

# SIMULAÇÃO DO CRESCIMENTO DOS NÓDULOS DE GRAFITA EM FERRO FUNDIDO PELO MÉTODO DO CAMPO DE FASE<sup>1</sup>

Alexandre Furtado Ferreira<sup>2</sup>  
José Adilson de Castro<sup>3</sup>  
Alexandre José da Silva<sup>4</sup>

## Resumo

O objetivo deste trabalho exploratório é modelar a morfologia da interface de crescimento de nódulos de grafita em ferro fundido pelo método do Campo de Fase. Portanto será feita uma análise do método aplicado ao processo de solidificação de uma liga Fe-C com 4,3% de carbono em massa. Neste trabalho o método do Campo de Fase será constituído de duas equações principais: a) A equação de fases; b) A equação da energia. Estas equações serão resolvidas pelo método de volumes finitos, para uma malha regular. A equação das fases será resolvida utilizando um esquema explícito, enquanto que a equação da energia será resolvida na forma implícita. Em todas as simulações admite-se uma condição de contorno adiabática e núcleo sólido adicionado previamente no domínio líquido. Primeiramente será tratado da simulação de crescimento de um único nódulo de grafita envolvido num meio líquido. Nesta simulação destacaremos a fase líquida com 4.3% de carbono e o nódulo de grafita, e ainda o campo de temperatura em torno do nódulo. Na segunda simulação apresentaremos vários nódulos de grafita crescendo em meio líquido e seu respectivo campo de temperatura. Com as simulações para o crescimento dos nódulos de grafita pode-se concluir que estes se assemelham aos nódulos de grafitas encontradas em experimentos e literaturas. Portanto o método do Campo de Fase surge como uma alternativa para a simulação do processo de crescimento dos nódulos de grafita.

**Palavras-chave:** Solidificação; Ferro fundido nodular; Campo de fase.

## SIMULATION OF NODULAR GRAPHITE GROWTH IN CAST IRON BY PHASE-FIELD METHOD

### Abstract

The objective of this paper is to simulate the nodular graphite growth in cast iron by phase-field method. Therefore will be carried through an analysis of phase-field method applied to the solidification process of Fe-C alloy (4,3%in mass). In this paper the phase-field method contains two main equations: a) The phase equation and; b) The energy equation. These equations will be solved by finite volumes method, in regular grid. The phase equation will be solved by explicit form, while energy equation will be solved in implicit form. In present paper is admitted adiabatic boundary conditions and solid nucleus is added previously in the liquid domain. Firstly will show the nodular graphite growth from solid nucleus involved liquid domain. In this simulation will show the liquid phase with 4.3%C (in mass) and the nodular graphite, and still the temperature field around the nodular graphite. In the second simulation will show some nodular graphite growing in liquid system and its respective temperature field. With results of these simulations for the growth of the nodular graphite, we concluded that these resemble to the nodular graphite found in experiments and literatures. Therefore the Phase Field method appears as an alternative for the simulation of the solidification process and growth of the nodular graphite.

**Key words:** Solidification; Nodular graphite; Phase-field.

<sup>1</sup> Contribuição técnica apresentada na 61º Congresso Anual da ABM, de 24 a 27 de julho de 2006, Rio de Janeiro – RJ

<sup>2</sup> Pesquisador, Doutor em Ciências de Engenharia Metalúrgica do Programa de Pós-Graduação da EEIMVR – UFF, Av. dos Trabalhadores 420, Volta Redonda – RJ;

<sup>3</sup> Professor Ph.D do Programa de Pós-Graduação da EEIMVR – UFF;

<sup>4</sup> Professor Dr.-Ing. do Programa de Pós-Graduação da EEIMVR-UFF.

## INTRODUÇÃO

Dentre as ligas ferro-carbono, os ferros fundidos constituem um grupo de ligas de importância fundamental para a indústria, não só devido às características inerentes ao próprio material, como também pelo fato de, mediante a introdução de elementos de liga e aplicação de tratamento térmico adequados, ter sido viável ao emprego em aplicações que, de certo modo, eram exclusivas dos aços.

As propriedades mecânicas dos ferros fundidos estão condicionadas à estrutura final obtida, isto é, dependem da matriz metálica, da morfologia e quantidade de grafita e ainda do tamanho e distribuição das células eutéticas.

A forma da grafita é um fator determinante das propriedades do ferro fundido. Em termos de propriedades mecânicas, os ferros fundidos nodulares exibem maiores resistência mecânica, tenacidade e ductilidade do que os ferros fundidos cinzentos. Por outro lado, a condutividade térmica e capacidade de amortecimento são mais elevadas nos cinzentos.<sup>(1)</sup>

No presente trabalho, será simulado a morfologia da interface de crescimento de nódulos de grafita em ferro fundido pelo método do Campo de Fase. O método do Campo de Fase ficou conhecido como uma importante ferramenta para descrever interfaces entre as fases sólida/líquida, durante o processo de solidificação. Este método é especialmente eficiente na aplicação dos métodos numéricos, devido a todas as equações de transporte serem descritas num domínio sem a distinção direta da posição da interface que separa as fases. A interface entre as fases sólida e líquida é descrita por uma suave e localizada mudança da variável  $\phi$ , entre os valores fixados que representam o sólido e o líquido. No método do Campo de Fase, as equações de transporte clássicas são acopladas a uma equação de fase que determina a variável  $\phi$ . Esta variável  $\phi$  determina em que estado (sólido ou líquido) o material se encontra localmente num determinado instante. Neste trabalho será imposto arbitrariamente o valor de 0 para a fase líquida e +1 nos locais aonde o material se encontra solidificado (nódulos de grafita), desta forma a interface estará localizada entre 0 e +1.

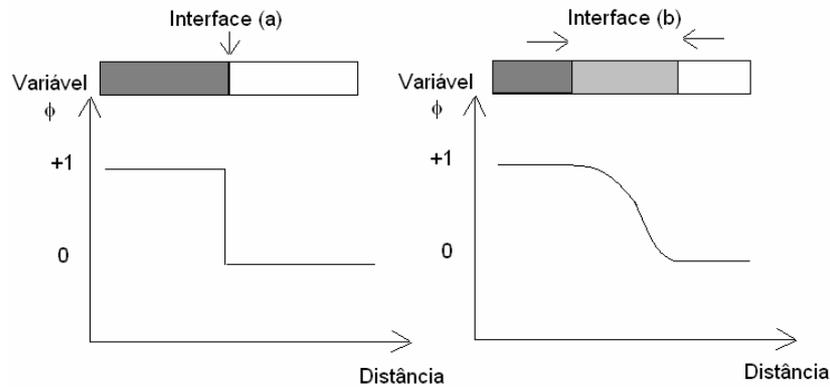
Os primeiros trabalhos utilizando o método do Campo de Fase foram aplicados a simulações de materiais puros,<sup>(2,3)</sup> e então estendido para a solidificação de ligas.<sup>(4-6)</sup> Entre os trabalhos realizados no Programa de Pós Graduação em Engenharia Metalúrgica da EEIMVR-UFF com o método do Campo de Fase podemos citar o mais recente que se concentra em determinar a cinética de formação de hidratos em dutos de petróleo.<sup>(7)</sup>

## MODELAMENTO MATEMÁTICO

O modelamento matemático apresentado neste trabalho consiste na solução simultânea das equações de energia e da equação de fase ( $\phi$ ) para o caso da solidificação do ferro fundido nodular.

Para o modelamento do método do Campo de Fase admite-se, segundo Bhadeshia,<sup>(8)</sup> o crescimento de um núcleo (nódulo) isolado do meio líquido por uma interface. Nessa hipótese, existem três variáveis distintas a serem consideradas: o núcleo solidificado, o meio líquido e a interface ( $0 < \phi < 1$ ). A interface pode ser descrita como uma superfície envolvente, cujo movimento é controlado pelas condições de contorno consistente com o mecanismo de transformação. 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 ( $\phi$ ). 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, como mostrado na Figura 1. As condições de contorno para a variável  $\phi$  são nulas na fronteira do domínio, ou seja, admite-se fluxo de fase nulo ( $\partial\phi/\partial t = 0$ ).



**Figura 1.** (a) Interface abrupta. (b) Interface difusa.

A Figura 1 mostra a espessura da interface no qual ocorre a mudança da variável  $\phi$ . Tem-se nesta Figura dois casos: a) A interface abrupta e; b) A interface difusa utilizada no método do Campo de Fase.

Neste método admite-se a evolução do núcleo solidificado com o tempo ser proporcional à variação de um funcional de energia livre com relação a variável  $\phi$ , segundo Bhadeshia.<sup>(8)</sup> Esta relação é mostrada a seguir:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -M \frac{\partial F}{\partial\phi} \quad (1)$$

M é a mobilidade da equação. O sinal negativo na equação 1, garante que a densidade de energia diminuirá em relação a  $\partial\phi/\partial t$ , 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  $\phi$ , sendo F representado a seguir:

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

Essa equação foi proposta por Cahn, citado em Bhadeshia.<sup>(8)</sup> O autor assumiu que a densidade de energia livre pode ser expressa por uma expansão da série de Taylor de multivariáveis. Na equação 2, V e T representam volume e temperatura, respectivamente. O segundo termo depende somente do gradiente de  $\phi$  e, portanto, é diferente de zero somente na região da interface. O sinal negativo no segundo termo favorece a diminuição de energia livre do sistema devido ao gradiente de  $\phi$ . O primeiro termo é a soma das energias livres do núcleo solidificado e do meio líquido, e também contém uma variável que representa a energia livre de excesso devido à interface. Sendo esse termo representado por:

$$f_o = h(\phi)f^S + (1 - h(\phi))f^L + Wg(\phi) \quad (3)$$

Onde  $f^S$  e  $f^L$  representam a densidade de energia livre das fases sólida e líquida, respectivamente, e  $W$  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 ( $\sigma$ ) e espessura da interface ( $\lambda$ ).  $h(\phi)$  e  $g(\phi)$  são representados abaixo, conforme Furtado:<sup>(6)</sup>

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

O objetivo de adotarmos a função  $h(\phi)$  é devido à função apresentar características suavizante na região da interface. A seguir apresentaremos a equação  $g(\phi)$ :

$$g(\phi) = \phi^2(1 - \phi)^2 \quad (5)$$

A função  $g(\phi)$  é nula em 0 e +1, e tem o seu valor máximo quando  $\phi = 0.5$ . Essa equação garante que a densidade de energia terá valores diferentes de zero somente na região da interface.

Assim, os termos  $h(\phi)f^S + Wg(\phi)$  tornam-se nulos quando  $\phi = 0$ . Nessa região há somente líquido e, similarmemente 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 equação 3 são diferentes de zero. As equações 4 e 5 são amplamente utilizadas em trabalhos sobre o Campo de Fase. Com as equações 2 e 3, pode-se determinar  $\partial F/\partial \phi$ . Substituindo na equação 1, tem-se:

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

Na equação 6,  $\partial \phi/\partial t$  representa o termo transiente e  $\varepsilon^2 \nabla^2 \phi$ , 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.  $h'(\phi)$  e  $g'(\phi)$  são as derivadas das equações 4 e 5 em relação a  $\phi$ . O termo entre parênteses na equação 6 representa a variação da densidade de energia livre em relação a  $\phi$ , ou seja,  $\partial F/\partial \phi$ .

Para o tipo de solidificação em questão, admitiremos a força motriz do processo de solidificação representada por:

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

A equação 7 calcula a diferença entre as energias livres do líquido e do sólido em torno do ponto de fusão e próximo a ele.  $\Delta H$  é o calor latente,  $T$  é a temperatura e  $T_m$  é a temperatura de fusão. Substituindo a equação 7 na equação 6, tem-se:

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

O segundo termo na equação 8 favorece o avanço da interface se a temperatura estiver abaixo da temperatura de fusão. Os parâmetros  $\varepsilon$ ,  $W$  e  $M$ , na equação de fase, são relacionados com a energia interfacial  $\sigma$ , espessura da interface  $2\lambda$ , e o coeficiente cinético da interfacial  $\mu_k$ . Estas relações serão obtidas de forma similar a proposta por Boettinger citado em Furtado,<sup>(6)</sup> que admitiu que uma condição de equilíbrio ( $\partial\phi/\partial t = 0$ ) é obtida se  $\phi$  é constante com valores iguais a 0 ou +1. Esta situação corresponde ao líquido ou sólido monofásico, respectivamente. Assim, tem-se  $T = T_m$  para uma transição unidimensional de uma interface plana entre o líquido ( $\phi = 0$ ) e o sólido ( $\phi = +1$ ), onde  $\phi$  varia na direção normal à interface. Admitindo-se estas condições, a equação 8 torna-se:

$$\varepsilon^2 \frac{d^2 \phi}{dx^2} = w \frac{dg(\phi)}{d\phi} \quad (9)$$

Utilizando as seguintes condições de contorno citadas em Furtado,<sup>(6)</sup> para a região do sólido tem-se  $\phi = +1$  e  $x \rightarrow -\infty$  e para a região do líquido  $\phi = 0$  e  $x \rightarrow +\infty$ . Resolvendo a equação 9 e aplicando as condições de contorno para a condição de equilíbrio, a solução da equação 9 é representada por:

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

Cahn citado em Furtado,<sup>(6)</sup> propôs que a tensão superficial ( $\sigma$ ) pode ser obtida pelo excesso de energia livre na região da interface, sendo a tensão expressa por:

$$\sigma = \varepsilon^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 dx \quad (11)$$

Utilizando as equações 9, 10 e 11 chega-se às seguintes relações entre os parâmetros da equação de fase ( $\varepsilon$  e  $W$ ) com a tensão superficial ( $\sigma$ ) e espessura da interface ( $\lambda$ ), como mostrado a seguir:

$$\sigma = \frac{\varepsilon \sqrt{w}}{3\sqrt{2}} \quad (12)$$

$$2\lambda = \alpha \sqrt{2} \frac{\varepsilon_o}{\sqrt{w}} \quad (13)$$

A equação que representa o parâmetro  $M$  é a mesma proposta por Kim (2), sendo representada por:

$$M_o = \frac{T_m \mu^k}{2.73 \Delta H \lambda} \quad (14)$$

A forma como estes parâmetros foram obtidos equações 12, 13 e 14 são apresentados em Furtado.<sup>(6)</sup>

O modelo do Campo de Fase empregado na simulação de solidificação do Ferro Fundido Nodular consiste na equação 8, com suas equações auxiliares 12, 13 e 14 acoplada a equação de energia, como mostrado a seguir:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \nabla^2 T + \frac{\Delta H}{C_p} h'(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (15)$$

Onde D é a difusividade térmica,  $\Delta H$  o calor latente e o  $C_p$  é a capacidade calorífica.

Ambas as equações foram resolvidas numericamente pelo método de Volumes Finitos, sendo que a equação 8 foi resolvida utilizando a forma explícita e a equação 15 a forma implícita.

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste trabalho o método do Campo de Fase foi aplicado para o caso da solidificação do Ferro Fundido Nodular, contendo 4,3% de carbono em massa.

As propriedades físicas da liga, utilizadas no desenvolvimento deste trabalho são apresentadas na Tabela 1:

**Tabela 1.** Propriedades físicas da liga Fe-C.

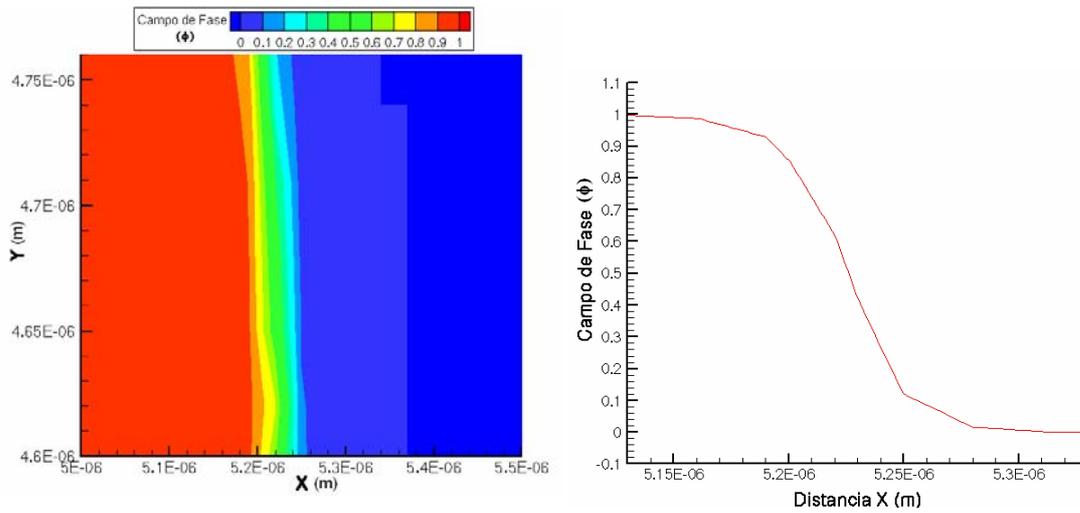
| Propriedades Físicas                         | Fe-C                                    |
|--|---|
| Energia Interfacial ( $\sigma$ )             | 0,408 J/m <sup>2</sup>                  |
| Temperatura de Fusão ( $T_m$ )               | 1427,15 K                               |
| Difusividade do Carbono no Líquido ( $D_L$ ) | 2,0x10 <sup>-8</sup> m <sup>2</sup> /s  |
| Difusividade do Carbono no Sólido ( $D_S$ )  | 6,0x10 <sup>-9</sup> m <sup>2</sup> /s  |
| Calor Latente ( $\Delta H$ )                 | 2,0343x10 <sup>9</sup> J/m <sup>3</sup> |
| Difusividade Térmica (D)                     | 6,1x10 <sup>-6</sup> m <sup>2</sup> /s  |
| Capacidade Calorífica ( $C_p$ )              | 5,36x10 <sup>6</sup> J/m <sup>3</sup> K |
| Espessura Interfacial ( $2\lambda$ )         | 4x10 <sup>-8</sup> m                    |

Os parâmetros utilizados no método do Campo de Fase são apresentados na Tabela 2:

**Tabela 2.** Parâmetros Computacionais utilizados no Método do Campo de Fase.

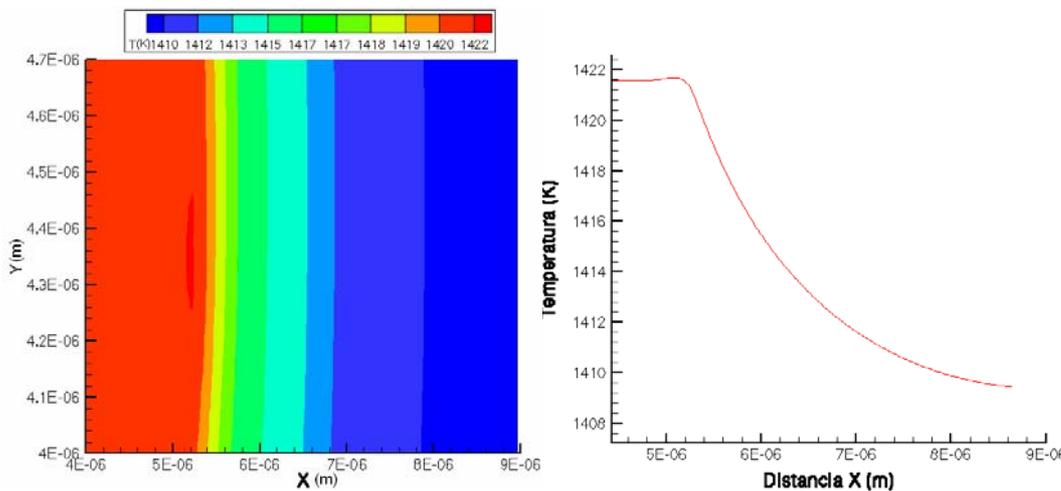
| Parâmetros                                     |  |
|--|--|
| $\varepsilon$                                  | 1,46x10 <sup>-4</sup> (J/m) <sup>1/2</sup> |
| W  | 0,46x10 <sup>8</sup> J/m <sup>3</sup>      |
| M  | 0,41 m <sup>3</sup> /sJ                    |
| Espaçamento da malha ( $\Delta x = \Delta y$ ) | 3X10 <sup>-8</sup> m                       |
| Passos no tempo ( $\Delta t$ )                 | 1x10 <sup>-9</sup> s                       |

Primeiramente apresentaremos a interface que separa os nódulos de grafita e o meio líquido (à direita) e o perfil da variável do Campo de Fase ( $\phi$ ) nesta região ao longo do eixo x.



**Figura 2.** Campo e perfil da variável de fase ( $\phi$ ) em torno da interface.

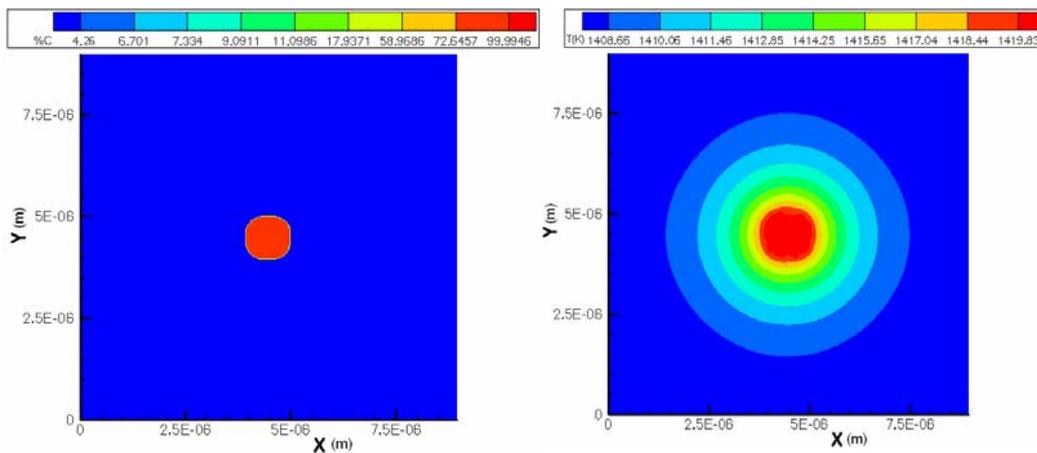
Na Figura 2, pode-se observar que para  $\phi = 1$  tem-se a região do nódulo de grafita, enquanto que para  $\phi = 0$  tem-se a região do líquido envolvendo a grafita. A Figura 3, a seguir mostra o campo de temperatura e o perfil de temperatura próximo à interface.



**Figura 3.** Campo e perfil de temperatura em torno da interface.

Na Figura 3, podemos perceber que os maiores níveis de temperatura se encontra no nódulo de grafita, e à medida que afastamos desta região a temperatura decai exponencialmente para a temperatura inicial do líquido.

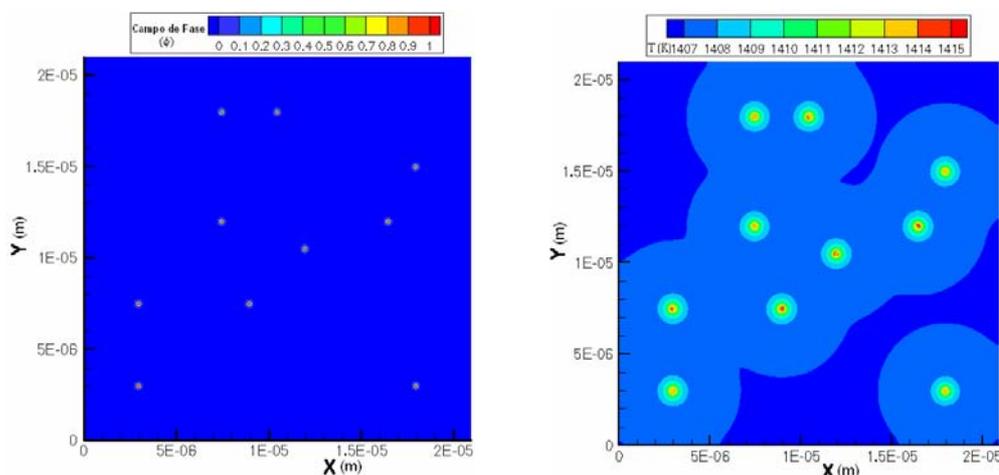
A seguir, apresentaremos o campo de fases (à esquerda) e o campo de temperatura (à direita).

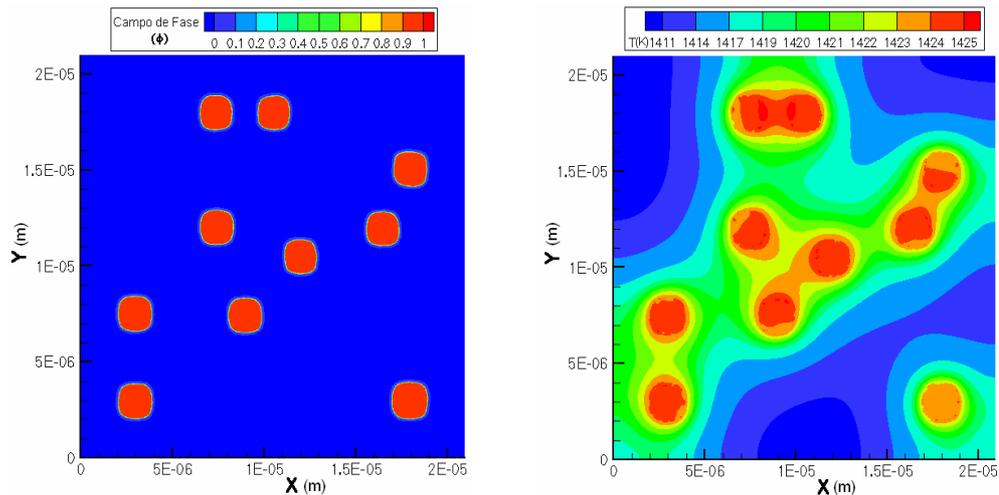


**Figura 4.** Campo de fases (à esquerda) e o campo de temperatura (à direita).

A esquerda da Figura 4 tem o campo de fases, em vermelho o nódulo de grafita ( $\cong 100\%C$ ) e em azul o meio líquido envolvente com 4.26% de carbono em massa. A direita o campo de temperatura, em vermelho as temperaturas mais elevadas do domínio. Pode-se observar na Figura 4 que a temperatura avança mais rapidamente para o meio líquido quando comparada com a fase. Isto é devido à difusividade térmica ser maior em ordem de grandeza quando comparado com a mobilidade da fase. O tempo real de solidificação para este estágio do nódulo da grafita é de  $1.7 \times 10^{-6}$  segundos.

A simulação a seguir mostra uma seqüência de crescimento de nódulos de grafita, dispostos aleatórios no domínio. O lado esquerdo das Figuras encontra-se as fases sólido e líquido enquanto que do lado direito a evolução da temperatura no tempo. A primeira Figura é para um tempo de  $3.1 \times 10^{-7}$  s. O tempo de solidificação para a segunda Figura é de  $4.4 \times 10^{-6}$  s. Neste estágio o avanço da interface é muito lento, devido o nível de temperatura esta próximo da temperatura de fusão da liga. Nesta simulação temos um domínio com  $700 \times 700$  volumes de controle. Devido pequeno domínio adiabático utilizado na simulação com esta quantidade de nódulos de grafita, houve um aumento significativo dos níveis de temperatura, inibindo o crescimento dos nódulos de grafita.





**Figura 5.** Evolução do campo de fase e temperatura.

## CONCLUSÕES

O método do Campo de Fase aplicado à solidificação da liga de Fe-C com 4.3% de carbono em massa, reproduz a morfologia dos nódulos de grafita encontrados em experimentos e literaturas. Portanto, este método surge como uma alternativa para o estudo da cinética de crescimento dos nódulos de grafita em meio líquido.

## Agradecimentos

Os autores deste trabalho agradecem ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) por incentivar e fomentar o desenvolvimento tecnológico nacional, através do projeto n<sup>o</sup> 507328/2004-3.

## REFERÊNCIA

- 1 Walton, C. F.; Opar, T. J. Iron Casting Handbook. Nova York: Iron Casting Society Inc., 1981;
- 2 Kim, S. G.; Kim W. T.; Lee, J. S.; Ode, M.; Suzuki, T. Large Scale Simulation of Dendritic Growth in Pure Undercooled Melt by Phase-Field Model. ISIJ International, vol. 39, pg. 335-340, 1999;
- 3 Furtado, A. F.; Castro, J. A.; Silva A. J. Simulação do Processo de Crescimento Dendrítico através do Método Campo de Fase. Simulação do Processo de Crescimento Dendrítico Através do Método do Campo de Fase. In: Congresso em Ciência de Materiais do Mercosul, Joinville/SC, 2004;
- 4 Furtado, A. F.; Castro J. A.; Silva A. J. Simulação do Crescimento Dendrítico Durante o Processo de Solidificação num Sistema Líquido Preenchido com uma Liga Fe-C Super-Resfriado. In: 60º Congresso Anual da ABM, Belo Horizonte/MG, 2005;
- 5 Ode, M.; Suzuki T. Numerical of Initial Microstructure Evolution of Fe-C Alloys Using a Phase-Field Model. ISIJ International, vol. 42, pg. 368-374, 2002;
- 6 Furtado, A. F. Modelamento do Processo de Solidificação e Formação de Microestrutura pelo Método do Campo de Fase. Dissertação de Doutorado, Universidade Federal Fluminense, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica, 2005;
- 7 Biancardi, M. O. Modelamento da Cinética de Formação de Hidratos em Dutos de Petróleo pelo Método do Campo de Fases. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal Fluminense, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica, 2006;
- 8 Bhadeshia, H. K. D. H. Course MP6. Department Materials Science & Metallurgy, University of Cambridge, 2000.