

# MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA SOLIDIFICAÇÃO DE METAIS PUROS UTILIZANDO O MODELO DO CAMPO DE FASES<sup>1</sup>

Alan Lamotte<sup>2</sup>  
 Marcelo Aquino Martorano<sup>3</sup>

## Resumo

No presente trabalho foi implementado um modelo matemático baseado no método do campo de fases para simular a solidificação de metais puros em domínios bi e tridimensionais. O modelo foi utilizado para observar a estabilidade da interface sólido-líquido sob diversas condições de transferência de calor e propriedades características. Os resultados, quando possível, foram comparados com soluções disponíveis na literatura para validar o desenvolvimento do modelo. Observa-se que os resultados do modelo relativos à formação e à morfologia das instabilidades que surgem na interface estão consistentes com a teoria do super-resfriamento constitucional. Nota-se que a anisotropia da energia de interface sólido-líquido causa o crescimento de braços dendríticos em direções preferenciais, mas a transferência de calor, afetada pelo formato do domínio, também tem efeitos na localização e crescimento das instabilidades.

**Palavras-chave:** Campo de fases; Simulação; Modelos matemáticos; Metal puro.

## MODELING AND SIMULATION OF THE SOLIDIFICATION OF PURE METALS USING THE PHASE-FIELD METHOD

## Abstract

In this paper was implemented a mathematical model based on the method of phase-field to simulate the solidification of pure metals in two and three dimensional domains. The model was used to observe the stability of the solid-liquid interface under varying conditions of heat transfer characteristics and properties. The results, when possible, were compared with solutions available in the literature to validate the model development. It is observed that the model results relating to the formation and morphology of instabilities that arise at the interface are consistent with the theory of constitutional supercooling. Note that the anisotropy energy of solid-liquid interface causes growth of dendrite arms in preferential directions, but the heat transfer affected by the shape of the domain, it also has effect on the growth and location of instabilities.

**Keywords:** Phase-field; Simulation; Mathematic models; Pure metal.

<sup>1</sup> *Contribuição técnica ao 68º Congresso Anual da ABM - Internacional, 30 de julho a 2 de agosto de 2013, Belo Horizonte, MG, Brasil.*

<sup>2</sup> *Aluno de mestrado do Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Av. Prof. Mello Moraes, 2463, São Paulo, SP, Brasil, CEP 05508-900.*

<sup>3</sup> *Professor, Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Av. Prof. Mello Moraes, 2463, São Paulo, SP, Brasil, CEP 05508-900.*

## 1 INTRODUÇÃO

Uma alternativa para modelagem matemática da microestrutura formada durante a solidificação é o método do campo de fases. A aplicação deste método à solidificação elimina as dificuldades relacionadas ao acompanhamento de interfaces de geometria complexa. Segundo este método a transição entre uma fase e outra através de uma interface não ocorre de forma abrupta, mas sim de forma contínua e gradual em uma região reduzida, chamada de interface difusa.<sup>(1)</sup> O método tem ideia central e origem nos trabalhos de Cahn e Hilliard,<sup>(2)</sup> onde associa-se uma variável chamada "variável de fase" ( $\phi$ ), um tipo de parâmetro de ordem, às diferentes fases do sistema para cada ponto do domínio. Considera-se ainda que  $\phi$  varia suave e continuamente através da interface.

Geralmente adota-se  $\phi = 0$  para o líquido e  $\phi = 1$  para o sólido. Os pontos do domínio em que este campo de fases assume valores intermediários entre 0 e 1 são pertencentes à interface difusa e permitem identificar a posição e morfologia desta interface.<sup>(3)</sup> Assume-se que a posição da interface para este caso seja determinada pela posição onde a variável  $\phi = 0,5$ .

A variável de fase  $\phi$  representa um campo e seu valor depende do tempo e das coordenadas espaciais. Como  $\phi$  permite identificar a fase existente em um determinado ponto, pode ser utilizada para auxiliar no cálculo da energia livre total do sistema através de um funcional como apresentado abaixo,

$$G(\phi) = \iiint \left( f(\phi, T) + \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla\phi|^2 \right) \quad (1)$$

onde  $f(\phi, T)$  é a densidade de energia livre de Helmholtz em função da variável de fase e da temperatura, equação de onde vem a força motriz da solidificação; e  $\varepsilon$  é o coeficiente da chamada energia gradiente de  $\phi$ . O termo  $(\varepsilon^2/2)|\nabla\phi|^2$  foi postulado por Cahn e Hilliard<sup>(2)</sup> e denominado de energia gradiente. Esta energia está sempre presente quando existem gradientes ou variações de estrutura, composição ou temperatura. Ela é desprezível para as variações típicas no interior das fases, mas é significativa e deve ser considerada na região da interface, onde as variações são intensas.<sup>(4)</sup>

As equações do método do campo de fases foram desenvolvidas para garantir que, quando o sistema evoluísse, ocorreria a diminuição da energia livre total, visando o seu mínimo. A equação abaixo, postulada por Allen e Cahn,<sup>(5)</sup> garante esta evolução,

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -M \frac{\delta G}{\delta\phi} \quad (2)$$

onde  $\delta G/\delta\phi$  é a derivada variacional do funcional de energia livre em relação à variável de fase e M é denominado de mobilidade da interface.

A maioria dos processos de fundição apresenta estrutura dendrítica, mesmo para metais puros. O crescimento de instabilidades morfológicas na interface sólido-líquido é o fenômeno que resulta na estrutura dendrítica, entretanto apresenta grande complexidade para ser modelado matematicamente pelos métodos tradicionais. Se a energia de interface for relativamente alta, esta poderia inibir a formação de protuberâncias. No entanto, a transferência de calor na interface pode favorecer o crescimento destas perturbações. O método do campo de fases é capaz

de considerar de forma precisa todos estes efeitos.

O presente trabalho visa desenvolver um modelo matemático baseado no método do campo de fases capaz de simular a solidificação de metais puros, obtendo a morfologia das dendritas em função das condições de solidificação nos casos bi e tridimensionais.

## 2 METODOLOGIA

O método do campo de fases foi aplicado para simular a solidificação dendrítica de metais puros em domínios bi e tridimensionais. Este método foi implementado considerando-se inicialmente situações mais simples, que foram se tornando cada vez mais complexas até se atingir o objetivo final. Aqui serão apresentados os casos estudados para se atingir o modelo final. Inicialmente modelou-se o problema da solidificação de metal puro em crescimento colunar, posteriormente incluiu-se a anisotropia da energia por unidade de área da interface sólido-líquido, possibilitando a simulação do crescimento dendrítico em direções cristalográficas preferenciais. Finalmente, simulou-se a crescimento dendrítico tridimensional.

### 2.1 Solidificação de Metal Puro em Temperatura Uniforme

O primeiro problema solucionado pelo método do campo de fases foi a solidificação de um metal puro em um domínio unidimensional (frente de solidificação plana), considerando uma temperatura constante em todo domínio, abaixo da temperatura de fusão. Neste caso a interface sólido-líquido deve caminhar a uma velocidade constante proporcional ao super-resfriamento. A partir das equações apresentadas acima para o modelo de campo de fases, foram obtidas as equações abaixo para este problema específico, onde  $\beta(T)$  é chamada de força motriz:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M \left( \frac{\partial f}{\partial \phi} - \varepsilon^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) \quad (3)$$

$$f(\phi, T) = W \int_0^\phi \left( p(p-1) \left( p - \frac{1}{2} - \beta(T) \right) \right) dp \quad (4)$$

$$\beta(T) = \frac{6L(T - T_f)}{W T_f} \quad (5)$$

onde  $L$  é o calor latente de fusão,  $T_f$  a temperatura de fusão do metal puro e  $W$  uma constante que depende da energia interfacial e espessura da interface difusa. Como restrição, tem-se que  $|\beta(T)| \leq 0,5$ . Como condições de contorno, tem-se  $\phi$  igual a 0 e a 1 nos extremos do domínio, considerando o contorno suficientemente distante para que o domínio possa ser considerado semi-infinito.

Existe uma solução analítica deste problema elaborada por Harrowell e Oxtoby,<sup>(6)</sup> que foi utilizada para comparação.

## 2.2 Solidificação de Metal Puro em um Perfil de Temperatura Linear

Este modelo é semelhante ao anterior, representando uma frente de solidificação unidirecional. No entanto uma temperatura que varia linearmente no domínio e com o tempo de acordo com a equação abaixo foi imposta no sistema,

$$T(x, t) = T_f Gx - VGt \quad (6)$$

onde G representa o gradiente de temperatura e V a velocidade das isotermas.

## 2.3 Solidificação de Metal Puro com Previsão da Transferência de Calor

No presente item, o perfil de temperatura foi calculado a partir da equação de conservação da energia. Desta forma, a equação da variável de fase foi acoplada à equação abaixo,

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \rho L \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (7)$$

sendo  $\rho$  a densidade do metal,  $C_p$  o calor específico,  $k$  a condutividade térmica e  $L$  o calor latente. Como condição de contorno para a equação do transporte de calor adotou-se a temperatura fixa em um dos contornos e a temperatura de fusão no outro, onde sempre existe a presença de líquido.

As equações do modelo foram adimensionalizadas utilizando as seguintes variáveis adimensionais  $T^* = (T - T_0)/(T_f - T_0)$ ,  $f^* = f/W$ ,  $x^* = x/l$  e  $t^* = t\alpha/l^2$ , onde  $\alpha$  é a condutividade térmica e  $T_0$  a temperatura no contorno. Utilizando estas definições, as equações do campo de fases e do transporte de calor no formato adimensional são escritas abaixo, onde  $Ste$  é o número de Stefan.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t^*} = -M' \left( \frac{\partial f^*}{\partial \phi} - E \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^{*2}} \right) \quad (8)$$

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} - \frac{1}{Ste} \frac{\partial \phi}{\partial t^*} \quad (9)$$

$$Ste = \frac{C_p \Delta T}{L} \quad (10)$$

Existe também uma solução exata disponível na literatura para este problema, permitindo a comparação. Esta solução é conhecida como solução de Stefan.<sup>(7)</sup>

## 2.4 Solidificação de Metal Puro em um Domínio Bidimensional

O modelo para a solidificação do metal puro considerando a transferência de calor foi estendido para a solidificação em um domínio bidimensional. Para o campo de fases adotou-se o contorno sempre líquido e como condição inicial um pequeno núcleo circular sólido no centro do domínio. Para o transporte de calor impõe-se uma condição adiabática (fluxo no contorno igual a 0) com temperatura inicial super-resfriada em relação à temperatura de fusão.

Para comparação com os resultados do trabalho de Kobayashi<sup>(1)</sup>, o coeficiente  $\beta(T)$  foi calculado segundo a equação abaixo,

$$\beta(T) = \frac{-\kappa}{\pi} \tan^{-1} \gamma(T_m - T) \quad (11)$$

## 2.5 Solidificação de Metal Puro Anisotrópico em um Domínio Bidimensional

O problema anterior foi simulado novamente, porém considerando a anisotropia da energia de interface sólido-líquido. Nas equações do campo de fases, esta anisotropia pode ser incluída no coeficiente  $\varepsilon$ . A anisotropia foi considerada pela primeira vez por Kobayashi<sup>(1)</sup>, que assumiu que  $\varepsilon$  era função da orientação da interface. Segundo esta hipótese, a equação diferencial para a variável de fase solucionada no presente trabalho torna-se,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M \left( \frac{\partial f}{\partial \phi} - \nabla(\varepsilon^2 \nabla \phi) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon \varepsilon' \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \varepsilon \varepsilon' \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right) \quad (12)$$

onde  $\varepsilon = \bar{\varepsilon}(1 + s \cos(\nu(\theta - \theta_0)))$ ,  $\bar{\varepsilon}$  é uma constante,  $s$  a força da anisotropia,  $\nu$  o modo da anisotropia, que determina o número de orientações preferenciais de crescimento e  $\theta$  o ângulo entre o vetor normal à interface,  $n$ , e o eixo  $x$ , calculado por  $\theta = \tan^{-1}(\partial \phi / \partial y) / (\partial \phi / \partial x)$ .

## 2.6 Solidificação de Metal Puro Anisotrópico em um Domínio Tridimensional

No caso tridimensional, o coeficiente da energia gradiente,  $\varepsilon$ , é calculado por,

$$\varepsilon(n) = \bar{\varepsilon} \eta = \bar{\varepsilon}(1 - 3s) \left( 1 - \frac{4s}{1 - 3s} \frac{\phi_{x^*}^4 + \phi_{y^*}^4 + \phi_{z^*}^4}{(\nabla \phi)^4} \right) \quad (13)$$

onde  $n$  é a direção normal à interface. Esta equação foi também utilizada por Singer e Karma<sup>(8,9)</sup>. Utilizando este coeficiente na equação do campo de fases, resulta em,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t^*} = \frac{-M'}{\eta^2} + \left[ \frac{\partial f^*}{\partial \phi} + E \left( \nabla(\nabla \phi)^2 \eta \left( \frac{\partial \eta}{\partial \phi_{x^*}} + \frac{\partial \eta}{\partial \phi_{y^*}} + \frac{\partial \eta}{\partial \phi_{z^*}} \right) + \nabla(\eta^2 \nabla \phi) \right) \right] \quad (14)$$

No caso da transferência de calor, como condição de contorno têm-se contornos adiabáticos e um domínio com temperatura abaixo da temperatura de fusão. Para a equação do campo de fases, adotou-se um domínio suficientemente grande para que pudesse ser considerado semi-infinito e, como condição inicial, considerou-se um núcleo esférico sólido posicionado no centro do domínio.

As equações diferenciais para a variável de fase foram solucionadas através do método das diferenças finitas, formulação implícita, e a equação da conservação da energia foi solucionada utilizando o método dos volumes finitos, também na formulação implícita. O acoplamento entre as duas equações foi realizado simplesmente solucionando-se sequencialmente os sistemas de equações algébricas resultantes da discretização das duas equações até se atingir a convergência global. Os métodos de resolução utilizados foram implementados em um código computacional completamente desenvolvido no presente trabalho em linguagem computacional F#. A visualização dos resultados dos campos da variável

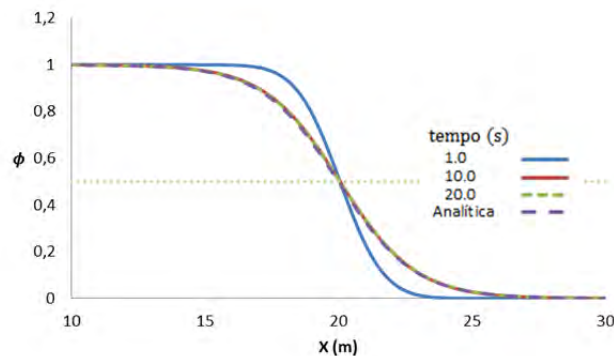
de fase e de temperatura, obtidos nas simulações em domínio bidimensional e tridimensional, foi obtida utilizando-se o software Tecplot 360.

### 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

#### 3.1 Solidificação de Metal Puro em Temperatura Uniforme

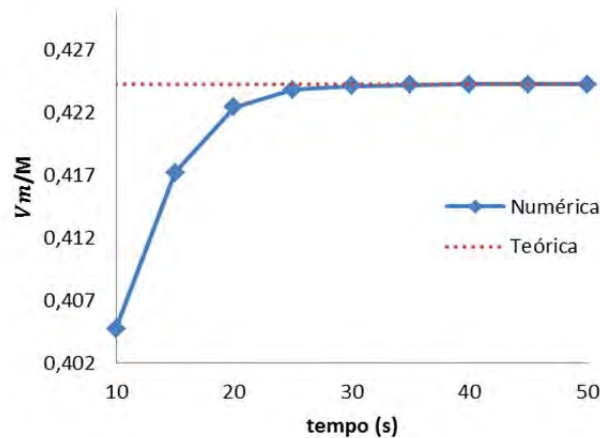
Foi simulada a solidificação de um metal puro hipotético utilizando-se os seguintes parâmetros de entrada:  $\varepsilon = 1 \text{ (J/m)}^{1/2}$ ,  $M = 1 \text{ m}^3/(\text{J}\cdot\text{s})$ ,  $T_f = 1 \text{ K}$ ,  $L = 1 \text{ J/m}^3$  e  $W = 1 \text{ J/m}^3$ .

Para  $\beta(T) = 0$ , a temperatura em todo sistema é igual à temperatura de fusão e o perfil da variável de fase,  $\phi$ , evolui com o tempo para uma situação de estacionária, como mostrado na Figura 1. Sendo  $\phi = 0$  é o líquido e  $\phi = 1$  é o sólido, o perfil de  $\phi$  ajusta-se com o decorrer do tempo para a situação de estacionária, também chamada de equilíbrio, aproximando-se da solução de Harrowell e Oxtoby,<sup>(6)</sup> o que valida o modelo implementado.



**Figura 1** - Evolução no tempo do perfil da variável de fase,  $\phi$ , ao longo da distância,  $x$ , representando a interface sólido-líquido (região onde  $0 < \phi < 1$ ) para  $\beta(T) = 0$ .

Quando se considera que  $\beta(T) = 0,3$ , o sistema está a uma temperatura abaixo da temperatura de fusão e, portanto, alguma solidificação deve ocorrer. A velocidade da interface sólido-líquido obtida pela solução numérica da equação da variável de fase, foi comparada com a velocidade teórica utilizada na solução analítica elaborada por Harrowell e Oxtoby<sup>(6)</sup> na Figura 2. Nota-se um período transiente de aumento de velocidade até atingir-se um estado estacionário de velocidade constante, igual àquela obtida da solução analítica.

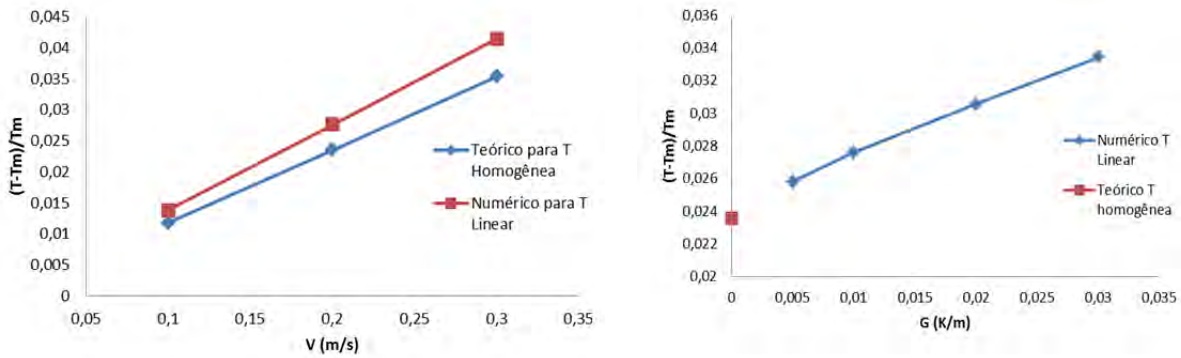


**Figura 2** - Variação da velocidade da interface simulada (numérica) ao longo do tempo comparada com a obtida da solução analítica (teórica), elaborada por Harrowell e Oxtoby<sup>(6)</sup>, para um mesmo super-resfriamento.

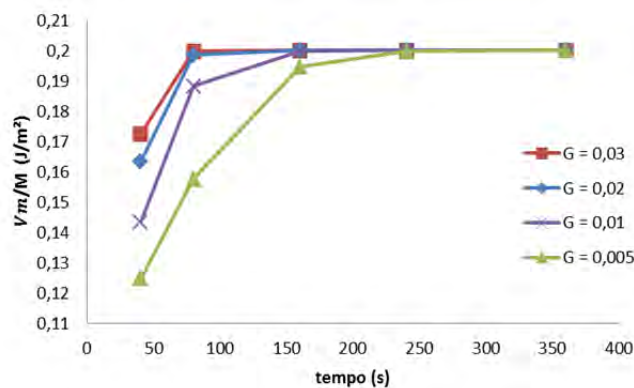
### 3.2 Solidificação de Metal Puro em um Perfil de Temperatura Linear

Utilizando-se do mesmo metal puro hipotético do caso anterior foram analisados o super-resfriamento e a velocidade da interface, a cada instante, para diversos valores de  $G$  e  $V$  a fim de observar a influência do gradiente de temperatura e da velocidade das isothermas no comportamento da interface utilizando o método do campo de fases. A Figura 3a mostra o super-resfriamento na interface, quando esta atinge o regime estacionário, em relação à velocidade das isothermas, considerando-se o gradiente de temperatura constante. A Figura 3b mostra o super-resfriamento na interface, quando esta atinge o regime estacionário, em relação a variação do gradiente de temperatura, considerando-se a velocidade das isothermas constante. A Figura 4 mostra a variação da velocidade da interface ao longo do tempo para diversos gradientes de temperatura, considerando-se a velocidade das isothermas constante.

Observa-se na Figura 3a que o super-resfriamento tem um comportamento linear em relação à velocidade. No entanto, devido ao gradiente de temperatura, a reta apresenta uma inclinação diferente em relação ao caso de gradiente igual a 0, caso teórico encontrado na literatura.<sup>(6)</sup> Mantendo a velocidade das isothermas constantes e variando apenas o gradiente de temperatura identifica-se uma relação linear entre o super-resfriamento e o gradiente de temperatura, observado na Figura 3b. Nota-se na Figura 4 que a velocidade da interface atinge o estado estacionário mais rapidamente quanto maior for o gradiente de temperatura.



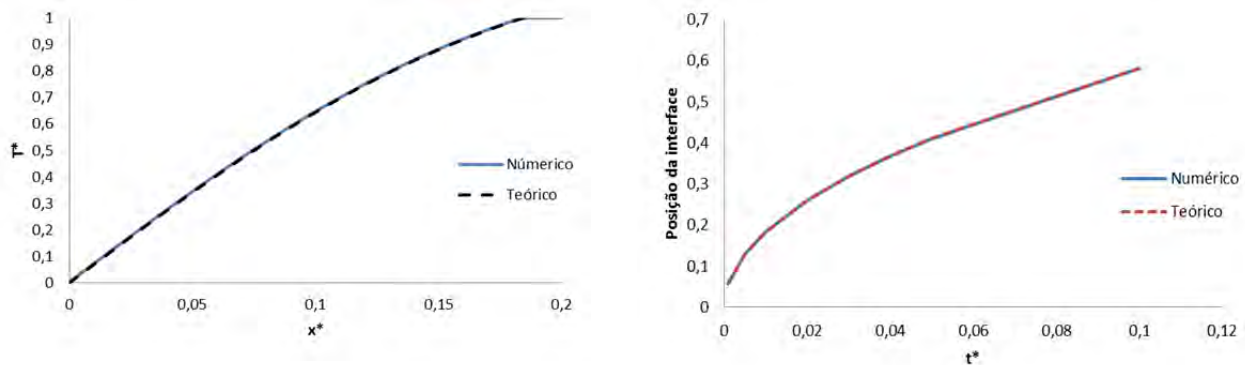
**Figura 1** - a) Super-resfriamento na interface sólido-líquido,  $(T-T_m)/T_m$ , em relação à velocidade das isotermas,  $V$ , com gradiente de temperatura,  $G$ , constante e igual a  $0 \text{ K/m}$ , para o caso teórico, e  $0,001 \text{ K/m}$ , para o caso numérico. b) Super-resfriamento na interface sólido-líquido em relação ao gradiente de temperatura com velocidade das isotermas constante e igual a  $0,2 \text{ m/s}$ .



**Figura 4** - Variação da velocidade da interface sólido-líquido,  $V_m/M$ , ao longo do tempo para diversos gradientes de temperatura e velocidade das isotermas constante e igual a  $0,2 \text{ m/s}$ .

### 3.3 Solidificação de Metal Puro com Previsão de Transferência de Calor

O perfil de temperatura obtido como resultado das simulações, bem como a posição da interface ao longo do tempo podem ser observados na Figura 5, onde comparou-se a solução teórica analítica proposta por Stefan<sup>(7)</sup> com a solução numérica obtida por simulação. Nota-se que as duas soluções apresentaram os mesmos resultados.

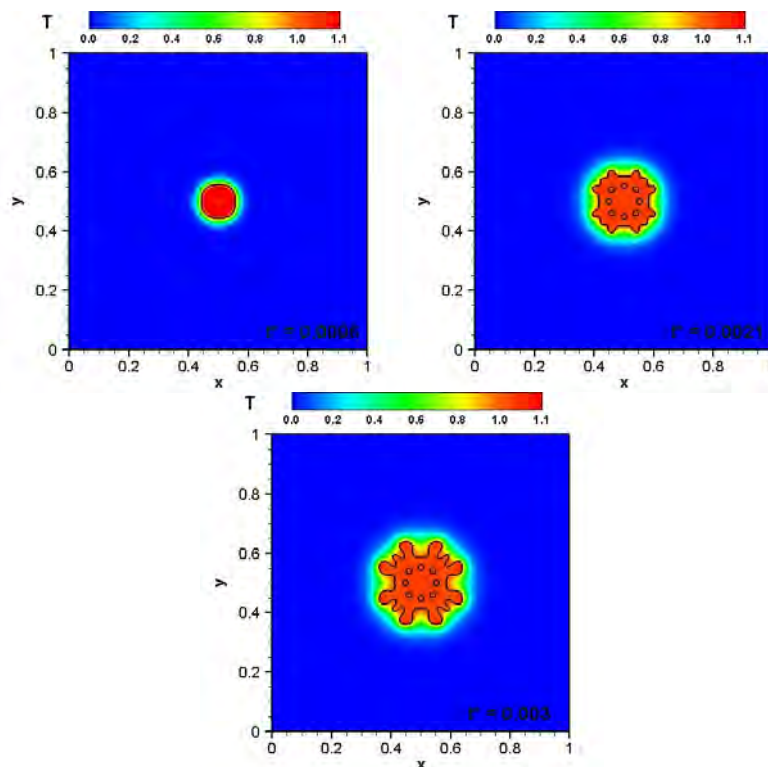


**Figura 5**- a) Perfil de temperatura obtido numericamente (numérico) e analiticamente por meio da solução de Stefan<sup>(7)</sup> (teórico). b) Posição da interface obtido numericamente (numérico) e analiticamente por meio da solução de Stefan<sup>(7)</sup> (teórico).



### 3.4 Solidificação de Metal Puro em um Domínio Bidimensional

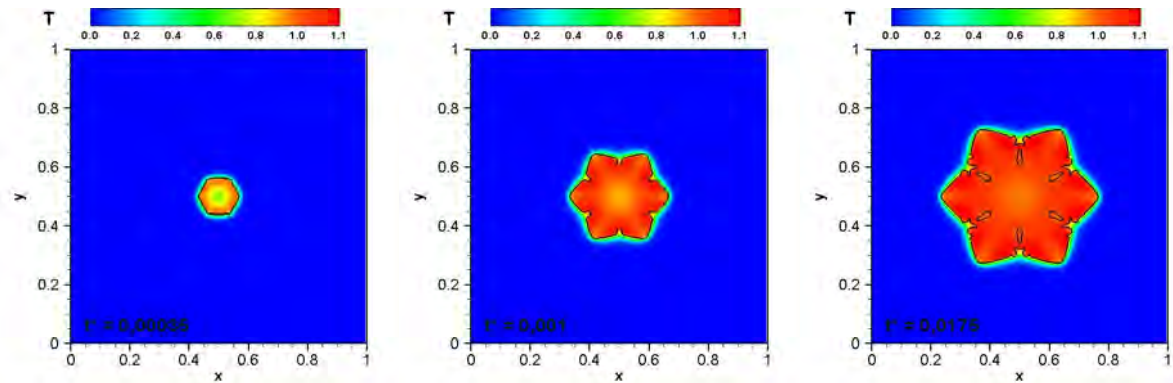
A solidificação bidimensional foi simulada para  $Ste = 0,5$ . Observa-se na figura 6 o campo de temperaturas e a interface sólido-líquido para diversos instantes de tempo. Nota-se que ocorre a formação de ramificações no sólido crescendo no centro do domínio, apesar de não haver nenhum efeito de anisotropia nas propriedades. As ramificações aparecem nas diagonais do domínio, onde a extração de calor é maior, devido ao ganho de superfície de troca de calor entre o sólido e o líquido. Vale ressaltar ainda que este resultado está consistente com a teoria do super-resfriamento constitucional, que prevê a formação de instabilidades morfológicas (formação de protuberâncias) nos metais puros quando a extração de calor ocorre através do líquido.



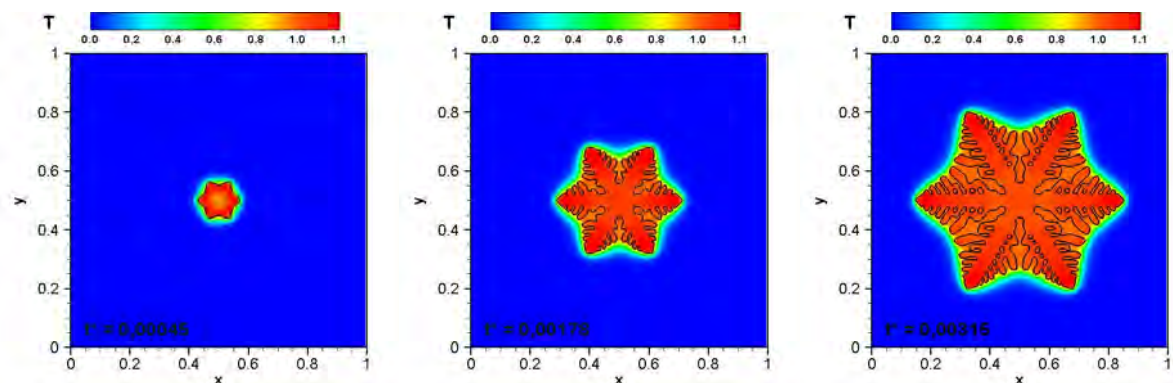
**Figura 6** - Campo de temperaturas em diferentes instantes de tempo adimensional,  $t^*$ , durante a solidificação de um metal puro e isotrópico a partir de um núcleo cristalino em meio adiabático com  $Ste = 0,5$ . A linha preta indica a posição da interface sólido/líquida.

### 3.5 Solidificação de Metal Puro Anisotrópico em um Domínio Bidimensional

O efeito da anisotropia na energia de interface sólido-líquido foi considerado nas simulações apresentadas neste item. Foi adotado um metal puro hipotético com parâmetros adimensionais  $M' = 270000$  e  $E = 1,23E - 06$ . Para descrever a anisotropia na solidificação em meio adiabático utilizou-se  $s = 0,04$  e  $\nu = 6$  para dois valores de  $Ste$ . O comportamento observado nas Figuras 7 e 8 é análogo ao observado por Kobayashi.<sup>(1)</sup> Nota-se que, quanto maior o número de Stefan, menor é o calor latente liberado e, portanto, mais esférica é a morfologia, já que as ramificações já não são mais necessárias para uma extração eficiente do calor latente gerado na interface sólido-líquido.

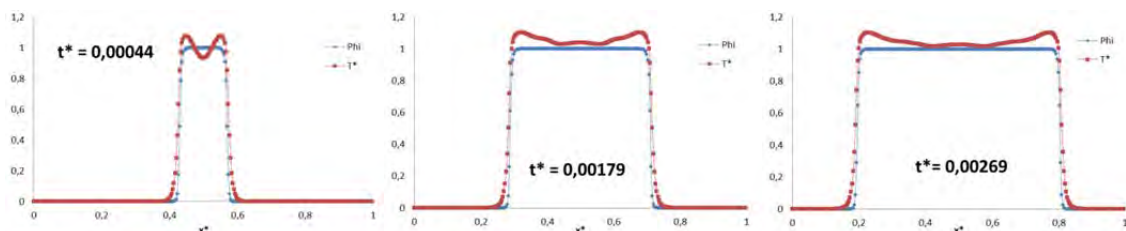


**Figura 7** - Campo de temperaturas em diferentes instantes de tempo adimensional durante a solidificação de metal puro anisotrópico a partir de núcleo cristalino em meio adiabático para  $Ste = 0,83$ . A linha preta indica a posição da interface sólido/líquida.



**Figura 8** - Campo de temperaturas em diferentes instantes de tempo adimensional durante a solidificação de metal puro anisotrópico a partir de núcleo cristalino em meio adiabático para  $Ste = 0,625$ . A linha preta indica a posição da interface sólido/líquida.

A Figura 9, representando um corte em  $y^* = 0,5$  nos perfis de temperatura e da variável de fases para o caso com número de  $Ste = 0,625$ , permite observar que o sólido fica superaquecido na região central, uma vez que apresenta temperatura adimensional maior que 1 (temperatura de fusão adimensional) na região do sólido (onde  $\phi = 1$ ), apesar da temperatura na interface, na posição onde  $\phi = 0,5$  permanecer super-resfriada. O fenômeno ocorre devido à maior parte da liberação de calor latente ocorrer durante o final da solidificação, ou seja, quando  $\phi$  se torna 1. A temperatura na região imediatamente após a interface aparece em uma temperatura maior que a temperatura de fusão e o calor é transferido para as regiões de menor temperatura, como o interior do sólido e o líquido.



**Figura 9** - Corte para  $y^*=0,5$  dos perfis de temperatura e da variável de fases em diferentes instantes de tempo durante a solidificação de metal puro anisotrópico a partir de núcleo cristalino em meio adiabático para  $Ste = 0,625$ .

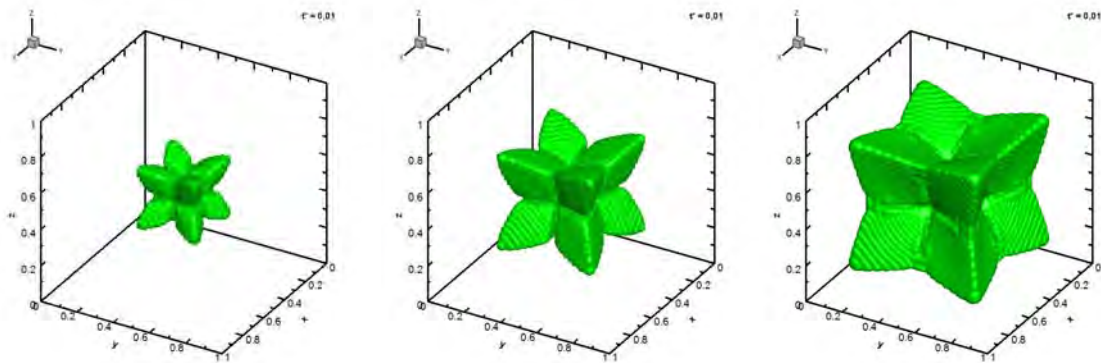
As simulações apresentadas mostram que, devido à liberação de calor latente durante a transformação de fase, algum calor é conduzido para o interior do sólido,

elevando a sua temperatura acima da temperatura de fusão, o que deveria causar a refusão total do sólido. Esta não ocorre devido à anisotropia na energia de interface, que aumenta consideravelmente a energia da interface em certas direções. O fenômeno também resulta em um maior gradiente de temperatura na região da interface favorecendo o transporte de calor para o líquido e conseqüentemente a intensificando a formação dos braços de dendrita. No entanto, esse acúmulo de energia resulta em um mecanismo de refundirá alguns braços secundários de dendrita principalmente no ponto de junção entre os braços primários e secundários, que são regiões onde o transporte de calor para o líquido é prejudicado devido à menor superfície específica. Esse fato pode ser evidenciado na Figura 8, onde é possível notar o afinamento do braço secundário de dendrita na região onde este é ligado ao braço primário.

### **3.6 Solidificação de Metal Puro Anisotrópico em um Domínio Tridimensional**

Foi adotado um metal puro hipotético com parâmetros adimensionais  $M' = 270000$  e  $E = 1,23E - 06$ . Para estudar os efeitos da anisotropia e da transferência de calor na solidificação em meio adiabático utilizou-se diversos valores de  $s$  e  $Ste$ .

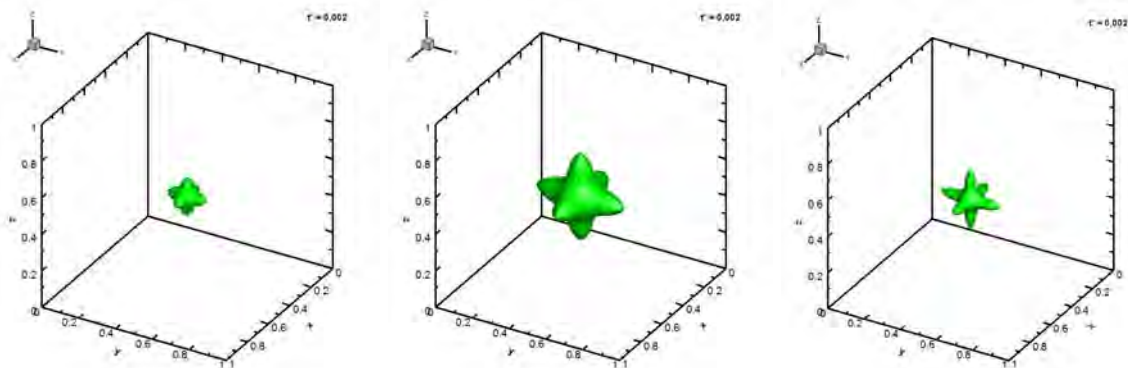
Primeiramente, utilizando o caso de força de anisotropia,  $s$ , igual a 0 e diversos números de Stefan, podemos estudar o efeito exclusivo do transporte de calor. A Figura 10 obtida como resultado das simulações para o mesmo instante de tempo e diferentes números de Stefan, mostra que, para o caso de crescimento equiaxial, o crescimento da interface é morfologicamente instável, mesmo considerando-se apenas o efeito térmico, e que ao alterar-se o número de Stefan altera-se a velocidade de solidificação e de crescimento das protuberâncias, o que pode ser evidenciado devido à morfologia mais volumosa e com braços de dendrita mais grossos para o caso de maior número de Stefan na Figura 10.c. O maior número de Stefan representa um menor calor latente que resulta em uma taxa de solidificação mais acentuada.



**Figura 10** - Morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com  $s = 0$  e  $t^* = 0,01$ . a)  $Ste=0,5$ . b)  $Ste=0,75$ . c)  $Ste=1$ .

Utilizando-se força de anisotropia 0,05 e 0,1 estudou-se o comportamento morfológico por efeito da anisotropia, além da observação do fenômeno térmico. Os resultados observados na Figura 11, que apresenta a morfologia da interface para metais puros com diferentes números de Stefan e diferentes forças de anisotropia, apontam que, para o formato de domínio escolhido, a anisotropia compete com o fenômeno térmico.

A anisotropia favorece o crescimento do grão na direção dos eixos do sistema de coordenadas adotado, enquanto a transferência de calor favorece o crescimento nas direções diagonais, devido à maior transferência de calor nessa direção. Esse fato não permitiu a observação de uma dendrita bem formada, mas permite estudar uma situação particular do crescimento de um grão orientado de maneira não favorável termicamente.



**Figura 11** - Morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro para diferentes casos no mesmo instante de tempo adimensional,  $t^*=0,002$ . a)  $s = 0,05$  e  $Ste=0,5$ . b)  $s = 0,05$  e  $Ste=1$ . c)  $s = 0,1$  e  $Ste=0,5$ .

Como resultado observa-se uma dendrita com um formato muito próximo ao observado na solidificação real de um metal puro. Ao comparar-se as Figuras 11a e 11b, que apresentam mesmo valor de força de anisotropia, pode-se concluir que o maior número de Stefan resultou em uma maior taxa de solidificação, porém o formato da dendrita se manteve praticamente o mesmo. Comparando-se as figuras 11a e 11c, que apresentam mesmo número de Stefan e diferentes forças de anisotropia, pode-se concluir que o aumento da força de anisotropia resultou em maior velocidade de crescimento dos braços de dendrita (braços maiores para o mesmo instante de tempo) apenas da taxa de solidificação não apresentar grandes diferenças (braços de dendrita mais finos).

## 4 CONCLUSÕES

O modelo do campo de fases foi implementado no presente trabalho para o estudo do crescimento dendrítico na solidificação de metais. Uma cuidadosa verificação do modelo e do algoritmo construído foi realizada inicialmente comparando-se os resultados deste modelo com soluções analíticas e resultados numéricos disponíveis na literatura.

A aplicação do modelo do campo de fases ao estudo da solidificação unidimensional de um metal puro mostra que o gradiente de temperatura afeta a evolução do sistema até este atingir o estado estacionário. Nota-se que, quanto maior o gradiente, mais rápido o perfil do campo de fases entra em estado estacionário. A imposição de um gradiente de temperatura maior ao sistema, também causa a diminuição da espessura da região interfacial e ainda resulta em uma discrepância da dependência da velocidade desta interface em função do seu super-resfriamento, quando comparada ao valor teórico.

No estudo da solidificação em um domínio bidimensional, que permite o aparecimento do crescimento dendrítico, se observam ramificações dendríticas no crescimento equiaxial para números de Stefan baixos mesmo sem anisotropia na energia da interface, que vai de encontro com o previsto na teoria do super-resfriamento constitucional, que relaciona o aparecimento de ramificações com a maior dissipação de calor necessária para o crescimento do sólido. Estas ramificações não surgem para números de Stefan altos devido ao fato da energia interfacial estabilizar a forma do cristal, que inibe até certo ponto o crescimento dendrítico. Finalmente, a introdução de uma anisotropia na energia de interface sólido/líquida resulta no crescimento de ramificações dendríticas apenas em direções preferenciais, como observado em dados experimentais apresentados na literatura.

No estudo de solidificação em um domínio tridimensional para o caso de crescimento equiaxial pode-se concluir ao analisar-se apenas os efeitos de transporte de calor que alterando o número de Stefan altera-se a velocidade de solidificação e de crescimento das protuberâncias, o que afeta diretamente o formato do grão de forma que quanto maior o número de Stefan mais rapidamente será a solidificação, no entanto menor será o gradiente de temperatura na ponta das protuberâncias, o que deixa os braços formados mais grossos. Ao analisarmos o efeito da anisotropia os resultados apontam que, quando eu tenho uma anisotropia não favorável à extração de calor, um efeito competitivo entre a anisotropia e o fenômeno de extração de calor define a morfologia da dendrita. Para um estudo mais representativo da realidade faz-se necessário a adoção de um domínio esférico, ou grande o bastante para o formato do domínio não afetar a extração de calor do sólido para o líquido.

## REFERÊNCIAS

- 1 KOBAYASHI, R. "Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth", *Physica D*, vol. 63, no. 3-4, pp. 410-423, 1993.
- 2 CAHN, J.; HILLIARD, J. " Free energy of a nonuniform system .1. Interfacial free energy", *Journal of Chemical Physics*, vol. 28, no. 2, pp. 258-267, 1958.
- 3 EMMERICH, H. The diffuse interface approach in materials science – Thermodynamic concepts and applications of Phase-Field models, Springer-Verlag, 2003.
- 4 BHADRESHIA, H. " Lecture 15: Phase Field Modelling.", in *Course MP6, Kinetics and Microstructure Modelling*.

- 5 ALLEN, S.; CAHN J., "A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening", *Acta. Metall.*, vol. 27, pp. 1084–1095, 1979.
- 6 PETER, D. W. O.; HARROWELL, R. "On the interaction between order and a moving interface: Dynamical disordering and anisotropic growth rates", Department of Chemistry and James Franck Institute, University of Chicago, Chicago, Illinois, 1986.
- 7 GLICKSMAN, M. E. *Principles of Solidification - An introduction to modern casting and crystal growth concepts*, Gainesville, FL - USA: Springer, 2011.
- 8 SINGER, H. et al. "Morphology diagram of thermal dendritic solidification by means of phase-field models in two and three dimensions", *Journal of Crystal Growth*, vol. 296, no. 1, p. 58–68, 2006.
- 9 KARMA, A.; RAPPEL, W. "Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions", *PHYSICAL REVIEW E*, vol. 57, no. 4, pp. 4323-4349, 1998.