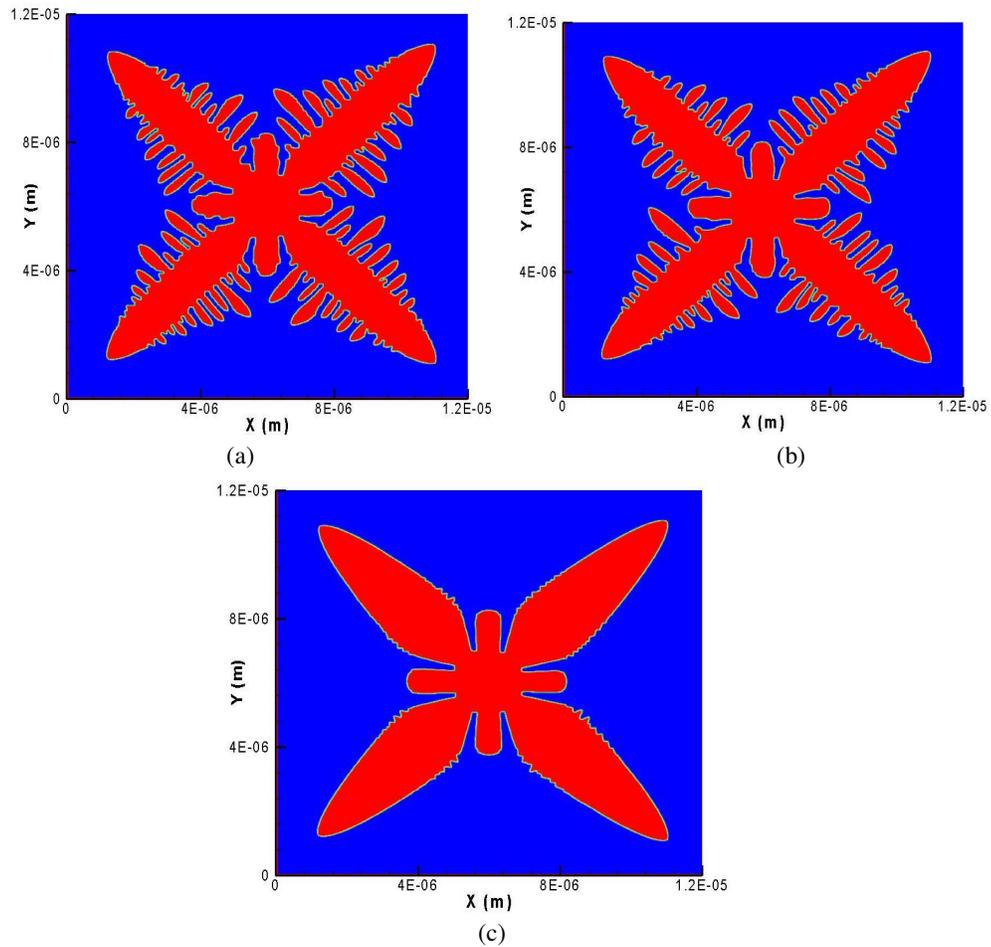


Figura 5. Influência da amplitude de ruído na formação da dendrita. (a) $a=0,025$, (b) $a=0,015$ e (c) $a=0$.

A fig. (6).a mostra a evolução da interface sólido/líquido com $\delta_c = 0$, com a força de anisotropia nula, observa-se o crescimento das pontas da dendrita sem uma direção preferencial de crescimento. Para valores da força de anisotropia diferente de zero $\delta_c = 0,01$, fig. (6).b e $\delta_c = 0,025$, fig. (6).c uma dendrita definida é formada ao longo da direção preferencial de crescimento.

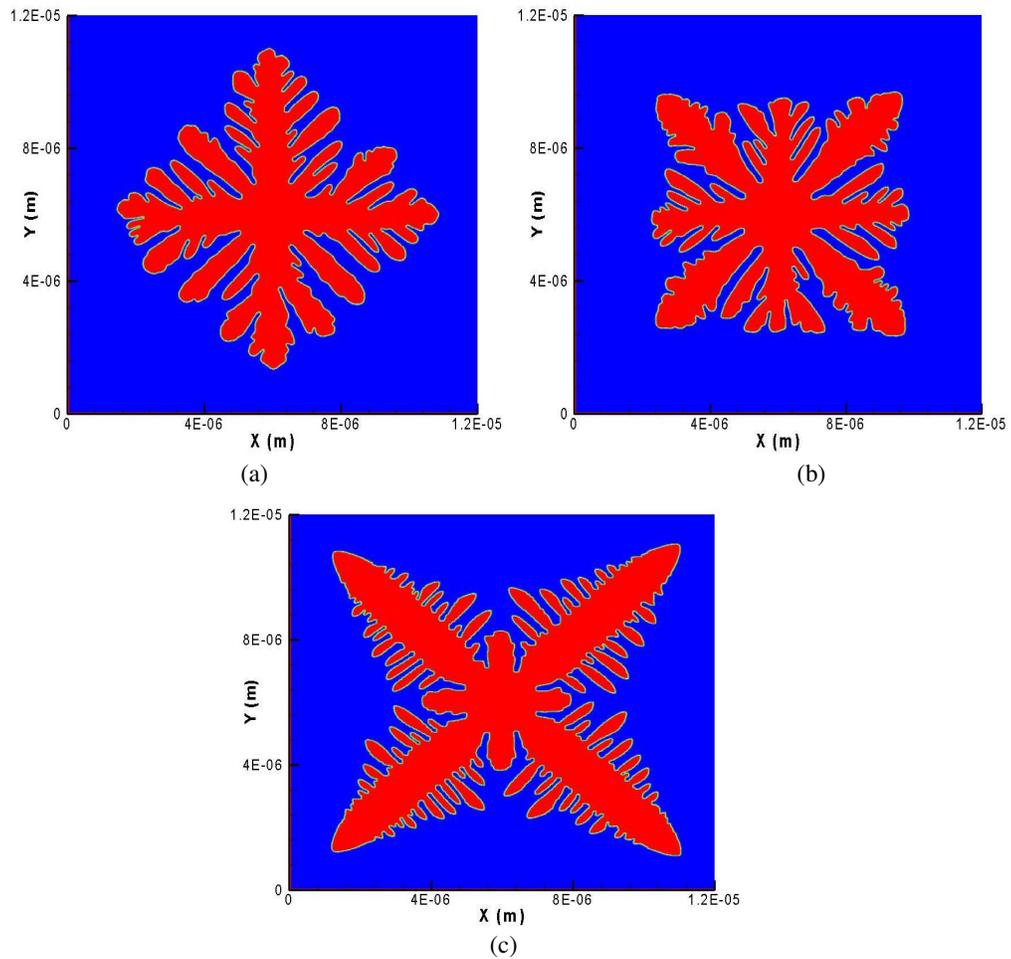


Figura 6. Influência da força de anisotropia na formação da dendrita.(a) $\delta\varepsilon = 0$, (b) $\delta\varepsilon = 0,01$ e (c) $\delta\varepsilon = 0,025$.

Na fig. (7) são mostradas três dendritas com diferentes valores de super-resfriamento. O aumento do valor do super-resfriamento facilita a formação da dendrita. Já que o avanço da interface sólido/líquido é determinado pelo super-resfriamento, ou taxa de extração de calor. O super-resfriamento determina a velocidade da frente de solidificação.

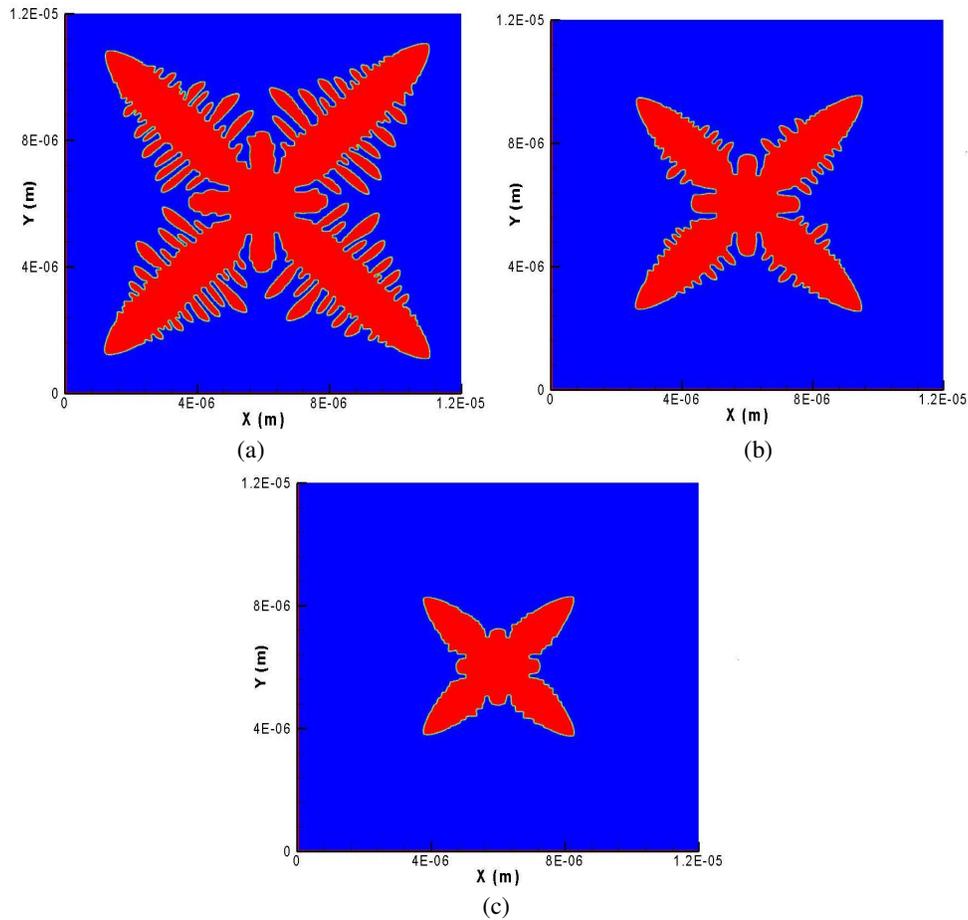


Figura 7. Influência do super-resfriamento em K na formação da dendrita. (a) $\Delta T=528$, (b) $\Delta T=428$ e (c) $\Delta T=328$.

5. CONCLUSÕES

O modelo do Campo de Fase implementado se mostrou confiável à medida que as dendritas geradas possuem uma morfologia semelhante às dendritas encontradas na literatura. Elas apresentaram as seguintes características, os braços primários bem desenvolvidos, e braços secundários que crescem perpendiculares aos braços primários. E também alguns pequenos braços terciários começaram a se formar perpendiculares aos braços secundários, e paralelos aos braços primários.

6. AGRADECIMENTOS

Agradeço a CAPES por incentivar e fomentar o desenvolvimento científico e tecnológico nacional e Universidade Federal Fluminense por fornecer toda estrutura necessária para a realização deste trabalho.

7. REFERÊNCIAS

- Boettinger, W.J., Warren, J.A., Beckermann, C., Karma, A. (2002), "Phase-Field Simulation of Solidification", *Annual Review of Materials Research*, vol. 32,163-194.
- Furtado, A. F.; (2005), "Modelamento do Processo de Solidificação e Formação de Microestrutura pelo Método do Campo de Fase", Tese de Doutorado, EEIMVR/UFF, Volta Redonda.
- Kim, S.G., Kim, W.T., Lee, J.S., Ode, M., Suzuki, T. (1999), "Large Scale Simulation of Dendritic Growth in pure Undercooled Melt by Phase-Field Model", *ISIJ International*, vol. 39, n. 4, 335-340.
- Warren, J.A., Boettinger, W.J. (1995), "Prediction of Dendritic Growth and Microsegregation Patterns in a Binary Alloy Using the Phase-Field Method". *Acta Metallurgical Materials*, vol. 43(2), 689-703.

8. DIREITOS AUTORAIS

Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo do material impresso incluído no seu trabalho.



VI CONGRESSO NACIONAL DE ENGENHARIA MECÂNICA
VI NATIONAL CONGRESS OF MECHANICAL ENGINEERING
18 a 21 de agosto de 2010 – Campina Grande – Paraíba - Brasil
August 18 – 21, 2010 – Campina Grande – Paraíba – Brazil

STUDY OF PARAMETERS OF THE PHASE-FIELD MODEL IN MODELING AND SIMULATION OF THE PROCESS OF SOLIDIFICATION OF A PURE SUBSTANCE IN COMPUTATIONAL DOMAIN WITH UNDERCOOLED MELT

Abner da Costa Assis, abner@metal.eeimvr.uff.br¹

Alexandre Furtado Ferreira, furtado@metal.eeimvr.uff.br²

Ingrid Meirelles Salvino, ingridsalvino@metal.eeimvr.uff.br³

¹ Universidade Federal Fluminense, EEIMVR, Av. dos Trabalhadores, 420, 27225-125, Volta Redonda, RJ, Brasil,

² Universidade Federal Fluminense, EEIMVR, Av. dos Trabalhadores, 420, 27225-125, Volta Redonda, RJ, Brasil,

³ Universidade Federal Fluminense, EEIMVR, Av. dos Trabalhadores, 420, 27225-125, Volta Redonda, RJ, Brasil.

Abstract. *Numerical models that can simulate the phenomenon of solidification are important, since the solidification is present in almost all of the manufacturing process of materials. Among these models the Phase Field is known as a technique capable of simulating complex interfaces in a undercooled melt. This work aims to study of the Phase-Field model, as this has become a popular tool for simulation and modeling of structures dendrites. Structures that strongly influence the properties of the products obtained by the solidification process. For a pure substance, the model uses two equations of state: phase equation and energy equation, which are coupled with their sources. This work, will present various simulations of dendritic growth, aiming at a qualitative relationship between the shapes of dendrites presented and the physical parameters of the Phase-Field model. Among them we mention the importance of the source of noise to the side branches of dendrites in some simulations.*

Keywords: *Phase-Field, noise , dendritic.*