

# Estudo dos parâmetros do modelo do campo de fase na modelagem e simulação do processo de solidificação de uma substância pura num domínio computacional super-resfriado

**Alexandre Furtado  
Ferreira**

furtado@metal.eeimvr.uff.br  
Universidade Federal  
Fluminense

**Abner da Costa Assis**

abner@metal.eeimvr.uff.br  
Universidade Federal  
Fluminense

**Ingrid Meirelles Salvino**

ingridsalvino@metal.eeimvr.  
uff.br  
Universidade Federal  
Fluminense

## Resumo

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

**Palavras-chave:** Campo de Fase. Solidificação. Dendrita. Modelagem.

## Abstract

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

**Keywords:** Phase-Field. Noise. Dendritic.

## 1 Introdução

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

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

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

b) Nucleação homogênea - a nucleação da fase sólida em meio à fase líquida ocorre 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 estável é adicionado previamente ao sistema e dependendo das condições do sistema, como por exemplo, o super-resfriamento ( $\Delta T$ ), o núcleo poderá se desenvolver.

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

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

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

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

No método do Campo de Fase, a espessura da interface é uma questão importante, pois o método correlaciona um parâmetro  $\epsilon_0$  com a espessura real da interface. Este parâmetro tem uma ordem de grandeza superior à da espessura da interface; isso permite que se utilizem, durante as simulações, malhas mais grosseiras com um número menor de volumes de controle, minimizando, portanto, o esforço computacional.

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

## **2 O Método do Campo de Fase**

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

### **2.1 Equações Governantes**

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

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

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

Os valores das funções  $g(\phi)$  e  $h(\phi)$  descritas por (Boettinger et al., 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 et al., 2002) são obtidos através das seguintes equações:

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

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

Onde  $M(\theta)$  é a mobilidade da interface sólido/ líquido e  $\varepsilon(\theta)$  é o parâmetro responsável pelo controle da interface difusa,  $\theta_0$  é orientação da interface com máxima anisotropia e  $j$  é modo de anisotropia responsável pelo número de ponta da dendrita que crescerão a partir do núcleo solidificado.

Segundo (Boettinger et al., 2002), os parâmetros  $M_0$ ,  $\varepsilon_0$  e  $w$  são obtidos através das Eqs. 6, 7 e 8, abaixo.

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

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

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

Onde  $2\lambda_0$  é a espessura da interface e  $\mu_0^k$  é o coeficiente linear cinético da interface S/L.

Entretanto, deve ser adicionado ao lado direito da Eq. (1) 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 e Boettinger, 1995):

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

$r$  é o número aleatório gerado entre -1 e +1, e  $a$  é o fator de amplitude do ruído.

Pela Eq. (9), pode-se observar que o ruído tem o seu valor máximo em  $\phi = 0,5$ , sendo nulo em  $\phi = 0$  e  $\phi = 1$ , ou seja, os ruídos são gerados na região interfacial.

A Eq. (10) representa a equação de energia utilizada no modelamento deste trabalho, citada em (Furtado, 2005).

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

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 difusividade térmica. O segundo representa o termo fonte, onde  $cp$  é o calor específico.

No modelamento do processo de solidificação de substâncias puras, a Eq. (1) será acoplada à Eq. (10) através do termo fonte.

Neste trabalho todas as simulações foram realizadas com um único material cristalino puro, no caso o Níquel. As propriedades físicas do metal puro (Ni) utilizadas foram obtidas em (Kim et al., 1999) e são mostradas na Tabela 1, abaixo.

**Tabela 1:** Propriedades Físicas do Níquel Puro.

Propriedades Físicas	Ni
Energia interfacial ( $\sigma_\theta$ ) - J/m <sup>2</sup>	0,37
Temperatura de Fusão ( $T_m$ ) - K	1728
Difusividade térmica (D) - m <sup>2</sup> /s	1,55 x 10 <sup>-5</sup>
Calor latente ( $\Delta H$ ) - J/m <sup>3</sup>	2,35 x 10 <sup>-9</sup>
Capacidade calorífica ( $C_p$ ) - J/m <sup>3</sup> K	5,42 x 10 <sup>6</sup>
Espessura interfacial ( $2\lambda_\theta$ ) - m	8 x 10 <sup>-8</sup>
Coefficiente linear cinético da interface S/L ( $\mu_\theta^k$ )	

Os parâmetros do modelo foram calculados pelas Eqs.(6), (7) e (8) e são listados na Tabela 2.

**Tabela 2:** Parâmetros computacionais utilizados no modelo do Campo de Fase para o Níquel Puro.

Parâmetros do Modelo	
Força de anisotropia ( $\delta_M$ )	0
Força de anisotropia ( $\delta_\epsilon$ )	0,025
Espessura da interface ( $\epsilon_\theta$ )	2,01 x 10 <sup>-4</sup> (J/m) <sup>1/2</sup>
Fator da energia livre de excesso ( $w$ )	0,61 x 10 <sup>8</sup> J/m <sup>3</sup>
Mobilidade da interface ( $M_\theta$ )	13,47 m <sup>3</sup> /s J
Espaçamento malha ( $\Delta x$ )	2,0 x 10 <sup>-8</sup> m
Espaçamento malha ( $\Delta y$ )	2,0 x 10 <sup>-8</sup> m
Passos no tempo ( $\Delta t$ )	7,74 x 10 <sup>-12</sup> s

### 3 Método Numérico

Para a solução das equações de fase, Eq.(1), e energia, Eq.(10), foi utilizada a técnica de diferenças finitas no esquema explícito. E para garantir a convergência do método foram adotadas duas condições de estabilidade que devem ser respeitadas, descritas por (Kim et al., 1999) como:  $\Delta t < \Delta x^2 / 4D$  e  $\Delta t < \Delta x^2 / (4M\epsilon^2)$ . Os valores de  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  e  $\Delta t$  estão listados na Tabela 2.

Em todas as simulações foi adicionado um núcleo solidificado no centro do domínio computacional e foram assumidas condições adiabáticas nas fronteiras do domínio com o meio externo.

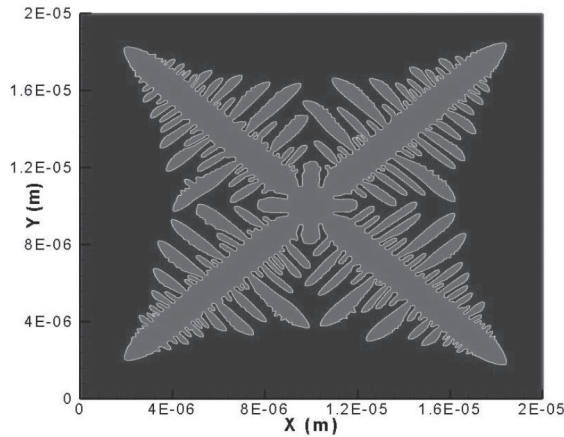
Todas as simulações foram feitas utilizando um computador Intel Dual Core, 3,00 GHz e 8,00 GB de RAM.

### 4 Resultados

A Fig. 1 mostra a morfologia dendrítica gerada através do modelo do Campo de Fase apresentado neste trabalho. Para esta simulação foi utilizada uma malha de 1000x1000 volumes de controles, modo de anisotropia igual a 4, super-resfriamento de 528 K e direção preferencial de crescimento de 45°. Através da Fig. 1 pode-se observar a presença de braços primários bem desenvolvidos, e braços secundários que cresceram perpendicularmente a partir dos braços

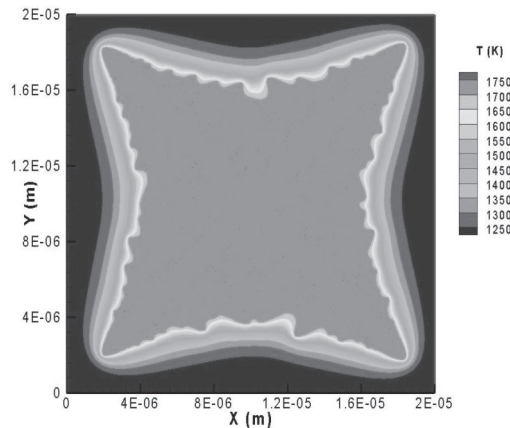
primários. Nota-se também que alguns pequenos braços terciários começaram a se desenvolver a partir dos braços secundários. Esses braços terciários cresceram paralelamente aos braços primários, com uma particularidade, os braços cresceram em um lado dos braços secundários. Esse comportamento pode ser explicado pela distribuição do campo térmico (Fig. 2), onde se percebe que a direção de maior extração de calor é justamente a direção de crescimento dos braços terciários.

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



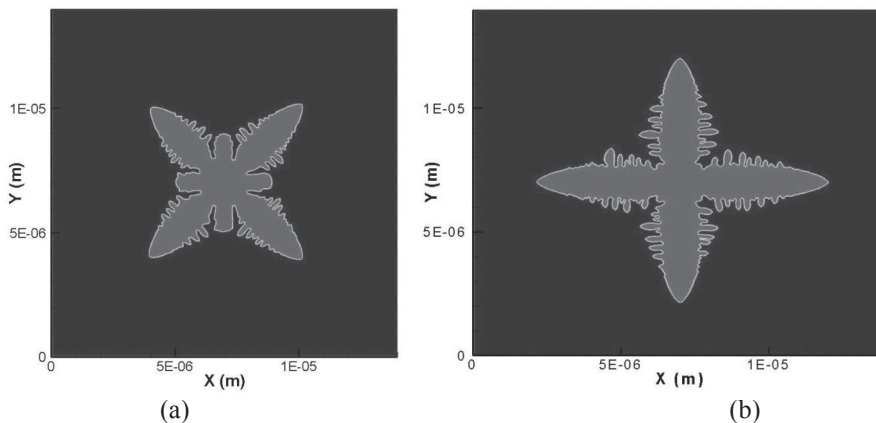
**Figura 1:** Dendrita gerada de um núcleo solidificado no centro domínio computacional.

A Figura (2) representa o perfil térmico da dendrita mostrada na Fig. (1). Observa-se 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 de ocorrer liberação do calor latente durante a mudança de fase. Outra característica percebida na Fig. (2) é que a região da interface possui uma temperatura intermediária entre a região solidificada e a região não solidificada. Devido ao efeito da difusividade térmica, as mudanças de temperatura ocorrem primeiro, e logo após a transformação de fase. Isto é uma condição para ocorrer às ramificações na estrutura dendrítica, caso este fenômeno não ocorra, a interface sólido/líquido avança para dentro do líquido na forma de uma superfície plana.



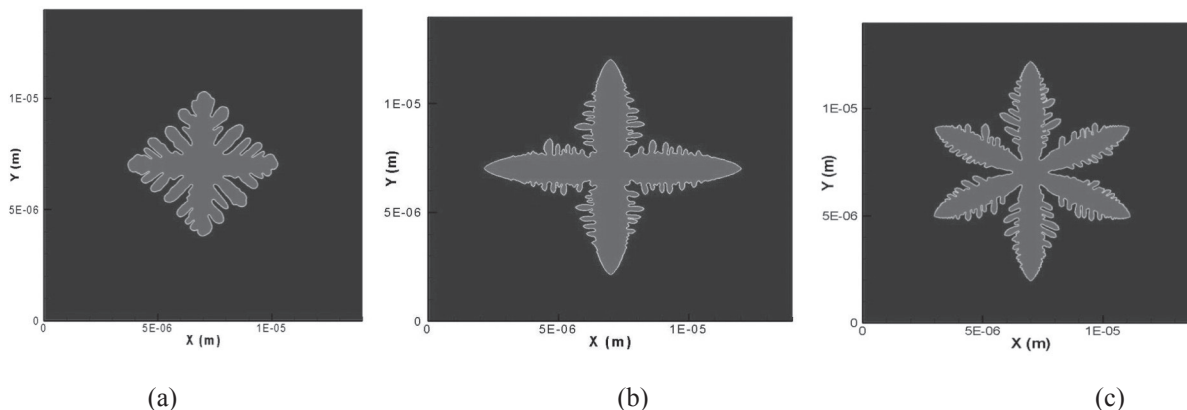
**Figura 2:** Perfil de temperatura de uma dendrita simulada em uma malha de medidas 1000x1000 volumes de controle.

Na Figura (3) duas dendritas com diferentes ângulos de orientação de crescimento são representadas. A Figura (3.a) mostra uma dendrita com direção de crescimento preferencial  $\theta_0=45^\circ$ , já na figura (3.b) a dendrita tem  $\theta_0=90^\circ$ . Observa-se que o crescimento do braço primário ocorre na direção de crescimento preferencial pré- definida.



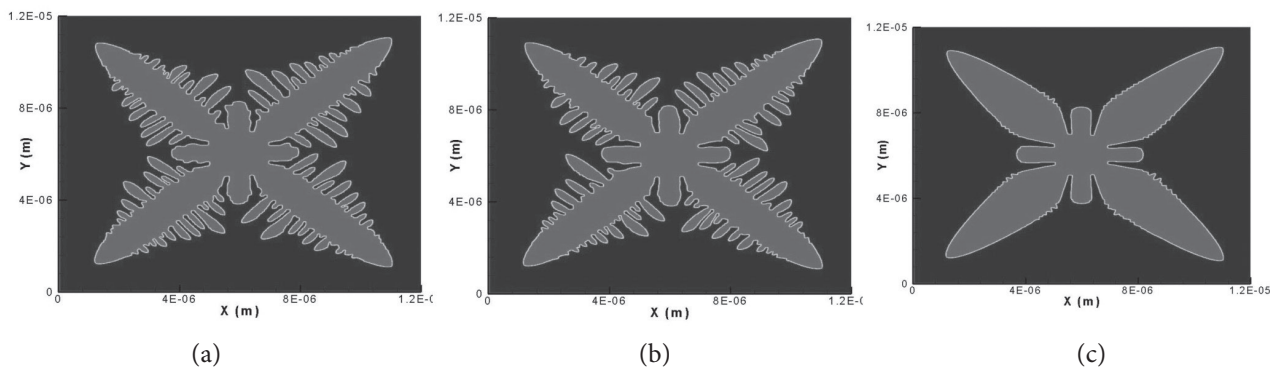
**Figura 3:** Influência do ângulo preferencial de crescimento na formação da dendrita. (a)  $\theta_0=45^\circ$  e (b)  $\theta_0=90^\circ$ .

A Fig. (4) mostra três dendritas com diferentes modos de anisotropia ( $j$ ). Foram assumidos modo de anisotropia igual a 0, 4 e 6, respectivamente. Pode-se notar que a quantidade de braços primários é determinada pelo modo de anisotropia assumido, ou seja, para modo de anisotropia igual a 6 o núcleo de fase sólida desenvolve 6 braços primários, Fig. (4.c).



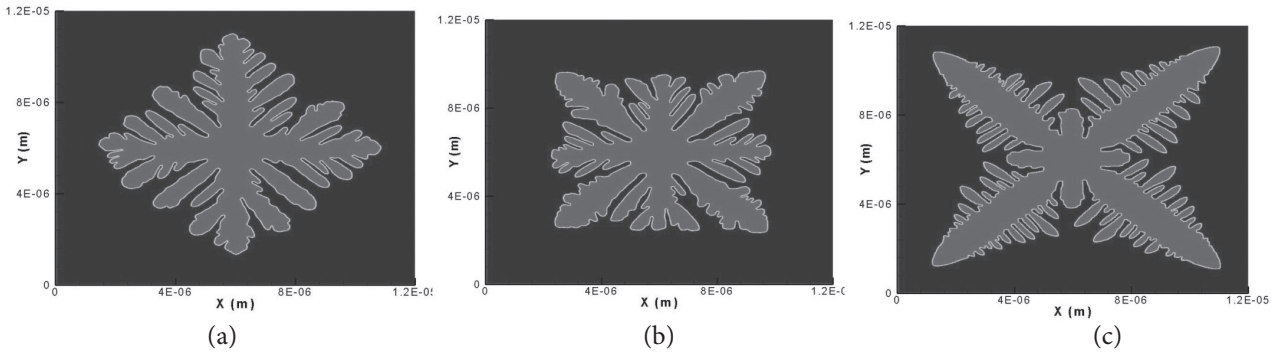
**Figura 4:** Influência do modo de anisotropia na morfologia dendrítica. (a)  $j=0$ , (b)  $j=4$  e (c)  $j=6$ .

A Figura (5) apresenta três dendritas com diferentes valores de amplitude de ruídos. Nota-se que quanto maior o valor da amplitude de ruído, maior será a assimetria entre ramificações da dendrita, já que os ruídos representam perturbações durante a solidificação. Essas perturbações simulam o caso real, onde a solidificação não é totalmente simétrica. Para amplitudes de ruídos maiores o crescimento competitivo entre os braços secundários é menos evidente, Fig. (5.a).



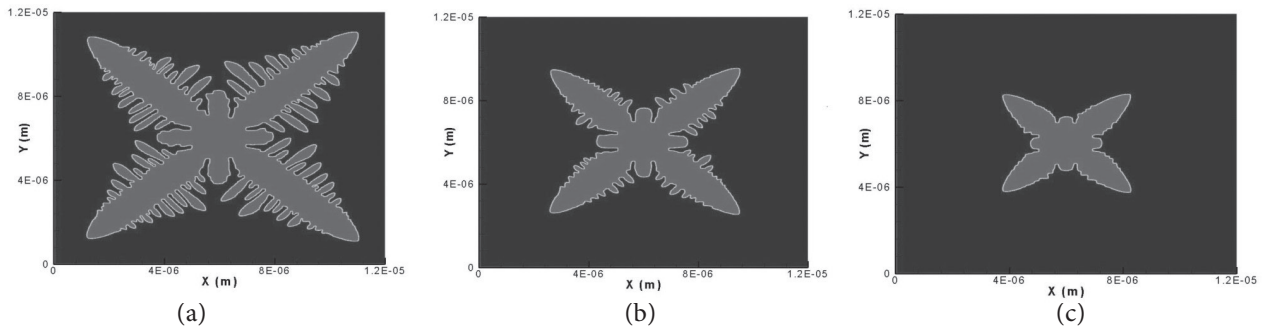
**Figura 5:** Influência da amplitude de ruído na formação da dendrita. (a)  $a=0,025$ , (b)  $a=0,015$  e (c)  $a=0$ .

A Figura (6.a) mostra a evolução da interface sólido/líquido com força de anisotropia nula,  $\delta_\epsilon = 0$ . Observa-se um crescimento das pontas da dendrita sem uma direção preferencial. Para valores da força de anisotropia diferente de zero  $\delta_\epsilon = 0.01$ , Fig. (6.b), e  $\delta_\epsilon = 0.025$ , Fig. (6.c), uma dendrita definida é formada ao longo da direção preferencial de crescimento.



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

As Figuras (7.a), (7.b) e (7.c) representam a morfologia dendrítica formada para diferentes condições de super-resfriamento. O aumento do valor do super-resfriamento facilita a formação de uma estrutura dendrítica bem definida, uma vez que maiores super-resfriamentos diminuem a velocidade da frente de solidificação.



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

## 5 Conclusões

O modelo do Campo de Fase desenvolvido se mostrou confiável à medida que as dendritas geradas possuem uma morfologia semelhante às dendritas encontradas na literatura. As dendritas simuladas apresentaram braços primários bem desenvolvidos, braços secundários que crescem perpendiculares aos braços primários e pequenos braços terciários começaram a se formar perpendiculares aos braços secundários, e paralelos aos braços primários.

Confirmou-se a influência do ângulo preferencial de crescimento na morfologia dendrítica gerada, sendo possível perceber que o crescimento do braço primário da dendrita ocorre na mesma direção do ângulo preferencial de crescimento pré-determinada.

Para o caso do modelo do Campo de Fase usado com o objetivo de estudar a influência do modo de anisotropia com a dendrita formada, vimos que o modo de anisotropia determina a quantidade de braços primários que o núcleo de fase sólida desenvolve como já era afirmado nas principais literaturas.

No estudo da amplitude de ruídos concluiu-se que quanto maior o valor da amplitude de ruído, maior será a assimetria entre ramificações da dendrita.

Nas simulações com valores da força de anisotropia diferente de zero uma dendrita definida é formada ao longo da direção preferencial de crescimento. Enquanto que, para casos com força de anisotropia igual a zero não há presença de crescimento preferencial dos braços dendríticos.

Comprovamos ainda que o grau de super-resfriamento do sistema interfere diretamente na dendrita formada. O aumento do valor do super-resfriamento facilita a formação de uma estrutura dendrítica bem definida.

## **Agradecimentos**

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

## **Referências**

- BOETTINGER, W. J. et al. Phase-field simulation of solidification. *Annual Review of Materials Research*, Palo Alto, v. 32, p. 163-194, Aug. 2002.
- FURTADO, A. F. *Modelamento do processo de solidificação e formação de microestrutura pelo método do campo de fase*. 2005. Tese (Doutorado em Engenharia Metalúrgica)-Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda, Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2005.
- KIM, S. G. et al. Large scale simulation of dendritic growth in pure undercooled melt by phase-field model. *ISIJ International*, Tokyo, v. 39, n. 4, p. 335-340, 1999.
- WARREN, J. A.; BOETTINGER, W. J. Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field method. *Acta Metallurgical Materials*, Elmsford, v. 43, n. 2, p. 689-703, 1995.