



UTILIZAÇÃO DO MÉTODO DO CAMPO DE FASE COM TÉCNICAS DE ECONOMIA DE TEMPO EM MATERIAIS CRISTALINOS PUROS¹

Abner da Costa Assis²
Alexandre Furtado Ferreira³

Resumo

Neste trabalho foi desenvolvido um algoritmo com Técnicas de Economia de Tempo com o objetivo de aperfeiçoar o Método do Campo de Fase, pois este é uma ferramenta importante para a simulação do crescimento dendrítico durante o processo de solidificação. No Campo de Fase novos valores de campo de fase só serão calculados em regiões da interface e regiões próximas a ela. E no Campo de Temperatura só serão calculados novos valores de temperatura dentro da camada de limite térmico. Com essas modificações se busca uma minimização do tempo de cálculo e da memória computacional do método, e se obter dendritas com o mesmo padrão das dendritas geradas pelo Método do Campo de Fase sem utilização de Técnicas de Economia de Tempo, para que se possa realizar uma comparação entre os dois métodos. O material cristalino puro adotado no desenvolvimento deste trabalho será o níquel.

Palavras-chave: Método do campo de fase; Dendritas; Técnicas de economia de tempo.

USE OF THE PHASE-FIELD METHOD WITH TIME-SAVING TECHNIQUES IN PURE CRYSTALLINE MATERIALS

Abstract

In this paper an algorithm was developed with Time-Saving Techniques in order to improve the Phase-Field Method, as this is an important tool for the simulation of dendritic growth during solidification. In the Phase Field new field values are calculated only phase in the interface regions and regions close to it. And Temperature Field only will be calculated new values of temperature inside the thermal boundary layer. With these changes they seek a minimization of computation time and memory computational method, and obtain dendrites with the same pattern of dendrites generated by the Phase-Field Method without the use of Time-Saving Techniques, so you can make a comparison between the two methods. The pure crystalline material adopted in the development of this work will be the nickel.

Key words: Phase-Field Method; Dendrites; Time-Saving Techniques.

¹ Contribuição técnica ao 41º Seminário de Aciaria – Internacional, 23 a 26 de maio de 2010, Resende, RJ, Brasil.

² Mestrando em Engenharia Metalúrgica, Universidade Federal Fluminense

³ Professor Doutor em Engenharia Metalúrgica, Universidade Federal Fluminense



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 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 produção 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 que são 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 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.

Devido a essa importância muitos pesquisadores têm focado os seus estudos neste campo utilizando-se de novas técnicas computacionais que possam realizar a modelagem e simulação deste processo. Neste sentido, surgiu o Método do Campo de Fase que simula o processo de solidificação com interface sólido/líquido complexas. Apesar da habilidade desta técnica em simular e evolução microestrutural, no entanto, sofre de baixa eficiência computacional.

Este trabalho será direcionado a aumentar a eficiência computacional desta nova técnica via utilização de Técnicas de Economia de Tempo que podem diminuir o tempo de CPU. Neste trabalho toda a simulação se concentrará em materiais cristalinos puros, neste caso no níquel.

2 MATERIAL E MÉTODOS

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.

2.1 Método do Campo de Fase

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.

2.2 Equações Governantes

A equação do Campo de Fase foi representada em recente trabalho de Furtado⁽²⁾, da seguinte forma:

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

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

Os valores das funções $g(\phi)$ e $h(\phi)$ descritas por Boettinger⁽³⁾, são os seguintes:

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

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



Os parâmetros $M(\theta)$ e $\varepsilon(\theta)$ descritos por Boettinger⁽³⁾ são obtidos através das seguintes equações:

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

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

Onde $M(\theta)$ e $\varepsilon(\theta)$ são constantes anisotrópicas, θ_0 é orientação da interface com máxima anisotropia e j controla o número de ponta da dendrita, que crescerão do núcleo solidificado. O j vale para 0 caso isotrópico, e 4 para anisotropia de 4 direções e 6 para de 6 direções.

Outras três relações descritas por Boettinger,⁽³⁾ fornecem os valores dos parâmetros M_0 , ε_0 e w :

$$\varepsilon = \sqrt{2.73 \lambda_0 \sigma_0} \quad (6)$$

$$w = 6.6 \frac{\sigma_0}{\lambda_0} \quad (7)$$

$$M_0 = \frac{T_m \mu_0^k}{2.73 \Delta H \lambda_0} \quad (8)$$

Onde $2\lambda_0$ é a espessura da interface e μ_0^k é o coeficiente linear cinético da interface. Além disso, deve ser adicionado ao lado direito da Eq. (1) de um termo referente à fonte de instabilidade da frente de solidificação, conhecida como fonte de ruídos. Este termo favorece a obtenção de uma estrutura dendrítica assimétrica em relação às ramificações primárias, estes ruídos têm como objetivo representar as perturbações ocorridas na interface durante o processo de solidificação. A equação que representa estes ruídos foi descrita por Warren e Boettinger:⁽⁴⁾

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

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 $\phi = 0,5$, sendo nulo em $\phi = 0$ e $\phi = 1$, ou seja, os ruídos são gerados na região interfacial. Já a Equação de energia representada por Furtado⁽²⁾ tem a seguinte forma:

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

O primeiro termo do lado esquerdo representa o termo transiente da equação de energia. O primeiro termo do lado direito representa o termo difusivo, D é a difusividade térmica. O segundo representa o termo fonte, onde c_p é o calor específico, ΔH representa o calor latente liberado na região da interface. A função suavizante $h(\phi)$ 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.⁽⁵⁾ Assumindo $\delta_M = 0$ e $\delta_\epsilon = 0,025$, e usando $\sigma_0 = 0,37 \text{ J/m}^2$ e $\mu_0^k = 2 \text{ m/s K}$ para a fusão do níquel puro e $2\lambda_0 = 8 \times 10^{-8} \text{ m}$ por conveniência numérica. Com $T_m = 1728 \text{ K}$ e $\Delta H = 2,35 \times 10^9 \text{ J/m}^3$, onde obtemos $\epsilon_0 = 2,01 \times 10^{-4} (\text{J/m})^{1/2}$, $w = 0,61 \times 10^8 \text{ J/m}^3$ e $M_0 = 13,47 \text{ m}^3/\text{s J}$. Os outros parâmetros na Eq. (1) são $D = 1,55 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ e $c_p = 5,42 \times 10^6 \text{ J/m}^3 \text{ K}$.

2.3 Métodos Numéricos

Para a solução das equações será utilizado para ambas as equações, um esquema de diferenças finitas explícito. E para garantir essa convergencia será adotada duas condições de estabilidade que devem ser respeitadas, que foram descritas por Kim⁽⁵⁾ como $\Delta t < \Delta x^2 / 4D$ e $\Delta t < \Delta x^2 / (4M\epsilon^2)$. A distância entre os pontos do grids vale $\Delta x = \Delta y = 2 \times 10^{-8} \text{ m}$; já o Δt vale $7,74 \times 10^{-12} \text{ s}$, o que garante obedecer a uma das condições de convergência. O núcleo 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.

2.4 Técnicas 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 da camada limite térmica. Por isso é desnecessário os cálculos de novos valores de campo de fase e temperatura, distantes da interface. Como não há variação significativa longe da interface e da camada limite térmica, novos cálculos significam perda de tempo.

Para garantir o funcionamento da técnica foi necessário desenvolver condições que garantam que um ponto esteja na região interfacial ou próxima dela, ou esteja na região da camada limite térmica.

Para o Campo de Fase a condição adotada foi à seguinte, um novo valor para o Campo de Fase só seria calculado se um de seus quatro pontos vizinhos mais próximos tivesse valores entre 0.004 e 0.096. O que significa dizer que este ponto ou está na região interfacial ou está numa região bem próxima dela.

No campo de temperatura, um novo valor do Campo de Fase só seria calculado se a condição $T(I,J) > T_i + 0.1$ descrita por Kim⁽⁵⁾ for satisfeita, onde T_i é uma dada temperatura inicial de super-resfriamento e é encontrado da seguinte relação $T_i = 0.6 (\Delta H / C_p)$ descrita por Kim.⁽⁵⁾ Essa condição define a região chamada camada limite térmica.

3 RESULTADOS

Para comprovar a eficiência das Técnicas de Economia de Tempo, foi possível a geração de uma dendrita com um grid 2000x2000 em aproximadamente 52 horas, como mostra a Figura 1. 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 trabalhada com o Método do Campo de Fase tradicional, demandaria um tempo absurdo para ser gerada.

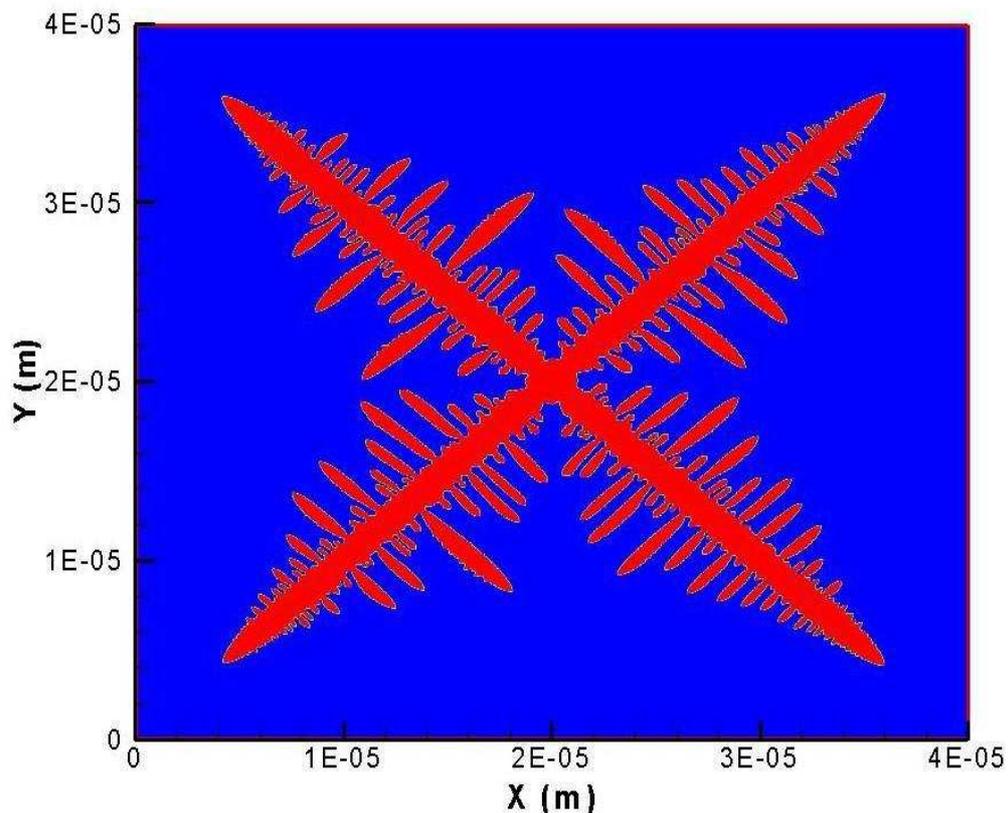


Figura 1 - Dendrita gerada de um núcleo solidificado no centro de um grid 2000x2000 num tempo de aproximadamente 52h.

Como forma de comparação entre os métodos, a Figura 2, mostra duas dendritas. Uma gerada pelo Método do Campo de Fase normal e outra gerada utilização de Técnicas de Economia de Tempo. Em relação à morfologia da dendrita não há diferenças entre as duas dendritas geradas.

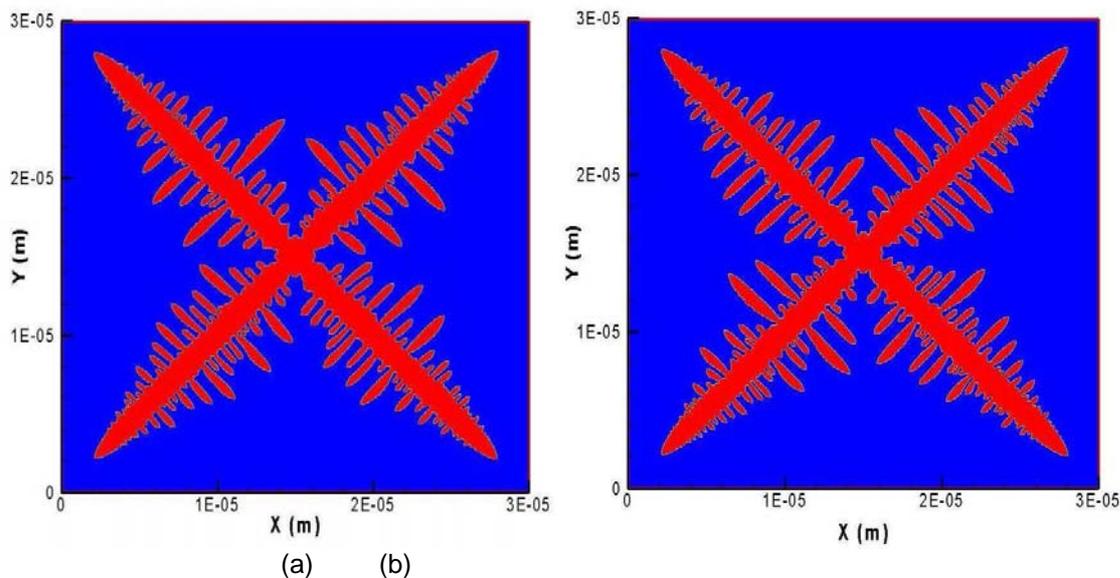


Figura 2 – Duas dendritas geradas de um núcleo solidificado no centro de um grid 1500x1500. (a) Método Tradicional e (b) Técnicas de Economia de Tempo.



A Figura 3 mostra os estágios de crescimento da dendrita com grid 1500x1500 com a utilização de Técnicas de Economia de Tempo. A Figura 3(a) representa o estágio inicial do crescimento da dendrita. Já as Figuras 3(b) e 3(c) são estágios intermediários do crescimento dendrítico. E ao termino do processo de crescimento a dendrita tem a forma como da Figura 3(d).

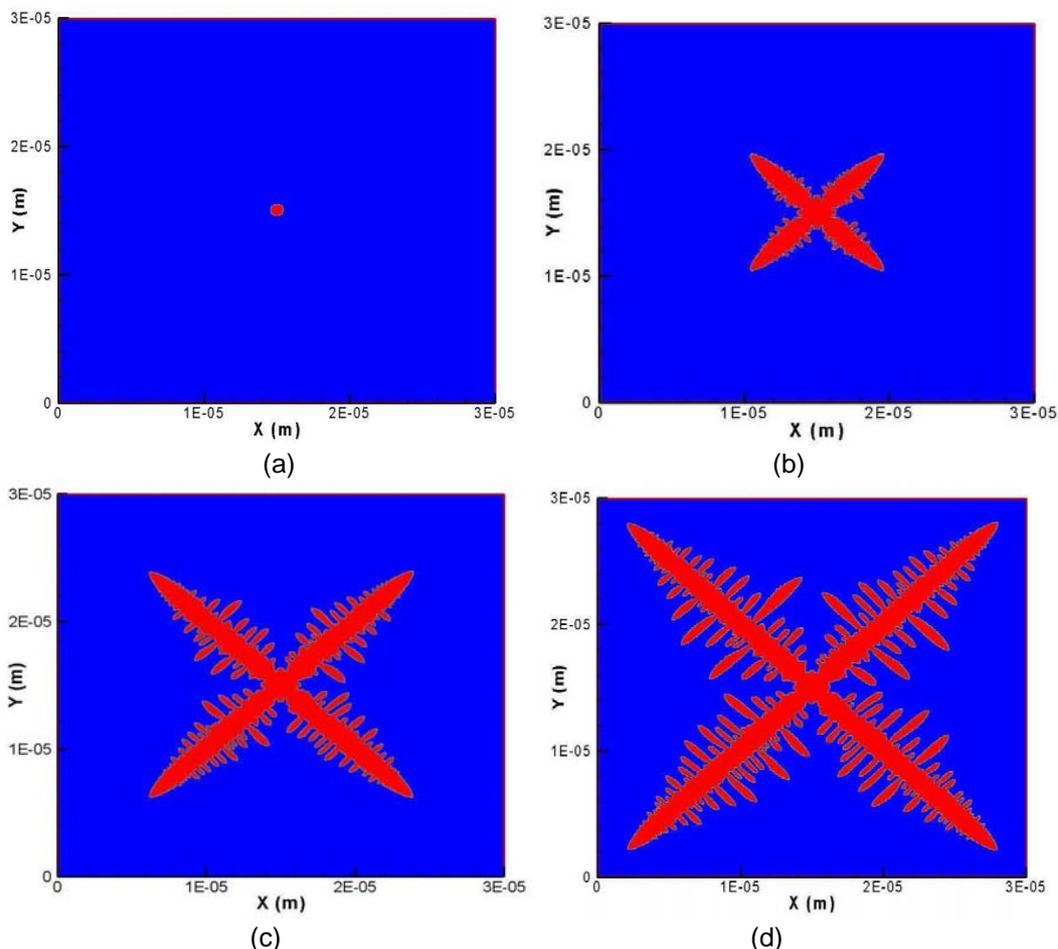


Figura 3 – Os estágios de crescimento da dendrita com grid 1500x1500 com a utilização de Técnicas de Economia de Tempo.

4 DISCUSSÃO

A Tabela 1 mostra tempos computacionais para seis diferentes de número de pontos no grid, para os dois tipos de métodos. Partindo desta tabela um gráfico foi gerado como mostra a Figura 4. Neste gráfico é possível mais uma vez comprovar a eficiência da Técnica de Economia de Tempo, uma vez a linha azul que representa o método tradicional, esta sempre acima da linha vermelha que representa a Técnica de Economia de Tempo. Isso mostra que para a técnica tradicional há necessidade de mais tempo computacional.



Tabela 1 – Valores do tempo computacional pelo número de grids, 18/01/2010

Número de Grids	Tempo Computacional (s)	
	Método Normal	Técnicas de Economia de Tempo
100	27	7
200	303	63
400	3256	750
800	32603	11211
1000	57617	14542
1200	109776	37337

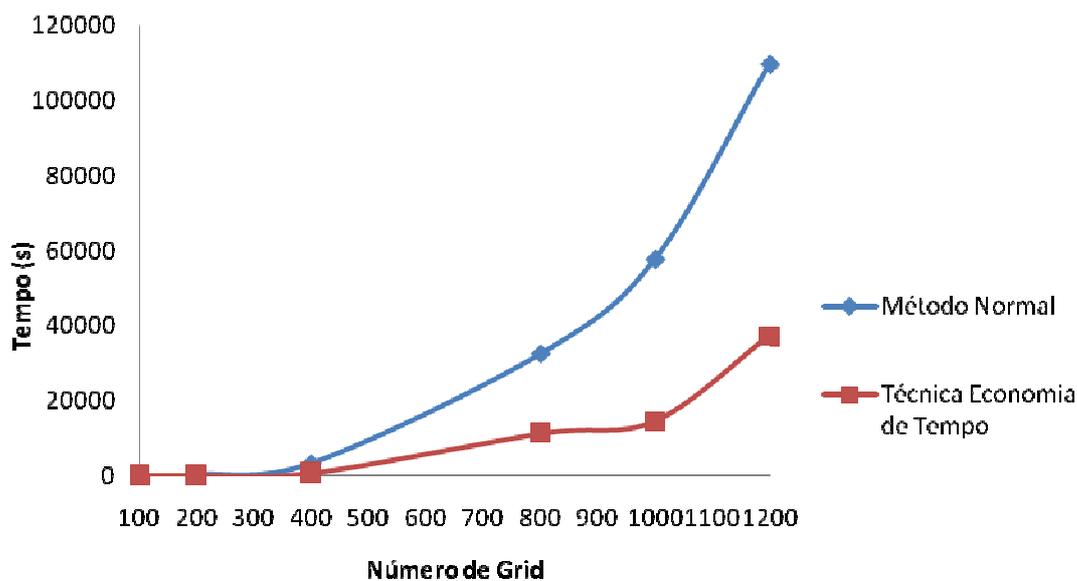


Figura 4 – Gráfico tempo computacional versus número de grids.

5 CONCLUSÃO

Como base nos resultados obtidos neste trabalho é possível concluir que a utilização de Técnicas de Economia de Tempo no Método do Campo de Fase acelera a obtenção de dendritas plenamente desenvolvidas, compatíveis com as encontradas na literatura. Numa comparação entre os dois métodos para uma dendrita com 1500 pontos de grid, A utilização de técnicas de economia de tempo reduziu o tempo computacional em aproximadamente 70%, de aproximadamente 68 horas para um método tradicional, para 20 horas com a utilização de Técnicas de Economia de Tempo. Também foi possível desenvolver um gráfico que confirma essa idéia, em todos os tamanhos de grids testados, a Técnica de Economia de Tempo se mostrou mais vantajosa em relação ao tempo computacional.

Agradecimento

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

REFERÊNCIAS

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



- 2 FERREIRA, Alexandre Furtado. *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;
- 3 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.
- 4 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.
- 5 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.