UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE
CENTRO TECNOLÓGICO
ESCOLA DE ENGENHARIA INDUSTRIAL METALÚRGICA DE VOLTA REDONDA
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA METALÚRGICA E DE MATERIAIS

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE SOLIDIFICAÇÃO DE UMA SUBSTÂNCIA PURA VIA MÉTODO DO CAMPO DE FASE COM TÉCNICA DE ECONOMIA DE TEMPO

ALUNO: Abner da Costa Assis

ORIENTADOR: Prof. Dr. Alexandre Furtado Ferreira

VOLTA REDONDA

2010

Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

ABNER DA COSTA ASSIS

"SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE SOLIDIFICAÇÃO DE UMA SUBSTÂNCIA PURA VIA MÉTODO DO CAMPO DE FASE COM TÉCNICA DE ECONOMIA DE TEMPO"

Dissertação apresentada ao curso de Mestrado em Engenharia Metalúrgica e de Materiais da Universidade Federal Fluminense, como requisito complementar para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Metalúrgica.

ORIENTADOR:

Prof. Dr. ALEXANDRE FURTADO FERREIRA

Volta Redonda

2010

ABNER DA COSTA ASSIS

"SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE SOLIDIFICAÇÃO DE UMA SUBSTÂNCIA PURA VIA MÉTODO DO CAMPO DE FASE COM TÉCNICA DE ECONOMIA DE TEMPO"

Aprovado em 04 de Junho de 2010

Banca Examinadora

Prof. Dr. Alexandre Furtado Ferreira – Orientador
EEIMVR - UFF - Universidade Federal Fluminense

Prof. Dr. Cleyton Senior Stampa
EEIMVR - UFF - Universidade Federal Fluminense

Prof. Dr. Claudinei dos Santos
USP - EEL

Prof. Dr. Carlos Roberto Xavier
Petrobras - UniFoa

AGRADECIMENTOS

Agradecimento especial é reservado ao Prof. Dr. Alexandre Furtado Ferreira, que generosamente contribui para a realização desta tese.

Aos amigos de pós-graduação que ajudaram a criar um clima de tranquilidade e companheirismo.

Ao suporte financeiro concedido pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e Universidade Federal Fluminense (UFF) que forneceu toda estrutura necessária para a realização deste trabalho.

DEDICATORIA

Dedico este trabalho a minha família, em especial a minha mãe Maria José da Costa Assis, meu pai Alberto Angelo de Assis, aos meus irmãos Adam e Arthur e minha tia Neusa Maria Soares, pelo apoio a mim dedicado e pelo incentivo nos momentos difíceis.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
2	OBJETIVOS	5
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	6
	3.1 SOLIDIFICAÇÃO DE UM MATERIAL CRIASTALINO PURO	6
	3.2 CRESCIMENTO DENDRÍTICO	8
	3.3 EFICIÊNCIA COMPUTACIONAL DO MÉTODO DO CAMPO DE FASE	11
4	MODELAMENTO	17
	4.1 MÉTODO DO CAMPO DE FASE	17
5	METODOLOGIA	30
	5.1 TÉCNICA DE ECONOMIA DE TEMPO	30
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES	34
	6.1 RELAÇÃO ENTRE A VELOCIDADE DA PONTA DA DENDRITA E O SUPER-RESFRIAMENTO	34
	6.2 ESTIMATIVA DA FRAÇÃO SOLIDIFICADA EM FUNÇÃO DO TEMPO	37
	6.3 COMPARAÇÃO ENTRE O MÉTODO DO CAMPO DE FASE COM OU SEM A UTILIZAÇÃO TÉCNICAS DE ECONOMIA DE TEMPO	38
	6.4 INFLUÊNCIA DA FONTE DE RUIDOS NA SOLIDIFICAÇÃO	48
	6.5 INFLUÊNCIA DA ANISOTROPIA NA SOLIDIFICAÇÃO	49
	6.6 INFLUÊNCIA DO SUPER-RESFRIAMENTO NA SOLIDIFICAÇÃO	50
	6.7 PERFIL DO CAMPO DE FASE E DA TEMPERATURA	52
7	CONCLUSÕES	55
8	SUGESTÕES	56
9	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	57
10	ANEXOS	62

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1	Representação da Interface difusa	7
FIGURA 2	Representação da Interface suave ou facetada	8
FIGURA 3	Avanço da interface sólido/líquido numa condição sem o super-resfriamento	9
FIGURA 4	Avanço da interface sólido/líquido numa condição de super-resfriamento	10
FIGURA 5	Crescimento dendrítico	10
FIGURA 6	Variação do tempo de cálculo em função do comprimento do braço primário com o uso do método de Kim	12
FIGURA 7	Simulação da evolução dendrítica do níquel. Utilizando a) malha dupla (método proposto por Kim) e b) método com única malha	13
FIGURA 8	Solidificação do níquel puro, com (a) $j = 4$ e $\theta 0 = 90°$, e (b) $j = 6$ e $\theta_0 = 45°$ utilizando o método de Andersson	14
FIGURA 9	Desenvolvimento do crescimento dendrítico com grids adaptativos pelo método de Furtado	15
FIGURA 10	Tempo Computacional em função do comprimento da dendrita primaria, utilizando o grid de tamanho fixo e o método adaptativo de Furtado	16
FIGURA 11	Variação do parâmetro ϕ, com a distância x, na interface sólido/líquido plana e estacionária na temperatura de fusão do material puro	21
FIGURA 12	Função $g(\phi)$ versus a variável de fase	24
FIGURA 13	Função suavizante na transição líquido para sólido na região da interface	25
FIGURA 14	Fluxograma de funcionamento do método do Campo de Fase com Técnica de Economia de Tempo	32
FIGURA 15	Taxa de crescimento do níquel, num líquido super-resfriado	35
FIGURA 16	Velocidade da ponta da dendrita x super-resfriamento térmico (ΔT)	36
FIGURA 17	Velocidade da ponta da dendrita x super-resfriamento térmico (ΔT) com a utilização de Técnicas de Economia de Tempo	37
FIGURA 18	Fração solidificada (F_S) em função do tempo	38

FIGURA 19 Dendrita gerada de um núcleo solidificado no centro de um grid 2000x2000 40
FIGURA 20 Dendritas geradas (a) por simulação e (b) experimentalmente 41
FIGURA 21 Dendritas com grid 1500x1500, geradas (a) sem Técnicas de Economia de Tempo e (b) com Técnicas de Economia de Tempo 42
FIGURA 22 Os estágios de crescimento da dendrita com grid 1500x1500 com a utilização de Técnicas de Economia de Tempo 43
FIGURA 23 Gráfico tempo computacional versus número de pontos no grid 45
FIGURA 24 Comparação Morfológica 46
FIGURA 25 Comparação Cinemática 47
FIGURA 26 Influência da amplitude de ruído na formação da dendrita. (a) $a = 0.025$, (b) $a = 0.015$ e (c) $a = 0$ 49
FIGURA 27 Influência da força de anisotropia na formação da dendrita.(a) $\delta\varepsilon = 0$, (b) $\delta\varepsilon = 0.01$ e (c) $\delta\varepsilon = 0.025$ 50
FIGURA 28 Influência do super-resfriamento na formação da dendrita. (a) $\Delta T = 300$ K, (b) $\Delta T = 200$ K e (c) $\Delta T = 100$ K 51
FIGURA 29 Crescimento dendrítico num estágio intermediário do processo de solidificação 52
FIGURA 30 Campo de Temperatura num estágio intermediário do crescimento dendrítico, para um metal puro super-resfriado 53
FIGURA 31 Perfil de temperatura e da variável ϕ do método do Campo de Fase através da interface sólido/líquido 54

LISTA DE TABELAS

TABELA 1	Parâmetros computacionais utilizados no Método do Campo de Fase para o Níquel	33
TABELA 2	Propriedades físicas do Níquel	34
TABELA 3	Valores do tempo computacional pelo número de pontos no grid	44

LISTA DE ABREVIATURAS, SIGLAS E SÍMBOLOS

ΔT	Super-resfriamento térmico (K)
ϕ	Parâmetro do método do Campo de Fase
ε_0	Parâmetro do método do campo de fase correlacionado com a espessura da interface $(J/m)^{1/2}$
θ_0	Ângulo preferencial de crescimento
v	Velocidade da ponta da dendrita (m/s)
R	Raio da ponta da dendrita (m)
ΔH	Calor latente (J/m^3)
j	Modo de anisotropia
δ_ε	Força de anisotropia
a	Amplitude do ruído
t	Tempo (s)
f^S	Fração de sólido
f^L	Fração de líquido
w	Fator da energia livre de excesso (J/m^3)

σ	Tensão superficial (J/m^2)
λ	Espessura da interface (m)
T_m	Temperatura de fusão (K)
T	Temperatura (K)
M_0	Mobilidade da equação de fase (m^3/s J)
μ^K	Coeficiente cinético linear (m/s K)
θ	Ângulo entre o vetor normal da interface e o eixo de referência
r	Número aleatório gerado entre -1 e +1
D	Difusividade térmica (m^2/s)
Δt	Passos no tempo (s)
Δx	Espaçamento da malha na direção x (m)
Δy	Espaçamento da malha na direção y (m)
C_p	Capacidade Calorífica (J/m^3 K)
V	Volume (m^3)
F_S	Fração solidificada
V_S	Volume do sólido

V_T	Volume Total
CCC	Cúbica de Corpo Centrada
CFC	Cúbica de Face Centrada
HC	Hexagonal Compacta
K	Número de Iterações
d	Distancia percorrida pela ponta da dendrita (m)
R^2	Índice de Correlação
α	Constante dependente da espessura da interface do modelo
$N(I,J)$	Variável para identificação da região interfacial
E	Energia do sistema (J)
Q	Fluxo de calor (Watts)
W	Fluxo de trabalho (Watts)
e	Energia especifica (J/kg)
P	Pressão (Pa)
q'''	Termo fonte (Watts/m^3)
h	Entalpia (J)

k	Calor latente adimensional
φ	Função dissipação viscosa

RESUMO

Nesta dissertação foi desenvolvido uma Técnica de Economia de Tempo com o objetivo de aperfeiçoar o Método do Campo de Fase. Já que este método é uma ferramenta importante na simulação do crescimento dendrítico durante o processo de solidificação, e sofre com problemas de eficiência computacional. Na produção desta dissertação as equações que compõem o método do Campo de Fase foram resolvidas pelo método de diferenças finitas com esquema explicito, e o material cristalino puro adotado foi o níquel. Com a utilização da Técnica de Economia de Tempo, novos valores do parâmetro do campo de fase só foram calculados em regiões da interface e regiões próximas a ela; e novos valores de temperatura só foram calculados dentro da região termicamente afetada. Com a utilização desta técnica foi possível uma minimização do tempo computacional que variou na casa dos 80%. Além de todas as dendritas geradas possuírem o mesmo padrão das dendritas geradas pelo método do Campo de Fase sem a utilização da Técnica de Economia de Tempo, e de estarem em conformidade com as dendritas encontradas na literatura. Com esta redução do tempo computacional, se justifica a utilização da Técnica de Economia de Tempo para simulações do crescimento dendrítico.

Palavras chave: Método do Campo de Fase, Dendritas, Técnicas de Economia de Tempo.

ABSTRACT

This dissertation was developed a Time-Saving Techniques aimed at improving the Phase-Field method. Since this method is an important tool in the simulation of dendritic growth during the solidification process, and suffers from problems of computational efficiency. In the production of this dissertation the equations that comprise the Phase-Field method were solved by Finite Difference method with explicit scheme, and the crystalline material used was pure nickel. With the use of Time-Saving Techniques, new parameter values of the phase field only were calculated in the interface regions and regions close to it, and new temperature values only were calculated within the thermal boundary layer. With this technique was possible to minimize the computational time that ranged at around 80%. Besides all dendrites generated have the same pattern of dendrites generated by the Phase-Field method without the use of Time-Saving Techniques, they comply with the dendrites in the literature. With this reduction in computational time is justified to use the Time-Saving Techniques for simulations of dendritic growth.

Key-word: Phase-Field Method, Dendrites, Time-Saving Techniques.

1 - INTRODUÇÃO

A produção de quase todos os objetos produzidos pelo homem envolve a solidificação em algum estágio do seu processo de fabricação. Especificamente no campo da metalurgia, é evidente a sua importância já que, com exceção de peças sinterizadas, todos os metais e suas ligas passam, em alguma etapa de seu processamento, por um processo de fusão e solidificação seja na fabricação de peças fundidas em moldes com a forma desejada, seja na fabricação de lingotes para posterior conformação. O estudo da solidificação é muito importante, por se tratar do principal fenômeno do processo de fundição, que é um método muito econômico. As estruturas resultantes desse processo, as dendritas, influenciam drasticamente as propriedades dos produtos obtidos via processo de solidificação. Algumas destas propriedades, tais como ductilidade, condutividade elétrica e resistência mecânica, são determinadas pelas estruturas microscópicas produzidas durante a solidificação, segundo Prates[1]. Portanto, seria interessante o entendimento e controle das estruturas formadas com o objetivo de obter as propriedades desejadas nas peças produzidas.

A dendrita de um metal cristalino puro ocorre na solidificação, devido à instabilidade da interface sólido/líquido, numa condição de super-resfriamento, ou seja, a temperatura do metal na fase líquida abaixo da temperatura de fusão. Nestas condições, perturbações na interface geram ramificações que crescem em direções preferenciais para dentro da fase líquida.

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 numérico, como por exemplo, método do Campo de Fase.

O método do Campo de Fase se tornou muito popular devido à sua habilidade em simular o processo de solidificação com interface sólido/líquido complexa. A idéia básica do "Campo de Fase" foi iniciada em 1983 quando Fix[2] propôs um método para resolução dos problemas de transição de fase incluindo dois efeitos importantes, tensão superficial e super-resfriamento, não capturado em problemas clássicos de Stefan. A tensão superficial é um fator de estabilização, enquanto super-resfriamento tende a amplificar qualquer perturbação introduzida no sistema. Com a presença da tensão superficial e do super-resfriamento certas dificuldades para solução numérica de problemas de Stefan foram impostas, e as primeiras tentativas de eliminar as dificuldades não foram muito bem sucedidas. Em seu trabalho Fix[2] introduziu uma variável fase, um parâmetro de ordem chamado, ϕ, em seu modelo, ele é determinado por uma equação de campo apropriada e varia bruscamente através da interface sólido/líquido. Langer[3] apresenta uma descrição simples e intuitiva para o modelo do Campo de Fase sem propor qualquer solução numérica aproximada; e Caginalp e Fife[4] introduzem um modelo do Campo de Fase que incorpora a tensão superficial, anisotropia, curvatura e dinâmica da interface com super-resfriamento empregando a abordagem de Landau-Ginzburg[5].

Mais tarde, Caginalp[6] mostra que, para um caso limite de transições de fase com base em considerações microscópicas, as equações de Campo de Fase podem levar a modelos de interface abrupta. Caginalp e Socolovsky[7] também mostraram em detalhes que o problema de interface abrupta decorrentes de qualquer dos problemas importante de transição de fase podem ser recuperados matematicamente usando a aproximação do Campo de Fase como um método numérico, para facilitar soluções através de uma interface com espessura finita, em que os efeitos da tensão superficial e super-resfriamento estão incluídos. Portanto, o método Campo de Fase transforma o problema de interface abrupta para um sistema rígido com equações diferenciais parciais para evolução de fase e do campo de temperatura. Em 1990, Penrose e Fife[8] obtiveram um "termodinamicamente consistente" modelo do Campo de Fase usando uma função análoga a entropia, em vez da função de energia livre de Landau-Ginzburg. Um "termodinamicamente consistente" modelo do Campo de Fase baseado na

primeira e segunda lei da termodinâmica, também foi apresentado por Wang[9] e seus colaboradores.

Inicialmente, a maioria dos pesquisadores se concentrou em substâncias puras no caso bidimensional e não consideravam a convecção induzida por um campo de velocidade ou flutuações em pequena escala. Mas as transições de fase em ligas binárias e solidificação na presença de convecção têm atraído crescente interesse. Kobayashi[10] introduziu "uma espécie de modelo do Campo de Fase" para simular a solidificação direcional e crescimento de cristais dendríticos com e sem anisotropia. Ele também investigou a estabilidade da forma da interface contra o ruído através da introdução de baixa amplitude das flutuações aleatórias. Wheeler[11] e seus colaboradores aplicaram o modelo de Campo de Fase para uma geometria esfericamente simétrica unidimensional e uma região plana retangular bidimensional para simular numericamente uma frente sólida crescendo dentro do super-resfriamento. Wheeler[12] e seus colaboradores também apresentaram um modelo do Campo de Fase de aprisionamento de soluto durante a solidificação através da introdução de uma equação de espécies dentro do modelo do Campo de Fase. Murray[13] e seus colaboradores apresentaram seus cálculos de solidificação dendrítica baseada no modelo previsto Wang[9] e seus colaboradores.

Já o estudo numérico de Kupferman[14] e seus colaboradores centraram-se no crescimento assintótico da fase final num grande limite de super-resfriamento. Em contrapartida, Juric e Tryggvason[15] simularam solidificação dendrítica com uma abordagem um pouco diferente, ou seja, um método de monitoramento aos conjuntos de nível, proporcionando assim uma verificação independente das previsões numéricas. A partir desses trabalhos, vários modelos foram desenvolvidos principalmente para a solidificação de materiais puros[16], depois estendidos a ligas binárias[17,18], e também estendidos a ligas ternárias[19,20].

Apesar da habilidade desta técnica em simular o processo de solidificação, ela apresenta baixa eficiência computacional e exige elevada memória computacional, por esta razão é necessário o seu aprimoramento.

Uma opção é utilização de Técnicas de Economia de Tempo no Método do Campo de Fase. Com a utilização desta técnica cálculos de novos valores de temperatura e campo de fase, só serão calculados em regiões onde ocorrem mudanças significativas; quer dizer, regiões onde os valores do parâmetro do campo de fase e da temperatura tem variação

de uma iteração para outra. O que significa uma diminuição nos cálculos e por conseqüência uma redução no tempo computacional para o cálculo das dendritas.

2 - OBJETIVOS

O objetivo principal deste trabalho foi o desenvolvimento da Técnica de Economia de Tempo no método do Campo de Fase; porque com este aprimoramento no método, foi possível realizar simulação de crescimento dendrítico com um tempo computacional menor.

Outros objetivos cumpridos foram: uma relação entre o super-resfriamento e a velocidade da ponta da dentrita, uma relação entre a fração sólida e o tempo, a construção de um perfil de temperatura e de fase em torno da interface, e a discussão da influência de alguns parâmetros sobre a morfologia das dendritas como: amplitude de ruído, super-resfriamento e anisotropia.

3 - REVISÃO BILIOGRÁFICA

Este capítulo se divide em três partes. Na primeira parte, será discutida a solidificação de um material cristalino puro, com ênfase nas etapas de nucleação e crescimento. Na segunda parte, serão introduzidos os conceitos envolvidos durante o crescimento dendrítico. E na última parte serão apresentados alguns exemplos de trabalhos sobre eficiência computacional para o método do Campo de Fase.

3.1 - SOLIDIFICAÇÃO DE UM MATERIAL CRISTALINO PURO

Um metal no estado sólido possui átomos que vibram com certa freqüência em torno de posições geométricas definidas (determinadas pelo tipo de arranjo cristalino específico do metal em questão). No estado líquido, tais átomos, além de vibrarem, não possuem posição definida, pois estão em movimento dentro do líquido. Por se movimentarem, os átomos no estado líquido entram em colisão, envolvendo milhares de átomos simultaneamente.

Nestas colisões, surge um agrupamento momentâneo de átomos, formando um núcleo, com um dado arranjo atômico (CCC, CFC, HC, etc.). Este agrupamento conhecido como embrião poderá ser tornar um núcleo (região solidificada) e crescer ou então se dissolver, dependendo da temperatura do sistema. O crescimento do sólido se dá por migração de átomos do líquido para o sólido, acoplando os átomos nas posições de equilíbrio do reticulado que é específico do metal em questão.

O processo de solidificação de um material cristalino puro se dá através de duas etapas: nucleação e crescimento[21]. A nucleação é a etapa inicial da transformação de

fase, sendo ela caracterizada pela formação de pequenas partículas (núcleos) de nova fase. Já o crescimento tem a ver com a forma como os núcleos da nova fase crescem sob a forma de grãos cristalinos.

A nucleação se dá de duas formas distintas: homogênea e heterogênea.

A nucleação homogênea da fase sólida em meio à fase líquida ocorre sem que haja interferência ou contribuição energética de elementos ou agentes estranhos ao sistema.

A nucleação heterogênea ocorre quando a solidificação ocorre a partir de superfícies pré-existentes, tais como as paredes do molde ou quando da presença de partículas sólidas no líquido. A nucleação a partir de um substrato (nucleação heterogênea) possui uma superfície a ser criada menor, (comparada a da nucleação homogênea) podendo facilitar o processo, pois exige menor energia de interface (barreira energética).

O crescimento do núcleo durante a solidificação irá depender da estrutura atômica da interface sólido/líquido, e se divide em dois tipos:

- Interface difusa – se caracteriza pela separação entre o sólido (região ordenada atomicamente) e o líquido (região desordenada atomicamente) por meio de uma faixa mista de regiões ordenadas e desordenadas com espessura de aproximadamente 50 átomos, e são geralmente encontradas nos materiais metálicos, como ilustrada da fig. 1;

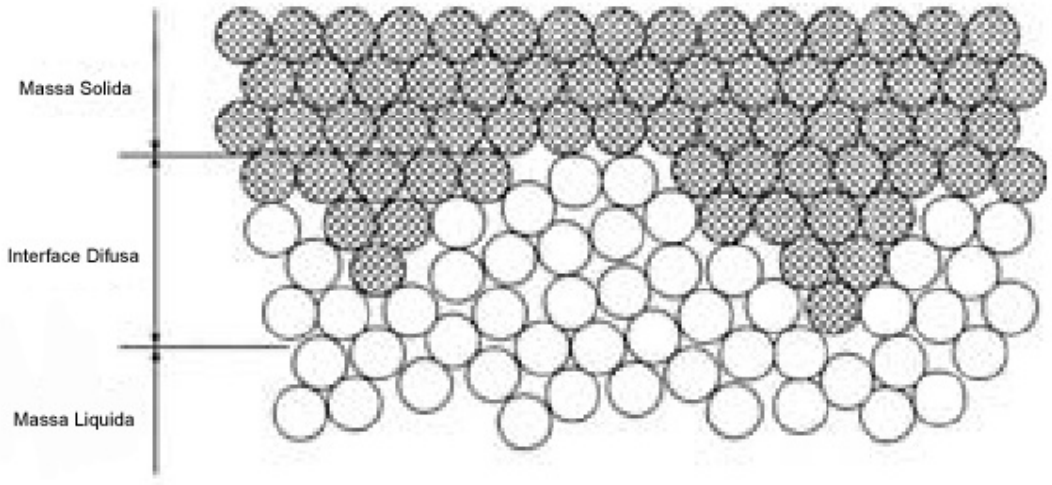


Figura 1 – Representação da Interface difusa.[22]

- Interface suave ou facetada – se caracteriza pela separação entre a fase sólida e a fase líquida por meio de uma faixa abrupta e nítida com não mais que 5 átomos, e são normalmente encontradas nos materiais cerâmicos, como ilustrado na fig. 2.

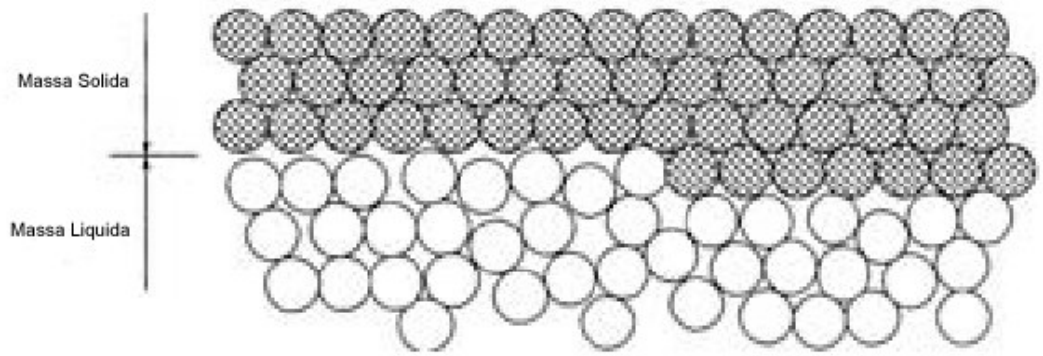


Figura 2 – Representação da Interface suave ou facetada.[22]

De forma resumida a solidificação de metais pode ser definida como um processo de extração de calor em regime transiente, com mudança de fase, no qual certa quantidade de energia térmica deve ser transferida, da fase líquida para o meio ambiente para possibilitar a nucleação e crescimento da fase sólida.

3.2 - CRESCIMENTO DENDRÍTICO

Para a solidificação de metais puros, o avanço da interface sólido/líquido numa região sem o super-resfriamento é geralmente controlado pela extração de calor a partir da interface sólido/líquido e do sólido formado para uma fonte fria. Sem o super-resfriamento na fase líquida, a interface plana, em avanço, possui uma forma macroscopicamente estável, segundo Chalmers[23]. Qualquer instabilidade de forma localizada na interface se projetará para uma região de maior temperatura que a de fusão e, assim, seria novamente fundida, para propiciar a continuidade de uma interface plana, como mostrado na fig. 3:

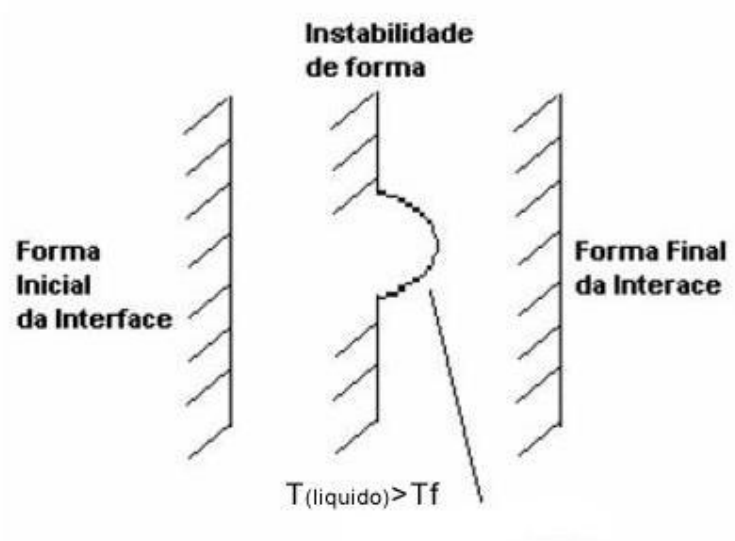


Figura 3 – Avanço da interface sólido/líquido numa condição sem o super-resfriamento.[21]

Entretanto, para o caso de interface difusa onde se obtêm a dendrita térmica devido à instabilidade da interface sólido/líquido, esta instabilidade ocorre devido ao líquido estar numa condição de super-resfriamento. Nesta condição o calor latente gerado na interface é conduzido para dentro da região líquida. Uma vez que a fase líquida encontra-se super-resfriada, perturbações nesta interface (vibrações no molde, presenças de elementos estranhos no meio líquido, etc.) geram o aparecimento de instabilidades de forma, fig. 4. Estas instabilidades estando mais a frente no meio líquido super-resfriado, avançarão com uma velocidade maior que as demais regiões. Usualmente, estas instabilidades da interface também entram em colapso, desenvolvendo ramificações laterais. Assim sendo, a interface degenera-se morfologicamente, crescendo com uma forma ramificada semelhante a uma árvore, conhecida como estrutura dendrítica, segundo Prates[1].

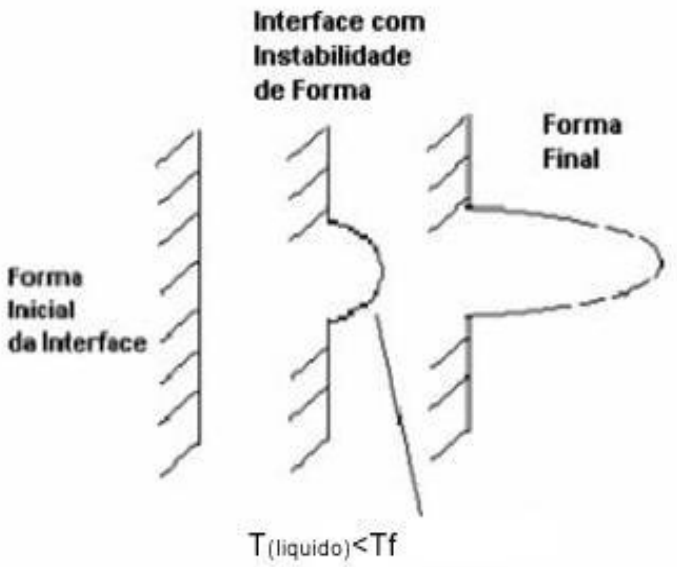


Figura 4 – Avanço da interface sólido/líquido numa condição de super-resfriamento.[21]

Uma estrutura dendrítica bem desenvolvida é caracterizada pelo braço primário que é a espinha dorsal da estrutura dendrítica, braços secundários que crescem perpendicularmente ao braço primário e os braços terciários que crescem paralelamente aos braços primários, conforme mostra a fig. 5. Resultados experimentais citados em Redd-Hill[22], mostram que o crescimento dendrítico, é paralelo às direções cristalográficas específicas, por exemplo, no caso de metais cúbicos de face centrada (CFC) o crescimento é paralelo às direções <100>.

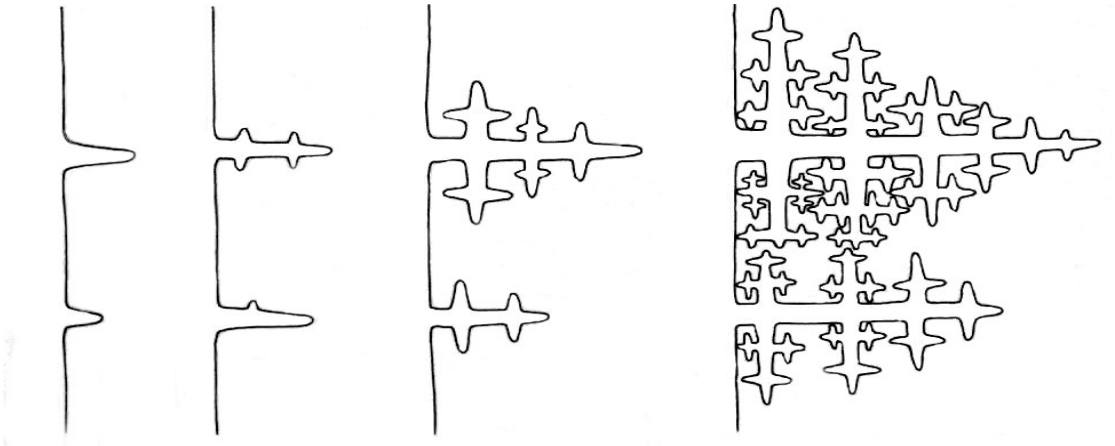


Figura 5 – Crescimento dendrítico.[22]

3.3 - EFICIÊNCIA COMPUTACIONAL DO MÉTODO DO CAMPO DE FASE

Como já dito anteriormente o Método do Campo de Fase sofre com o elevado tempo e memória computacionais requeridos para a geração de dendritas com um padrão bem desenvolvido. Por isso, novas alternativas para o aperfeiçoamento do método foram necessárias.

No ano de 1999, Kim e seus colaboradores[24], observaram que para geração de uma dendrita com poucas ramificações laterais seria necessário um espaço computacional de aproximadamente um milhão de pontos, o que diminuía e muito a eficiência computacional do método, e impossibilitava os cálculos em um computador pessoal. Então Kim e seus colaboradores[24], proporam o uso de uma malha adaptativa, com o objetivo de utilizar passos no tempo maiores para a simulação da evolução de interfaces complexas num domínio preenchido com um metal líquido super-resfriado (níquel), uma vez que a limitação do método do Campo de Fase está na utilização de passos de tempo pequenos, para a garantia da convergência. O método utiliza diferentes tamanhos de malhas. Uma malha mais grosseira é utilizada para o campo de temperatura. E no campo de fase são utilizados dois tamanhos de grid, um grid grosseiro na região fora da interface e um grid refinado de forma adaptativa na interface. Esse grid na interface deve ser refinado para conseguir acompanhar as mudanças dentro interface, o que um grid grosseiro não conseguiria já que tem quase a largura da interface.

Para o campo de temperatura Kim e seus colaboradores[24] utilizaram uma malha mais grosseira com espaçamento entre grids de $\Delta X = \Delta Y = 6 \times 10^{-8}$ m. E ainda adicionou uma condição que delimitava a região termicamente afetada, para garantir que novos valores de temperatura só seriam calculados nesta região.

No campo de fase Kim e seus colaboradores[24] criaram uma variável $N(I,J)$ para a identificação da região interfacial e cálculo do número de grids dentro dessa região. Com a ajuda desta variável dividia os grids da região interfacial em grids com o espaçamento de $\Delta x = \Delta y = 2 \times 10^{-8}$ m. E só realizava novos cálculos do campo de fase dentro desta região.

A fig. 6 mostra variação do tempo de funcionamento em segundos do computador como uma função do comprimento de braço primário da dendrita em unidades de tamanho de grids. O método 1 utiliza grids com tamanhos diferentes e o método 2 utiliza

tamanho de grid único. Pode se observar que o tempo de funcionamento requerido pelo método 1 para alcançar um dado comprimento primário da dendrita é a vigésima parte do tempo do método 2. Isto foi possível devido ao passo de tempo do método 1 ser nove vezes menor que o passo de tempo do método 2, como citado em Kim[24] . A outra contribuição para a eficiência computacional vem do uso do grid adaptativo para o cálculo do campo de fase e o número reduzido de grids para o cálculo do campo térmico.

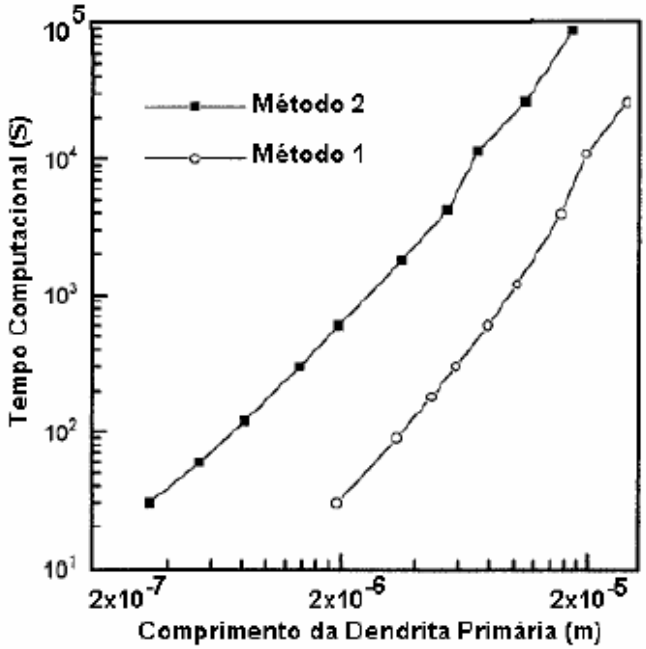


Figura 6 – Variação do tempo de cálculo em função do comprimento do braço primário com o uso do método de Kim.[24]

As figs. 7(a) e 7(b) mostram dendritas obtidas pelo método 1 (malha com dois tamanhos de grid) e 2 (malha com tamanho de grid único), ambas com 400 pontos de grid. O comprimento do braço primário da dendrita é 760Δx na fig. 7(a) e 772Δx na fig. 7(b), e o tempo de funcionamento para as figs. 7(a) e 7(b) são 53 e 910 minutos respectivamente. Sendo Δx o espaçamento entre os grid e neste trabalho sendo igual a 2 x 10^{-8} m. Os valores de tempo de funcionamento computacional dos dois métodos comprova a eficiência computacional da utilização do método com tamanhos de grids diferenciados para cada campo, em relação ao método do Campo de Fase sem a utilização da técnica de duplo grid operado adaptativamente.

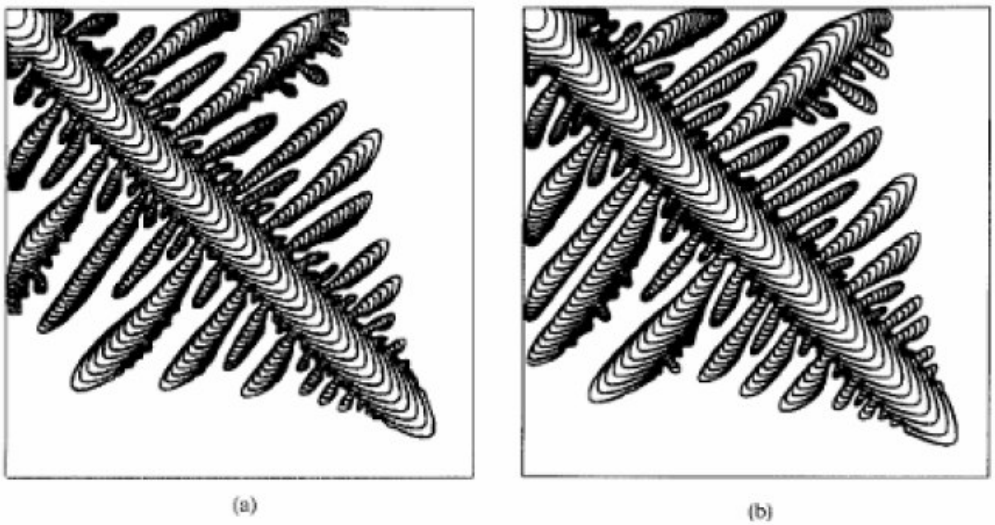


Figura 7 – Simulação da evolução dendrítica do níquel. Utilizando a) malha dupla (método proposto por Kim) e b) método com única malha.[24]

Já no ano 2002, Andersson[25], doutorando do "Royal Institute of Technology", Universidade de Stockholms, do Departamento de Analise Numérica e Ciência da Computação, estudou o método do Campo de Fase aplicado a metais puros, cujo principal propósito de seu trabalho foi encontrar métodos computacionalmente eficientes para a simulação com o Campo de Fase de estruturas dendríticas de solidificação. Para este fim, aproximações por diferenças finitas e suas implementações foram consideradas. Neste trabalho, uma alternativa simples de se reduzir o tempo computacional seria a utilização de tolerâncias suficientemente baixas na casa de 10^{-12}. Além de utilizar tolerâncias baixas Andersson[25], fez uso de técnicas de arquiteturas de memória computacional em paralelo. Medidas de desempenho mostraram que esta técnica reduz em 70% o tempo de cálculo com domínios de 200x200 volumes de controle. Para o desenvolvimento do trabalho proposto por Andersson[25], também foi utilizado o níquel. A fig. 8 mostra os resultados obtidos.

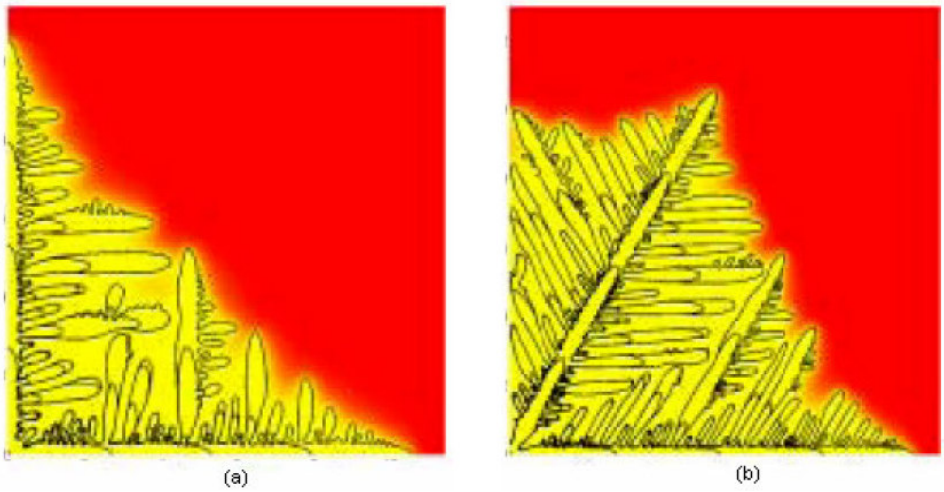


Figura 8 – Solidificação do níquel puro, com (a) j = 4 e θ_0 = 90°, e (b) j = 6 e θ_0 = 45° utilizando o método de Andersson. [25]

Em 2009, Furtado e seus colaboradores[26], apresentaram uma nova técnica numérica, para melhoria da eficiência computacional e redução da exigência de memória. O objetivo desta técnica é que o domínio computacional cresça, enquanto a solidificação avança para a região líquida. O crescimento ao redor da interface sólido/líquido é controlado de acordo com a difusividade térmica do material na região líquida, e a expansão do domínio se dá em torno da dendrita. Como os domínios computacionais são pequenos no início dos cálculos, a convergência é melhorada. No início do processo de solidificação um núcleo sólido é colocado num domínio computacional muito pequeno. A cada vez que a temperatura do domínio aumenta em um grau Kelvin, são adicionados grids nas direções x e y. A simulação termina quando o domínio atinge um número de pontos de grid predeterminado. A fig. 9 mostra o desenvolvimento do crescimento dendrítico com esta técnica. Os tempos de execução para o método do Campo de Fase sem a utilização de domínios adaptativos e o método adaptativo desenvolvido por Furtado e seus colaboradores[26] são 1.0 x 10^5 s e 1.2 x 10^4 s, respectivamente.

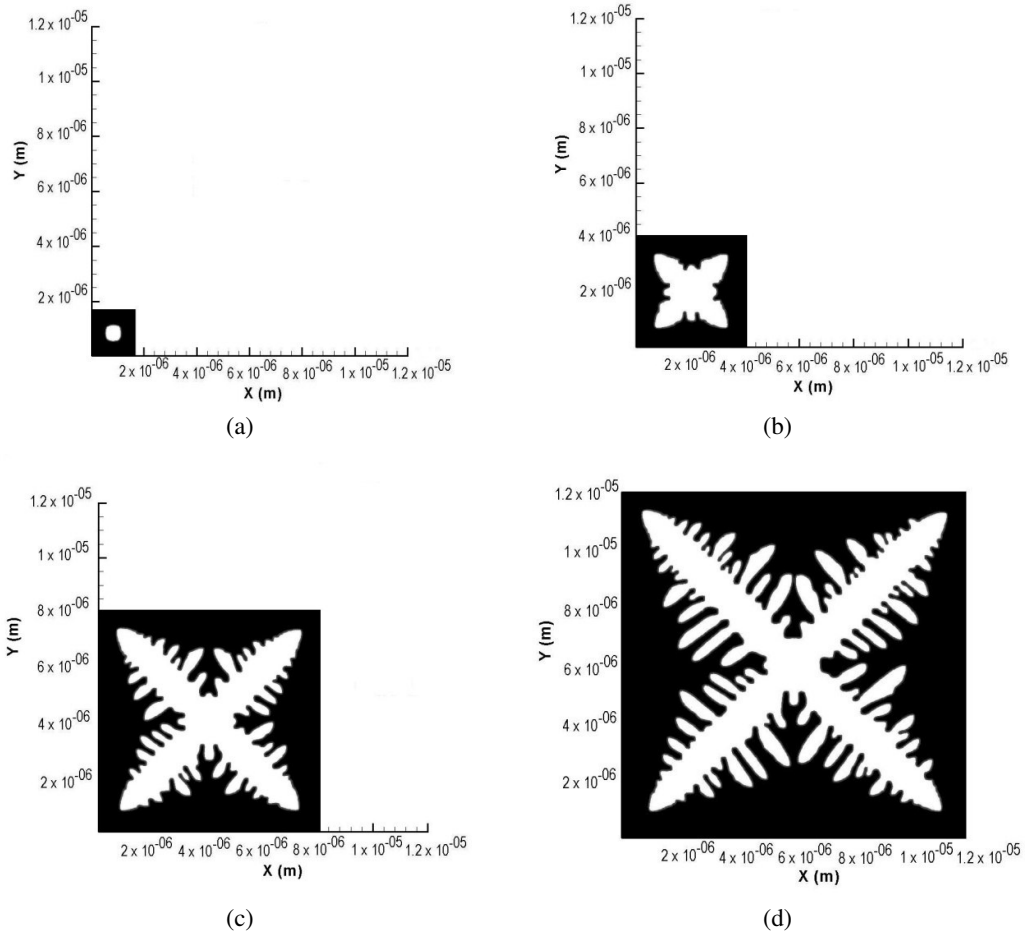


Figura 9 - Desenvolvimento do crescimento dendrítico com grids adaptativos pelo método de Furtado.[26]

A fig. 10 mostra a variação do tempo de computação (em segundos) como uma função do comprimento da dendrita primaria (em unidades de tamanho do domínio). Os círculos fechados e os quadrados fechados representam o grid de tamanho fixo e o grid adaptativo, respectivamente. Com um domínio adaptativo, o tempo de execução necessário para atingir um dado de crescimento dendrítico primário é de cerca de um décimo do que com um domínio de tamanho fixo. A eficiência computacional é garantida pelo uso de um domínio adaptativo para o campo de fase e cálculo térmico. Como os domínios são pequenos no início dos cálculos a convergência é melhorada. Usando o Método do Campo de Fase com domínio adaptativo para simulação do processo de solidificação, o cálculo do crescimento dendrítico é realizado com domínio suficientemente pequeno para a fase de campo e cálculos

térmicos. Com o aumento do comprimento da dendrita primária, verificou-se que o tempo de execução tende a apresentar um comportamento exponencial.

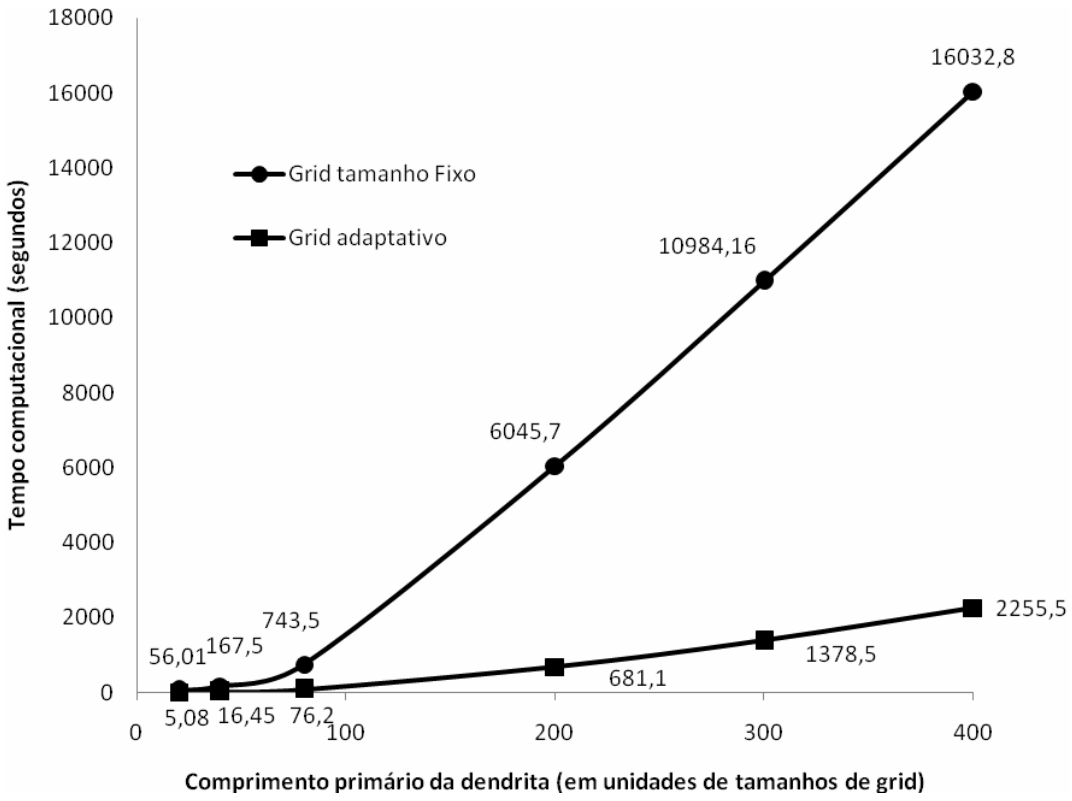


Figura 10 - Tempo Computacional em função do comprimento da dendrita primaria, utilizando o grid de tamanho fixo e o método adaptativo de Furtado.[26]

4 - MODELAMENTO

4.1 - MÉTODO DO CAMPO DE FASE

O Método do Campo de Fase é uma técnica matemática, baseada na termodinâmica, para descrever o processo de transformação de fase em um material[21] (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 pode 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, neste trabalho. Em alguns casos como no trabalho de Xu[27], são utilizados valores diferentes para parâmetro ϕ . No trabalho de Xu[27], o valor de $\phi = 0$ corresponde à região sólida e $\phi = 1$ corresponde à região líquida. Essa adoção de diferentes valores do parâmetro ϕ não influencia no funcionamento do método do Campo de Fase, sendo apenas uma convenção. No caso de materiais cristalinos puros o método do Campo de Fase se caracteriza pela solução simultânea das equações de energia e de fase, assim também é no caso de ligas.

Para o modelamento do método do Campo de Fase, admite-se segundo Bhadeshia[28], o crescimento de um núcleo isolado do meio líquido por uma interface. Nesta hipótese, existem três distintas variáveis a serem consideradas: o núcleo solidificado, o meio líquido e a interface. A interface pode ser descrita como uma superfície envolvente, cujo movimento é controlado pelas condições de contorno consistente com o mecanismo de transformação. A interface nesta descrição matemática é simplesmente uma superfície bidimensional sem nenhuma espessura ou estrutura, nesta hipótese tem-se a interface abrupta.

No método do Campo de Fase, o estado de todo o sistema (núcleo sólido, meio líquido e interface) é representado continuamente por um único parâmetro conhecido como

variável do campo de fase (ϕ). Por exemplo, $\phi = +1$, $\phi = 0$ e entre 0 e +1 representam o núcleo solidificado, o meio líquido e a interface respectivamente. Por conseqüência a interface é a região localizada entre os valores de +1 que representa a fase sólida e 0 que representa o meio líquido. As condições de contorno para a variável ϕ são nulas na fronteira do domínio, ou seja, admite-se fluxo de fase nulo ($\partial\phi/\partial t = 0$).

A faixa no qual ocorre a mudança da variável do campo de fase representa a espessura da interface.

A evolução do núcleo solidificado com o tempo é assumida ser proporcional à variação de um funcional de energia livre com relação à variável ϕ, segundo Bhadeshia[28], está relação é mostrada a seguir:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M \frac{\partial F}{\partial \phi} \tag{1}$$

O parâmetro M é a mobilidade da equação. O sinal negativo na Eq. 1, garante que a densidade de energia diminuirá em relação à $\partial\phi/\partial t$, ou seja, na transformação de líquido para sólido há um decréscimo da densidade de energia do sistema. O termo F descreve como a energia livre varia em função da variável ϕ, sendo F representado a seguir:

$$F = \int_V \left[f_0\{\phi, T\} - \frac{\varepsilon^2}{2} (\nabla \phi)^2 \right] dV \tag{2}$$

Esta equação foi obtida por Cahn[29] citado em Badeshia[28], onde Cahn assumiu que a densidade de energia livre, pode ser expressa por uma expansão da série de Taylor de multivariáveis. Na Eq. 2, V e T representam o volume e temperatura respectivamente. O segundo termo nesta equação depende somente do gradiente de ϕ e, portanto é diferente de zero somente na região da interface. O sinal negativo no segundo termo favorece a diminuição da energia livre do sistema, devido ao gradiente de ϕ. O primeiro termo é a soma das energias livres do núcleo solidificado e do meio líquido, e também contem uma variável que representa a energia livre de excesso devido à interface. Para o caso da solidificação este termo é representado por:

$$f_0 = h(\phi) f^S + (1 - h(\phi)) f^L + w g(\phi) \tag{3}$$

E f^S e f^L representam à densidade de energia livre das fases sólida e líquida respectivamente. w é o fator da energia livre de excesso, este fator é um parâmetro do modelo que posteriormente será correlacionado com as propriedades do material como tensão superficial (σ) e espessura da interface (λ). E $h(\phi)$ e $g(\phi)$ são representadas abaixo, conforme Boettinger[30]:

$$h(\phi) = \phi^3(10 - 15\phi + 6\phi^2) \tag{4}$$

$$g(\phi) = \phi^2(1-\phi)^2 \tag{5}$$

Pelas Eqs. 4 e 5 pode-se observar que os termos $h(\phi)f^S$ e $h(\phi))\ f^L + w\ g(\phi)$ se tornam nulos quando $\phi = 0$. Nesta região tem-se somente líquido e, similarmente para o sólido, $(1 - h(\phi))\ f^L + wg\ (\phi)$ são nulos quando $\phi = +1$. Somente quando ambas as fases estão presentes, ou seja, na região da interface os termos da Eq. 3 são diferentes de zero. As Eqs. 4 e 5 são amplamente utilizadas em trabalhos apresentados sobre o Campo de Fase. Com as Eqs. 3 e 2, pode-se determinar $\partial F/\partial\phi$, substituindo na Eq. 1, tem se:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = M\left[\varepsilon^2\nabla^2\phi + h'(\phi)\{f^L - f^S\} - wg'(\phi)\right] \tag{6}$$

Na Eq. 6, $\partial\phi/\partial t$ representa o termo transiente, $\varepsilon^2\nabla^2\phi$ representa o termo difusivo da equação, $h'(\phi)\{f^L - f^S\}$ representa a força motriz do processo de solidificação, e finalmente $wg'(\phi)$ representa a energia livre de excesso devido à superfície, ou seja, a tensão superficial na região da interface. Os valores de $h'(\phi)$ e $g'(\phi)$ são as derivadas das Eqs. 4 e 5 em relação à ϕ. O termo entre parênteses da Eq. 6 representa a variação da densidade de energia livre em relação à ϕ, ou seja, $\partial F/\partial\phi$.

Para a solidificação de metais puros, a força motriz do processo de solidificação pode ser representada por:

$$f^L - f^S = -\frac{\Delta H}{T_m}(T - T_m) \tag{7}$$

A Eq. 7 calcula a diferença entre as energias livres do líquido e sólido em torno do ponto de fusão, ΔH é o calor latente, T é a temperatura e T_m é a temperatura de fusão. Substituindo a Eq. 7 na Eq. 6, tem-se:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M\left[\varepsilon^2 \nabla^2 \phi - h'(\phi)\frac{\Delta H}{T_m}(T - T_m) - wg'(\phi)\right] \tag{8}$$

O efeito do segundo termo na Eq. 8 é favorecer o avanço da interface sólido/líquido se a temperatura estiver abaixo da temperatura de fusão. Os parâmetros ε, w e

M na equação de fase são relacionados com a energia interfacial σ, espessura da interface 2λ,

e o coeficiente cinético interfacial μ^K. Estas relações serão obtidas de forma similar a proposta por Boettinger e colaboradores[30], que admitiram que uma condição de equilíbrio ($\partial\phi/\partial t = 0$) é obtida, se ϕ é constante com valores iguais a 0 ou +1. Esta situação corresponde ao líquido ou sólido monofásico, respectivamente. Para esta condição de equilíbrio tem-se também $T = T_m$ para uma transição unidimensional de uma interface plana entre o líquido ($\phi = 0$) e o sólido ($\phi = +1$), onde ϕ varia na direção normal (direção x) à interface. Admitindo-se estas condições a Eq. 8, torna-se:

$$\varepsilon^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = w\frac{\partial g(\phi)}{\partial \phi} \tag{9}$$

Utilizando as seguintes condições de contorno, proposta por Suzuki e colaboradores[31], ou seja, para a região do sólido tem-se $\phi = +1$ e $x \rightarrow -\infty$, para a região do líquido $\phi = 0$ e $x \rightarrow +\infty$. Resolvendo a Eq. 9 e aplicando as condições de contorno, para a condição de equilíbrio num sistema unidimensional, a equação de fase é representada por:

$$\phi_0(x) = \frac{1}{2}\left[1 - \tanh\left(\frac{\sqrt{w}}{\sqrt{2}\varepsilon}x\right)\right] \tag{10}$$

A comprovação da relação entre as Eqs. 9 e 10 é mostrada no Anexo III.

A relação entre a espessura real da interface (λ) e os parâmetros ε e w utilizados no modelo, segundo Boettinger e colaboradores[30], é representada por:

$$\lambda = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2w}} \tag{11}$$

O valor da espessura da interface é uma relação entre dois efeitos opostos. A interface tenderá a uma forma abrupta para minimizar o volume do material, onde ϕ está entre 0 e +1, nesta região tem-se um alto valor para $f_0(\phi,T)$. A interface tenderá a se difundir para reduzir a energia associada com o gradiente de ϕ. Substituindo a Eq. 11 na Eq. 10 tem-se:

$$\phi_0(x) = \frac{1}{2}\left[1 - \tanh\left(\frac{x}{2\lambda}\right)\right] \tag{12}$$

A fig. 11 mostra os valores da variável $\phi_0(x)$ através da espessura da interface, obtida pela Eq. 12.

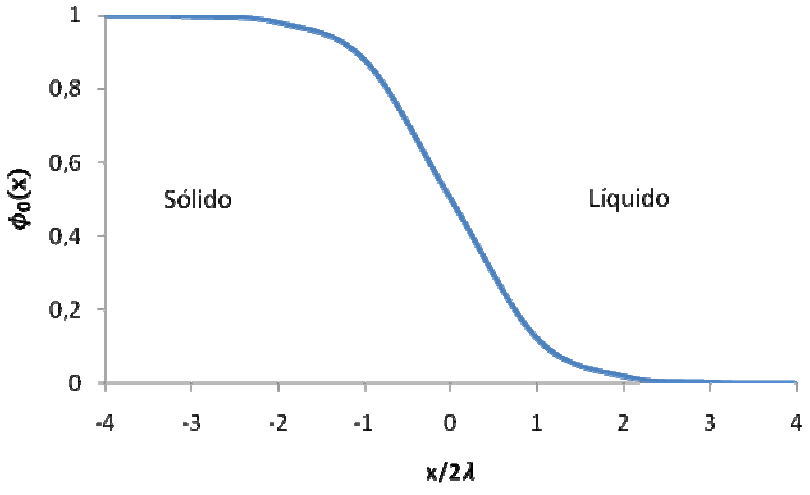


Figura 11 - Variação do parâmetro ϕ, com a distância x, na interface sólido/líquido plana e estacionária na temperatura de fusão do material puro.

Cahn e colaboradores[29] propuseram que a tensão superficial (σ) pode ser obtida pelo excesso de energia livre na região da interface, sendo a tensão superficial expressa a partir da Eq. 13:

$$\sigma = \varepsilon^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 dx \tag{13}$$

Utilizando as Eqs. 9, 12 e 13 chegam-se as seguintes relações entre os parâmetros da equação de fase (ε e w) com a tensão superficial (σ) e espessura da interface (λ), mostrados a seguir:

$$\sigma = \frac{\varepsilon \sqrt{w}}{3\sqrt{2}} \tag{14}$$

$$2\lambda = \alpha \sqrt{2} \frac{\varepsilon_0}{\sqrt{w}} \tag{15}$$

A espessura da interface foi definida com a distância através do qual ϕ varia de 0.1 a 0.9. α é uma constante que depende da espessura da interface do modelo, como no trabalho de Furtado[21] α é igual a 2.2 para ϕ entre 0.1 a 0.9.

Para determinar o parâmetro do modelo M_0, admite-se para a equação de fase segundo Kim e colaboradores[24], uma interface plana, movendo-se com velocidade constante (v). Portanto a equação que representa o parâmetro M_0 é representada a seguir:

$$M_0 = \frac{T_m \mu^K}{2.73 \Delta H \lambda} \tag{16}$$

Utilizando as Eqs. 14 e 15 chegam-se às seguintes relações:

$$\varepsilon = \sqrt{2.73 \lambda \sigma} \tag{17}$$

$$w = 6.6\frac{\sigma}{\lambda} \tag{18}$$

A forma como estes parâmetros foram obtidos é mostrado no Anexo II. Para muitos materiais, incluindo metais e suas ligas, a energia da interface sólido/líquido e o coeficiente cinético dependem da orientação preferencial de crescimento. Portanto, a anisotropia tem uma importância crucial na morfologia da interface obtida durante o processo de solidificação. Para obter a morfologia da interface similar às estruturas dendríticas utilizando o método do Campo de Fase, faz-se necessário introduzir no modelo dois fenômenos: a anisotropia, como dito anteriormente, e a instabilidade da frente de solidificação. Primeiramente será discutida a questão da anisotropia no modelo. Um método amplamente utilizado nos trabalhos encontrados na literatura para sistemas bidimensionais é assumir que ε dependa de um ângulo θ. Onde θ é uma orientação do vetor normal à interface com relação ao eixo x, dado pela relação $tan(\theta) = \phi_y/\phi_x$, onde ϕ_y e ϕ_x representam as derivadas de ϕ em relação à y e x, respectivamente. Esta mudança exige uma nova derivação da Eq. 2, resultando em uma equação de fase com termos de derivadas cruzadas, como mostrada no trabalho McFadden[32] e seus colaboradores.

$$\frac{1}{M(\theta)}\frac{\partial\phi}{\partial t} = (\nabla.(\varepsilon(\theta)^2\nabla\phi)) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon(\theta)\varepsilon'(\theta)\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon(\theta)\varepsilon'(\theta)\frac{\partial\phi}{\partial y}\right) -$$
$$- wg'(\phi) - h'(\phi)\frac{\Delta H}{T_m}(T - T_m) \tag{19}$$

A fonte da instabilidade da frente de solidificação é obtida no método do Campo de Fase através da adição de uma fonte de ruídos do lado direito da Eq. 19. Este termo adicionado à equação favorece a obtenção de uma estrutura dendrítica assimétrica em relação às ramificações secundárias. Estes ruídos têm como objetivo representar as perturbações ocorridas na interface durante o processo de solidificação tais como: vibrações no molde, presença de elementos estranhos no meio líquido e etc. Portanto, estes ruídos foram obtidos da mesma forma que Warren e Boettinger[33]. Estes ruídos foram adicionados utilizando um gerador de números aleatórios, que geram uma instabilidade na interface, a equação que representa estes ruídos tem a seguinte forma:

$$Noise = 16ar\phi^2(1-\phi)^2 \tag{20}$$

O *r* é o número aleatório gerado entre -1 e +1. O fator de amplitude do ruído "*a*", adotado foi 0.025. Pela a Eq. 20 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 da interface.

O primeiro termo do lado esquerdo da equação 19 representa o termo transiente. A variável do método do Campo de Fase é definida como $\phi = 0$ no estado líquido e $\phi = 1$, para a região no estado 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 modelo do Campo de Fase. 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 da energia. E $M(\theta)$ é o parâmetro que determina a mobilidade da equação de fase e, portanto controla o termo transiente da Eq. 19. A interface difusa é controlada pelo parâmetro $\varepsilon(\theta)$. O parâmetro w corresponde à densidade de energia associada à frente de solidificação, enquanto ΔH, representa o calor latente liberado na transformação de fase. A função $g(\phi)$ é nula em 0 e +1, como mostra a fig. 12. Isto garante que a densidade de energia terá valores diferentes de zero somente na região da interface.

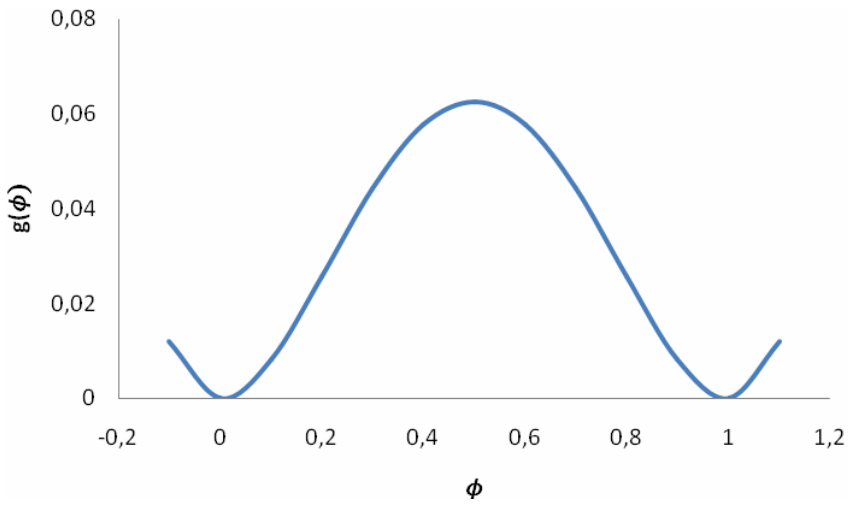


Figura 12 – Função g(ϕ) versus a variável de fase.

Para um comportamento suave de ϕ dentro dos valores limites (0 e 1), se faz necessário o uso de uma função suavizante $h(\phi)$, como mostra a fig. 13.

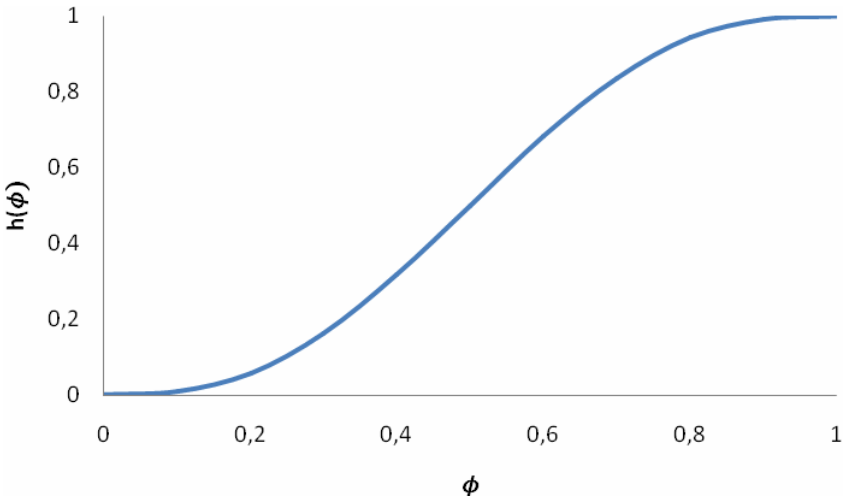


Figura 13 – Função suavizante na transição líquido para sólido na região da interface.

A espessura real da interface sólido/líquido é um dos principais parâmetros do método do Campo de Fase, e seu valor possibilita a determinação dos valores de $M(\theta)$, w e $\varepsilon(\theta)$. A estrutura da Eq. 19, somente promove o avanço da frente de solidificação para o interior da região líquido, a partir de um núcleo solidificado colocado previamente no domínio. A força motriz para o avanço da frente de solidificação é obtida pelo super-resfriamento (ΔT) do líquido. A existência da densidade de energia w demanda que deverá haver um super-resfriamento para permitir que a fase sólida cresça.

Para o cálculo bidimensional, o parâmetro $\varepsilon(\theta)$, é determinado pela Eq. 21, de forma similar proposta por Wheeler[11]:

$$\varepsilon(\theta) = \varepsilon_0 (1 + \delta_\varepsilon \cos j(\theta - \theta_0)) \tag{21}$$

O δ_ε é uma constante de anisotropia. O valor de j controla o número de pontas da dendrita que irão crescer do núcleo solidificado. O j vale 0 para o caso isotrópico, e 4 para anisotropia de 4 direções, e 6 anisotropia de 6 direções. A constante θ_0 é a orientação da

interface com a máxima anisotropia, ou seja, o crescimento preferencial é determinado previamente por θ_0. Como no trabalho de Kim[24], admite-se que a influência da força de anisotropia sobre a mobilidade da equação de fase é nula ($\delta_M = 0$), portanto o $M(\theta) = M_0$.

O modelo do Campo de Fase empregado em processos de solidificação de metais puros consiste na equação do transporte de energia e da equação de transporte da variável de fase, ϕ. A equação de transporte de energia térmica é obtida a partir da primeira lei da termodinâmica conforme mostrado em Reynolds[34]:

$$\left.\frac{dE}{dt}\right|_{sist} = Q - W \tag{22}$$

que estabelece que a variação de energia E para um sistema é igual a soma dos fluxos de calor e trabalho que cruzam a fronteira do sistema. Na formulação da primeira lei, segue-se a convenção de sinal: o calor recebido e o trabalho exercido pelo sistema são positivos por sua vez, o calor rejeitado e o trabalho recebido pelo sistema são negativos. Entende-se por trabalho qualquer transformação cujo efeito final possa ser representado pela elevação de um peso.

Aplicando-se o teorema da divergência, chega-se a forma diferencial da equação da energia:

$$\rho.\frac{De}{Dt} = \nabla.(\vec{q}_K - W) + q''' \tag{23}$$

Os modos de energia a serem considerados serão aqueles mais comuns a sistemas térmicos: energia cinética, energia potencial e energia interna. Assim, a energia específica 'e' passa a representar estas parcelas como indicado:

$$e = \hat{u} + \frac{1}{2}\vec{V}.\vec{V} + \vec{g}.\vec{r} \tag{24}$$

onde r é o vetor posição. Finalmente o termo fonte, q''', representa as fontes e sumidouros de energia por unidade de volume (Watts/m^3) dentro do volume de controle. Provenientes, por exemplo, da energia liberada por reações químicas.

Substituindo-se os modos de energia na Eq. 23 tem-se:

$$\rho\frac{D\hat{u}}{Dt}+\rho\frac{D}{Dt}\left(\frac{1}{2}\vec{V}.\vec{V}\right)+(\rho\vec{g}.\vec{V})=\nabla.(\vec{q}_K-W)+q''' \tag{25}$$

Substituindo-se as equações que constituem o fluxo de calor e trabalho de deformação na Eq. 25 tem-se a equação de conservação de energia interna, cinética e potencial:

$$\rho\frac{D\hat{u}}{Dt}+\rho\frac{D}{Dt}\left(\frac{1}{2}\vec{V}\cdot\vec{V}\right)+(\rho\vec{g}\cdot\vec{V})=\nabla\cdot(k\nabla\theta)-\nabla\cdot(P\vec{V})+\nabla\cdot(\mathrm{T}'\cdot\vec{V})+q''' \tag{26}$$

Multiplicando-se a equação de conservação da quantidade de movimento pelo vetor velocidade, chega-se a uma versão da equação de conservação da energia cinética e potencial:

$$\rho\vec{V}\cdot\frac{D\vec{V}}{Dt}=-\vec{V}\cdot\nabla P+\vec{V}\cdot\nabla\cdot\mathrm{T}'+\rho\vec{V}\cdot\vec{g} \tag{27}$$

Subtraindo-se a Eq. 27, que refere-se às parcelas da energia cinética e potencial, da Eq. 26, que contêm a energia específica '*e*', obtem-se a equação de conservação da energia interna do fluido:

$$\rho\frac{D\hat{u}}{Dt}=\nabla\cdot(k\nabla\theta)-P\nabla\cdot\vec{V}+\varphi+q''' \tag{28}$$

onde φ é a função dissipação viscosa. Na forma conservativa, a equação de transporte da energia interna do fluido é representada por:

$$\frac{\partial(\rho\hat{u})}{\partial t}+\nabla.[\rho\hat{u}\vec{V}]=\nabla.[k\nabla\theta]-P(\nabla.\vec{V})+\varphi+q''' \tag{29}$$

O significado dos termos da Eqs. 28 ou Eq. 29 segue. O lado esquerdo das equações representa a taxa de variação da energia interna de um sistema. O lado direito representa o fluxo de calor por condução que cruza a fronteira do sistema, o trabalho de compressão, a função dissipação e por último, fontes volumétricas (watts/m^3) de calor. O trabalho de compressão pode ser positivo ou negativo, dependendo se o fluido se expande ou contrai; esta variação de sinal também indica que a troca entre energia interna em energia mecânica (pressão) é reversível. A função dissipação viscosa vem precedida de um sinal

positivo, ao contrário do que ocorre com a equação de conservação da energia cinética. Neste caso o sinal positivo indica que há uma conversão direta de energia mecânica (pressão, cinética ou potencial) em energia interna. A conversão se dá de modo irreversível e degrada a energia mecânica.

A equação da conservação da energia pode ser expressa por meio da taxa de variação de entalpia do fluido manipulando-se o termo reversível de trabalho de pressão: $P\nabla.V$.

Da equação de conservação de massa, pode-se expressar o divergente do campo de velocidades em termos da taxa de variação da densidade:

$$\nabla \cdot \vec{V} = -\frac{1}{\rho}\frac{D\rho}{Dt} \tag{30}$$

substituindo a definição da Eq. 30 no termo de trabalho de pressão:

$$P\nabla \cdot \vec{V} = -\frac{P}{\rho}\frac{D\rho}{Dt} \equiv \rho\frac{D}{Dt}\left(\frac{P}{\rho}\right) - \frac{DP}{Dt} \tag{31}$$

Substituindo-se Eq. 29 na equação da energia interna e reconhecendo-se que a entalpia específica do fluido é:

$$h = \left(\hat{u} + \frac{P}{\rho}\right) \tag{32}$$

chega-se a equação de conservação da energia em termos da entalpia h do fluido:

$$\rho\frac{Dh}{Dt} = \nabla \cdot (k\nabla\theta) + \frac{DP}{Dt} + \varphi + q''' \tag{33}$$

Expressando a equação da conservação da energia em função da temperatura, chega-se a Eq. 34, mostrada em Kobayashi[10]:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla^2 T + k\frac{\partial \phi}{\partial t} \tag{34}$$

O k é um calor latente adimensional, ele é proporcional ao calor latente e inversamente proporcional à força de resfriamento. Para simplificação, a constante de difusão

é idêntica em ambas as regiões sólida e líquida. A Eq. 34 é uma equação de condução de calor tendo uma fonte de calor ao longo do movimento da interface, e $k\,\partial\phi/\partial t$ tem valor diferente de zero somente quando passa pela interface.

Em alguns modelos[2,6], o termo dinâmico tem a forma como o seguinte somatório $\phi\,(1-\phi)(\phi-½)+const.x(T_e-T)$. Então o valor de equilíbrio ϕ depende do valor de T, enquanto eles estão fixas em 0 ou 1 em nosso modelo. Assim, se a temperatura de um ponto muda (na verdade, ele pode mudar da temperatura de resfriamento para uma próxima a T_e em solidificação super-resfriado), o valor de ϕ nesse ponto varia de acordo com a variação temporal de T. Consequntemente, o termo $k\,\partial\phi/\partial t$ tem valor diferente de zero, o que significa que o calor latente é liberado neste ponto. Portanto, devemos adotar a forma de expressão dinâmica tal que os valores de equilíbrio de ϕ sejam fixos, se usarmos $k\,\partial p/\partial t$ como um termo de calor latente. Caso contrário, devemos mudar o termo do calor latente $k\,\partial\phi/\partial t$ para $k\,\partial h(\phi)/\partial t$, onde $h(\phi)$ é uma função suavizante não-decrescente satisfazendo $h(\phi) = 0$ perto de $\phi = 0$ e $h(\phi) = 1$ perto de $\phi = 1$.

A seguir será mostrada e discutida a forma final da equação da energia.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D\nabla^2 T + \frac{\Delta H}{c_p} h'(\phi)\frac{\partial \phi}{\partial t} \tag{35}$$

O primeiro termo do lado esquerdo representa o termo transiente da equação de energia. O primeiro termo do lado direito representa o termo difusivo, onde D é a difusividade térmica. O segundo termo representa o termo fonte, onde c_p é o calor específico, ΔH representa o calor latente liberado na região da interface.

A solução numérica das Eqs. 19 e 35 foram obtidas através do método de Diferenças Finitas, estas equações são discretizadas em detalhes no Anexo I. Para ambas as equações foram utilizadas um esquema explícito. E para a utilização deste tipo de esquema as seguintes condições[24] $\Delta t<\Delta x^2/4D$ e $\Delta t<\Delta x^2/(4M\varepsilon^2)$ precisam ser respeitadas para que a convergência seja garantida. Como o valor da difusividade térmica (D = 1.55 x 10^{-5} m^2/s) é maior que o produto $M\varepsilon^2$ = 5.44 x 10^{-7} m^2/s, logo a primeira condição resultará num Δt menor; portanto respeitando a primeira condição atenderemos também a segunda.

Para a simulação de dendritas do níquel, os cálculos foram realizados utilizando um computador Intel® Core™ 2 Quad, 2,83 GHz e 3,25 GB de RAM.

À equação de energia foi adicionado o termo fonte, no qual representa o calor latente que é liberado durante o processo de solidificação, em torno da interface. Como estamos tratando de uma substância pura, a equação de fase, é acoplada à equação da energia, através do termo fonte, como também acontece no caso de ligas.

5 - METODOLOGIA

5.1 - TÉCNICA DE ECONOMIA DE TEMPO

As Técnicas de Economia de Tempo usadas neste trabalho se baseiam no fato de que as mudanças significativas observadas durante a simulação ocorrem na região da interface e na região termicamente afetada. Por isso são desnecessários os cálculos de novos valores de campo de fase distantes da interface; e de temperatura fora da região termicamente afetada. Já que esses cálculos significariam diminuição na eficiência computacional.

Para garantir o funcionamento da técnica foi necessário desenvolver condições que garantam que um ponto esteja na região interfacial ou próxima dela, no caso do campo de fase. E também desenvolver condições que garantam que um ponto esteja na região termicamente afetada ou próxima dessa região, para o campo de temperatura.

Para o campo de fase a condição adotada foi à seguinte; um novo valor para o parâmetro do campo de fase $\phi(I,J)$ somente será calculado se um de seus quatro pontos vizinhos mais próximos tiver valores entre 0.004 e 0.996, condição essa proposta por Kim[24]. Quando o valor de ϕ é menor que 0.004, garante-se que o ponto está na região liquida $(\phi = 0)$. *E* quando o valor de ϕ é maior que 0.996, garante-se que o ponto está na região sólida $(\phi = 1)$.

No campo de temperatura, um novo valor do campo de temperatura $T(I,J)$ só será calculado se a condição proposta por Kim[24] $T(I,J) > T_i + 0.1$ for satisfeita, onde T_i é uma dada temperatura inicial de domínio computacional. Através de experimentação foi possível concluir que esse valor T_i deve ser menor que a temperatura inicial do sistema, para que uma

dendrita bem desenvolvida seja gerada. Essa condição define a região chamada termicamente afetada. Como neste caso a região termicamente afetada não atinge regiões longe da ponta da dendrita e a temperatura do líquido longe da ponta da dendrita permanece constante com um dado super-resfriamento inicial. O domínio computacional para o campo térmico pode ser restrito a região termicamente afetada. Então podemos economizar tempo de calculo para o campo térmico, especialmente no estagio inicial de solidificação.

Um esquema simplificado com a Técnica de Economia de Tempo com foco na redução de tempo de cálculo pode assim ser apresentado:

1) O espaço do sistema é composto por grids quadrados Nx x N_y com espaçamento entre grids $\Delta x = \Delta y$ e avanço no tempo igual a Δt. No inicio da simulação um núcleo solidificado é introduzido no centro do sistema, de onde a dendrita irá se desenvolver.
2) Em cada passo de tempo um valor do campo de temperatura $T(I,J)$ e o campo de fase $\phi(I,J)$ é calculado pelas equações da temperatura e campo de fase, respectivamente . E os valores necessários para cálculos do campo de temperatura $T(I, J)$ e o campo de fase $\phi(I,J)$ são conhecidos do passo anterior.
3) Para o campo de temperatura novos valores de $T(I,J)$ serão calculados através da Eq. 35 se a condição $T(I,J) > T_i + 0.1$, for satisfeita, caso não seja satisfeita, um novo valor do campo de temperatura $T(I,J)$ não precisa ser calculado.
4) Para o calculo do campo de fase, novos valores de $\phi(I, J)$ serão calculados pela Eq. 19 se qualquer uma das seguintes condições for satisfeita: $0.004<\phi(I+1,J)<0.996$, $0.004<\phi(I-1,J)<0.996$, $0.004<\phi(I,J+1)<0.996$ ou $0.004<\phi(I,J-1)<0.996$. Resumidamente significa que se um vizinho próximo está na região interfacial, o próprio ponto também está ou se situa próximo da região interfacial. Já se nenhuma condição for satisfeita o valor do campo de fase $\phi(I,J)$ do passo anterior é adotado para o passo atual.
5) E os passos 3 e 4 são repetidos até se atingir o número de iterações pré determinado ou a dendrita se desenvolver até uma determinada região.

A fig. 14 apresenta um fluxograma que descreve o funcionamento do programa. E os resultados obtidos com essa metodologia serão mostrados e discutidos na próxima seção.

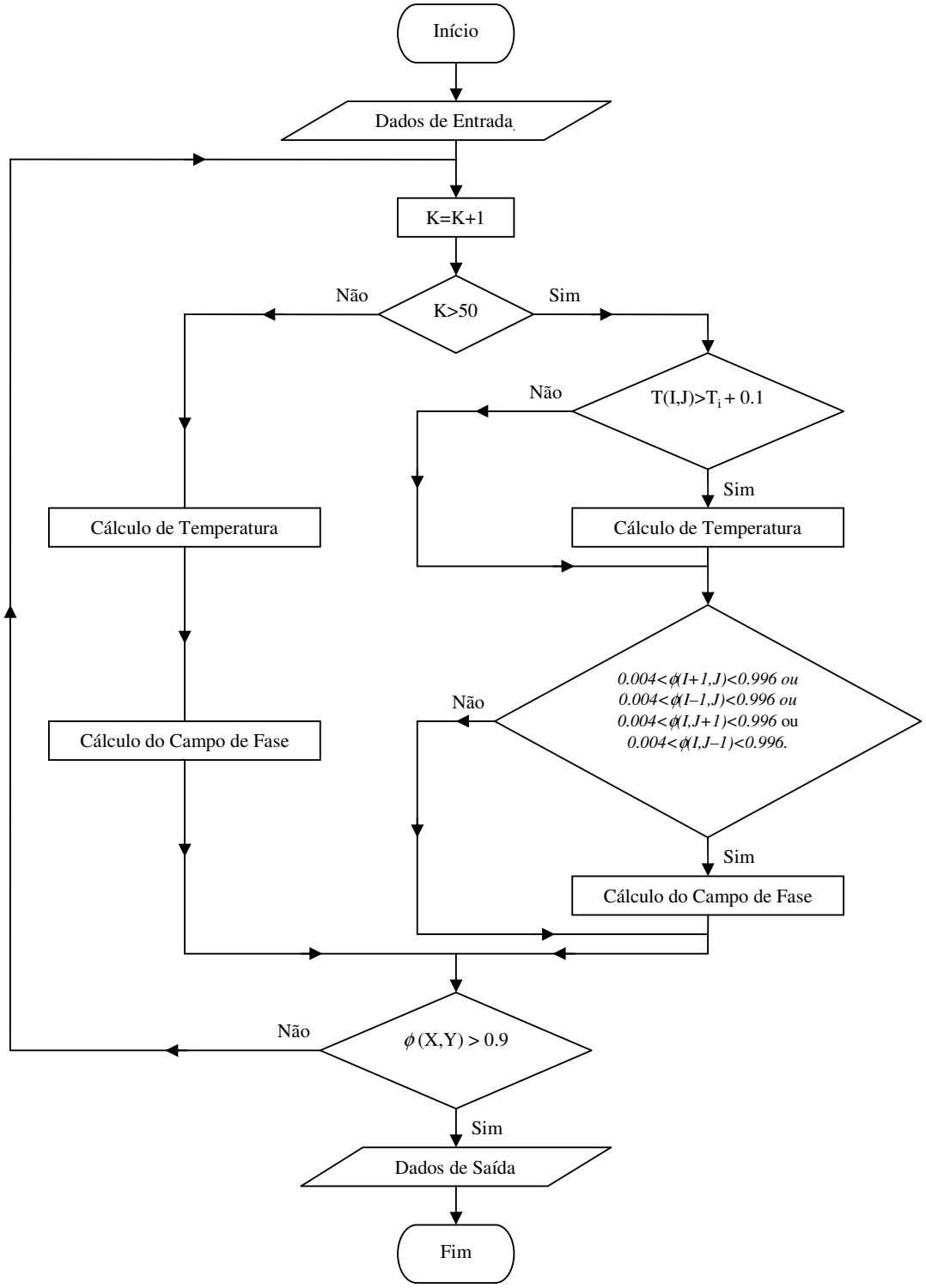


Figura 14 – Fluxograma de funcionamento do método do Campo de Fase com Técnica de Economia de Tempo.

Os parâmetros utilizados no método do Campo de Fase relacionados com as propriedades físicas do material, aplicado à solidificação do metal puro (níquel) são mostrados na tabela 1:

Parâmetros do Modelo	
Amplitude de Ruído (a)	0.025
Constante de Anisotropia (δ_ε)	0.025
Espessura da Interface (ε_0)	2.01×10^{-4} $(J/m)^{1/2}$
Densidade de Energia Interfacial (w)	0.61×10^{8} J/m^3
Mobilidade da Interface (M_0)	13.47 m^3/s J
Espaçamento Malha ($\Delta x = \Delta y$)	2×10^{-8} m
Passo no Tempo (Δt)	6.4×10^{-12} s

Tabela 1 – Parâmetros computacionais utilizados no método do Campo de Fase para o níquel.[24]

6 - RESULTADOS E DISCUSSÕES

Como este trabalho se concentrará no Método do Campo de Fase para substâncias puras. As propriedades do metal puro (Ni) utilizado no desenvolvimento deste trabalho são apresentadas na tabela 2, a seguir:

Propriedades do Níquel	
Energia Interfacial (σ_0)	0.37 J/m^2
Coeficiente Cinético Linear Interfacial (μ^K)	2 m/s K
Temperatura de Fusão (T_m)	1728 K
Calor Latente (ΔH)	2.35 x 10^9 J/m^3
Difusividade Térmica (D)	1.55 x 10^{-5} m^2/s
Capacidade Calorífica (C_p)	5.24 x 10^6 J/m^3 K
Espessura da Interfacial ($2\lambda_0$)	8 x 10^{-8} m

Tabela 2 – Propriedades físicas do níquel.[24]

6.1 - RELAÇÃO ENTRE A VELOCIDADE DA PONTA DA DENDRITA E O SUPER-RESFRIAMENTO

Muitos experimentos foram realizados com o objetivo de entender a velocidade de crescimento das dendritas em condições de líquidos super-resfriados, vários destes experimentos utilizaram à água, como o citado em Chalmers[23]. Com estes experimentos

Chalmers[23] concluiu que as dendritas avançam mais rapidamente do que as interfaces planas, para dentro da região líquida. Walker citado em Chalmers[23] fez diversas medidas da velocidade da dendrita do níquel e cobalto, em ambas as experiências foi utilizado líquidos super-resfriados com nucleação homogênea. Os resultados de Walker citado em Chalmers[23] mostraram uma relação parabólica entre o super-resfriamento (ΔT) e a velocidade da ponta da dendrita. Os resultados obtidos para o níquel são mostrados na fig. 15. Nesta figura, pode-se observar a velocidade de crescimento versus o super-resfriamento (ΔT), com uma relação aproximadamente parabólica.

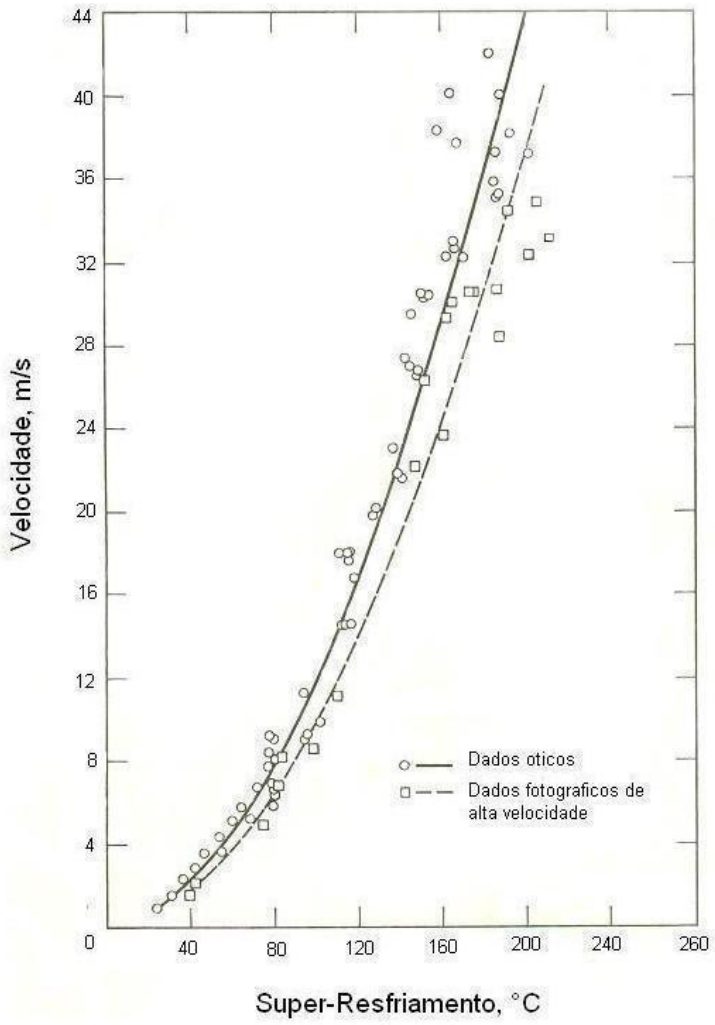


Figura 15 - Taxa de crescimento do níquel, num líquido super-resfriado.[23]

Para a construção da relação entre a velocidade da ponta da dendrita versus o super-resfriamento, foram feitas simulações para seis valores de super-resfriamento: 28, 78, 128, 178, 228 e 278 K. Nestas simulações foi medido o número de iterações (*K*) para que a ponta da dendrita percorresse uma distância fixa *d*. O tempo de solidificação é o produto do número de iterações (*K*) pelo intervalo de tempo Δt. E a velocidade da ponta da dendrita é a razão entre a distância *d* pelo tempo de solidificação. As simulações foram realizadas tanto para o método do Campo de Fase com e sem a utilização da Técnica de Economia de Tempo. Como mostra a fig. 16 as curvas para cada tipo de método ficaram sobrepostas. Isto era de se esperar; já que a substancia é a mesma, e só houve variação no método utilizado.

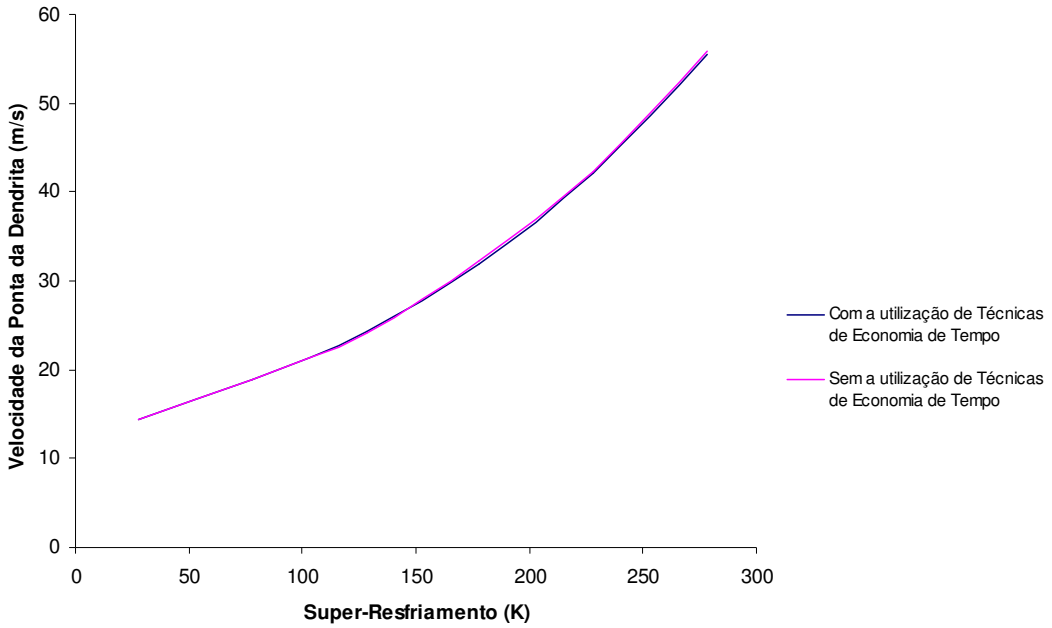


Figura 16 – Velocidade da ponta da dendrita x super-resfriamento térmico (ΔT)

A fig. 17 é a relação entre a velocidade da ponta da dendrita versus o super-resfriamento para o Método do Campo de Fase com a utilização da Técnica de Economia de Tempo. O objetivo deste gráfico é a comprovação da relação parabólica proposta por Chalmers[23] para a relação entre a velocidade da ponta da dendrita versus o super-resfriamento. Para isto foi traçada uma relação parabólica no gráfico, e foi calculado o valor do índice de correlação (R^2). O índice de correlação é uma medida do grau de proximidade entre os valores estimados e os observados da variável, conforme citado em Downing e

Clark[35]. Quanto mais próximo o valor de R^2 é de um 1, mais próximo estão os valores estimados dos valores observados. Como neste caso o valor de R^2 é muito próximo de um 1, a relação entre a velocidade da ponta da dendrita versus o super-resfriamento para o Método do Campo de Fase com a utilização da Técnica de Economia de Tempo é praticamente igual a relação parabólica traçada; o que comprova a relação parabólica proposta por Chalmers[23].

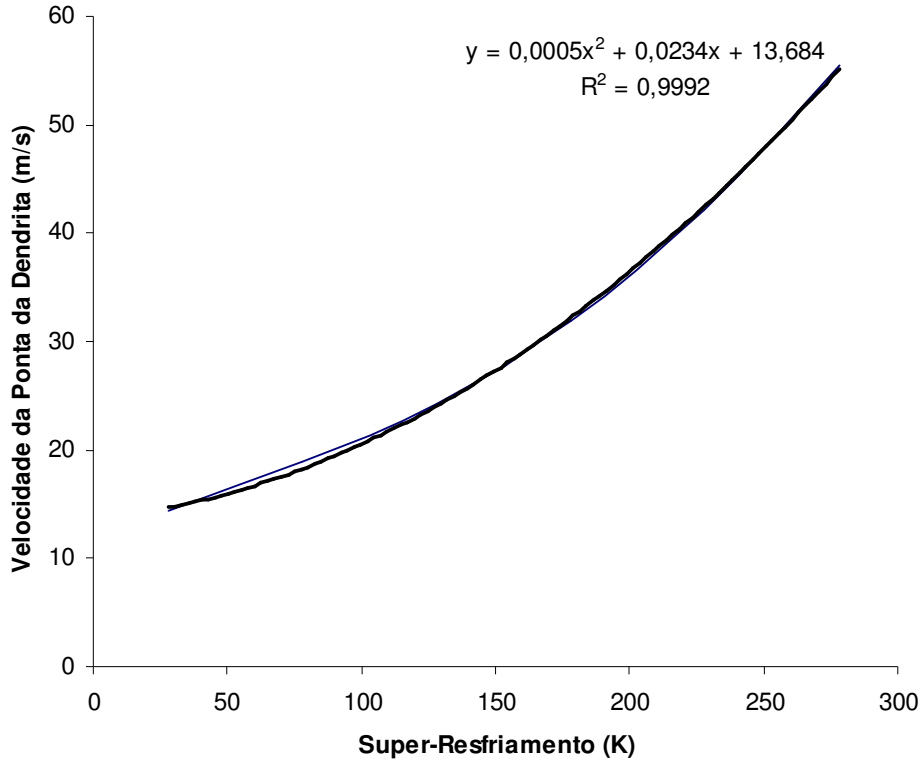


Figura 17 – Velocidade da ponta da dendrita x super-resfriamento térmico (ΔT) com a utilização deTécnicas de Economia de Tempo.

6.2 - ESTIMATIVA DA FRAÇÃO SOLIDIFICADA EM FUNÇÃO DO TEMPO

A fig. 18 mostra a evolução da fração solidificada (F_S) com tempo para uma temperatura de 1700 K. Esta fração solidificada é dada pela razão do volume de controle do sólido pelo volume de controle total do domínio, como mostrado no trabalho de Furtado[20].

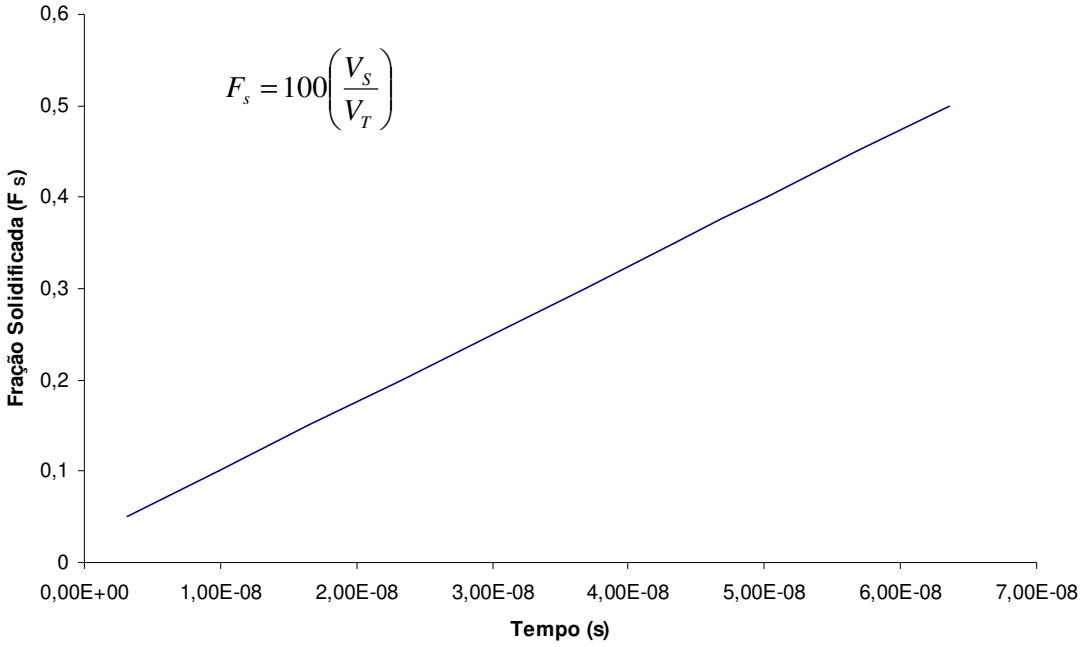


Figura 18 - Fração solidificada (F_S) em função do tempo.

Uma fina camada sólida foi adicionada no limite esquerdo do domínio retangular, sendo consideradas condições de contorno adiabáticas no sistema. E tempos de solidificação foram medidos para determinados pontos do domínio. Com posse destes resultados foi possível traçar um gráfico da fração sólida (F_S) em função do tempo. Na fig. 18, observa-se uma relação linear entre a fração solidificada e o tempo, isto para o caso de uma substância pura. Esta relação totalmente linear durante a solidificação é diferente da relação citada estabelecida por Furtado[20] para o caso de ligas ternárias, onde no começo da solidificação a um crescimento rápido da fração solidificada, mas com o passar do tempo este crescimento diminui de intensidade.

6.3 - COMPARAÇÃO ENTRE O MÉTODO DO CAMPO DE FASE COM OU SEM A UTILIZAÇÃO TÉCNICAS DE ECONOMIA DE TEMPO

Para comprovar a eficiência das Técnicas de Economia de Tempo, foi possível a geração de uma dendrita com um grid 2000x2000 em aproximadamente 10 horas e 30 minutos, como mostra a fig. 19. Uma dendrita com as mesmas características: modo de

anisotropia (j) = 4, ângulo de máxima anisotropia (θ_0) = 90° e temperatura de super-resfriamento (ΔT) = 328 K; mas gerada com o Método do Campo de Fase sem a utilização de Técnicas de Economia de Tempo, demandaria um tempo grande para ser gerado.

Na fig. 19 observam-se os braços primários e secundários completamente desenvolvidos e alguns braços terciários que começam a crescer. Pode-se também concluir que, os comprimentos dos braços secundários aumentam progressivamente à medida que se afastam da ponta da dendrita. Uma característica interessante nesta simulação é a assimetria entre os braços da dendrita, gerado pela fonte de ruído. As ramificações ocorrem somente de um lado da dendrita, isto pode ser observado em experimentos de crescimentos de dendrita em metais super-resfriados. As ramificações laterais crescem preferencialmente na direção da liberação do calor latente. Também foi possível concluir que o super-resfriamento é a força motriz do processo de solidificação de um metal puro, pois se a temperatura estivesse acima da temperatura de fusão a interface sólido/líquido não avançaria para dentro da região líquida, em condições adiabáticas impostas previamente na fronteira do domínio. Conclui-se também que a temperatura do líquido longe da interface não foi alterada significativamente, e a região já solidificada apresenta o maior gradiente de temperatura, isto se deve ao fato da 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, o domínio faz-se sentir primeiro as mudanças de temperatura, e em seguida a transformação de fase, ou seja, o gradiente de temperatura difunde-se mais rapidamente do que a interface sólido/líquido, isto é uma condição para que ocorram as ramificações na estrutura dendrítica.

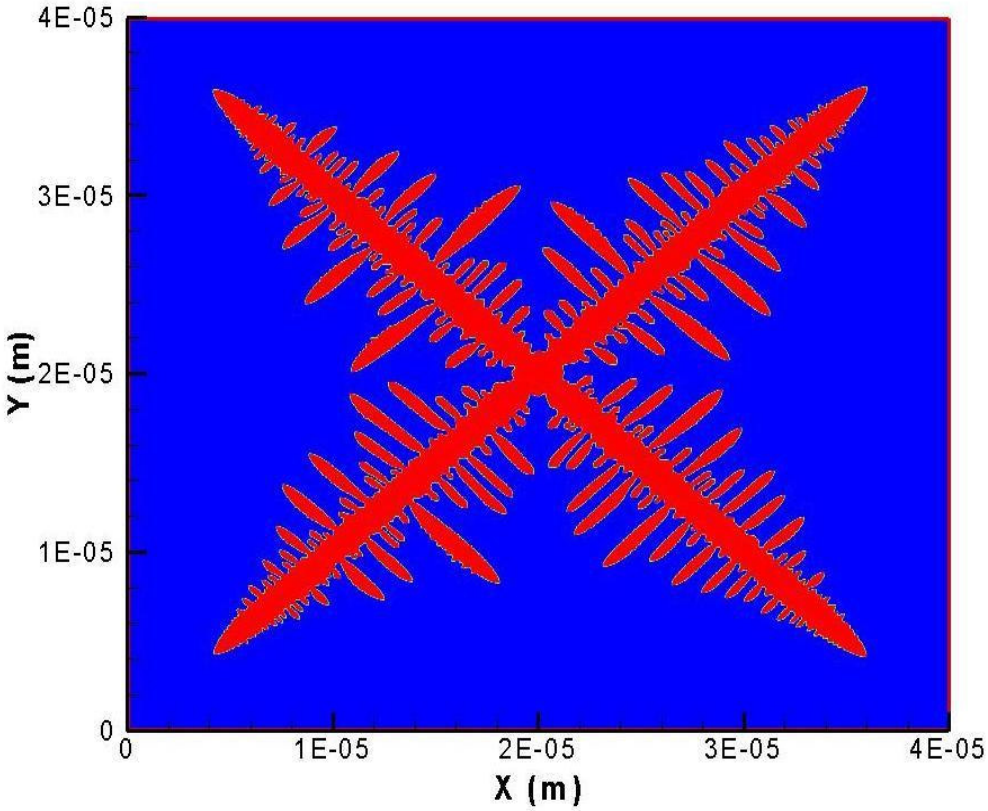
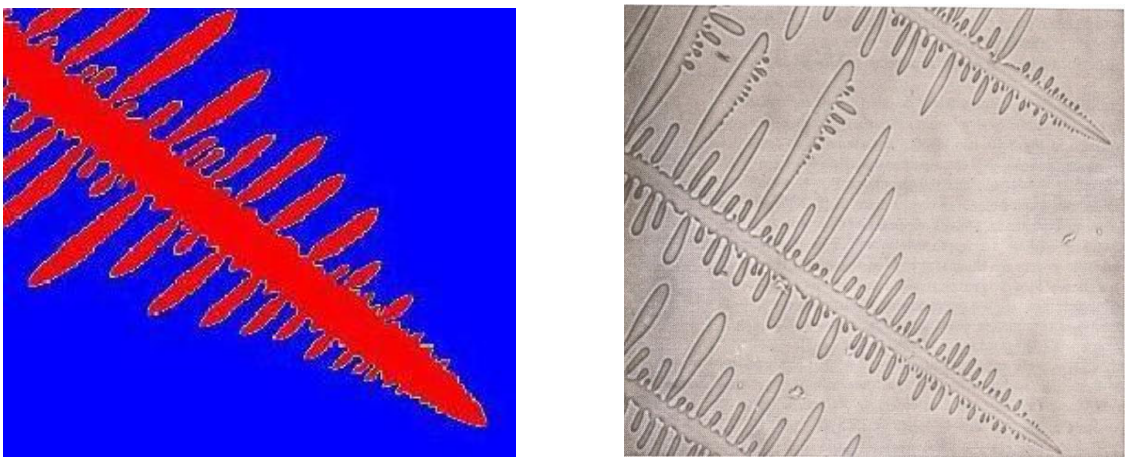


Figura 19 - Dendrita gerada de um núcleo solidificado no centro de um grid 2000x2000.

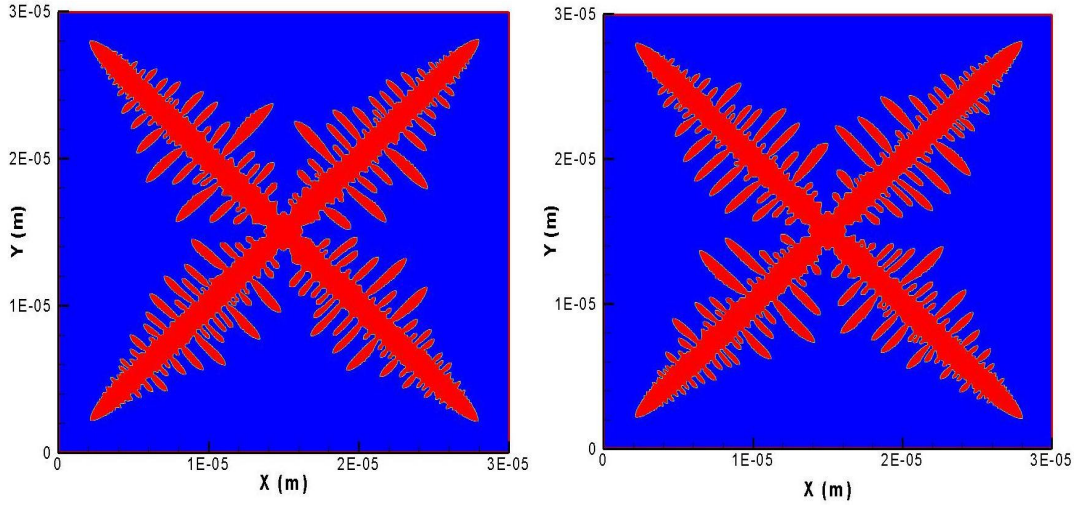
A fig. 20 faz uma comparação entre uma dendrita gerada pela simulação deste trabalho e uma dendrita obtida experimentalmente. Comparação foi focada na morfologia, já que não havia informações sobre a escala da dendrita experimental. A fig. 20(a) mostra em detalhe parte da dentrita da fig. 19, essa dentrita foi gerada pela simulação do método do Campo de Fase para o níquel. Já a fig. 20(b) mostra uma dendrita de uma liga impura de chumbo, conforme Prates[1]. Independente na natureza diferente das substâncias, uma é níquel puro e a outra é uma liga de chumbo, o que chama atenção é a semelhança entre a morfologia das dendritas. Ambas possuem características parecidas, como braços primários bem desenvolvidos, braços secundários crescendo perpendicularmente aos braços primários, e alguns braços terciários começando a crescer perpendicularmente dos braços secundários.



(a) (b)

Figura 20 – Dendritas geradas (a) por simulação e (b) experimentalmente.

A fig. 21 mostra duas dendritas, uma gerada pelo Método do Campo de Fase sem a utilização de Técnicas de Economia de Tempo e outra gerada com a utilização de Técnicas de Economia de Tempo, para comparação entre a morfologia das dendritas e comparação do tempo computacional. Em relação à morfologia da dendrita, não há diferenças significativas, as duas possuem as mesmas características quanto à formação das ramificações laterais; possuem braços primários e secundários bem desenvolvidos e muito semelhantes. Mas em relação ao tempo computacional a diferença é expressiva. Na fig. 21(a) a dendrita gerada no método do Campo de Fase sem a utilização de Técnicas de Economia de Tempo l levou 22 horas e 38 minutos, já na fig. 21(b) onde foi utilizada Técnicas de Economia de Tempo o tempo foi de 3 horas e 24 minutos. Uma redução de aproximadamente 85%.



(a) (b)

Figura 21 – Dendritas com grid 1500x1500, geradas (a) sem Técnicas de Economia de Tempo e (b) com Técnicas de Economia de Tempo.

A fig. 22 mostra os estágios de crescimento da dendrita com grid 1500x1500 com a utilização de Técnicas de Economia de Tempo. A fig. 22(a) representa o estagio inicial do crescimento da dendrita, onde ainda não é possível identificar nenhuma ramificação na dendrita. Já as figs. 22(b) e 22(c) são estágios intermediários do crescimento dendrítico, onde a dendrita já apresenta sua forma característica, com o desenvolvimento de braços primários e também braços secundários. Na fig. 22(d) é mostrada a dendrita plenamente desenvolvida, com braços primários e braços secundários bem desenvolvidos.

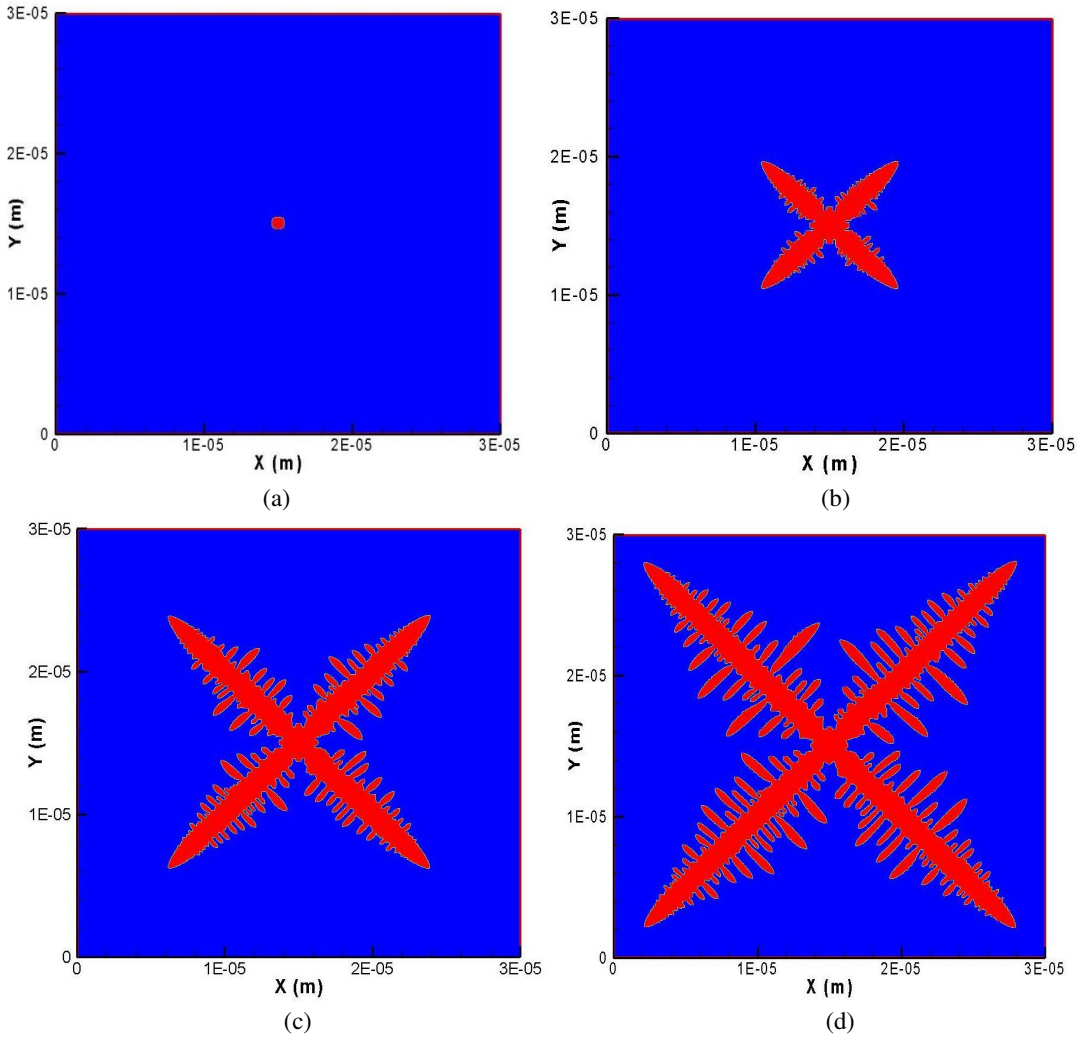


Figura 22 – Os estágios de crescimento da dendrita com grid 1500x1500 com a utilização de Técnicas de Economia de Tempo.

Para a comparação entre o método do Campo de Fase com a utilização de Técnicas de Economia de Tempo e o método do Campo de Fase sem a utilização de Técnicas de Economia de Tempo foram feitas três simulações com os seguintes números de pontos de grid: 100, 200, 400, 800, 1000, 1200 para cada tipo de método. Nestas simulações todos os outros parâmetros do modelo foram mantidos constantes para os dois métodos. O mais importante na simulação era o tempo computacional para a geração da dendrita. Porque com estes resultados foi possível a realização de uma comparação entre os dois métodos, em relação ao tempo computacional.

Como resultado das simulações foi elaborada a tabela 3, que mostra a média dos tempos computacionais e o desvio padrão pelo número pontos de grids, para cada tipo de

método utilizado. Além disso, a tabela 3 também mostra o resultado do cálculo da redução percentual do tempo computacional do método sem a utilização de Técnicas de Economia de Tempo para o método que utiliza Técnicas de Economia de Tempo. Partindo da tabela 3 um gráfico foi gerado como mostra a fig. 23. Na fig. 23 a linha azul representa o método do Campo de Fase sem a utilização de Técnicas de Economia de Tempo e a linha vermelha representa o método do Campo de Fase com a utilização de Técnicas de Economia de Tempo. A fig. 23 mostra a eficiência computacional do método do Campo de Fase com a utilização de Técnicas de Economia em relação ao método do Campo de Fase sem a utilização de Técnicas de Economia, uma vez que para todos os números de pontos de grids simulados ele apresenta um tempo computacional menor. Além disso, à medida que o número de pontos de grid é aumentado, a redução percentual do tempo computacional entre os dois métodos também aumenta, mesmo esse aumento não apresentando proporcionalidade.

Número de pontos no grid	**Tempo computacional para o método do Campo de Fase (segundos)**		**Redução percentual do tempo computacional**
	Sem Técnicas de Economia de Tempo	**Com Técnicas de Economia de Tempo**	
100	14.75 ± 0.08	3.44 ± 0.07	76.67%
200	149.23 ± 1.25	27.94 ± 0.45	81.28%
400	1651.94 ± 2.20	292.37 ± 1.69	82.3%
800	16790.34 ± 2.72	2896.41 ± 1.93	82.75%
1000	31707.41 ± 3.00	5307.41 ± 2.16	83.26%
1200	57385.47 ± 4.02	9033.56 ± 2.89	84.26%

Tabela 3 – Valores do tempo computacional pelo número de pontos no grid.

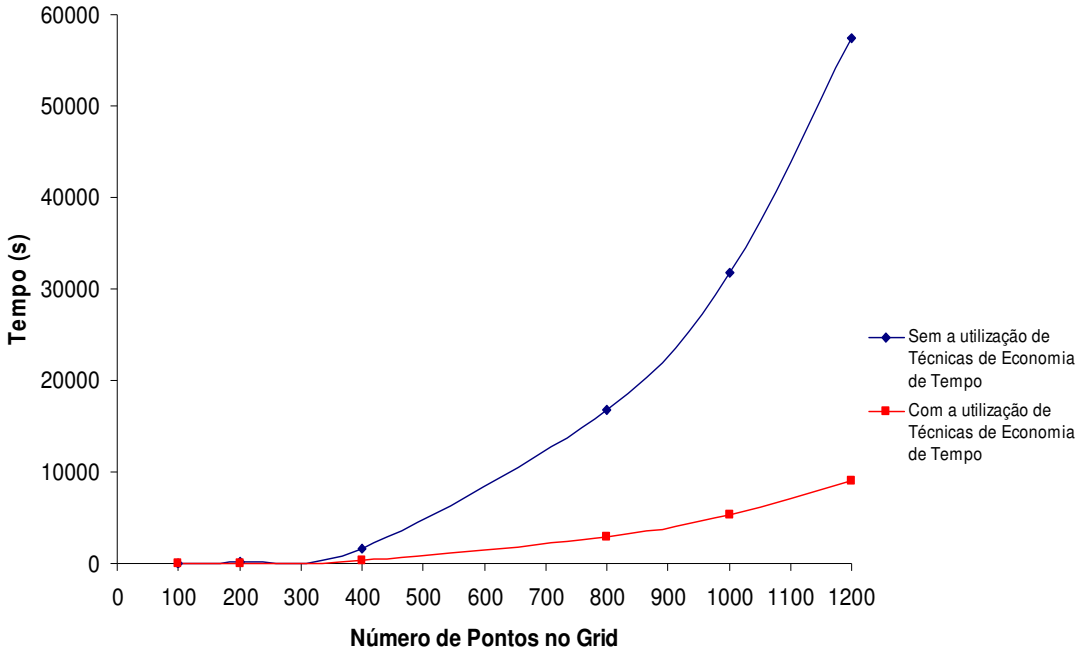


Figura 23 – Gráfico tempo computacional versus número de pontos no grid.

Mas só a realização de uma comparação entre o tempo computacional dos dois métodos não é o suficiente para comprovar a eficiência do método do Campo de Fase com a utilização de Técnicas de Economia de Tempo. Além dessa comparação é preciso outros tipos de comparações que avaliem questões referentes à morfológica e a cinemática de cada tipo de método.

A comparação morfológica avalia a morfologia das dendritas geradas pelos dois tipos de métodos. Esta comparação é possível com a construção do gráfico para a razão entre o comprimento e a largura do braço primário versus o tempo adimensional de Fourier. Onde o tempo adimensional de Fourier é a razão entre a taxa de condução de calor e a taxa de armazenamento de energia interna em um sólido, conforme Kreith e Bohn[36]. Para cada valor de tempo adimensional de Fourier é medido o tamanho e a largura do braço primário neste ponto, e assim é calculada a razão entre eles. A fig. 24 mostra as curvas para a razão entre o comprimento e a largura do braço primário versus o tempo adimensional de Fourier do método do Campo de Fase sem e com a utilização de Técnicas de Economia de Tempo. Os valores e os perfis das curvas são bastante semelhantes. Quando o tempo adimensional de Fourier é pequeno, ambos os métodos apresentam um valor elevado para a razão entre o

comprimento e a largura do braço primário; já no caso de tempo adimensional de Fourier maiores, ambos os métodos apresentam um valor pequeno para a razão entre o comprimento a largura do braço primário. Então é possível afirmar que a morfologia das dendritas geradas pelo método do Campo de Fase com e sem a utilização de Técnicas de Economia de Tempo são muito próximas.

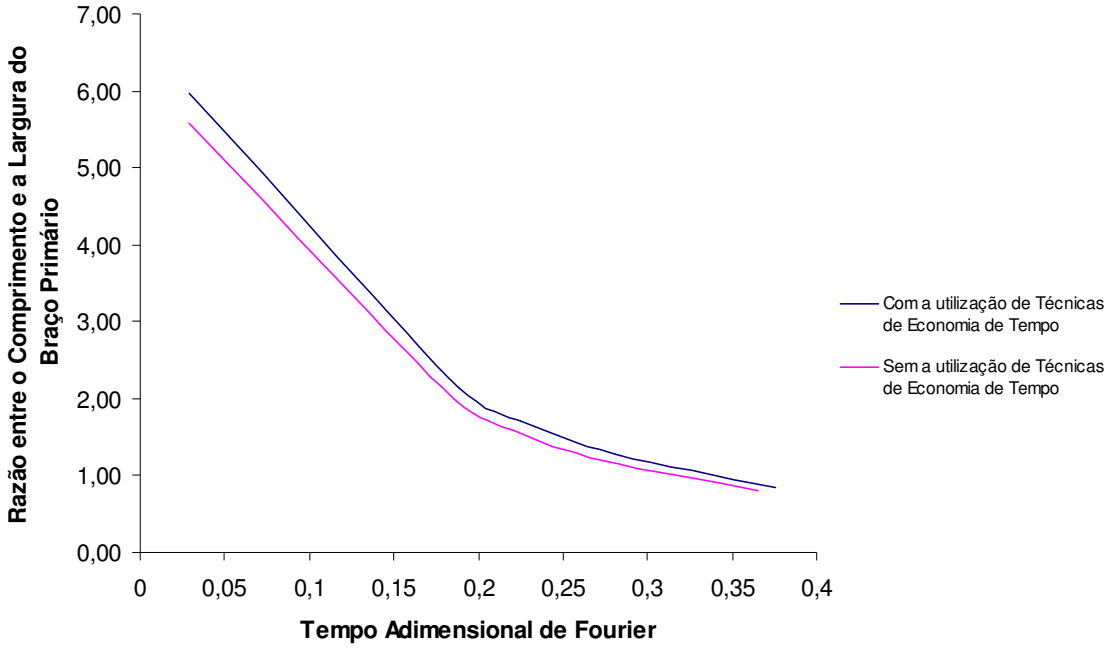


Figura 24 - Comparação morfológica.

A comparação cinemática avalia o movimento realizado pelas das dendritas geradas pelos dois tipos de métodos durante o seu crescimento. Esta comparação é possível com a construção do gráfico para a razão entre velocidade de solidificação e a máxima velocidade de solidificação versus o tempo adimensional de Fourier. A máxima velocidade de solidificação é a velocidade de solidificação no maior super-resfriamento que se consiga gerar dendritas, no caso do níquel este super-resfriamento corresponde a ΔT = 319 K[23]; já o super-resfriamento utilizado em todas as simulações equivale a um ΔT = 260 K. Então para cada valor de tempo adimensional de Fourier é medida a velocidade de solidificação e a máxima velocidade de solidificação, e assim é calculada a razão entre elas. A fig. 25 mostra as curvas para a razão entre a velocidade de solidificação e a máxima velocidade de solidificação versus o tempo adimensional de Fourier do método do Campo de Fase sem e com a utilização de

Técnicas de Economia de Tempo. Os valores e os perfis das curvas são bastante semelhantes. Quando o tempo adimensional de Fourier é pequeno, ambos os métodos apresentam um valor um pouco mais elevado para a razão entre a velocidade de solidificação e a máxima velocidade de solidificação; no caso de tempos adimensionais de Fourier maiores, ambos os métodos apresentam um valor um pouco menor para a razão entre a velocidade de solidificação e a máxima velocidade de solidificação. Então é possível afirmar que o movimento realizado pelas dendritas geradas pelo método do Campo de Fase com e sem a utilização de Técnicas de Economia de Tempo durante o crescimento dendrítico são muito próximas.

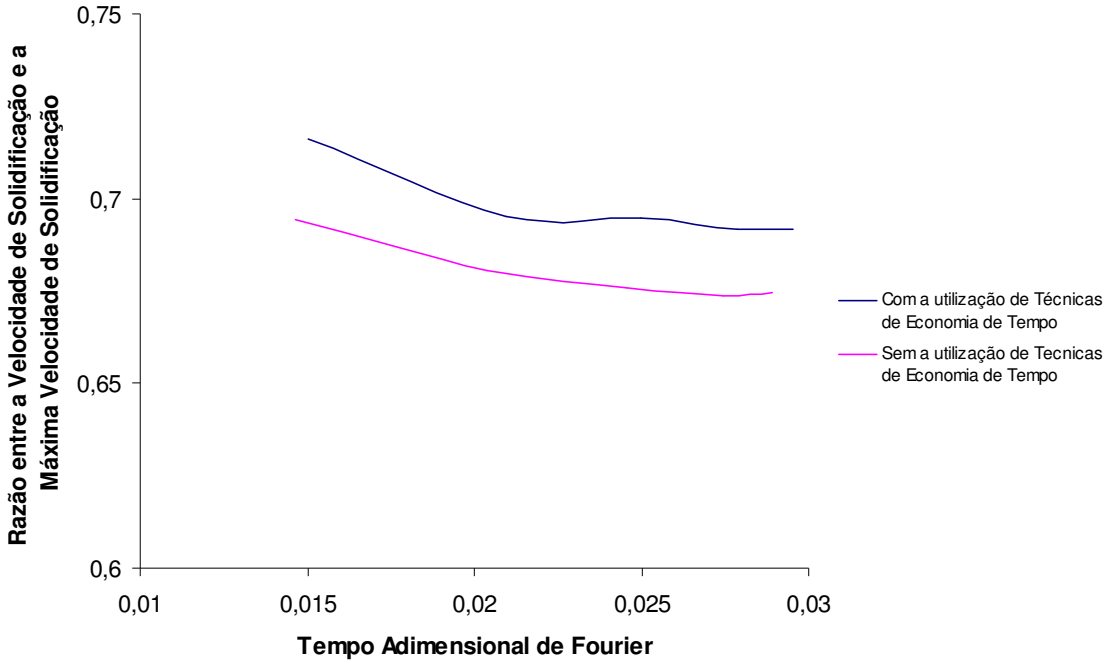


Figura 25 - Comparação Cinemática.

As comparações morfologia e cinemática entre os métodos do Campo de Fase com e sem a utilização de Técnicas de Economia de Tempo, mostraram perfis semelhantes; o que comprova que a adoção de técnicas de Economia de Tempo no método do Campo de Fase não prejudica os resultados de simulação. No tocante a comparação entre os tempos computacionais, os resultados mostraram que o método do Campo de Fase com a utilização de Técnicas de Economia de Tempo foi mais eficiente. Portanto, o método do Campo de Fase com a utilização de Técnicas de Economia de Tempo consegue os mesmos resultados de

simulação do método do Campo de Fase sem a utilização de Técnicas de Economia de Tempo com um tempo computacional bem menor.

6.4 - INFLUÊNCIA DA FONTE DE RUÍDO NA SOLIDIFICAÇÃO

Na fig. 26 são mostradas três dendritas geradas com 600 pontos de grid em cada direção, onde foi variado somente o valor amplitude de ruído (*a*) em cada caso. Quanto maior o valor da amplitude de ruído, mas assimétrica será morfologia da dendrita, já que os ruídos representam perturbações ocorridas durante a solidificação; e essas perturbações simulam o caso real, onde as dendritas geradas não são totalmente simétricas. Essa assimetria é bem observada na fig. 26(a) onde os braços secundários crescem com uma forma diferenciada em cada lado do braço primário, em contra partida na fig. 26(c) a dendrita é quase totalmente simétrica já que nem braços secundários se formam. Durante as simulações para este trabalho foi utilizado um valor para a amplitude de ruído (*a*) de 0.025, este valor é padrão para o níquel conforme mostrado na tabela 1.

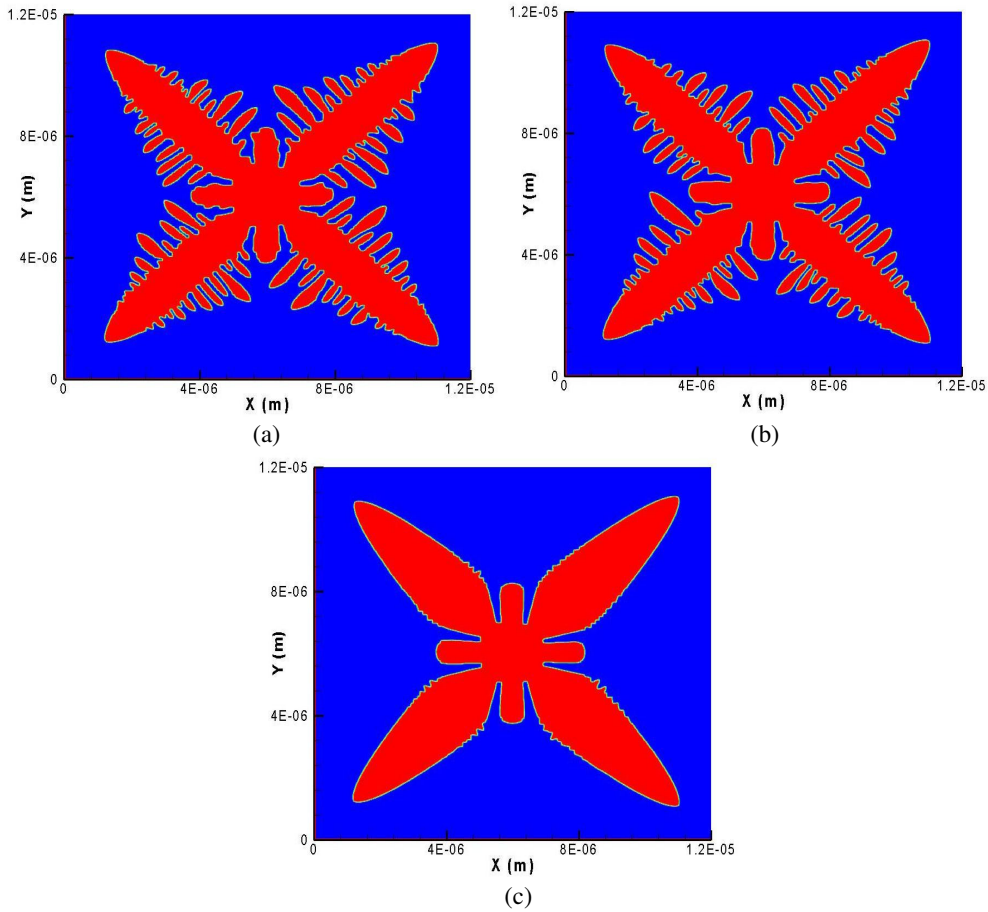


Figura 26 – Influência da amplitude de ruído na formação da dendrita. (a) a = 0.025, (b) a = 0.015 e (c) a = 0.

6.5 - INFLUÊNCIA DA ANISOTROPIA NA SOLIDIFICAÇÃO

Na fig. 27 são mostradas três dendritas geradas com 600 pontos de grid em cada direção, onde foi variado somente o valor da constante de anisotropia (δ_ε) em cada caso. Através destas simulações foi possível concluir que com o aumento do valor da constante de anisotropia (δ_ε) a dendrita cresce apresentando um ângulo preferencial de crescimento (θ_0); isto até o valor padrão para o níquel conforme a tabela 2, porque a partir deste valor a dendrita cresce totalmente sem obedecer a um ângulo preferencial de crescimento. A fig. 27(a) mostra a evolução da interface sólido/líquido com $\delta_\varepsilon = 0$, que dizer força de anisotropia nula, onde se observa o crescimento das pontas da dendrita sem uma direção preferencial de crescimento, neste caso 45°. Para valores da força de anisotropia diferente de zero, $\delta_\varepsilon = 0.01$, como o caso

da fig. 27(b), a dendrita tem um crescimento mais próximo do ângulo preferencial. Para δ_ε = 0.025, valor padrão para o níquel conforme a tabela 1, como no caso da fig. 27(c), a dendrita cresceu respeitando totalmente o ângulo preferencial de crescimento no caso 45°.

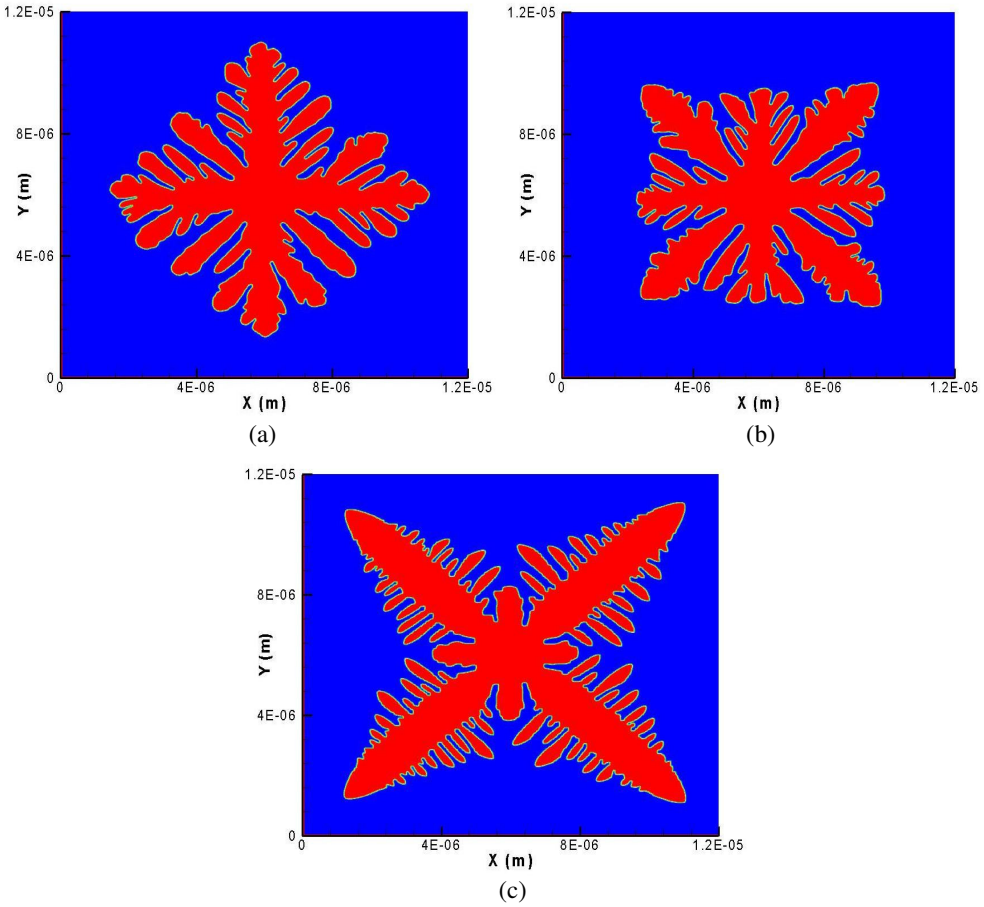


Figura 27 - Influência da força de anisotropia na formação da dendrita. (a) $\delta\varepsilon$ = 0, (b) $\delta\varepsilon$= 0.01 e (c) $\delta\varepsilon$= 0.025.

6.6 - INFLUÊNCIA DO SUPER-RESFRIAMENTO NA SOLIDIFICAÇÃO

Na fig. 28 são mostradas três dendritas geradas com 800 pontos de grid em cada direção, onde o número de iterações foi mantido constante e foi variado somente o valor do super-resfriamento para cada caso. Na fig. 28(a) foi adotado um super-resfriamento de ΔT = 300 K, e a dendrita gerada a partir de um núcleo no centro do grid se desenvolve por todo o domínio. Já na fig. 28(b) com um super-resfriamento ΔT = 200 K, a dendrita gerada a partir

do centro do domínio não se desenvolve tanto quanto na fig. 28(b). E na fig. 28(c) onde o super-resfriamento é igual a ΔT = 100 K, a dendrita gerada a partir de um núcleo no centro do domínio se desenvolveu menos ainda em relação às outras duas dendritas. Portanto é possível concluir que 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, e o super-resfriamento determina a velocidade da frente de solidificação.

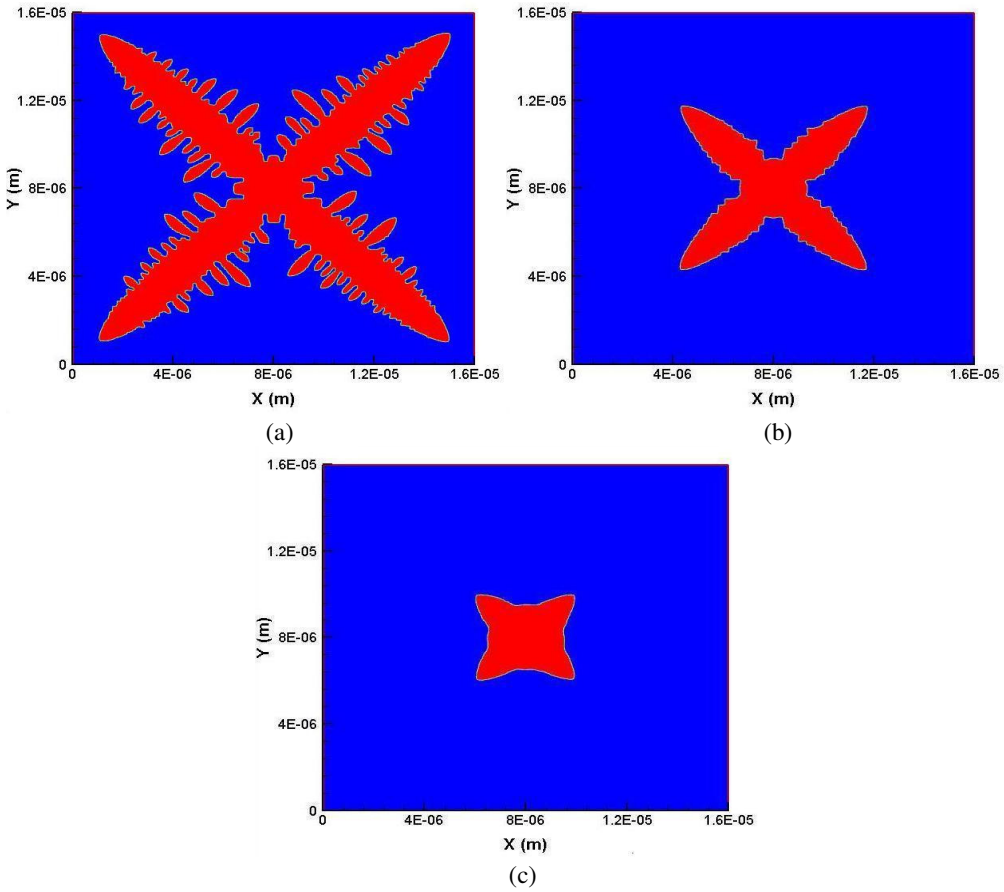


Figura 28 - Influência do super-resfriamento na formação da dendrita. (a) ΔT=300 K, (b) ΔT=200 K e (c) ΔT=100 K.

6.7 - PERFIL DO CAMPO DE FASE E DA TEMPERATURA

A fig. 29 mostra, o crescimento da dendrita num estágio intermediário, neste estágio foi retirado os dados de temperatura e o campo de fases (ϕ), na ponta da dendrita, e estes resultados serão discutidos posteriormente.

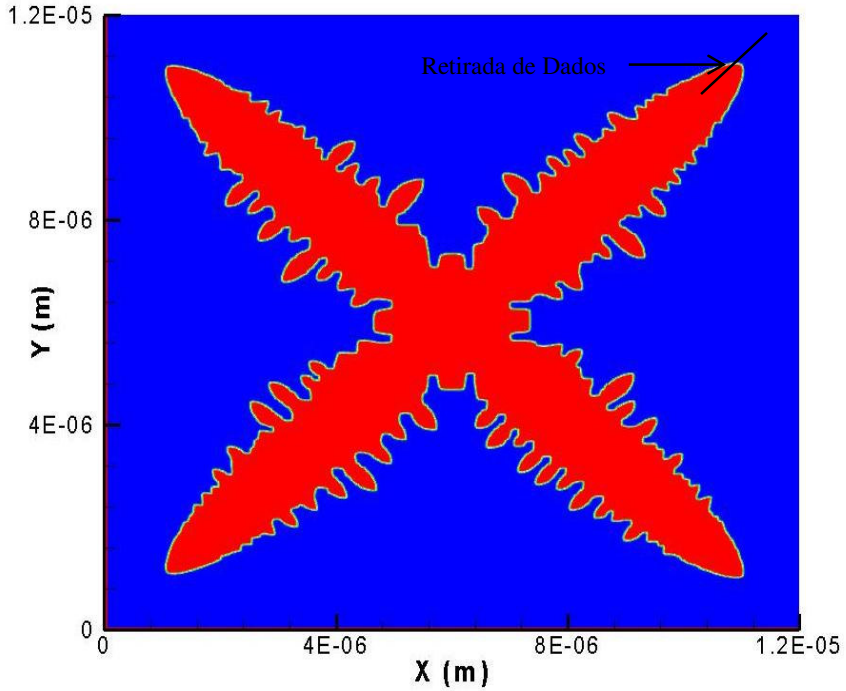


Figura 29 – Crescimento dendrítico num estágio intermediário do processo de solidificação.

Se na fig. 29, tem-se o crescimento dendrítico durante o processo de solidificação. Na fig. 30, tem-se o mesmo estágio de formação, porém para o campo térmico.

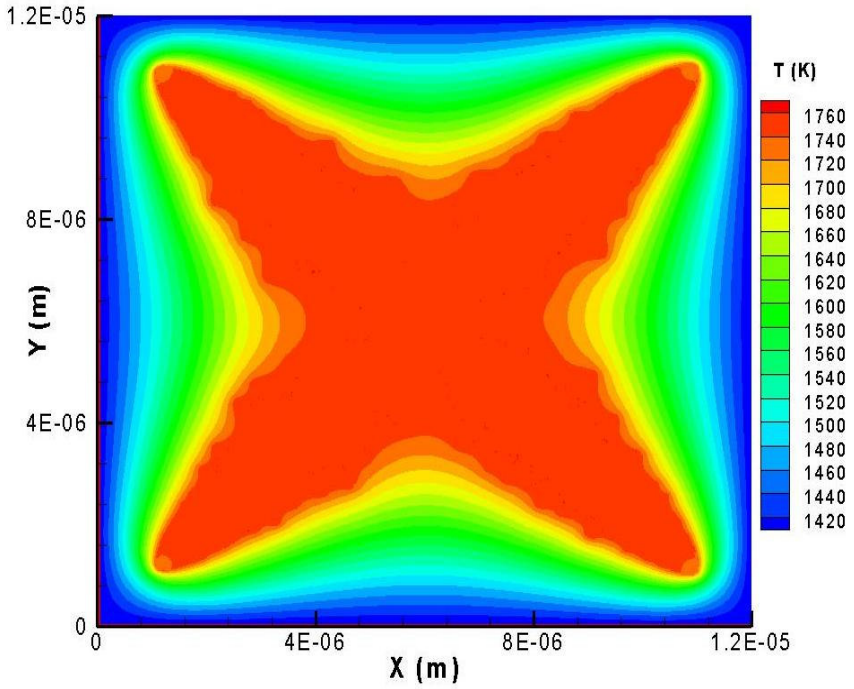


Figura 30 – Campo de Temperatura num estágio intermediário do crescimento dendrítico, para um metal puro super-resfriado.

Vale lembrar que num instante inicial todo o domínio foi preenchido com líquido super-resfriado termicamente ($\Delta T = 328\ K$), este super-resfriamento térmico é a força motriz do processo de solidificação, pois se a temperatura estivesse acima da temperatura de fusão a interface sólido/líquido não avançaria para dentro da região líquida. E quanto às condições de contorno, elas são adiabáticas para a equação da temperatura. Na fig. 30, observa-se que a temperatura do líquido longe da interface não foi alterada significativamente, a região já solidificada apresenta o maior gradiente de temperatura, isto se deve ao fato da 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, o domínio faz-se sentir primeiro as mudanças de temperatura, e em seguida à transformação de fase, ou seja, o gradiente de temperatura difunde-se mais rapidamente do que a interface sólido/líquido, isto é uma condição para que ocorram as ramificações na estrutura dendrítica no modelo. Caso este fenômeno não ocorra, a interface sólido/líquido avança para dentro da região do líquido na forma de uma superfície plana. A fig. 31 mostra o perfil de temperatura e da variável ϕ do campo de fase.

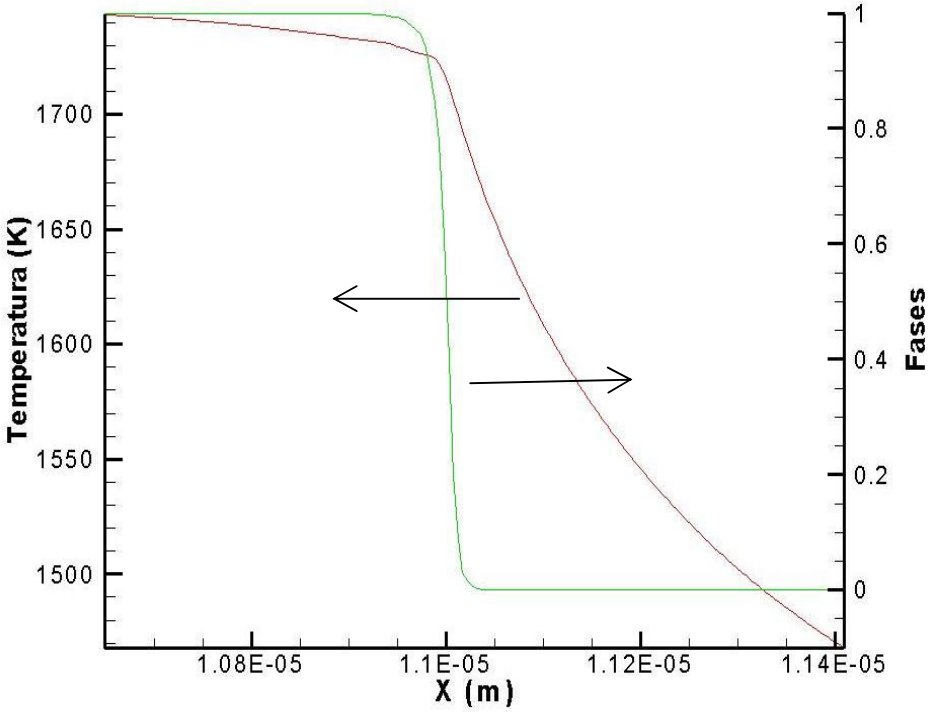


Figura 31 – Perfil de temperatura e da variável ϕ do método do Campo de Fase através da interface sólido/líquido.

Observa-se na fig. 31, a linha verde mostra que para $\phi = +1$, tem-se a região solidificada e para $\phi = 0$, tem-se a região do líquido, para valores do parâmetro ϕ entre 0 e +1, tem-se a interface, pode-se dizer então que este parâmetro do campo de fase (ϕ) varia suave e continuamente de 0 a +1 na região da interface.

Para o perfil da temperatura nesta região, observa-se um gradiente expressivo na região da interface e próxima a ela, como mostra a linha vermelha. Há também gradientes de temperatura nas regiões do sólido e líquido, porém menos expressivo à medida que se tem o afastamento da interface.

7 - CONCLUSÕES

Os resultados deste trabalho mostraram que a utilização do método do Campo de Fase com a utilização de Técnicas de Economia de Tempo é uma ótima alternativa para a melhora do método do Campo de Fase. Comparações quanto à morfologia e a cinemática mostram que o método do Campo de Fase com e sem utilização de Técnicas de Economia de tempo geraram dendritas com características bem semelhantes. Em relação ao tempo computacional, o método do Campo de Fase com Técnicas de Economia de Tempo reduz o tempo computacional em média na casa dos 80%. Além da fig. 20 mostrar que as dendritas geradas pelo método do Campo de Fase com a utilização de Técnicas de Economia de Tempo, estão de acordo com as dendritas experimentais encontradas na literatura.

Outra confirmação alcançada foi da relação parabólica entre a velocidade de avanço da ponta da dendrita e o super-resfriamento. O gráfico gerado se assemelha ao gráfico encontrado na literatura quando esta relação foi proposta.

Já no caso da relação entre a fração solidificada em função do tempo, foi encontrado um perfil linear, para este caso em que tratamos de uma substância pura.

Também foi possível observar a influencia do fator amplitude de ruído na morfologia da dendrita. À medida que esse fator é aumentado, uma dendrita mais assimétrica é gerada, característica de uma dendrita real.

Com relação à influência do fator de anisotropia, conclui-se que ele é o responsável pela dendrita apresentar um ângulo preferencial durante o crescimento. Quer dizer, quando este valor é muito pequeno ou nulo, a dendrita cresce e não respeita o ângulo preferencial de crescimento; já para valores maiores a dendrita cresce ordenada.

Já o super-resfriamento à medida que é aumentado favorece o avanço da interface sólido/líquido, já que a velocidade de avanço da ponta da dendrita é proporcional ao super-resfriamento. O que torna o crescimento dendrítico mais rápido.

8 - SUGESTÕES

A principal seria a utilização da técnica computacional, em trabalhos do Método do Campo de Fase aplicados a ligas: binárias, ternárias e quaternárias, já que estas ligas demandariam ainda mais tempo computacional do que as substâncias puras.

Outra sugestão seria a verificação da eficiência desta técnica na geração de dendritas com três dimensões.

9 - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] Prates, M. C. F.; John G. D.; Solidificação e Fundição de Metais e Suas Ligas. Ed. LTC/EDUSP, 1978, pg. 1-123.

[2] Fix, G.; Phase-Field models for free boundary problems, in: A. Fasano, M. Primicerio (Eds.), Free Boundary Problems, Theory and Application, Pitman, New York, 1983, pp. 580–589.

[3] Langer, J.S.; Models of pattern formation in first-order phase transitions, in: G. Grinstein, G. Mazenko (Eds.), Directions in Condensed Matter Physics, World Science, Singapore, 1986, pp. 164–186.

[4] Caginalp, G., Fife, P.; "Phase-Field methods for interface boundaries", Physical Review B, v. 33, pp. 7792-7794, 1986.

[5] Landau, L.D., Ginzburg, V.L.; On the theory of superconductivity, J. Exp. Theor. Phys. (USSR) 20 (1950) 1064.

[6] Caginalp, G.; Stefan and Hele–Shaw type models as asymptotic limits of the Phase-Field equations, Phys. Rev. A 39 (11) (1989) 5887–5896.

[7] Caginalp, G., Socolovsky, E.A.; Computation of sharp phase boundaries by spreading: the planar and spherically symmetric cases, J.Comput. Phys. 95 (1991) 85–100.

[8] Penrose, O., Fife, P.; Thermodynamically consistent models of Phase-Field type for the kinetics of phase transitions, Physica D 43(1990) 44–62.

[9] Wang, S.L., Sekerka, R.F., Wheeler, A.A., Murray, B.T., Coriell, S.R., Braun, R.J., McFadden, G.B.; Thermodynamically-consistent Phase-Field models for solidification, Physica D 69 (1993) 189–200.

[10] Kobayashi, R.; Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth, Physical D, v. 63, pp. 410-423, 1993.

[11] Wheeler, A.A.; Computation of Dendrite Using a Phase-Field Model. Physica D, vol. 66, 1993, pg. 243-262.

[12] Wheeler, A.A., Boettinger, W.J., McFadden, G.B.; Phase-Field model for isothermal phase transitions in binary alloys, Phys. Rev. A 45(10) (1992) 7424–7440.

[13] Murray, B.T., Boettinger, W.J., McFadden, G.B., Wheeler, A.A.; In: I.S. Habib and S. Thynell, Editors, Heat Transfer in Melting, Solidification, and Crystal Growth, ASME HTD-234, New York (1993), p. 67.

[14] Kupferman, R., Shochet, O., Ben-Jacob, E.; Numerical study of a morphology diagram in the large undercooling limit using a Phase-Field model, Phys. Rev. E 50 (2) (1994) 1005–1009.

[15] Juric, D., Tryggvason, G.; A front-tracking method for dendritic solidification, J. Comput. Phys. 123 (1996) 127–148.

[16] Furtado, A.F., Castro, J.A., Silva, A.J.; Simulation of the solidification of pure nickel via the Phase-Field method, Materials Research, v. 9, n. 4, pp. 349-356, 2006.

[17] Lee, J.S., Suzuki, T.; Numerical simulation of isothermal dendritic growth by Phase-Field model, ISIJ International, v. 39, n. 3, pp. 246-252, 1999.

[18] Ode, M., Suzuki, T.; Numerical simulation of initial evolution of Fe-C alloys using a Phase-Field model, ISIJ International, v. 42, n.4, pp. 368-374, 2002.

[19] Furtado, A.F.; Simulation of microstructures of ternary alloys via Phase-Field method, Revista Matéria, v. 12, n. 4, pp. 602-611, 2007.

[20] Furtado, A.F.; Ferreira, L.O.; Microsegregation in Fe-C-P Ternary Alloys Using a Phase-Field Model. Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering, v. XXXI, p. 173-180, 2009.

[21] Furtado, A.F.; Modelamento do Processo de solidificação e formação de microestrutura pelo método do Campo de Fase. (Tese de Doutorado em Engenharia Metalúrgica) – EEIMVR, Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda. 2005.

[22] Redd-Hill, R.E.; Physical metallurgy principles. PWS Publishing Co., 3rd edition, 1994.

[23] Chalmers, B.; Principles of Solidification. 2ª Edição, Ed. John Wiley & Sons, 1964.

[24] Kim, S.G., Kim, W.T., Lee, J.S., Ode, M. and Suzuki, T.; Large Scale Simulation of Dendritic Growth in Pure Undercooled Melt by Phase-Field Model. Progress ISIJ International, v.39, n. 4, p.335-340, 1999.

[25] Andersson, C.; Phase-Field Simulation of Dendritic Solidification. Tese de Doutorado, Royal Institute of Technology; Departament of Numerical Analysis and Computer Science, 2002.

[26] Furtado, A.F., Ferreira, L.O., Assis, A.C.; Modelagem e simulação numérica da evolução micro-estrutural num sistema super-resfriado com foco na redução do tempo computacional, Unpublished.

[27] Xu, Y., McDonough, J.M., Tagavi K.A.; A Numerical procedure for solving 2D Phase-Field model problems, Journal of Computational Physics 218 (2006) 770–793.

[28] Bhadeshia, H.K.D.H.; Course MP6. Department Materials Science & Metallurgy, University of Cambridge, 2000.

[29] Cahn, J.W.; Allen, S.M.; A Microscopic Theory for Anti-phase Boundary Motion and Its Application to Anti-phase Domain Coarsening. Acta Metallurgica. vol. 27, 1979, pg. 1085–1095.

[30] Boettinger, W.J.; Warren, J.A.; Beckermann, C.; Karma, A.; Phase-Field Simulation of Solidification. Annual Review of Materials Research, vol. 32, 2002, pg.163-194.

[31] Suzuki, T.; Kim, W.T.; Kim, S.G.; Phase-Field Model for Binary Alloys. Physical Review E, vol. 60, 1999, pg. 7186-7197.

[32] McFadden, G.B.; Wheeler, A.A.; Braun, R.J.; Coriell, S.R.; Phase-Field models for anisotropic interfaces. Physical Review E, vol. 48, 1993, pg. 2016-2024.

[33] Warren, J.A.; Boettinger, W.J.; Prediction of Dendritic Growth and Microsegregation Patterns in a Binary Alloy Using the Phase-Field Method. Acta Metallurgica et Materialia, vol. 43, 1995, pg. 689.

[34] Reynolds, W.C.; Perkins, H.C.; Engineering Thermodynamics, 2ª Edição, Mc Graw Hill, 1977.

[35] Downing, D.; Clark, J.; Estatística Aplicada. 2ª Edição, Editora Saraiva, São Paulo, 2006.

[36] Kreith, F.; Bohn, M.S.; Princípios de Transferência de Calor, Editora Pioneira Thomson, São Paulo, 2003.

[37] Spiegel, M. R.; Manual de Fórmulas e Tabelas Matemáticas. Coleção Schaum, 1ª Edição, Ed. McGraw-Hill, 1973.

[38] Ode, M.; Lee, J. S.; Kim, S. G.; Kim, W. G.; Suzuki, T.; Phase-Field Model for Solidification of Ternary Alloys. ISIJ International, vol. 40, 2000, no.9, pg. 870-876.

10 - ANEXOS

ANEXO I

A solução numérica das equações de estado utilizadas na simulação da solidificação de um metal puro é mostrada a seguir. Sendo que para a equação de fase, admite-se fluxo nulo na fronteira do domínio *($\partial\phi/\partial t = 0$)*, como condição de contorno. Fazendo-se uma discretização por diferenças finitas, e utilizando um esquema explícito para ambas as equações.

Equação de fase, esquema explícito:

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

Desenvolvendo o 1° termo do lado direito da equação tem-se:

$$\frac{1}{M(\theta)}\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon(\theta)^2\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon(\theta)^2\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon(\theta)\varepsilon'(\theta)\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) -$$
$$- \frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon(\theta)\varepsilon'(\theta)\frac{\partial\phi}{\partial y}\right) - wg'(\phi) - h'(\phi)\frac{\Delta H}{T_m}(T - T_m) \qquad \text{(I.1)}$$

Para melhor compreensão da solução numérica, os termos da equação de fase acima serão resolvidos separadamente.

O termo do lado esquerdo da equação I.1:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}\frac{1}{M(\theta)} = \frac{1}{M(\theta)}\left[\frac{\phi_P^{k+1} - \phi_P^k}{\Delta t}\right]$$

O 1° termo do lado direito da equação I.1:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon(\theta)^2 \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) = \frac{\left(\varepsilon(\theta)^2 \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_E - \left(\varepsilon(\theta)^2 \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_W}{2\Delta x} =$$

$$= \frac{\varepsilon_E(\theta)^2 \frac{\phi_E^K - \phi_P^K}{\Delta x} - \varepsilon_W(\theta)^2 \frac{\phi_P^K - \phi_W^K}{\Delta x}}{2\Delta x} =$$

$$\frac{1}{4\Delta x^2}[\varepsilon_E(\theta)^2(\phi_E^K - \phi_P^K) - \varepsilon_W(\theta)^2(\phi_P^K - \phi_W^K)]$$

O 2° termo do lado direito da equação I.1:

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon(\theta)^2 \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) = \frac{\left(\varepsilon(\theta)^2 \frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_N - \left(\varepsilon(\theta)^2 \frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_S}{2\Delta y} =$$

$$= \frac{\varepsilon_N(\theta)^2 \frac{\phi_N^K - \phi_P^K}{\Delta y} - \varepsilon_S(\theta)^2 \frac{\phi_P^K - \phi_S^K}{\Delta y}}{2\Delta y} =$$

$$\frac{1}{4\Delta y^2}[\varepsilon_N(\theta)^2(\phi_N^K - \phi_P^K) - \varepsilon_S(\theta)^2(\phi_P^K - \phi_S^K)]$$

O 3° termo do lado direito da equação I.1:

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon(\theta)\varepsilon'(\theta)\frac{\partial \phi}{\partial x}\right) = \frac{\left(\varepsilon_N(\theta)\varepsilon'_N(\theta)\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_N - \left(\varepsilon_S(\theta)\varepsilon'_S(\theta)\ \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_S}{2\Delta y} =$$

$$= \frac{\varepsilon_N(\theta)\varepsilon'_N(\theta)\frac{\phi_{NE}^K - \phi_{NW}^K}{2\Delta x} - \varepsilon_S(\theta)\varepsilon'_S(\theta)\ \frac{\phi_{SE}^K - \phi_{SW}^K}{2\Delta x}}{2\Delta y} =$$

$$\frac{1}{4\Delta x\Delta y}[\varepsilon_N(\theta)\varepsilon'_N(\theta)\ (\phi_{NE}^K - \phi_{NW}^K) - \varepsilon_S(\theta)\varepsilon'_S(\theta)\ (\phi_{SE}^K - \phi_{SW}^K)]$$

O 4° termo do lado direito da equação I.1:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon(\theta)\varepsilon'(\theta)\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)=\frac{\left(\varepsilon_E(\theta)\varepsilon'_E(\theta)\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)_E-\left(\varepsilon_W(\theta)\varepsilon'_W(\theta)\ \frac{\partial\phi}{\partial y}\right)_W}{2\Delta x}=$$

$$=\frac{\varepsilon_E(\theta)\varepsilon'_E(\theta)\frac{\phi_{NE}^K-\phi_{Se}^K}{2\Delta y}-\varepsilon_W(\theta)\varepsilon'_W(\theta)\ \frac{\phi_{NW}^K-\phi_{SW}^K}{2\Delta y}}{2\Delta x}=$$

$$\frac{1}{4\Delta x\Delta y}[\varepsilon_E(\theta)\varepsilon'_E(\theta)\ (\phi_{NE}^K-\phi_{SE}^K)-\varepsilon_W(\theta)\varepsilon'_W(\theta)\ (\phi_{NW}^K-\phi_{SW}^K)]$$

O 5° termo do lado direito da equação I.1:

$$wg'(\phi)=w(3(\phi_P^K)^3-4(\phi_P^K)^2+2\phi_P^K)$$

O 6° termo do lado direito da equação I.1:

$$h'(\phi)\frac{\Delta H}{T_m}(T-T_m)=(30(\phi_P^K)^4-60(\phi_P^K)^3+30(\phi_P^K)^2)\frac{\Delta H}{T_m}(T-T_m)$$

Agrupando os ternos temos:

$$\frac{1}{M(\theta)}\left[\frac{\phi_P^{k+1}-\phi_P^k}{\Delta t}\right]=\frac{1}{4\Delta x^2}[\varepsilon_E(\theta)^2(\phi_E^K-\phi_P^K)-\varepsilon_W(\theta)^2(\phi_P^K-\phi_W^K)]+$$

$$+\frac{1}{4\Delta y^2}[\varepsilon_N(\theta)^2(\phi_N^K-\phi_P^K)-\varepsilon_S(\theta)^2(\phi_P^K-\phi_S^K)]+$$

$$+\frac{1}{4\Delta x\Delta y}[\varepsilon_N(\theta)\varepsilon'_N(\theta)\ (\phi_{NE}^K-\phi_{NW}^K)-\varepsilon_S(\theta)\varepsilon'_S(\theta)\ (\phi_{SE}^K-\phi_{SW}^K)]-$$

$$-\frac{1}{4\Delta x\Delta y}[\varepsilon_E(\theta)\varepsilon'_E(\theta)\ (\phi_{NE}^K-\phi_{SE}^K)-\varepsilon_W(\theta)\varepsilon'_W(\theta)\ (\phi_{NW}^K-\phi_{SW}^K)]-$$

$$-(w(3(\phi_P^K)^3-4(\phi_P^K)^2+2\phi_P^K))-((30(\phi_P^K)^4-60(\phi_P^K)^3+30(\phi_P^K)^2)\frac{\Delta H}{T_m}(T-T_m))$$

Finalmente temos:

$$\phi_P^{k+1} = (M(\theta)\Delta t)\left\{\left(\frac{1}{4\Delta x^2}[\varepsilon_E(\theta)^2(\phi_E^K - \phi_P^K) - \varepsilon_W(\theta)^2(\phi_P^K - \phi_W^K)]\right) + \right.$$
$$+\left(\frac{1}{4\Delta y^2}[\varepsilon_N(\theta)^2(\phi_N^K - \phi_P^K) - \varepsilon_S(\theta)^2(\phi_P^K - \phi_S^K)]\right) +$$
$$+\left(\frac{1}{4\Delta x\Delta y}[\varepsilon_N(\theta)\varepsilon'_N(\theta)\ (\phi_{NE}^K - \phi_{NW}^K) - \varepsilon_S(\theta)\varepsilon'_S(\theta)\ (\phi_{SE}^K - \phi_{SW}^K)]\right) -$$
$$-\left(\frac{1}{4\Delta x\Delta y}[\varepsilon_E(\theta)\varepsilon'_E(\theta)\ (\phi_{NE}^K - \phi_{SE}^K) - \varepsilon_W(\theta)\varepsilon'_W(\theta)\ (\phi_{NW}^K - \phi_{SW}^K)]\right) -$$
$$-(w(3(\phi_P^K)^3 - 4(\phi_P^K)^2 + 2\phi_P^K)) -$$
$$\left. -((30(\phi_P^K)^4 - 60(\phi_P^K)^3 + 30(\phi_P^K)^2)\frac{\Delta H}{T_m}(T - T_m))\right\} + \phi_P^K \qquad \text{(I.2)}$$

O próximo passo será adicionar, na equação acima um termo para a geração de ruídos, esta forma de adição de ruídos é similar ao trabalho proposto por Warren e colaboradores[33]:

$$Noise = 16ar(\phi_P^K)^2(1 - \phi_P^K)^2$$

onde:

r é um número aleatório gerado entre –1 e +1;

a é a amplitude do ruído.

Para a solução numérica da equação de fase I.2, tem-se o parâmetro *ε(θ)*, portanto o próximo passo será determinar expressões para esta incógnita.

A mobilidade da equação de fase é igual a uma constante:

$$M(\theta) = M_0 \qquad \text{(I.3)}$$

Onde M_0 é determinado pela relação $\dfrac{T_m \mu_0^K}{2.73\Delta H \lambda_0}$.

Para *ε(θ)* e *ε'(θ)*, tem-se:

$$\varepsilon(\theta) = \varepsilon_0(1 + \delta_\varepsilon \cos j(\theta - \theta_0)) \qquad \text{(I.4)}$$

$$\varepsilon'(\theta) = -\varepsilon_0 \delta_\varepsilon j sen j(\theta - \theta_0) \qquad \text{(I.5)}$$

O parâmetro ε_0 é determinado pela relação, $\sqrt{2.73\lambda_0\sigma_0}$, as constantes δ_ε e j são determinadas previamente e valem para a simulação de metais puros 0.025 e 4 respectivamente. O θ_0 é o ângulo preferencial de crescimento, portanto falta determinar o ângulo da interface em relação ao eixo $x(\theta)$, portanto tem-se:

$$\tan(\theta) = \frac{\phi_y}{\phi_x} \tag{I.6}$$

$$\theta = \arctan\left(\frac{\phi_y}{\phi_x}\right) \tag{I.7}$$

Uma vez determinados o $\varepsilon(\theta)$, $\varepsilon'(\theta)$ e o θ. O próximo passo será determinar estas variáveis em torno do ϕ_P no domínio. Ao norte do ponto ϕ_P, tem-se:

$$\varepsilon_N(\theta) = \varepsilon_0(1 + \delta_\varepsilon \cos j(\theta_N - \theta_0))$$

$$\varepsilon'_N(\theta) = -\varepsilon_0\delta_\varepsilon jsenj(\theta_N - \theta_0)$$

O parâmetro nestas duas equações é ϕ_N, sendo determinado por:

$$\theta_N = \arctan\left(\frac{\phi_{Ny}}{\phi_{Nx}}\right)$$

Ao sul do ponto ϕ_P, tem-se:

$$\varepsilon_S(\theta) = \varepsilon_0(1 + \delta_\varepsilon \cos j(\theta_S - \theta_0))$$

$$\varepsilon'_S(\theta) = -\varepsilon_0\delta_\varepsilon jsenj(\theta_S - \theta_0)$$

O parâmetro nestas duas equações é ϕ_S, sendo determinado por:

$$\theta_S = \arctan\left(\frac{\phi_{Sy}}{\phi_{Sx}}\right)$$

Ao leste do ponto ϕ_P, tem-se:

$$\varepsilon_E(\theta) = \varepsilon_0(1 + \delta_\varepsilon \cos j(\theta_E - \theta_0))$$

$$\varepsilon'_E(\theta) = -\varepsilon_0 \delta_\varepsilon j sen j(\theta_E - \theta_0)$$

O parâmetro nestas duas equações é ϕ_E, sendo determinado por:

$$\theta_E = \arctan\left(\frac{\phi_{Ey}}{\phi_{Ex}}\right)$$

E a oeste do ponto ϕ_P, tem-se:

$$\varepsilon_W(\theta) = \varepsilon_0(1 + \delta_\varepsilon \cos j(\theta_W - \theta_0))$$

$$\varepsilon'_W(\theta) = -\varepsilon_0 \delta_\varepsilon j sen j(\theta_W - \theta_0)$$

O parâmetro nestas duas equações é ϕ_W, sendo determinado por:

$$\theta_W = \arctan\left(\frac{\phi_{Wy}}{\phi_{Wx}}\right)$$

Com as equações obtidas acima se pode resolver numericamente a equação de fase, sendo que para a temperatura no ponto para a equação de fase, será determinado pela equação da energia, cuja solução numérica será mostrada a seguir.

Equação de transporte de energia (esquema explícito):

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

Desenvolvendo o segundo termo do lado esquerdo, a equação do transporte de energia tem a seguinte forma:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)\right) + \frac{\Delta H}{c_p} h'(\phi)\frac{\partial \phi}{\partial t} \qquad \text{(I.8)}$$

Agora vamos resolver separadamente cada termo da equação.

O termo do lado esquerdo da equação I.8:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_P^{K+1} - T_P^K}{\Delta t}$$

O 1° termo do lado direito da equação I.8:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)=\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}=\frac{T_W^K-2T_P^K+T_E^K}{\Delta x^2}$$

O 2° termo do lado direito da equação I.8:

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)=\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}=\frac{T_N^K-2T_P^K+T_S^K}{\Delta y^2}$$

O 3° termo do lado direito da equação I.8:

$$\frac{\Delta H}{c_P}h'(\phi)\frac{\partial \phi}{\partial t}=\frac{\Delta H}{c_P}(30(\phi_P^K)^4-60(\phi_P^K)^3+30(\phi_P^K)^2)\left(\frac{\phi_P^{K+1}-\phi_P^K}{\Delta t}\right)$$

Agrupando os ternos de I.8 temos:

$$\frac{T_P^{K+1}-T_P^K}{\Delta t}=D\left\{\left(\frac{T_W^K-2T_P^K+T_E^K}{\Delta x^2}\right)+\left(\frac{T_N^K-2T_P^K+T_S^K}{\Delta y^2}\right)\right\}+$$
$$+\frac{\Delta H}{c_P}(30(\phi_P^K)^4-60(\phi_P^K)^3+30(\phi_P^K)^2)\left(\frac{\phi_P^{K+1}-\phi_P^K}{\Delta t}\right)$$

Finalmente temos:

$$T_P^{K+1}=D\Delta t\left\{\left(\frac{T_W^K-2T_P^K+T_E^K}{\Delta x^2}\right)+\left(\frac{T_N^K-2T_P^K+T_S^K}{\Delta y^2}\right)\right\}+$$
$$+\frac{\Delta H}{c_P}(30(\phi_P^K)^4-60(\phi_P^K)^3+30(\phi_P^K)^2)(\phi_P^{K+1}-\phi_P^K)+T_P^{K+1} \qquad \text{(I.9)}$$

ANEXO II

A equação de fase para uma condição de equilíbrio num sistema unidimensional é representada por:

$$\varepsilon^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = w \frac{\partial g(\phi)}{\partial \phi} \tag{II.1}$$

O termo do lado direito da equação acima representa a energia associada à interface. Resolvendo a equação anterior e aplicando as seguintes condições de contorno $\phi = 1$ quando $x \rightarrow -\infty$ e $\phi = 0$ quando $x \rightarrow +\infty$, a equação de fase para as condições citadas acima é representada por:

$$\phi_0(x) = \frac{1}{2}\left\{1 - \tanh\left(\frac{x}{2\lambda}\right)\right\} \tag{II.2}$$

onde:

$$\lambda = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}w} \tag{II.3}$$

Esta equação II.3, correlaciona a espessura real da interface com os parâmetros ε e w do modelo do Campo de Fase. Cahn e colaboradores[29], propuseram que a tensão superficial (σ) pode ser obtida pelo excesso de energia livre na região da interface, sendo a tensão superficial expressa a partir da equação II.1:

$$\sigma = \varepsilon^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 dx \tag{II.4}$$

O termo $\partial\phi/\partial x$, é representado por:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{1}{4\lambda} \sec h^2\left(\frac{1}{2\lambda} x\right) \tag{II.5}$$

Substituindo II.4, na equação II.5 tem-se:

$$\sigma = \varepsilon^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-\frac{1}{4\lambda} \sec h^2\left(\frac{1}{2\lambda} x\right)\right)^2 dx$$

$$\sigma = \frac{\varepsilon^2}{16\lambda^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sec h^2\left(\frac{1}{2\lambda} x\right)\right)^2 dx \tag{II.6}$$

Substituindo $b = \varepsilon^2/16\lambda^2$ e $a = 1/2\lambda$, na equação II.6:

$$\sigma = b\int_{-\infty}^{+\infty}(\sec h^2(ax))^2\,dx \tag{II.7}$$

$$\sigma = b\int_{-\infty}^{+\infty}\sec h^4(ax)\;\;dx \tag{II.8}$$

Integrando a equação II.8, conforme Spiegel[37]:

$$\sigma = b\left\{\left[\frac{\sec h^2(ax)\tanh(ax)}{3a}\right]_{-\infty}^{+\infty} + \frac{2}{3}\int_{-\infty}^{+\infty}\sec h^2(ax)dx\right\}$$

$$\sigma = b\left\{\left[\frac{\sec h^2(ax)\tanh(ax)}{3a}\right]_{-\infty}^{+\infty} + \frac{2}{3}\left[\frac{\tanh(ax)}{a}\right]_{-\infty}^{+\infty}\right\}$$

$$\sigma = b\left\{\left[\frac{\sec h^2(+\infty)\tanh(+\infty)}{3a} - \frac{\sec h^2(-\infty)\tanh(-\infty)}{3a}\right] + \frac{2}{3}\left[\frac{\tanh(+\infty)}{a} - \frac{\tanh(-\infty)}{a}\right]\right\}$$

$$\sigma = b\left\{\frac{2}{3}\left[\frac{1}{a} + \frac{1}{a}\right]\right\}$$

$$\sigma = b\left\{\frac{4}{3a}\right\} \tag{II.9}$$

Substituindo as relações para "*a*" e "*b*" na equação II.9, tem-se:

$$\sigma = \frac{\varepsilon^2}{4\lambda^2}\left\{\frac{1}{3\dfrac{1}{2\lambda}}\right\}$$

$$\sigma = \frac{\varepsilon^2}{6\lambda} \tag{II.10}$$

Substituindo a equação II.3 na equação II.10, tem-se a relação dos parâmetros (ε e w) do modelo com a tensão superficial (σ):

$$\sigma = \frac{\varepsilon^2}{6\dfrac{\varepsilon}{\sqrt{2w}}}$$

$$\sigma = \frac{\varepsilon\sqrt{w}}{3\sqrt{2}} \tag{II.11}$$

O próximo passo será determinar a equação que relaciona os parâmetros (ε e w) com a espessura da interface, neste trabalho a região da interface no domínio estará para valores de ϕ entre 0.1 a 0.9. a equação que determina a espessura da interface adotada neste trabalho é a mesma proposta por Ode[38]:

$$2\lambda = \int_{0.1}^{0.9} \frac{dx}{d\phi_0} d\phi_0 \tag{II.12}$$

Substituindo a equação II.2 na equação II.3 e reagrupando a equação, ou seja, colocando o x em evidência, tem-se:

$$x = \frac{\sqrt{2}\varepsilon}{\sqrt{w}} \arctan h(1-2\phi_0) \tag{II.13}$$

Derivando a equação II.13 em relação à ϕ_0, tem-se:

$$\frac{dx}{d\phi_0} = -\frac{2\sqrt{2}\varepsilon}{\sqrt{w}} \frac{1}{1+(1-2\phi_0)^2} \tag{II.14}$$

Substituindo II.14 na equação II.12, tem-se:

$$2\lambda = \int_{0.1}^{0.9} -\frac{2\sqrt{2}\varepsilon}{\sqrt{w}} \frac{1}{1+(1-2\phi_0)^2} d\phi_0$$

$$2\lambda = \frac{\sqrt{2}\varepsilon}{\sqrt{w}} \int_{0.1}^{0.9} \frac{1}{1+(1-2\phi_0)^2} (-2) d\phi_0$$

$$2\lambda = \frac{\sqrt{2}\varepsilon}{\sqrt{w}} [\arctan h(1-2\phi_0)]_{0.1}^{0.9}$$

$$2\lambda = \frac{\sqrt{2}\varepsilon}{\sqrt{w}} [\arctan h(1-2(0.9) - \arctan h(1-2(0.1)]$$

$$2\lambda \cong -\frac{2.2\sqrt{2}\varepsilon}{\sqrt{w}} \tag{II.15}$$

Finalmente com as equações II.11 e II.15, chega-se à relação dos parâmetros ε e w relacionados com a tensão superficial (σ) e com a real espessura da interface (λ), como mostrado a seguir:

$$\varepsilon = \sqrt{2.73\lambda\sigma} \tag{II.16}$$

$$w = 6.6\frac{\sigma}{\lambda} \tag{II.17}$$

O próximo parâmetro que será correlacionado com as propriedades do metal é o M_0. Este parâmetro é correlacionado com o coeficiente cinético linear (μ), temperatura de fusão (T_m), calor latente (ΔH) e espessura da interface (2λ). Para tanto se aplica à equação de fase um problema de interface plana, unidimensional, movendo-se com velocidade constante. Portanto a equação se reduz a:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{M_0\Delta H}{T_m}(T_m - T)h'(\phi) \tag{II.18}$$

Para as condições citadas acima o termo transiente pode ser representado por:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial t} = v\frac{\partial\phi}{\partial x} \tag{II.19}$$

Substituindo a equação II.19 na II.18, tem-se:

$$v\frac{\partial\phi}{\partial x} = \frac{M_0\Delta H}{T_m}(T_m - T)h'(\phi) \tag{II.20}$$

A velocidade v é representada por:

$$v = \mu(T_m - T) \tag{II.21}$$

A equação II.21, foi obtida a partir de um gráfico velocidade da interface sólido/líquido (v) versus super-resfriamento (ΔT). μ é o coeficiente cinético linear, ou seja, o coeficiente angular obtido no gráfico velocidade x ΔT. Substituindo II.21 em II.20, tem-se:

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{M_0 \Delta H}{T_m} h'(\phi) \qquad \text{(II.22)}$$

Para a equação II.22 $\partial\phi/\partial x$ é diferente de zero na região da interface sendo representado por $\partial\phi/\partial x = 1/\lambda$, substituindo em II.22 e explicitando M_0 chega-se à expressão:

$$M_0 = \frac{\mu . T_m}{\lambda . \Delta H} h'(\phi) \qquad \text{(II.23)}$$

ANEXO III

A equação de fase para uma condição de equilíbrio num sistema unidimensional III.1, quando resolvida com as seguintes condições de contorno $\phi = 1$ quando $x \rightarrow -\infty$ e $\phi = 0$ quando $x \rightarrow +\infty$, resultará em III. 2:

$$\varepsilon^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = w \frac{\partial g(\phi)}{\partial \phi} \qquad \text{(III.1)}$$

$$\phi_0(x) = \frac{1}{2}\left\{1 - \tanh\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)\right\} \qquad \text{(III.2)}$$

Uma forma de se comprovar esta relação é se derivando III.2 duas vezes e comparando com a III.1. Para facilitar está comparação vamos rearranjar a equação III.1.

Começando por resolver $\partial g(\phi)/\partial\phi$.

$$g(\phi) = \phi^2(1-\phi)^2 = \phi^2 + 2\phi^3 + \phi^4 \qquad \text{(III.3)}$$

Derivando III.3 tem-se:

$$\frac{\partial g(\phi)}{\partial \phi} = 2\phi - 6\phi^2 + 4\phi^3 \qquad \text{(III.4)}$$

Com o resultado de III.4 podemos rearranjar III.1, que fica da seguinte forma:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{w}{\varepsilon^2} 2\phi - 6\phi^2 + 4\phi^3 \qquad \text{(III.5)}$$

Antes de se derivar duas vezes III.2 vamos estabelecer algumas relações. Rearranjado a III.2 temos que *tanh* é:

$$\tanh\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) = 1 - 2\phi_0 \qquad \text{(III.6)}$$

A relação entre $sech^2$ e $tanh^2$ é descrita por Spiegel[37] como:

$$\sec h^2(x) = 1 - \tanh^2(x) \qquad \text{(III.7)}$$

Com a utilização da relação III.7 chegamos a:

$$\sec h^2\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) = 1 - \tanh^2\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) \qquad \text{(III.8)}$$

Substituindo III.6 elevado ao quadrado em III.8 temos:

$$\sec h^2\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) = 1-(1-2\phi_0)^2 = 4\phi - 4\phi^2 \qquad \text{(III.9)}$$

Agora podemos começar a derivar III.2. A primeira derivada é igual a :

$$\frac{d\phi_0(x)}{dx} = \frac{\frac{1}{2}\left\{1-\tanh\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)\right\}}{dx} = \frac{-\sqrt{w}}{2\sqrt{2}\varepsilon}\sec h^2\left(\frac{\sqrt{w}}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)x =$$

$$\frac{-\sqrt{w}}{2\sqrt{2}\varepsilon}\sec h\left(\frac{\sqrt{w}}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)x\sec h\left(\frac{\sqrt{w}}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)x \qquad \text{(III.10)}$$

Na segunda derivada derivamos o resultado III.10.

$$\frac{d\phi_0(x)^2}{dx^2} = \frac{\frac{-\sqrt{w}}{2\sqrt{2}\varepsilon}\sec h\left(\frac{\sqrt{w}}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)x\sec h\left(\frac{\sqrt{w}}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)x}{dx} =$$

$$= \frac{-\sqrt{w}}{2\sqrt{2}\varepsilon}\sec h\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)\frac{-\sqrt{w}}{\sqrt{2}\varepsilon}\tanh\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)\sec h\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) +$$

$$+\sec h\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)\frac{-\sqrt{w}}{\sqrt{2}\varepsilon}\tanh\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)\frac{-\sqrt{w}}{\sqrt{2}\varepsilon}\sec h\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) \qquad \text{(III.11)}$$

Reescrevendo III.11 temos:

$$\frac{d\phi_0(x)^2}{dx^2} = \frac{w}{4\varepsilon}\sec h^2\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)\tanh\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) + \frac{w}{4\varepsilon}\sec h^2\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)\tanh\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)$$

$$\frac{d\phi_0(x)^2}{dx^2} = \frac{w}{2\varepsilon^2}\sec h^2\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right)\tanh\left(\frac{\sqrt{w}x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) \qquad \text{(III.12)}$$

Substituindo III.6 e III.9 em III.12 temos :

$$\frac{d\phi_0(x)^2}{dx^2} = \frac{w}{2\varepsilon^2}(4\phi - 4\phi^2)(1-2\phi) = \frac{w}{2\varepsilon^2}2\phi - 6\phi^2 + 4\phi^3 \qquad \text{(III.13)}$$

É fácil observar que III.13 é igual a III.5. Então a derivada de segunda ordem de III.2 e igual a III.1.

ANEXO IV

Trabalhos gerados na produção desta dissertação:

- "Estudo do Método do Campo de Fase para Solidificação de uma Substância Pura" apresentado no IX Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional em 2009.
- **"**Simulação Computacional da Solidificação do Níquel pelo Método do Campo de Fase" apresentado no XII Encontro de Modelagem Computacional em 2009.

ESTUDO DO MÉTODO DO CAMPO DE FASE PARA SOLIDIFICAÇÃO DE UMA SUBSTÂNCIA PURA

Abner da Costa Assis - abner@metal.eeimvr.uff.br
Universidade Federal Fluminense, Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda, 27225-125 – Volta Redonda, RJ, Brasil
Alexandre Furtado Ferreira - furtado@metal.eeimvr.uff.br
Universidade Federal Fluminense, Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda, 27225-125 – Volta Redonda, RJ, Brasil

Resumo. *Métodos que possam simular a solidificação são importantes, porque a solidificação está presente em quase todos os processos de fabricação de materiais; e tem um papel ainda mais acentuado no processo de fundição, onde é a etapa mais importante. Por isso o presente trabalho tem como objetivo o estudo do Método do Campo de Fase, pois este é uma ferramenta importante para simulação do crescimento dendrítico ocorrido durante a solidificação. A estrutura gerada por este crescimento chamada dendrita, vai influenciar fortemente nas propriedades do material como: ductilidade, condutividade térmica e resistência mecânica, dependendo de suas características. A condição primordial para esse tipo de crescimento é a condição de super-resfriamento, quer dizer, a temperatura no liquido estar abaixo da temperatura de fusão da substância. As dendritas irão crescer com forma parecida a de uma árvore; primeiro crescem braços primários, após braços secundários crescem nos braços primários perpendicularmente, e após braços terciários crescem a partir dos secundários paralelos aos braços primários. Por isso o Método do Campo de Fase tornou possível a simulação da interface difusa formada entre o sólido e o líquido durante a solidificação. Para uma substância pura o método consiste de duas equações que trabalham acopladas: equação do Campo de Fase e equação da Energia; além das duas equações, uma equação chamada ruídos, referente às perturbações ocorridas durante a solidificação deve ser acrescida à equação de fase; essa equação simula vibrações no molde, presença de elementos estranhos no meio líquido e etc.; que vão gerar uma dendrita assimétrica como num caso real. O método tem como parâmetro característico o parâmetro Campo de Fase (ϕ), que vale zero no líquido puro e um no sólido puro, e recebe valores entre zero e um na interface Sólido-Líquido; através desse parâmetro é possível identificar se um determinado ponto do domínio está na fase líquida, sólida, ou é uma região de interface. O Método do Campo de Fase foi resolvido pelo Método de Diferenças Finitas com um esquema explícito, por isso foram necessárias condições para a sua convergência; e o material cristalino puro adotado nesse estudo foi o Níquel. Como resultados da simulação computacional foram geradas essas dendritas: uma dendrita com grid 1000x1000 e seu campo térmico, com o objetivo do estudo da formação das ramificações primarias, secundarias e terciárias, e verificação da influência do campo térmico no campo de fase; duas dendritas com diferentes ângulos de crescimento preferenciais, mostrando como o crescimento dos braços primários*

obecede a estes valores; três dendritas com diferentes número de pontas, mostrando que a variável número de pontas determina a quantidade de braços primários da dendrita; quatro dendritas com diferentes valores de amplitude de ruídos, a amplitude de ruído comanda a equação de ruído, então, quanto menor valor da amplitude mais simétrica fica a dendrita; duas dendritas com diferentes valores de constantes de anisotropia, mostrando que quanto maior o valor da constante de anisotropia mais o crescimento dendrítico obedece ao crescimento preferencial; e três dendritas com diferentes valores de super-resfriamento, mostrando que o super-resfriamento é proporcional a velocidade da ponta da dendrita, então, as dendritas com maior super-resfriamento irão ter o seu crescimento mais adiantado.

Palavras chave: *Campo de Fase, Diferenças Finitas, Explícito.*

REFERÊNCIAS

Ferreira, 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. and Suzuki, T. ; (1999), "*Large Scale Simulation of Dendritic Growth in Pure Undercooled Melt by Phase-field Model*", *Progress ISIJ* International, v.39, n. 4, p.335-340.

Muller, A.; (2002), "*Solidificação e análise térmica dos metais*", Editora UFRGS, 1ª edição.

Reed-Hill, R.E.; (1994), "*Physical metallurgy principles*", PWS Publishing Co., 3rd edition.

Sinha, A.K.;(2003) *Physical Metallurgy Handbook*. McGraw-Hill books.

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA SOLIDIFICAÇÃO DO NÍQUEL PELO MÉTODO DO CAMPO DE FASE

Abner da Costa Assis – abner@metal.eeimvr.uff.br
Universidade Federal Fluminense, Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda, Av. dos Trabalhadores, 420, 27225-125, Volta Redonda, RJ, Brasil
Alexandre Ferreira Furtado – furtado@metal.eeimvr.uff.br
Universidade Federal Fluminense, Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda, Av. dos Trabalhadores, 420, 27225-125, Volta Redonda, RJ, Brasil

Resumo. *Este trabalho simula o crescimento dendrítico, para o estudo da estrutura característica do processo de solidificação. As características quanto a forma dessas dendritas influenciam fortemente as propriedades dos materiais como: ductilidade, resistência mecânica e condutividade térmica. E o Método do Campo de Fase tem essa capacidade de simular o crescimento dendrítico, já que consegue reproduzir a interface difusa entre as fases. Esse método se caracteriza pelo parâmetro Campo de Fase (ϕ) que vale 0 no líquido puro e 1 no sólido puro, e por variar entre 0 e 1 na interface. O método do Campo de Fase utilizado no presente trabalho é composto por duas equações acopladas: a equação do campo de fase e a equação da energia. Neste trabalho essas duas equações serão discretizadas através do método de Diferenças Finitas na sua forma explicita, e a substância analisada será o níquel puro. Com as dendritas geradas foi possível discutir a influência de alguns parâmetros como: número de pontas da dendrita, ângulo preferencial de crescimento, amplitude de ruído e temperatura de super-resfriamento, além de um estudo sobre o crescimento das ramificações laterais.*

Palavras Chave: *Campo de Fase, Diferenças Finitas, Explícito.*

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 processar-se sob as duas seguintes condições segundo (Furtado, 2005):

a) Nucleação heterogênea – a fase sólida nucleia 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 freqüentes 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, tais como o super-resfriamento (ΔT), poderá 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 atomicamente) e o líquido (região desordenada atomicamente) por meio de uma faixa mista de regiões ordenadas e desordenadas com espessura de aproximadamente 50 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.

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/liquido complexas.

2. 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 em um material (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 de fase.

2.1 EQUAÇÕES GOVERNANTES

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

$$\frac{1}{M(\theta)}\frac{\partial\phi}{\partial t} = \left(\nabla.(\varepsilon(\theta)^2\nabla\phi\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon(\theta)\varepsilon'(\theta)\frac{\partial}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon(\theta)\varepsilon'(\theta)\frac{\partial}{\partial y}\right) - \tag{1}$$

$$-\omega.g'(\phi) - h'(\phi)\frac{\Delta H}{Tm}(T - Tm)$$

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 ϕ=0 no estado liquido e ϕ=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 ultimo termo representa a força motriz do processo de solidificação, que é obtido pela relação *(T-Tm)/Tm* onde *Tm* 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(ϕ) descrita na eq. (2) 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(ϕ) descrita na eq. (3).

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

$$g(\phi) = \phi^2(1-\phi)^2 \tag{2}$$

$$h(\phi) = \phi^3(10 - 15\phi + 6\phi^2) \tag{3}$$

Os parâmetros $M(\theta)$ e $\varepsilon(\theta)$ descritos por (Boettinger, 2002) são obtidos através das eq. (4) e eq. (5), respectivamente:

$$M(\theta) = M_0\left[1 + \delta_M \cos j(\theta - \theta_0)\right] \tag{4}$$

$$\varepsilon(\theta) = \varepsilon_0\left[1 + \delta_\varepsilon \cos j(\theta - \theta_0)\right] \tag{5}$$

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 do núcleo solidificado. O *j* vale para 0 caso isotrópico, e 4 para anisotropia de 4 direções e 6 para de 6 direções.

As eq. (6), eq. (7) e eq. (8) descritas por (Boettinger, 2002) fornecem os valores dos parâmetros M_0, ε_0 e w:

$$\varepsilon_0 = \sqrt{2{,}73\lambda_0\sigma_0} \tag{6}$$

$$w = 6{,}6\frac{\sigma_0}{\lambda_0} \tag{7}$$

$$M_0 = \frac{T_m\mu_0^K}{2{,}73\Delta H\lambda_0} \tag{8}$$

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):

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

O r é o numero 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 ϕ= 0,5, sendo nulo em ϕ=0 e ϕ=1, ou seja, os ruídos são gerados na região interfacial.

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

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

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 difusidade térmica. O segundo representa o termo fonte, onde cp é o calor especifico, ΔH representa o calor latente liberado na região da interface. A função suavizante $h(\phi)$ mostrada na eq. (3) tem função pouco clara, uma vez que $\partial\phi/\partial t$ deveria sozinho, indicar onde a energia latente da solidificação deveria ser liberada.

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 distancia entre ϕ que varie de 0.1 a 0.9. Os dados usados neste trabalho foram retirados de (Kim, 1999). Assumindo δ_M = 0 e δ_ε = 0,025, e usando σ_0 = 0,37 J/m^2 e μ_0^k = 2 m/s K para a fusão do níquel puro e $2\lambda_0$ = 8 x 10^{-8} m por conveniência numérica. Com T_m = 1728 K e ΔH = 2,35 x 10^{-9} J/m^3, onde obtemos ε_0 = 2,01 x 10^{-4} (J/m)$^{1/2}$, w = 0,61 x 10^8 J/m^3 e M_0 = 13,47 m^3/s J. Os outros parâmetros na Eq. (1) são D = 1,55 x 10^{-5} m^2/s e c_p = 5,42 x 10^6 J/m^3 K.

3. MÉTODO NUMÉRICO

Para a solução das equações será utilizado para ambas as equações, um esquema de diferenças finitas explicito. E para gararantir essa convergencia será adotada duas condições de estabilidade que devem ser respeitadas, que foram descitas 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 $\Delta x=\Delta y=2 \times 10^{-8}$ m; já o Δt vale $7{,}74 \times 10^{-12}$ s, o que garante obedecer a uma das condições de convergência. O núcleo de solidificação será colocado no meio do grid e há condições adiabáticas nas fronteiras do sistema.

Toda a computação foi desenvolvida 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 ΔT = 528 K e crescimento preferencial num ângulo de 45°. Onde é possível observar braços primários bem desenvolvidos, e braços secundários que cresceram nos braços primários a 90°. Alguns pequenos braços terciários começaram a se desenvolve a partir dos braços secundários. Esses braços terciários cresceram paralelamente aos braços primários, e ainda cresceram com uma particularidade, os braços só cresceram em um lado dos braços secundários. Isto e 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 da ponta da dendrita. 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.

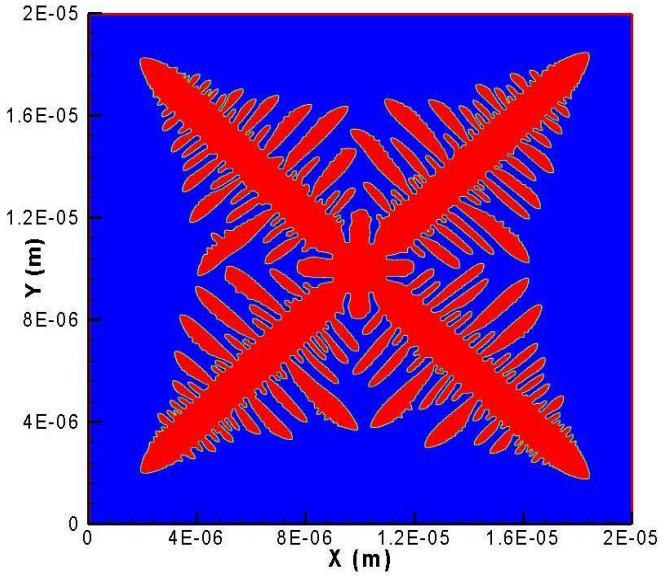


Figura 1 - Dendrita gerada de um núcleo solidificado no centro de um grid 1000x1000.

A fig. 2 é o perfil térmico da dendrita mostrada na fig.1, como a figura mostra o liquido 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 intermediaria entre a região solidificada e a região não solidificada. Devido ao efeito da difusividade térmica, o domínio sente primeiro as mudanças de temperatura, e após a transformação de fase, isto é uma condição para ocorrer às ramificações na estrutura dendrítico. Caso este fenômeno não ocorra, a interface sólido/liquido avança para dentro do liquido na forma de uma superfície plana.

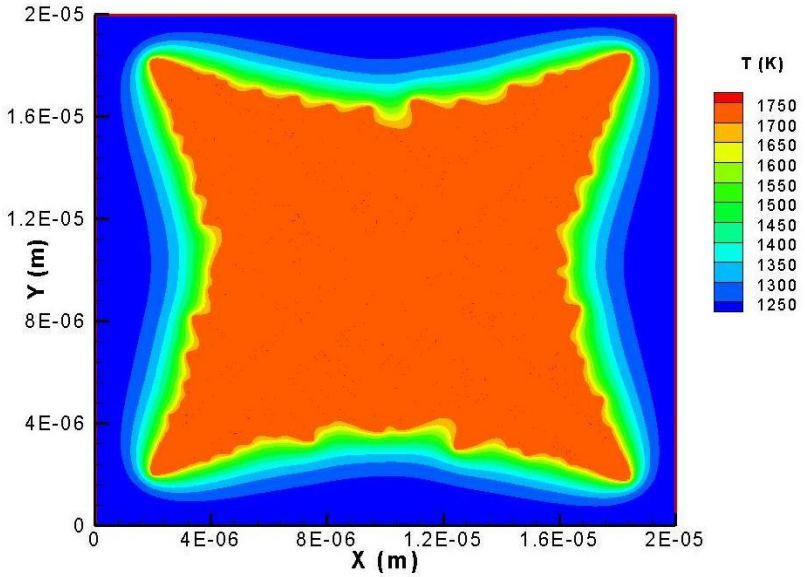


Figura 2 – Perfil de temperatura de uma dendrita de grid 1000x1000.

Na fig. 3 duas dendritas com 700x700 grids e com diferentes ângulos de orientação de crescimento são representados. A fig. 3(a) mostra uma dendrita com direção de crescimento preferencial θ_0=45°, já na figura 3(b) a dendrita tem θ_0=90°.

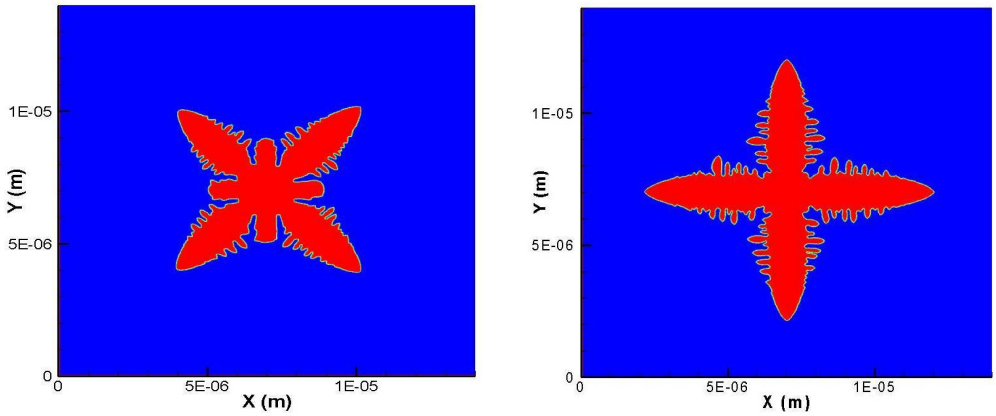


Figura 3 – Influência do ângulo preferencial de crescimento na formação da dendrita. (a) θ_0=45 e (b) θ_0=90°.

Na fig. 4 três dendritas com 300x300 grids e com diferentes números de pontas são mostrados. A fig.4(a) representa um caso isotrópico em que a dendrita possui numero de pontas igual a $j = 0$, nas fig. 4(b) e 4(c) representam casos anisotrópicos onde o numero de pontas são respectivamente, $j = 4$ e $j = 6$.

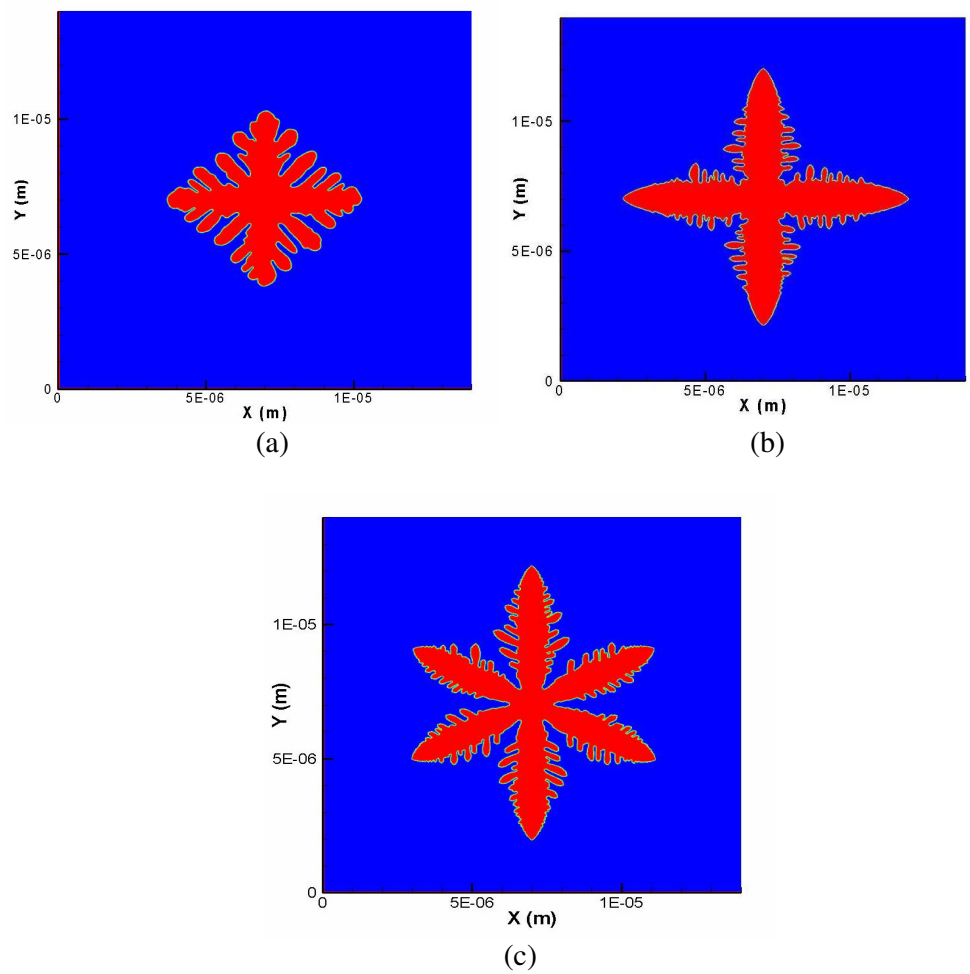


Figura 4 – Influência do número de pontas na formação da dendrita. (a) $j = 0$, (b) $j = 4$ e (c) $j = 6$.

Na fig. 5 quatro dendritas com 300x300 grids e com diferentes valores de amplitude de ruídos são mostrados. Quanto maior o valor da amplitude de ruído, mas assimétrica será a dendrita, já que os ruídos representam perturbações durante a solidificação. E essas perturbações simulam o caso real, onde a solidificação não é totalmente simétrica.

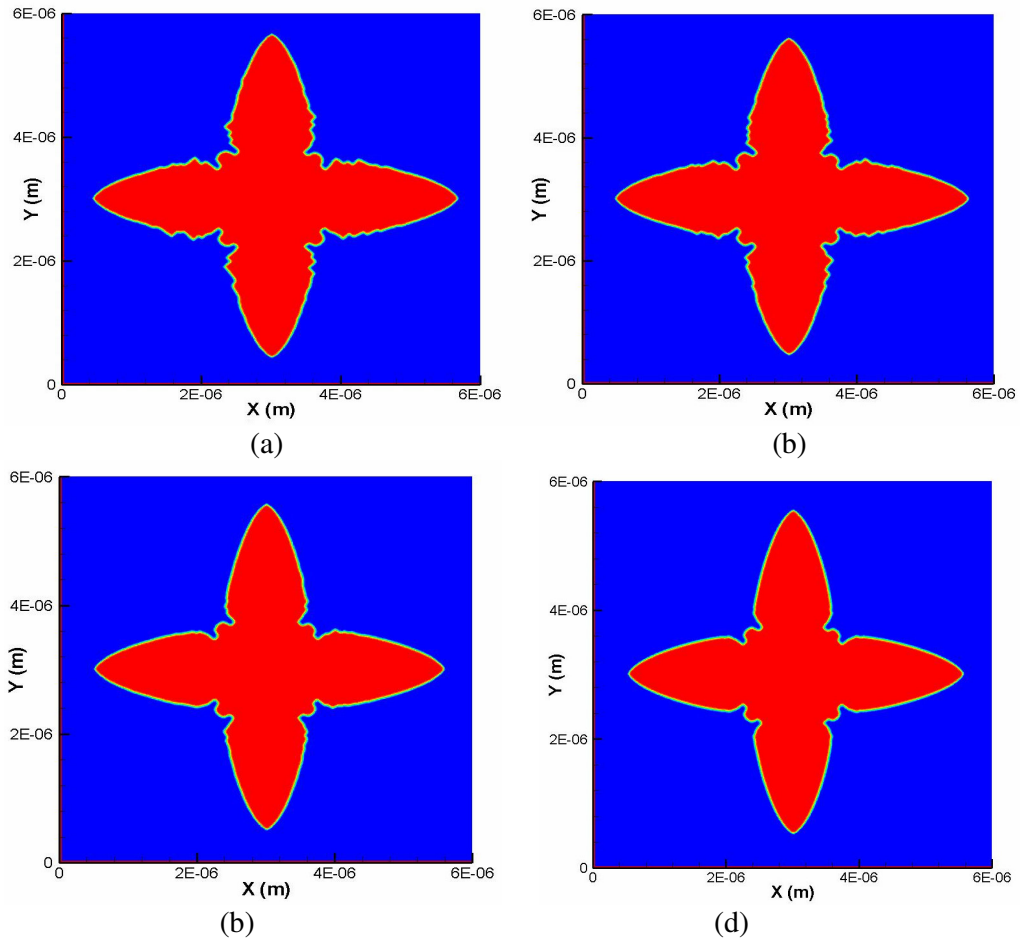
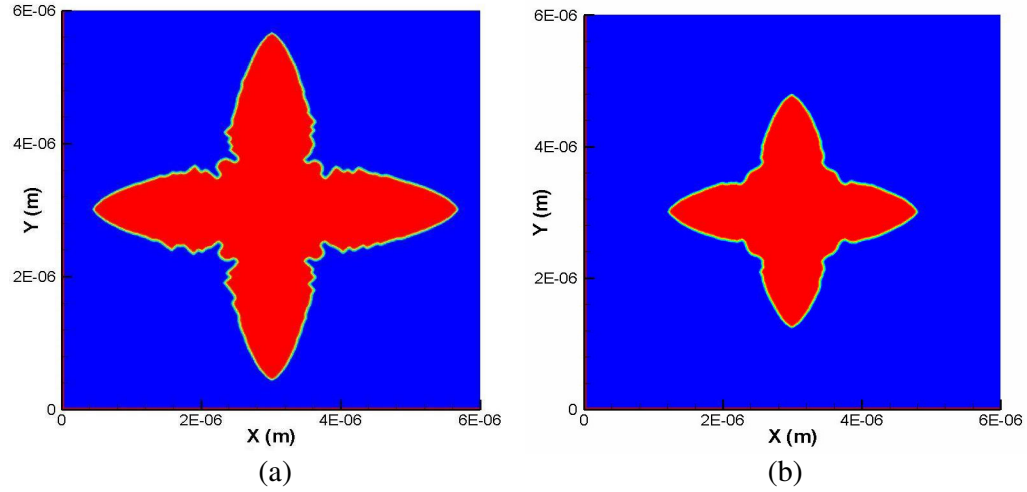
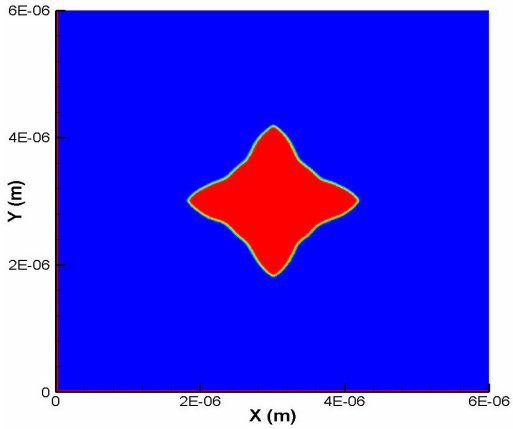


Figura 5 – Influência da amplitude de ruído na formação da dendrita. (a) a = 0,025, (b) a = 0,015, (c) a = 0,005 e (d) a = 0.

Na fig. 6 são mostradas três dendritas com 300x300 grids e 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/liquido é determinada pelo super-resfriamento, ou taxa de extração de calor. O super-resfriamento determina a velocidade da frente de solidificação.





(c)

Figura 6 - Influência do super-resfriamento na formação da dendrita. (a) ΔT=528 K, (b) ΔT=428 K e (c) ΔT=328 K.

Agradecimento

Agradeço a CAPES por incentivar e fomentar o desenvolvimento científico e tecnológico nacional.

5. 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.

COMPUTER SIMULATION OF THE NICKEL SOLIDIFICATION BY PHASE-FIELD METHOD

Abner da Costa Assis – abner@metal.eeimvr.uff.br
Universidade Federal Fluminense, Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda, Av. dos Trabalhadores, 420, 27225-125, Volta Redonda, RJ, Brasil
Alexandre Ferreira Furtado – furtado@metal.eeimvr.uff.br
Universidade Federal Fluminense, Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda, Av. dos Trabalhadores, 420, 27225-125, Volta Redonda, RJ, Brasil

Abstract: This work computationally simulating dendritic growth, to study the characteristic structure of their dendrites. Features such as the outside dentrites strongly influence on properties of materials such as: ductility, strength and thermal conductivity. The Phase_Field Method has the ability to simulate the dendritic growth, as it can reproduce the diffuse interface between the phases. This method is characterized by the parameter of Field-Phase (ϕ) worth 0 in the pure liquid and 1 in the pure solid, and vary between 0 and 1 at the interface. The Field-Phase method consists of two equations: the equation of the phase field and the equation of the thermal field, which coupled work. In this work these two equations are discretized by finite difference method in their explicit form, and the substance will be considered pure nickel.

Keywords: *Phase-Field, Finite Difference, Explicit*

Livros Grátis

(http://www.livrosgratis.com.br)

Milhares de Livros para Download:

Baixar livros de Administração
Baixar livros de Agronomia
Baixar livros de Arquitetura
Baixar livros de Artes
Baixar livros de Astronomia
Baixar livros de Biologia Geral
Baixar livros de Ciência da Computação
Baixar livros de Ciência da Informação
Baixar livros de Ciência Política
Baixar livros de Ciências da Saúde
Baixar livros de Comunicação
Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE
Baixar livros de Defesa civil
Baixar livros de Direito
Baixar livros de Direitos humanos
Baixar livros de Economia
Baixar livros de Economia Doméstica
Baixar livros de Educação
Baixar livros de Educação - Trânsito
Baixar livros de Educação Física
Baixar livros de Engenharia Aeroespacial
Baixar livros de Farmácia
Baixar livros de Filosofia
Baixar livros de Física
Baixar livros de Geociências
Baixar livros de Geografia
Baixar livros de História
Baixar livros de Línguas

Baixar livros de Literatura
Baixar livros de Literatura de Cordel
Baixar livros de Literatura Infantil
Baixar livros de Matemática
Baixar livros de Medicina
Baixar livros de Medicina Veterinária
Baixar livros de Meio Ambiente
Baixar livros de Meteorologia
Baixar Monografias e TCC
Baixar livros Multidisciplinar
Baixar livros de Música
Baixar livros de Psicologia
Baixar livros de Química
Baixar livros de Saúde Coletiva
Baixar livros de Serviço Social
Baixar livros de Sociologia
Baixar livros de Teologia
Baixar livros de Trabalho
Baixar livros de Turismo