

ALAN LAMOTTE

**SIMULAÇÃO DE SOLIDIFICAÇÃO UTILIZANDO MÉTODO DO
CAMPO DE FASES**

**São Paulo
2012**

Departamento de Engenharia
Metalúrgica e de Materiais da
Escola Politécnica da USP

ALAN LAMOTTE

**SIMULAÇÃO DE SOLIDIFICAÇÃO UTILIZANDO MÉTODO DO
CAMPO DE FASES**

**Trabalho de Formatura apresentado à
Escola Politécnica da Universidade de
São Paulo para obtenção do título de
Engenheiro de Materiais**

**São Paulo
2012**

ALAN LAMOTTE

**SIMULAÇÃO DE SOLIDIFICAÇÃO UTILIZANDO MÉTODO DO
CAMPO DE FASES**

**Trabalho de Formatura apresentado à
Escola Politécnica da Universidade de
São Paulo para obtenção do título de
Engenheiro de Materiais**

**São Paulo
2012**

ALAN LAMOTTE

**SIMULAÇÃO DE SOLIDIFICAÇÃO UTILIZANDO MÉTODO DO
CAMPO DE FASES**

**Trabalho de Formatura apresentado à
Escola Politécnica da Universidade de
São Paulo para obtenção do título de
Engenheiro de Materiais**

**Área de concentração:
Engenharia Metalúrgica e de Materiais**

**Orientador: Prof. Marcelo de Aquino
Martorano**

**São Paulo
2012**

Aos meus pais, pela imensa compreensão,
aos meus colegas de laboratório, pela paciência,
e aos meus amigos,
por todo o apoio nos momentos em que o trabalho ficou “pesado”

AGRADECIMENTOS

Ao professor Marcelo de Aquino Martorano, pela orientação e pelo constante estímulo transmitido durante todo o trabalho.

Aos amigos, Arthur, Thomas, Lucas, Rodrigo, Victor, Fernando, Pierre, Santiago, Marcelo, Maria Cecília, até mesmo os mais distantes, Caio e Paula, e a todos que colaboraram direta ou indiretamente, na execução deste trabalho.

A mente que se abre a uma nova ideia
jamais voltará ao seu tamanho original.

(Albert Einstein)

RESUMO

Um estudo da simulação de solidificação utilizando o modelo de campo de fases, uma técnica que torna fácil estudar a interface sólido / líquido. Exploramos esse modelo para observar a espessura e estabilidade da interface sob diversas condições de transferência de calor e condições de contorno.

Constantemente validado por comparação com trabalhos anteriores internacionais e com soluções analíticas, este trabalho mostra que o modelo pode representar a teoria de super refrigerado constitucional, mostrando os efeitos uma anisotropia térmica natural e, com a aplicação de uma anisotropia de energia de interface, observamos uma microestrutura dendrítica.

Obtivemos sucesso com simulações 3D de solidificação de metais puros que poderiam ser tema de futuros trabalhos e estudos com metais de ligados.

Palavras-chave: campo de fase, simulação, modelos matemáticos, metal puro, estabilidade morfológica e interface.

ABSTRACT

A solidification simulation study using the Phase field model, a technique that made easy to study the solid/liquid interface. We explored this model to observe the interface thickness and interface stability under several conditions of heat transference and boundary conditions.

Constantly validated by comparison with previous international works and analytic solutions, this work shows that the model can represent the constitutional super cooled theory, showing a natural thermal anisotropy and, applying an interface energy anisotropy, we observed a dendritic microstructure.

We obtained success with 3D simulations of solidification of pure metals that could be theme of future works and studies, with alloy metals.

Keywords: phase field, simulation, mathematic models, pure metal, morphological stability and interface.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Variável de fase em função da distância através de uma interface: (a) modelo do campo de fases e (b) modelo clássico.	19
Figura 2 – Perfil de concentração em uma dendrita obtida utilizando técnica de campo de fases para uma liga níquel cobre [11].	20
Figura 3 – Perfil concentração de Si no líquido para solidificação de uma liga ternária Al-6,7%(at.)Si-1,1%(at.)Mg [16].	20
Figura 4 – Interface sólido/líquido para diversos tempos, utilizando $\beta T = 0$. Solução comparada com solução analítica.	38
Figura 5 – Interface de solidificação de metal puro com $\beta T = -0,3$ e tempo de 10^{-3} s para diferentes malhas.	39
Figura 6 – Interface de solidificação de metal puro com $\beta T = -0,3$ para diferentes instantes de tempos.	40
Figura 7 – Evolução da velocidade da interface da frente de solidificação obtida por aproximação (numérica) comparada com a solução analítica (teórica) para um mesmo super-resfriamento.	41
Figura 8 - Interface de solidificação e perfil de temperatura linear para diversos tempos com $V=0,1$ m/s e $G=0,001$ K/m.	42
Figura 9 - Interface de solidificação e perfil de temperatura linear para diversos tempos com $V=0,2$ m/s e $G=0,001$ K/m.	42
Figura 10 - Interface de solidificação e perfil de temperatura linear para diversos tempos com $V=0,3$ m/s e $G=0,001$ K/m.	43
Figura 11 - Evolução da velocidade da interface da frente de solidificação para o caso linear, com $V=0,1$ m/s, $V=0,2$ m/s e $V=0,3$ m/s.	43
Figura 12 – Super-resfriamento para diversas velocidades observado comparativo entre o caso analítico (teórico) para temperatura homogênea e o numérico (calculado) com o perfil linear de temperatura.	44
Figura 13 - Interface de solidificação e perfil de temperatura linear para diversos tempos com $V=0,2$ m/s e $G=0,005$ K/m.	45
Figura 14 - Interface de solidificação e perfil de temperatura linear para diversos tempos com $V=0,2$ m/s e $G=0,01$ K/m.	45

Figura 15 - Interface de solidificação e perfil de temperatura linear para diversos tempos com $V=0,2$ m/s e $G=0,02$ K/m.	46
Figura 16 - Interface de solidificação e perfil de temperatura linear para diversos tempos com $V=0,2$ m/s e $G=0,03$ K/m.	46
Figura 17 - Evolução da velocidade da interface da frente de solidificação para o caso linear, com $G=0,005$ K/m, $G=0,01$ K/m, $G=0,02$ K/m e $G=0,03$ K/m.	47
Figura 18 - Super-resfriamento para mesma velocidade e vários gradientes de temperatura. Caso com temperatura linear forma uma reta. Caso de temperatura homogênea é representado como ponto, uma vez que $G = 0$	47
Figura 19 – Comparação da interface para os casos de temperatura linear e homogênea.	48
Figura 20 - Diferença entre os perfis de interface de solidificação.	49
Figura 21 – Perfil da variável de fase e de temperatura para diversos tempos.	50
Figura 22 – Detalhe do perfil de temperatura para a solidificação de um metal no caso adimensional, com interface em preto tracejado.	51
Figura 23 – Comportamento do super-resfriamento em relação à velocidade da interface sólido/líquido.	51
Figura 24 – Comparação do perfil de temperatura obtida numericamente (numérico) com a solução analítica de Stefan (teórico).	52
Figura 25 – Posição da interface para solidificação obtida através da solução numérica (numérico) e analítica de Stefan (teórico).	52
Figura 26 – Perfil de temperaturas para a solidificação colunar nos instantes $t^* = 0,012$, $t^* = 0,016$ e $t^* = 0,036$. A interface sólido/líquida está indicada pela linha cheia.	53
Figura 27 – Resultado de simulação em solidificação colunar de Kobayashi [4], para os tempos de $t^* = 0,01$, $t^* = 0,015$ e $t^* = 0,11$, na escala adimensional do presente trabalho.	54
Figura 28 – Posição pelo tempo da interface para caso de solidificação colunar. Resultados obtidos por meio de simulação (numérica) em comparação com o obtido pela solução de Stefan (teórica).	54
Figura 29 – Perfil de temperatura durante a solidificação de um metal puro e isotrópico a partir de um núcleo cristalino em meio adiabático com $Ste = 1$ para $t^* = 0,0003$, $t^* = 0,0015$ e $t^* = 0,003$. A linha preta indica a posição da interface sólido/líquida.	55

Figura 30 – Perfil de temperatura durante a solidificação de um metal puro e isotrópico a partir de um núcleo cristalino em meio adiabático com $Ste = 0,5$ para diversos instantes de tempo. A linha preta indica a posição da interface sólido/líquida.	56
Figura 31 – Solidificação de metal a partir de semente cristalina em meio adiabático para $s = 0,04$ e $Ste = 1$ em $t^*=0,0003$, $t^*=0,0015$ e $t^*=0,003$	57
Figura 32 – Resultado de simulação em solidificação de metal a partir de semente cristalina em meio adiabático para $s = 0,04$ e $Ste = 1$ de Kobayashi [4], para os tempos de $t^* = 0,0006$, $t^* = 0,0018$ e $t^* = 0,003$, na escala adimensional do presente trabalho.	58
Figura 33 - Solidificação de metal a partir de semente cristalina em meio adiabático para $s = 0,04$ e $Ste = 0,83$ em $t^*=0,00035$, $t^*=0,0007$, $t^*=0,001$, $t^*=0,0014$ e $t^*=0,00175$	58
Figura 34 – Resultado de simulação em solidificação de metal a partir de semente cristalina em meio adiabático para $s = 0,04$ e $Ste = 0,83$ de Kobayashi [4], para os tempos de $t^* = 0,001$, $t^* = 0,0015$ e $t^* = 0,002$, na escala adimensional do presente trabalho.	59
Figura 35 - Solidificação de metal a partir de semente cristalina em meio adiabático para $s = 0,04$ e $Ste = 0,625$ em $t^*=0,00045$, $t^*=0,00135$, $t^*=0,00178$, $t^*=0,00225$, $t^*=0,0027$ e $t^*=0,00315$	59
Figura 36 – Resultado de simulação em solidificação de metal a partir de semente cristalina em meio adiabático para $s = 0,04$ e $Ste = 0,625$ de Kobayashi [4], para os tempos de $t^* = 0,0005$, $t^* = 0,002$ e $t^* = 0,0044$, na escala adimensional do presente trabalho.	60
Figura 37 – Corte para $y^*=0,5$ para diversos tempos da solidificação de dendrita com $s = 0,04$ e $Ste = 0,625$	61
Figura 38 – Corte para $y^*=0,5$ para diversos tempos da solidificação de dendrita com $s = 0,04$ e $Ste = 0,625$	61
Figura 39 - Corte para $y^*=0,5$ para $t^*=0,00314$ da solidificação de dendrita com $s = 0,04$ e $Ste = 0,625$	62
Figura 40 - Solidificação de metal a partir de semente na parede do domínio em meio adiabático para $s = 0$ em $t^*=0,0017$, $t^*=0,0083$ e $t^*=0,017$	63

Figura 41 - Solidificação de metal a partir de semente na parede do domínio em meio adiabático para $s = 0,02$ em $t^*=0,0017$, $t^*=0,0085$ e $t^*=0,017$	63
Figura 42 - Solidificação de metal a partir de semente na parede do domínio em meio adiabático para $s = 0,005$ em $t^*=0,0017$, $t^*=0,0085$ e $t^*=0,017$	63
Figura 43 - Solidificação de metal a partir de semente na parede do domínio em meio adiabático para $s = 0,01$ em $t^*=0,0034$, $t^*=0,0051$ e $t^*=0,0068$	64
Figura 44 – Evolução da morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=0,5$ para diversos instantes de tempo.	66
Figura 45 – Evolução da morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=0,75$ para diversos instantes de tempo.	67
Figura 46 – Evolução da morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=1$ para diversos instantes de tempo.	68
Figura 47 – Evolução da morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=1,25$ para diversos instantes de tempo.	69
Figura 48 – Evolução da morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=1,5$ para diversos instantes de tempo.	70
Figura 49 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=0,5$ para diversos instantes de tempo.	71
Figura 50 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=0,75$ para diversos instantes de tempo.	72
Figura 51 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=1$ para diversos instantes de tempo.	73
Figura 52 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=1,25$ para diversos instantes de tempo.	74

Figura 53 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=1,5$ para diversos instantes de tempo.	75
Figura 54 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ e morfologia 3D do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,05 e $Ste=0,5$ para diversos instantes de tempo.	76
Figura 55 – Evolução da morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,05 e $Ste=1$ para diversos instantes de tempo.	77
Figura 56 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,05 e $Ste=1$ para diversos instantes de tempo.	78
Figura 57 – Evolução da morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,05 e $Ste=1,5$ para diversos instantes de tempo.	79
Figura 58 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,05 e $Ste=1,5$ para diversos instantes de tempo.	80
Figura 59 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ e morfologia 3D do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,1 e $Ste=0,5$ para diversos instantes de tempo.	80
Figura 60 – Evolução da morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,1 e $Ste=1$ para diversos instantes de tempo.	81
Figura 61 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,1 e $Ste=1$ para diversos instantes de tempo.	82
Figura 62 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ e morfologia 3D do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,1 e $Ste=1,5$ para diversos instantes de tempo.	83
Figura 63 – Condição inicial para o modelo de difusão simples.	89
Figura 64 – Perfil de concentração para um corte no meio do domínio, onde $y^* = 0,5$, para erros de tolerância no método de Gauss-Seidel de 10^{-5} , 10^{-6} e 10^{-7}	93
Figura 65 - Perfil de concentração em um corte no meio do domínio, para diferentes números de nós na malha.	94

Figura 66 - Perfil de concentração para um corte no meio do domínio, para diversos passos de tempo.	94
Figura 67 – Perfil de concentração para solução analítica variando o número de termos da série de Fourier.	95
Figura 68 – Detalhe do Perfil de concentração para solução analítica variando o número de termos da série de Fourier.	96
Figura 69 – Perfil de concentração comparativo entre as soluções numérica e analítica para difusão simples em um tempo de 0,001.	96

LISTA DE SÍMBOLOS

ϕ	Variável de fase
$G(\phi)$	Energia livre
$\frac{\delta I}{\delta y}$ uma função y	Derivada variacional ou variação de um funcional I por
u_x	Derivada parcial de u por x
$f'(x)$	Derivada de f por x
$f''(x)$	Segunda derivada de f por x
ρ	Densidade
C_p	Calor específico
k	Condutividade térmica
T	Temperatura
t	Tempo
x	Eixo x
y	Eixo y
z	Eixo z
f	Densidade de energia livre de Helmholtz
ε	Coeficiente de energia gradiente
M	Mobilidade da Interface
∇^2	Laplaciano
W	Constante de densidade de energia de Helmholtz
β	Força motriz de transformação de fase
L	Calor latente

T_f	Temperatura de fusão
T_m	Temperatura de fusão (melting)
v	Velocidade de movimentação da interface
h	Distância entre nós do domínio
G	Gradiente de temperatura
V	Velocidade de movimentação das isothermas
Ste	Número de Stefan
M'	Constante adimensional para mobilidade de interface
E gradiente	Constante adimensional para coeficiente de energia
l	Comprimento do domínio
Erf	Função erro
α	Difusividade térmica
∇	Operador nabla
s	Força de anisotropia
ϑ	Modo de anisotropia
θ	Direção em relação ao eixo x
D	Difusividade
C	Concentração

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	18
2	OBJETIVO	22
3	METODOLOGIA	23
3.1	CÁLCULO VARIACIONAL.....	23
3.2	MÉTODOS NUMÉRICOS.....	24
3.2.1	Método das Diferenças Finitas.....	24
3.2.2	Método dos Volumes Finitos.....	25
3.2.3	Resolução das Equações Algébricas Discretizadas	26
3.3	SOLIDIFICAÇÃO DE METAL PURO	26
3.3.1	Solidificação de Metal Puro e Temperatura Uniforme.....	27
3.3.2	Solidificação de Metal Puro e Perfil de Temperatura Linear	29
3.3.3	Solidificação de Metal Puro e Campo de Temperaturas Desconhecido	30
3.3.4	Solidificação de Metal Puro em Domínio Bidimensional	32
3.3.5	Solidificação de Metal Puro Anisotrópico em Domínio Bidimensional	34
3.3.6	Solidificação de Metal Puro Anisotrópico em Domínio Tridimensional	35
4	RESULTADOS.....	38
4.1	SOLIDIFICAÇÃO DE METAL PURO	38
4.1.1	Solidificação de Metal Puro e Temperatura Uniforme.....	38
4.1.2	Solidificação de Metal puro e Perfil de Temperatura Linear.....	41
4.1.3	Solidificação de Metal Puro e Campo de Temperaturas Desconhecido	49
4.1.4	Solidificação de Metal Puro em um Domínio Bidimensional	52
4.1.5	Solidificação de Metal Puro Anisotrópico em um Domínio Bidimensional...	57
4.1.6	Solidificação de Metal Puro Anisotrópico em um Domínio Tridimensional..	64
5	CONCLUSÕES.....	84

6	REFERÊNCIAS.....	86
	APENDICE A - TRANSPORTE DE SOLUTO POR DIFUSÃO.....	89

1 INTRODUÇÃO

A solidificação de metais é um fenômeno existente em diversos processos da engenharia metalúrgica, como a fabricação de produtos por fundição e o lingotamento contínuo. Consequentemente, existe um grande interesse em entender a evolução da microestrutura durante o processo de solidificação de um metal ou liga metálica, uma vez que esta afeta as propriedades do produto final [1]. Ao mesmo tempo, a modelagem matemática de fenômenos em engenharia tem-se tornado uma prática econômica e atrativa com o avanço dos recursos computacionais, economizando tempo e gastos com experimentos trabalhosos. Esta modelagem consiste basicamente na proposta de equações que descrevem o fenômeno a ser estudado e a sua resolução, seja analítica quando possível ou, geralmente, através de algum tipo de método numérico, como diferenças finitas, volumes finitos ou elementos finitos [2].

Na solidificação de materiais metálicos, uma alternativa é o uso de métodos de dois domínios, um sólido e outro líquido, em que a interface sólido/líquido é aproximada por uma transição instantânea da fase líquida para a sólida, ou seja, a espessura desta interface é considerada nula. A resolução das equações de transferência de calor e de massa em conjunto com as condições de contorno determina a morfologia, a velocidade e evolução da interface com o tempo. A solução através deste método é muito complexa mesmo para as situações mais comuns, como o caso de uma interface dendrítica [3].

O método do campo de fases, do inglês "*phase-field*", foi aplicado à solidificação e à transformação de fases em geral em uma tentativa de eliminar os problemas relacionados com o 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 [4]. No método do campo de fases, cuja ideia central tem origem nos trabalhos de Cahn e Hilliard [5], associa-se uma variável chamada "variável de fase" (ϕ), um tipo de parâmetro de ordem, às diferentes fases do sistema para cada ponto do domínio – tem-se um campo de ϕ . Considera-se ainda que ϕ varia suave e continuamente (função de classe C^1) através da interface sólido/líquido.

No modelo chamado de clássico, onde a interface tem espessura nula, ϕ varia abruptamente e não é diferenciável em relação à distância na posição da interface. Utilizando-se o método do campo de fase, ϕ varia suavemente tornando-se diferenciável em relação à distância. A Figura 1 (a) e (b) demonstram uma comparação da variável de fase para o modelo do campo de fases e para o modelo clássico, respectivamente.

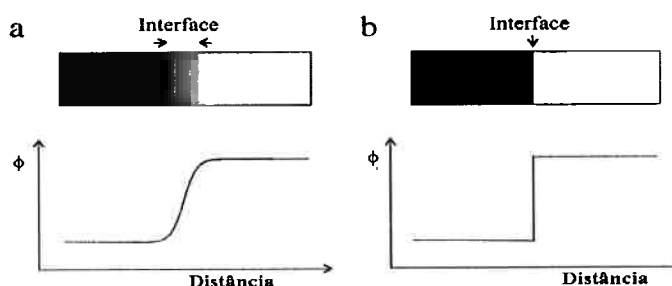


Figura 1 – Variável de fase em função da distância através de uma interface: (a) modelo do campo de fases e (b) modelo clássico.

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, chamada difusa, e permitem identificar a posição e morfologia desta interface [6]. Assume-se que a posição da interface para este caso seja determinada pela posição onde a variável $\phi = 0,5$. Esta representação é interessante devido à variável de fase poder ser interpretada como o grau de organização dos átomos no sistema, sendo 1 a representação na forma cristalina (mais organizada e com menor entropia) e 0 a forma líquida (maior entropia). Logo a interface é uma zona de transição entre a “ordem” e “desordem”.

As equações do método do campo de fases são construídas definindo-se um funcional que representa a energia livre total do sistema ($G(\phi)$) em função do campo de fases (ϕ), do campo de composição e do campo de temperaturas. O campo ϕ evoluirá de tal forma que a energia livre do sistema decresça com o tempo, como requerido pela termodinâmica. Como resultado deste método, além das fases e suas morfologias, obtém-se o perfil de temperatura T e de composição. O método do campo de fases é facilmente estendido para domínios bi e tridimensionais [4] [7] [8] [9] [10] [11]. Um resultado da aplicação deste método no estudo do crescimento dendrítico equiaxial de uma liga do sistema Cu-Ni crescendo em um domínio bidimensional pode ser observado na Figura 2. A figura mostra o campo de

concentrações de Ni. Também é possível aplicar o método para se estudar o crescimento dendrítico em ligas metálicas multicomponentes [12] [13] [14] [15] [16] [17]. A Figura 3 demonstra a concentração de silício em uma liga ternária Al-6,7%(at.)Si-1,1%(at.)Mg.

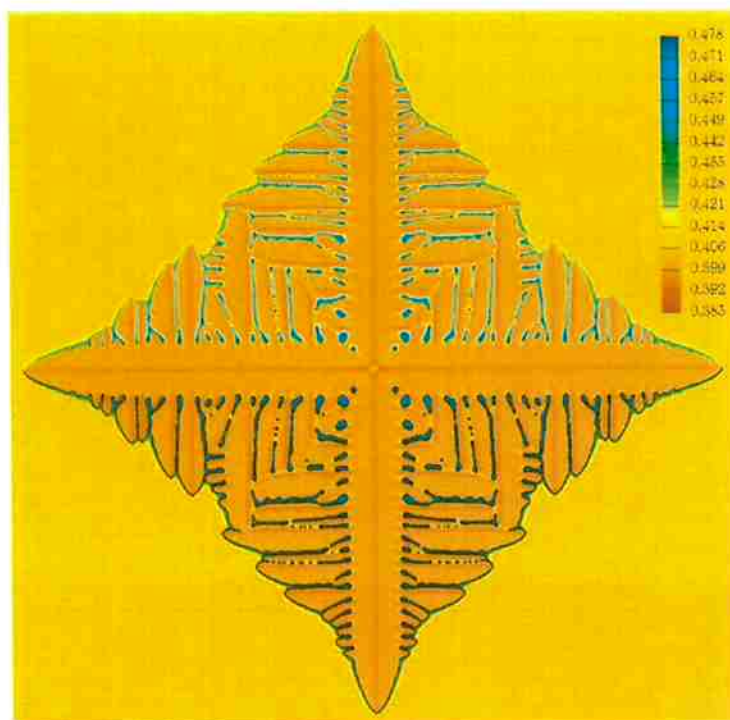


Figura 2 – Perfil de concentração em uma dendrita obtida utilizando técnica de campo de fases para uma liga níquel cobre [11].

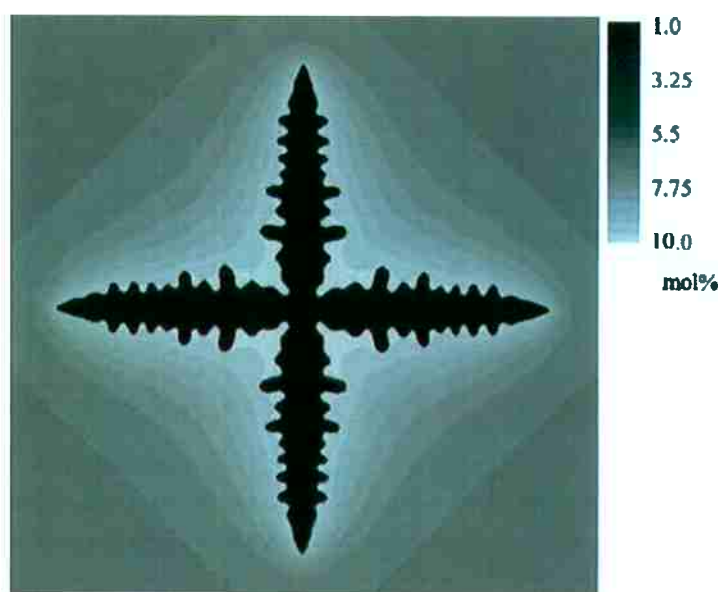


Figura 3 – Perfil concentração de Si no líquido para solidificação de uma liga ternária Al-6,7%(at.)Si-1,1%(at.)Mg [16].

A maioria dos processos de fundição apresenta estrutura dendrítica, mesmo para metais puros. Na verdade, a morfologia da interface é função das propriedades do material, como estrutura de empacotamento, e condições de processo, que definem se a extração de calor será pelo sólido, típico do crescimento colunar, ou pelo líquido, típico do crescimento equiaxial [18] [19].

As instabilidades na morfologia da interface, que ocorrem na forma de protuberâncias, são altamente influenciadas pela energia de interface. Se a energia de interface for muito alta esta inibirá a formação de protuberâncias, tendendo a uma interface lisa. No entanto caso a transferência de calor pela interface seja mais significativa para a diminuição da energia do sistema, as protuberâncias serão estáveis e a interface tenderá a ser “rugosa” na direção de maior transferência de calor, uma vez que, sendo maior a interface, maior será a troca de calor entre o sólido e o líquido.

Para o caso de extração de calor pelo sólido, o fluxo de calor tem o sentido contrário ao crescimento do grão e, desconsiderando os efeitos de capilaridade, ao formar-se uma protuberância na interface, o gradiente de temperatura no sólido em uma região próxima à protuberância diminui, diminuindo também a troca de calor entre o líquido e o sólido nessa região, logo o crescimento da protuberância é inibido e a interface tende a ser lisa.

No caso de extração de calor pelo líquido, o fluxo de calor tem o mesmo sentido do crescimento de grão e o surgimento de protuberâncias aumenta o gradiente de temperaturas no líquido em uma região próxima à protuberância, logo, com um fluxo de calor maior, mais rapidamente a interface andarà naquela região e a protuberância crescerá. A interface ficará com um aspecto enrugado principalmente nas direções em que a troca de calor for mais intensa.

Em suma, quanto aos fatores térmicos e adotando um sistema de coordenadas com referência no sólido, a morfologia da interface será estável e lisa caso o gradiente de temperatura na interface seja positivo e rugosa caso seja negativo.

2 OBJETIVO

O objetivo do presente trabalho é desenvolver um modelo matemático baseado no método do campo de fases (*“phase-field”*) capaz de simular a solidificação de metais puros, obtendo a morfologia das dendritas em função das condições de solidificação, mostrando representação da estabilidade morfológica da interface para os casos bi e tridimensionais.

3 METODOLOGIA

Este item apresentará a metodologia utilizada para desenvolver o modelo do campo de fases utilizado para simular o crescimento dendrítico na solidificação de metal puro. Inicialmente, serão apresentadas as ferramentas fundamentais do cálculo variacional e posteriormente os métodos numéricos utilizados para solucionar as equações do modelo. Em seguida, serão apresentados os casos estudados para se atingir o modelo final objetivado. Desta forma, foram solucionados casos mais simples no início, que se tornaram cada vez mais complexos à medida que o modelo foi sendo desenvolvido. O primeiro caso solucionado foi o problema a solidificação de metal puro tratado em diversos casos de complexidade crescente, desde o caso colunar unidimensional até o caso final com a anisotropia de energia interfacial, possibilitando a simulação do crescimento dendrítico em direções cristalográficas preferenciais. Posteriormente, foi implementado o caso tridimensional já com anisotropia.

3.1 CÁLCULO VARIACIONAL

O desenvolvimento das equações do modelo do campo de fases é realizado utilizando-se o cálculo variacional [12]. Neste item serão apresentadas algumas ferramentas básicas desta técnica matemática. O cálculo variacional lida com funcionais, ou seja, funções que aceitam outras funções como parâmetros e retornam valores reais. Um funcional I pode ser normalmente representado pela equação (1).

$$I(u(x)) = \int_{x_1}^{x_2} F(x, u(x), u_x(x)) dx \quad (1)$$

Onde $u_x = \partial u / \partial x$. Em muitos problemas solucionados pelo cálculo variacional, deve-se encontrar uma função $u(x)$ que minimiza um determinado funcional I , o modelo do campo de fases é um desses problemas.

Em uma função $f(x)$ de valores reais a valores reais, df é tido como o diferencial de f . Para um funcional $I(u(x))$ o correspondente ao diferencial é a sua

“variação”, δI , causada por uma variação infinitesimal em $u(x)$, denominada δu . A equação (2) descreve δI [12].

$$\delta I = \int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial F}{\partial u} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial u_x} \right) \right] \delta u dx \quad (2)$$

Tem-se um máximo ou mínimo em I (ponto estacionário), quando $\delta I = 0$. Esta situação é obtida quando o integrando é nulo, ou seja, quando $u(x)$ obedece a equação (3), conhecida como equação de Euler-Lagrange.

$$\frac{\delta I}{\delta y} = \frac{\partial F}{\partial u} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial u_x} \right) = 0 \quad (3)$$

Onde $\frac{\delta I}{\delta y}$ é denominada derivada variacional do funcional I em relação a $y(x)$. Esta equação pode ser estendida para o caso onde $u = u(x, y)$, ou seja, quando existem duas ou mais variáveis independentes. Neste caso, a derivada variacional resulta na equação (4).

$$\frac{\delta I}{\delta u} = \frac{\partial F}{\partial u} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial u_x} \right) - \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial F}{\partial u_y} \right) \quad (4)$$

3.2 MÉTODOS NUMÉRICOS

3.2.1 Método das Diferenças Finitas

No método das diferenças finitas, utilizado para solucionar numericamente equações diferenciais, divide-se o domínio de interesse por meio de pontos equidistantes chamados nós, que armazenam o valor da função de interesse naquele ponto [2]. Desta forma, se a distância entre nós for pequena o bastante podemos aproximar um diferencial infinitesimal a uma diferença finita entre valores de dois desses nós. Essa diferença pode ser aplicada entre dois nós consecutivos, sendo chamada de progressiva ou atrasada dependendo dos nós envolvidos, ou a diferença ocorre entre os nós adjacentes ao nó de interesse, sendo chamada

central. A diferença finita central apresenta uma precisão maior do que a progressiva ou a atrasada. As fórmulas gerais para diferenças finitas centrais de primeira e segunda ordem são dadas pelas equações (5) e (6) respectivamente.

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2) \quad (5)$$

$$f''(x) = \frac{f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)}{h^2} + O(h^2) \quad (6)$$

Onde h é a distancia entre cada ponto da malha e $O(h^2)$ é o erro.

3.2.2 Método dos Volumes Finitos

No método dos volumes finitos o domínio é dividido em pequenos volumes nos quais são integradas as equações diferenciais na forma conservativa. A técnica permite melhor aplicação das condições de contorno para os casos de fluxo constante sendo mais fácil trabalhar com transporte de calor e massa. O equacionamento depende da equação diferencial com a qual se trabalha, mas a técnica consiste em dividir a equação em duas partes convenientemente de acordo com as condições de contorno e integrar as duas partes no volume do elemento daquele domínio, tomando cuidado para aplicar as condições de contorno quando necessário. A equação (7) ilustra a integração em um volume da equação de transporte de calor para o caso bidimensional convenientemente organizada.

$$\iiint \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} dx dy dt = \iiint \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) dx dy dt \quad (7)$$

Onde ρ é a densidade, C_p o calor específico, T a temperatura e k a condutividade térmica.

3.2.3 Resolução das Equações Algébricas Discretizadas

A aplicação do método das diferenças finitas à equação da variável de fase e do método dos volumes finitos à equação da conservação de energia gerou um sistema de equações algébricas acopladas. Este sistema foi solucionado pelo método iterativo de Gauss-Seidel e a convergência foi atingida sem qualquer tipo de relaxação ou técnica de aceleração.

Esta solução numérica através do método de Gauss-Seidel foi obtida a partir de um algoritmo completamente desenvolvido no presente trabalho em linguagem computacional F#. O algoritmo foi compilado a partir do compilador Visual Studio 2010 e o código compilado foi executado em um computador pessoal com processador Intel Core i7 com 8 GB de memória RAM.

A visualização dos resultados dos campos da variável de fase e de temperatura, obtidos nas simulações em domínio bidimensional, foi obtida utilizando-se o software Tecplot 360, 2009.

3.3 SOLIDIFICAÇÃO DE METAL PURO

Neste item será apresentada uma série de problemas de complexidade crescente envolvendo a solidificação, solucionados pelo método do campo de fases. Na técnica de campo de fases é estabelecida uma variável de fase ϕ que assume valor igual a 1 para o sólido, 0 para o líquido e valores entre 0 e 1 para a região da interface entre as duas fases. Desta forma, a variável de fase ϕ é uma função dependente de x , y e z que pode ser usada para definir o funcional de energia livre descrito pela equação (8).

$$G(\phi(x, y, z)) = \iiint \left(f(\phi, T) + \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla \phi|^2 \right) dV \quad (8)$$

Sendo $f(\phi, T)$ 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, ou seja, um parâmetro puramente termodinâmico, e ε é o coeficiente da chamada energia gradiente de ϕ , que é responsável por fatores geométricos da interface, como espessura e anisotropia oriunda do empacotamento atômico. O

termo $\frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla \phi|^2$ foi postulado por Cahn e Hilliard [5] 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 deve ser considerada na região da interface, onde as variações são abruptas [20].

As equações do método do campo de fases são desenvolvidas a partir da ideia de que o sistema deve evoluir para um mínimo de energia livre total. Desta forma, o campo da variável de fase evoluirá no sentido de diminuir a energia livre do sistema. A equação (9), postulada por Allen e Cahn, garante esta evolução.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M \frac{\delta G}{\delta \phi} \quad (9)$$

Onde $\frac{\delta G}{\delta \phi}$ é a derivada variacional do funcional de energia livre do sistema em relação à variável de fase e M é denominado de mobilidade da interface.

3.3.1 Solidificação de Metal Puro e Temperatura Uniforme

O primeiro problema solucionado pelo método do campo de fases foi a solidificação de um metal puro em uma frente de transformação de fase unidirecional, portanto um problema unidimensional. A temperatura foi considerada uniforme em todo o domínio e constante no tempo. Desta forma, a frente de reação caminhará a uma velocidade constante proporcional ao super-resfriamento. Aplicando a equação (9) e substituindo a derivada variacional, obtém-se a equação (10) [14].

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} - \varepsilon^2 \nabla^2 \phi \right) \quad (10)$$

A função densidade de energia livre de Helmholtz, f , foi expressa pela equação (11).

$$f(\phi, T) = W \int_0^\phi \left(p(p-1) \left(p - \frac{1}{2} - \beta(T) \right) \right) dp \quad (11)$$

Sendo $\beta(T)$ chamada de força motriz, dada ela equação (12).

$$\beta(T) = \frac{6}{W} \frac{L(T - T_f)}{T_f} \quad (12)$$

Onde L é o calor latente de fusão, T_f a temperatura de fusão do metal puro e W uma constante. Como restrição, tem-se que $|\beta(T)| < 1/2$. Como condições de contorno, tem-se ϕ igual a 0 e a 1 nos extremos do domínio, considerando o contorno suficientemente grande para que o domínio possa ser considerado semi-infinito, podendo ser expresso pelas equações (13) e (14).

$$\phi(0) = 1 \quad (13)$$

$$\phi(\infty) = 0 \quad (14)$$

A solução analítica deste problema foi elaborada por Harrowell e Oxtoby [21] e está apresentada pela equação (15).

$$\phi(x) = \frac{1}{1 + \exp\left(x \sqrt{\frac{W}{2\varepsilon^2}}\right)} \quad (15)$$

Onde para a obtenção desta solução, foi adotado um referencial móvel de velocidade igual à velocidade da interface, definida pela equação (16).

$$\frac{v}{M} = 6\varepsilon L \sqrt{\frac{2}{W}} \frac{(T - T_f)}{T_f} \quad (16)$$

O modelo foi aplicado para duas condições iniciais. Uma onde metade do domínio está sólida, $\phi = 1$, enquanto a outra metade é líquida, $\phi = 0$, na

temperatura de fusão. E outra onde todo o domínio é líquido, $\phi = 0$, a exceção do contorno em uma temperatura abaixo da temperatura de fusão (líquido super-resfriado), assumindo o valor $\beta(T) = -0,3$.

A equação (10) foi discretizada pelo método das diferenças finitas, na formulação implícita, resultando na equação (17).

$$\begin{aligned} \phi(t) = & K1\phi(t)(\phi(t) - 1) \left(\phi(t) - \frac{1}{2} - \beta(T) \right) \\ & + K2(\phi(x - h, t) + \phi(x + h, t)) + K3\phi(t - \Delta t) \end{aligned} \quad (17)$$

Onde K1, K2 e K3 são dados pelas equações (18), (19) e (20) respectivamente.

$$K1 = \frac{-M\Delta t W}{1 + 2\Delta t M \left(\frac{\epsilon}{h} \right)^2} \quad (18)$$

$$K2 = \frac{M\epsilon^2\Delta t}{\left(1 + 2\Delta t M \left(\frac{\epsilon}{h} \right)^2 \right) h^2} \quad (19)$$

$$K3 = \frac{1}{1 + 2\Delta t M \left(\frac{\epsilon}{h} \right)^2} \quad (20)$$

3.3.2 Solidificação de Metal Puro e Perfil de Temperatura Linear

Este modelo é semelhante ao anterior, representando uma frente de solidificação unidirecional. Logo, a discretização apresentada na equação (17), com as condições de contorno expressa nas equações (13) e (14), pode ser reaproveitada. No entanto uma temperatura que varia linearmente no domínio e com o tempo de acordo com a equação (21) é imposta no sistema.

$$T(x, t) = T_f + Gx - VGt \quad (21)$$

Onde G representa o gradiente de temperatura e V a velocidade das isotermas. O perfil é ajustado de forma de forma a obedecer à restrição imposta para $\beta(T)$, sendo a temperatura constante quando $|\beta(T)| \leq 1/2$.

3.3.3 Solidificação de Metal Puro e Campo de Temperaturas Desconhecido

No item anterior, um campo de temperaturas linear e conhecido foi imposto sobre o sistema, analisando-se como a solidificação evoluía. No presente item, o perfil de temperatura é calculado a partir da equação de conservação da energia e, a princípio, é desconhecido. Desta forma, o modelo de solidificação unidimensional foi incrementado com as equações (22) de campo de fases e (23) de condução de calor.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} - \epsilon^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) \quad (22)$$

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \rho L \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (23)$$

Sendo ρ a densidade do metal, C_p o calor específico, k a condutividade térmica e L o calor latente. Como condições de contorno, adotaram-se as equações (13), (14), (24) e (25).

$$\phi(0) = 1 \quad (13)$$

$$\phi(\infty) = 0 \quad (14)$$

$$T\left(-\frac{h}{2}\right) = T_i \quad (24)$$

$$T\left(l + \frac{h}{2}\right) = T_m \quad (25)$$

Sendo T_i a temperatura no contorno e T_m a temperatura de fusão do metal. Como condição inicial temos as equações (26) e (27).

$$\phi(x) = 0 \quad (26)$$

$$T(x) = T_m \quad (27)$$

As equações do modelo foram adimensionalizadas a partir das definições expressas pelas equações (28), (29), (30) e (31).

$$T^* = \frac{T - T_i}{T_m - T_i} \quad (28)$$

$$f^* = \frac{f}{W} \quad (29)$$

$$t^* = \frac{t\alpha}{l^2} \quad (30)$$

$$x^* = \frac{x}{l} \quad (31)$$

Onde α é a condutividade térmica e T_i a temperatura em $x = 0$. Desta forma as equações da (22) a (27) podem ser escritas como as equações da (32) a (37).

$$\frac{\partial \phi}{\partial t^*} = -M' \left(\frac{\partial f^*}{\partial \phi} - E \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^{*2}} \right) \quad (32)$$

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} - \frac{1}{Ste} \frac{\partial \phi}{\partial t^*} \quad (33)$$

$$\phi(x^*, 0) = 0 \quad (34)$$

$$T^*(x^*, 0) = 1 \quad (35)$$

$$T^* \left(-\frac{h}{2}, t^* \right) = 0 \quad (36)$$

$$T^* \left(1 + \frac{h}{2}, t^* \right) = 1 \quad (37)$$

Onde Ste é o número de Stefan, equação (39), inversamente proporcional ao calor latente, portanto, quando minimizado maior será a energia liberada durante a solidificação, o que leva a uma diminuição da velocidade de solidificação. M' e E são parâmetros adimensionais definidos pelas equações (40) e (41) respectivamente.

$$Ste = \frac{C_p \Delta T}{L} \quad (39)$$

$$M' = \frac{MWl^2}{\alpha} \quad (40)$$

$$E = \frac{\varepsilon^2 \alpha}{l^2 W} \quad (41)$$

A solução para o transporte de calor na forma adimensional pode ser comparada com a solução de Stefan [22] dada pela equação (42).

$$T^* = \frac{\text{Erf} \left(\frac{x^*}{2\sqrt{t^*}} \right)}{\text{Erf}(\varphi)} \quad (42)$$

Onde φ é uma constante tabelada para diferentes números de Stefan.

3.3.4 Solidificação de Metal Puro em Domínio Bidimensional

O modelo para a solidificação do metal puro considerando a transferência de calor simultânea em um domínio unidimensional pode ser facilmente estendido para a solidificação em um domínio bidimensional. Estudou-se a solidificação com extração de calor pelo sólido, o que resultaria em crescimento típico colunar, em um domínio bidimensional quadrado a partir das equações (43) e (44) para o campo de fases e para a transferência de calor, respectivamente.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t^*} = -M' \left(\frac{\partial f^*}{\partial \phi} - E \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^{*2}} - E \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^{*2}} \right) \quad (43)$$

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} - \frac{1}{Ste} \frac{\partial \phi}{\partial t^*} \quad (44)$$

As condições de contorno e inicial adotadas são expressas pelas equações da (45) a (48).

$$\phi(x^*, y^*, t^*) = 1, \text{ para } x^* = 0, x^* = 1, y^* = 0, y^* = 1 \quad (45)$$

$$T^*(x^*, y^*, t^*) = 0, \text{ para } x^* = -\frac{h}{2}, x^* = 1 + \frac{h}{2}, y^* = +\frac{h}{2}, \\ y^* = 1 - \frac{h}{2} \quad (46)$$

$$\phi(x^*, y^*, 0) = 0 \quad (47)$$

$$T^*(x^*, y^*, 0) = 1 \quad (48)$$

A equação (43) foi discretizada pelo método das diferenças finitas implícito, enquanto a equação (44) foi descrita pelo método dos volumes finitos.

No domínio quadrado, além da solidificação com extração de calor pelo sólido, foi estudado o caso da solidificação com extração de calor pelo líquido, o que resultaria em um crescimento típico equiaxial, em um domínio adiabático. Neste caso, um núcleo sólido esférico foi posicionado no centro do domínio, sendo as condições iniciais e de contorno apresentadas pelas equações (49) a (53).

Condições iniciais:

$$\phi(x^*, y^*, 0) = 1, \text{ para } (x^* - 0,5)^2 + (y^* - 0,5)^2 \leq 25h^2 \quad (49)$$

$$\phi(x^*, y^*, 0) = 0, \text{ para } (x^* - 0,5)^2 + (y^* - 0,5)^2 > 25h^2 \quad (50)$$

$$T^*(x^*, y^*, 0) = 0 \quad (51)$$

Condições de contorno:

$$\frac{\partial T^*}{\partial x^*} = 0, \text{ para } x^* = 0 \text{ e } x^* = 1 \quad (52)$$

$$\frac{\partial T^*}{\partial y^*} = 0, \text{ para } y^* = 0 \text{ e } y^* = 1 \quad (53)$$

Para comparação dos resultados com o trabalho de Kobayashi [4], o coeficiente $\beta(T)$ foi calculado segundo a equação (54), que sempre obedece o critério de estabilidade para $\beta(T)$.

$$\beta(T) = -\frac{\kappa}{\pi} \tan^{-1} \gamma(T_m - T) \quad (54)$$

3.3.5 Solidificação de Metal Puro Anisotrópico em Domínio Bidimensional

Em estudos sobre o crescimento dendrítico, observou-se que a anisotropia de da energia de interface sólido/líquida promove o crescimento dos braços dendríticos em direções cristalográficas preferenciais. Este efeito foi considerado pela primeira vez por Kobayashi [4], que assumiu que o coeficiente de energia gradiente (ε), que define o funcional de energia livre, era função do ângulo de inclinação da interface. Segundo esta hipótese, a equação diferencial para a variável de fase torna-se a equação (55).

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} - \nabla(\varepsilon^2 \nabla \phi) + \nabla \left(|\nabla \phi|^2 \varepsilon \frac{\partial \varepsilon}{\partial \nu} \right) \right) \quad (55)$$

Sendo ν o vetor normal da interface. Para representar a dependência de ε com a orientação da interface, assumiu-se a equação (56).

$$\varepsilon = \bar{\varepsilon} \{1 + s \cos[\vartheta(\theta - \theta_0)]\} \quad (56)$$

Onde $\bar{\varepsilon}$ é uma constante, s a força da anisotropia, ϑ o modo da anisotropia, que determina o número de orientações preferenciais de crescimento e θ o ângulo entre v e o eixo x , calculado pela equação (57).

$$\theta = \tan^{-1} \frac{\partial \phi / \partial y}{\partial \phi / \partial x} \quad (57)$$

No caso bidimensional solucionado no presente item, a equação final para a variável de fase será a equação (58).

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} - \nabla(\varepsilon^2 \nabla \phi) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \varepsilon' \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon \varepsilon' \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right) \quad (58)$$

Onde $\varepsilon' = d\varepsilon/d\theta$. Esta equação, na sua forma adimensional, substitui a equação (32) do modelo descrito no item anterior. A equação da conservação de energia e todas as condições de contorno e iniciais são idênticas às do modelo anterior.

Como no item anterior, o núcleo sólido foi posicionado no centro do domínio para se estudar o crescimento equiaxial anisotrópico. No segundo caso estudado, o núcleo foi posicionado na parede do domínio e a condição de simetria foi utilizada, resultando nas condições iniciais expressas pelas equações (59) e (60).

$$\phi(x^*, y^*, 0) = 1, \text{ para } (x^*)^2 + (y^* - 0,5)^2 \leq 25h^2 \quad (59)$$

$$\phi(x^*, y^*, 0) = 1, \text{ para } (x^*)^2 + (y^* - 0,5)^2 \leq 25h^2 \quad (60)$$

3.3.6 Solidificação de Metal Puro Anisotrópico em Domínio Tridimensional

De maneira similar ao bidimensional, o caso tridimensional pode ser desenvolvido a partir da equação (9), levando em consideração a dependência da constante de energia de interface com a direção normal à interface, sendo as direções dos eixos consideradas direções preferenciais de crescimento, logo, obedecendo a equação (61), usada por Singer e Karma [23] [24].

$$\varepsilon(n) = \bar{\varepsilon} \eta(n) = \bar{\varepsilon}(1 - 3s) \left(1 - \frac{4s}{1 - 3s} \frac{\phi_x^4 + \phi_y^4 + \phi_z^4}{|\nabla\phi|^4} \right) \quad (61)$$

Onde $\phi_i = \partial\phi/\partial i$ e n é a direção normal à interface. Essa equação quando trabalhada de modo bidimensional recai sobre o caso onde o modo de anisotropia é igual a 4.

Ao trabalharmos a equação de transformação de fase com o método do campo de fases em três dimensões obteremos a equação (62), que deve ser acoplada com a equação (63) de transporte de calor tridimensional, ambas equações na forma adimensional.

$$\begin{aligned} \frac{\partial\phi}{\partial t^*} = & -\frac{M'}{\eta^2} \left(\frac{\partial f^*}{\partial\phi} + E \frac{\partial}{\partial x^*} \left(|\nabla\phi|^2 \eta \frac{\partial\eta}{\partial\phi_x} \right) + E \frac{\partial}{\partial y^*} \left(|\nabla\phi|^2 \eta \frac{\partial\eta}{\partial\phi_y} \right) + \right. \\ & \left. E \frac{\partial}{\partial z^*} \left(|\nabla\phi|^2 \eta \frac{\partial\eta}{\partial\phi_z} \right) + E \nabla(\eta^2 \nabla\phi) \right) \end{aligned} \quad (62)$$

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial z^{*2}} - \frac{1}{Ste} \frac{\partial\phi}{\partial t^*} \quad (63)$$

Como nos itens anteriores, o núcleo sólido foi posicionado no centro do domínio para se estudar o crescimento equiaxial anisotrópico e isotrópico, onde $s = 0$. As condições iniciais expressas pelas equações (64) e (65) para o campo de fases e temperatura, utilizando como condição de contorno as equações (66) e (67).

Condições iniciais:

$$\begin{aligned} \phi(x^*, y^*, z^*, 0) = 1, \text{ para } (x^* - 0,5)^2 + (y^* - 0,5)^2 + \\ (z^* - 0,5)^2 \leq 5h^2 \end{aligned} \quad (64)$$

$$\begin{aligned} T^*(x^*, y^*, z^*, 0) = 1, \text{ para } (x^* - 0,5)^2 + (y^* - 0,5)^2 + \\ (z^* - 0,5)^2 \leq 5h^2 \end{aligned} \quad (65)$$

Condições de contorno:

$$\phi(x^*, y^*, z^*, t^*) = 0, \text{ para } x^* = 0, y^* = 0 \text{ e } z^* = 0 \quad (66)$$

$$\frac{\partial T^*}{\partial i} = 0, \text{ para } i = x^*, y^* \text{ ou } z^* \text{ em } i = 0 \quad (67)$$

4 RESULTADOS

4.1 SOLIDIFICAÇÃO DE METAL PURO

4.1.1 Solidificação de Metal Puro e Temperatura Uniforme

Foi simulada a solidificação de um metal puro hipotético com parâmetros $\varepsilon = 1 \text{ (J/m)}^{1/2}$, $M = 1 \text{ m}^3/(\text{J}\cdot\text{s})$, $T_m = 1 \text{ K}$, $L = 1 \text{ J/m}^3$ e $W = 1 \text{ J/m}^3$, para dois valores de $\beta(T)$, em diversos períodos de tempo. A equação (17), descrita em diferenças finitas de modo implícito, foi resolvida numericamente usando o método de Gauss-Seidel com tolerância ao erro de convergência de 10^{-6} , para uma malha de 300 nós, domínio de comprimento l igual a 100 m e um passo de tempo de 10^{-3} s .

Para $\beta(T) = 0$, ou seja, temperatura igual à temperatura de fusão (líquido sem super-resfriamento) obteve-se a Figura 4, para os tempos de 1, 10 e 20 s. A solução foi comparada com a solução analítica expressa pela equação (15). Nota-se que o perfil da variável de fase evolui com o tempo para uma situação estacionária, também chamada de equilíbrio, aproximando-se da solução analítica, o que valida o modelo implementado.

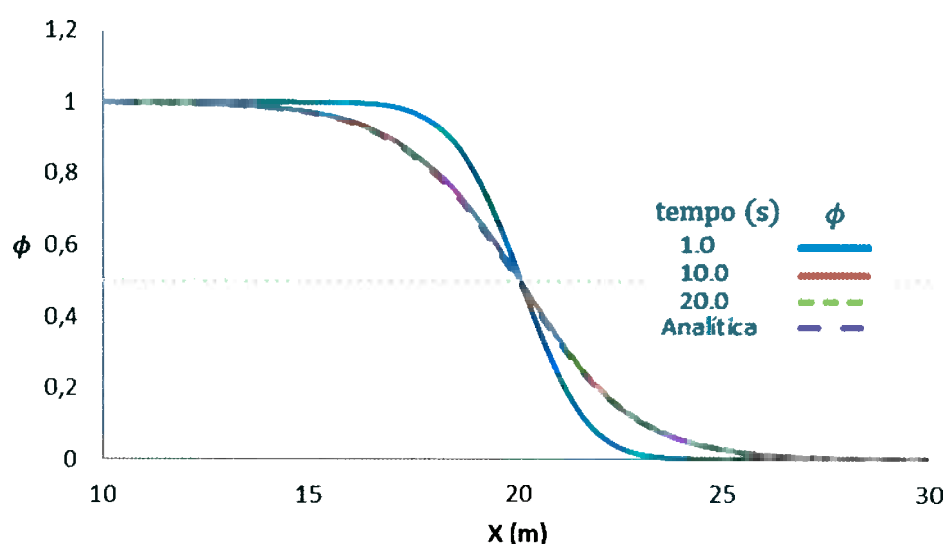


Figura 4 – Interface sólido/líquido para diversos tempos, utilizando $\beta(T) = 0$. Solução comparada com solução analítica.

Uma simulação foi realizada partindo-se de um líquido super-resfriado. Neste caso, adotou-se $\beta(T) = -0,3$ e foram testadas malhas com diferentes números de nós para verificar se a malha de 300 nós seria adequada. Utilizando malhas de 300, 1000, 100 e 50 nós, obteve-se a Figura 5. A malha de 300 nós mostrou-se adequada, uma vez que seus resultados são praticamente idênticos aos resultados obtidos com malhas de 100 e 1000 nós.

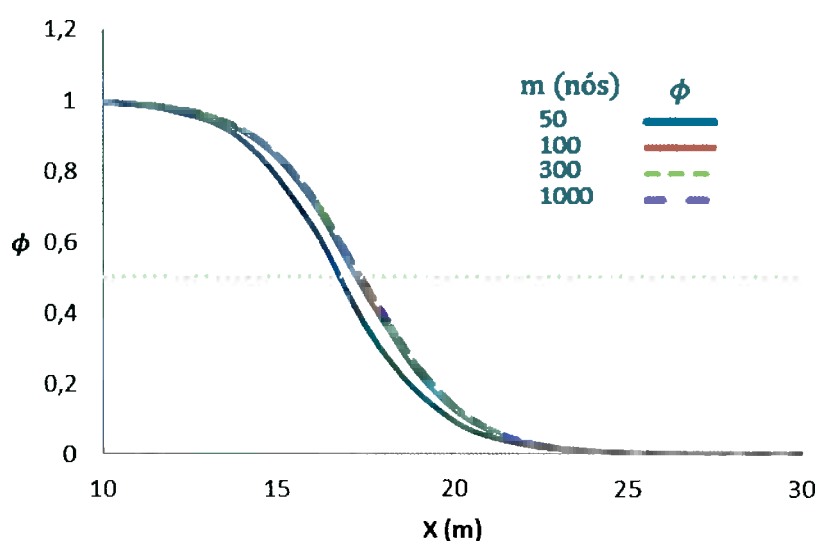


Figura 5 – Interface de solidificação de metal puro com $\beta(T) = -0,3$ e tempo de 10^{-3} s para diferentes malhas.

Para o mesmo caso, adotando a malha de 300 nós, obteve-se o resultado da Figura 6, para os tempos de 5, 15, 20, 30 e 50 s. A solução para o maior tempo (125 s) foi comparada com a solução analítica. O perfil evolui de modo a manter sua forma constante e igual ao perfil da solução analítica.

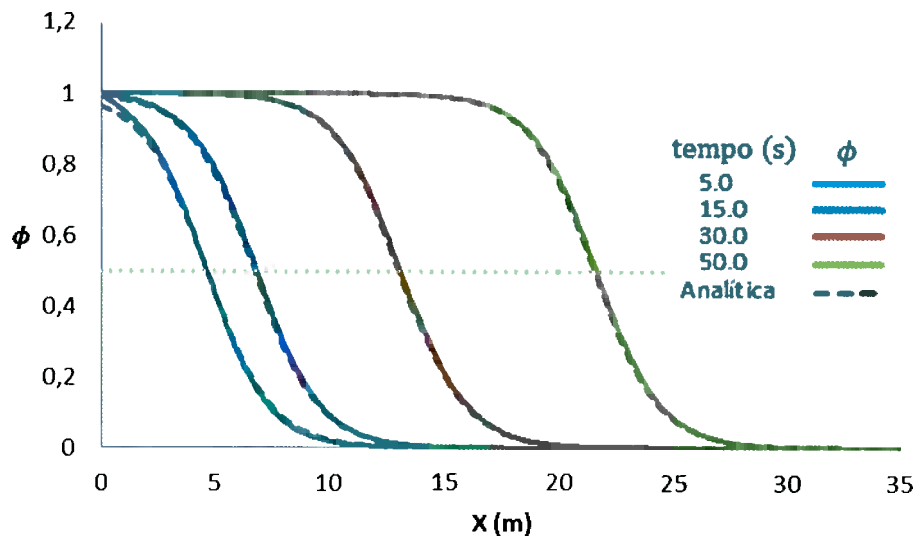


Figura 6 – Interface de solidificação de metal puro com $\beta(T) = -0,3$ para diferentes instantes de tempos.

Neste caso, obteve-se a velocidade de translação do perfil de ϕ monitorando-se $\phi = 0,5$, que por definição representa a posição da interface. Esta velocidade foi extraída utilizando-se a aproximação dada pela equação (68).

$$V_m = \frac{X_{\phi=0,5}^{t+\Delta t} - X_{\phi=0,5}^t}{\Delta t} \quad (68)$$

Sendo $X_{\phi=0,5}^t$, a posição da interface ($\phi = 0,5$) para um instante de tempo t .

Esta velocidade foi comparada com a velocidade da solução analítica, definida pela equação (16), como mostra a Figura 7. Novamente, nota-se um período transiente que evolui para um estado estacionário. No estado estacionário, a velocidade obtida pelo método do campo de fases torna-se muito próxima da solução analítica. Estes testes mostraram que a equação utilizada para calcular a evolução do campo da variável de fase foi corretamente solucionada no presente trabalho, permitindo que casos mais complexos sejam analisados.

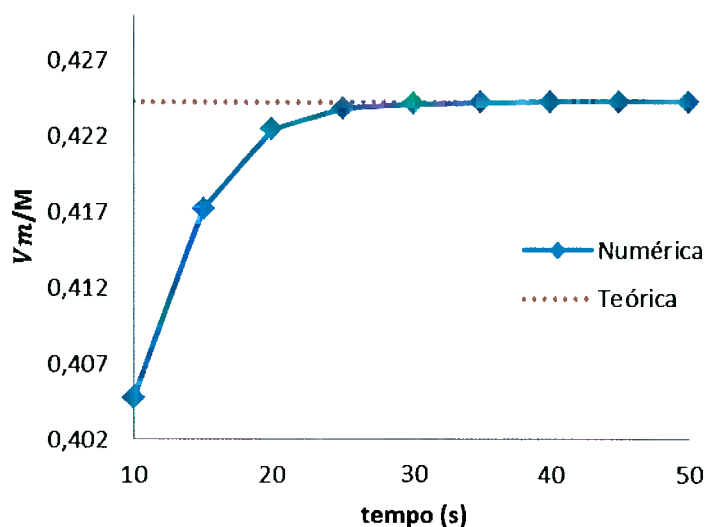


Figura 7 – Evolução da velocidade da interface da frente de solidificação obtida por aproximação (numérica) comparada com a solução analítica (teórica) para um mesmo super-resfriamento.

4.1.2 Solidificação de Metal puro e Perfil de Temperatura Linear

Foi simulada a solidificação de um metal puro com parâmetros $\varepsilon = 1 \text{ (J/m)}^{1/2}$, $M = 1 \text{ m}^3/(\text{J}^*\text{s})$, $T_m = 1 \text{ K}$, $L = 1 \text{ J/m}^3$ e $W = 1 \text{ J/m}^3$, como no item anterior. No entanto, agora o perfil de temperatura imposto no sistema foi assumido variar linearmente com a distância e com o tempo de acordo com a equação (21). No método de Gauss-Seidel a tolerância para o erro de convergência foi de 10^{-6} , para uma malha de 300 nós, domínio de comprimento l igual a 100 m e um passo de tempo de 10^{-3} s. Utilizando valores de G e V iguais a 0,01 K/m e 0,1 m/s respectivamente, foram obtidos os resultados apresentados na Figura 8, mostrando os perfis de temperatura e variável de fase. Nota-se que o perfil de variável de fase e consequentemente a interface, localizada em $\phi = 0,5$, transladam junto com perfil de temperatura, indicando que a interface tem velocidade semelhante à velocidade das isothermas, como esperado.

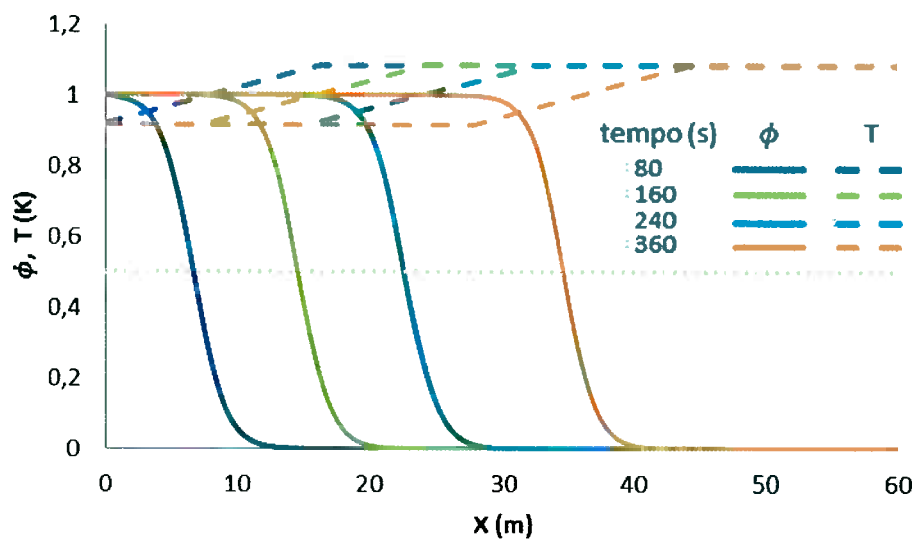


Figura 8 - Interface de solidificação e perfil de temperatura linear para diversos tempos com $V=0,1$ m/s e $G=0,001$ K/m.

Este mesmo tipo de simulação foi realizado para maiores velocidades das isothermas, a saber, $V = 0,2$ e $0,3$ m/s. Os resultados estão apresentados na Figura 9 e Figura 10. Nestes casos a velocidade da interface foi extraída e mostrada na Figura 11. Nesta figura nota-se um transiente inicial que evolui para o estado-estacionário onde a velocidade é igual à velocidade das isothermas, como esperado.

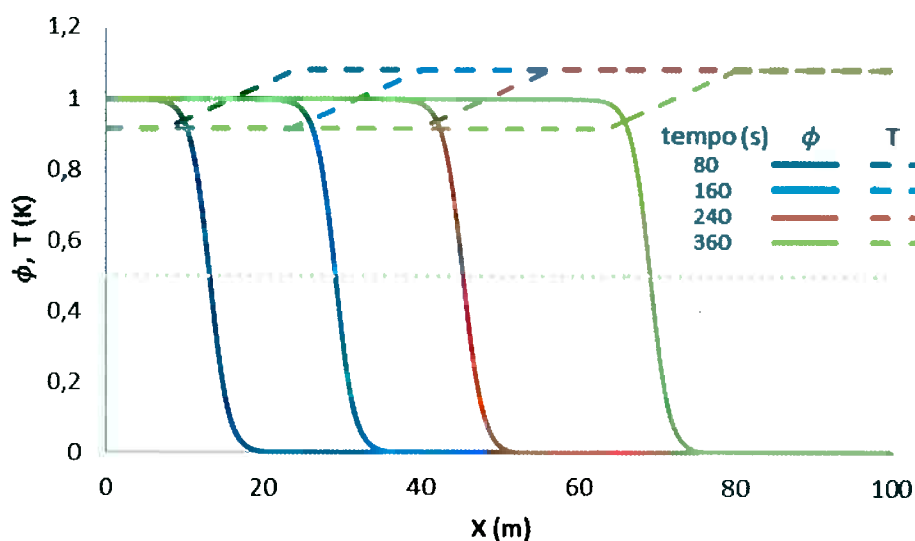


Figura 9 - Interface de solidificação e perfil de temperatura linear para diversos tempos com $V=0,2$ m/s e $G=0,001$ K/m.

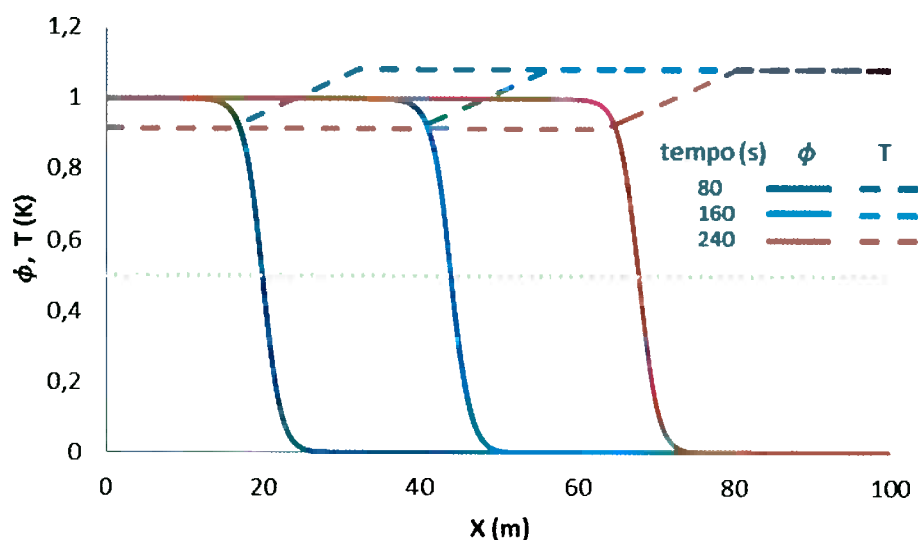


Figura 10 - Interface de solidificação e perfil de temperatura linear para diversos tempos com $V=0,3$ m/s e $G=0,001$ K/m.

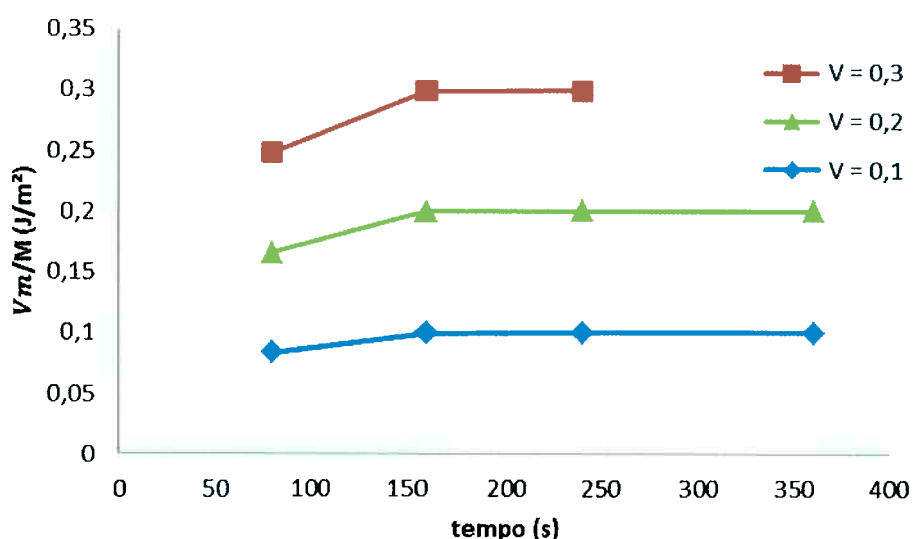


Figura 11 - Evolução da velocidade da interface da frente de solidificação para o caso linear, com $V=0,1$ m/s, $V=0,2$ m/s e $V=0,3$ m/s.

Após atingir o estado-estacionário mostrado na Figura 11, pode-se extrair a temperatura na posição da interface ($\phi = 0,5$), e consequentemente o super-resfriamento adimensional na interface, definido como $(T_m - T)/T_m$, onde T é a temperatura da interface e T_m é a temperatura de fusão. Estes valores foram extraídos para as três simulações e mostrados em função da velocidade na Figura 12. Observa-se um comportamento linear, como descrito na literatura. No entanto, devido ao gradiente de temperatura, a curva apresenta uma inclinação diferente em relação à curva teórica, obtida a partir da equação (16).

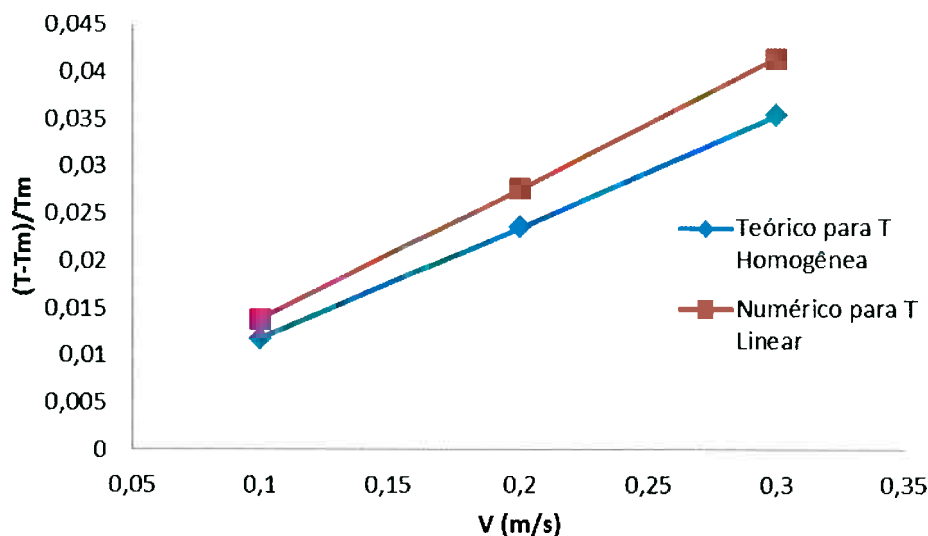


Figura 12 – Super-resfriamento para diversas velocidades observado comparativo entre o caso analítico (teórico) para temperatura homogênea e o numérico (calculado) com o perfil linear de temperatura.

Com o intuito de estudar o comportamento da interface com o gradiente de temperatura imposto foi realizado um estudo da evolução ao longo do tempo da variável de fase variando-se o gradiente de temperatura e mantendo a velocidade das isothermas constante. Para tanto, foram realizadas simulações utilizando um V fixo em 0,2 m/s para os valores de G iguais a 0,005, 0,01, 0,02 e 0,03 K/m em diversos instantes de tempo. Assim obteve-se a Figura 13, Figura 14, Figura 15 e Figura 16. Nestes casos a velocidade da interface para diversos instantes de tempo foi extraída e mostrada na Figura 17.

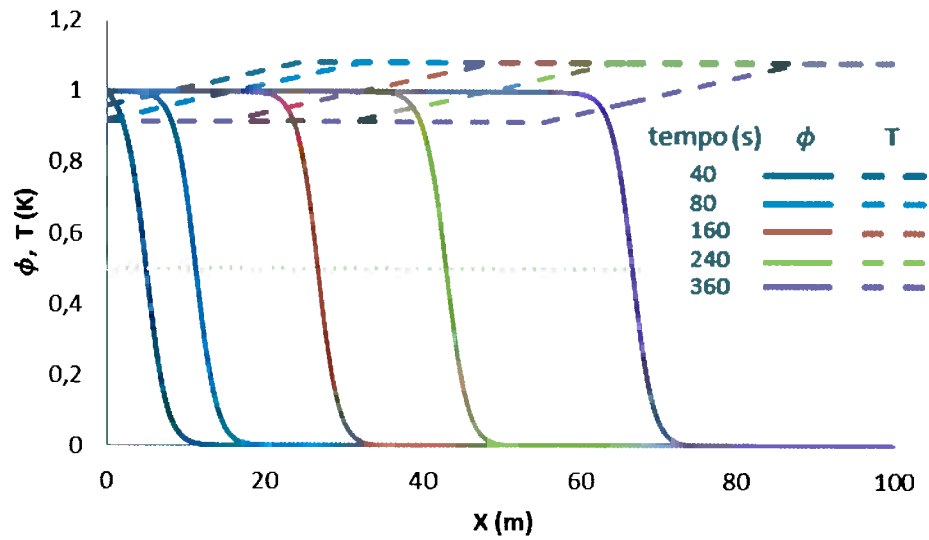


Figura 13 - Interface de solidificação e perfil de temperatura linear para diversos tempos com $V=0,2$ m/s e $G=0,005$ K/m.

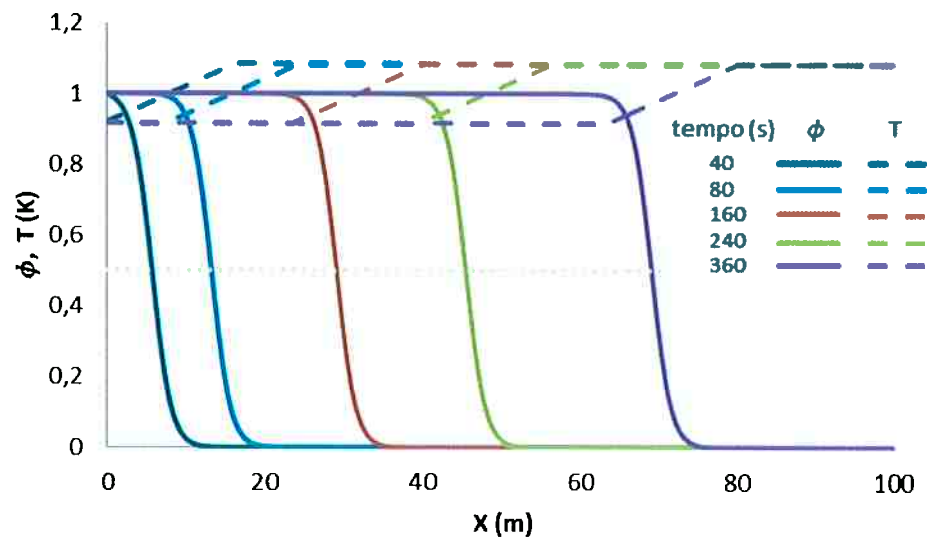


Figura 14 - Interface de solidificação e perfil de temperatura linear para diversos tempos com $V=0,2$ m/s e $G=0,01$ K/m.

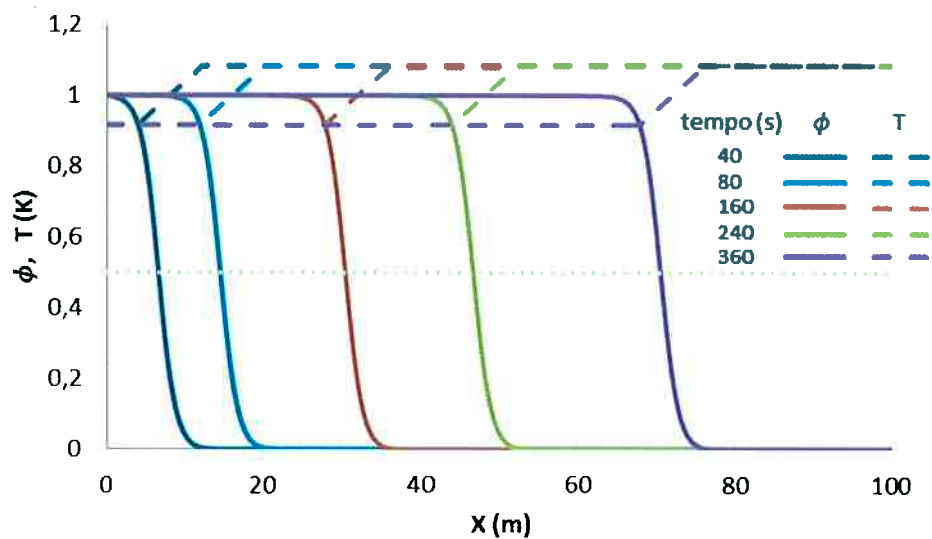


Figura 15 - Interface de solidificação e perfil de temperatura linear para diversos tempos com $V=0.2$ m/s e $G=0.02$ K/m.

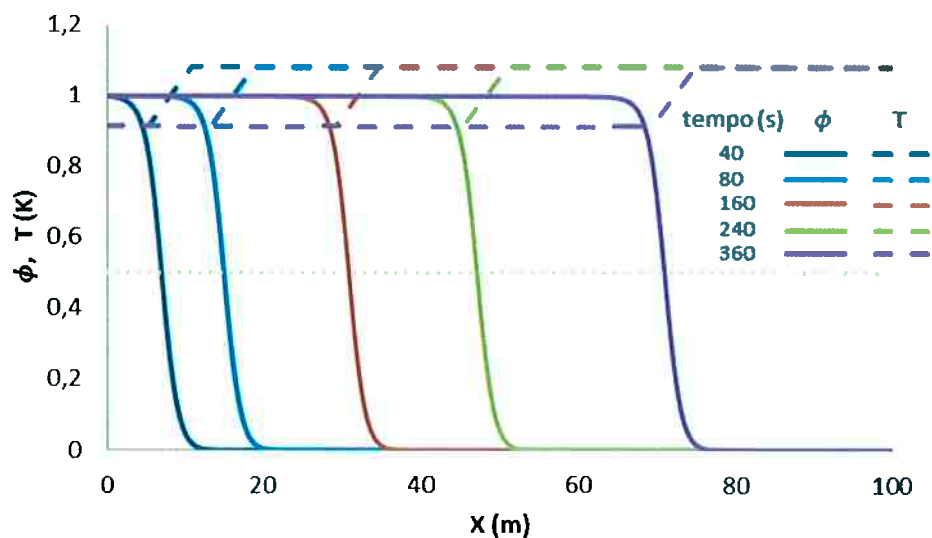


Figura 16 - Interface de solidificação e perfil de temperatura linear para diversos tempos com $V=0.2$ m/s e $G=0.03$ K/m.

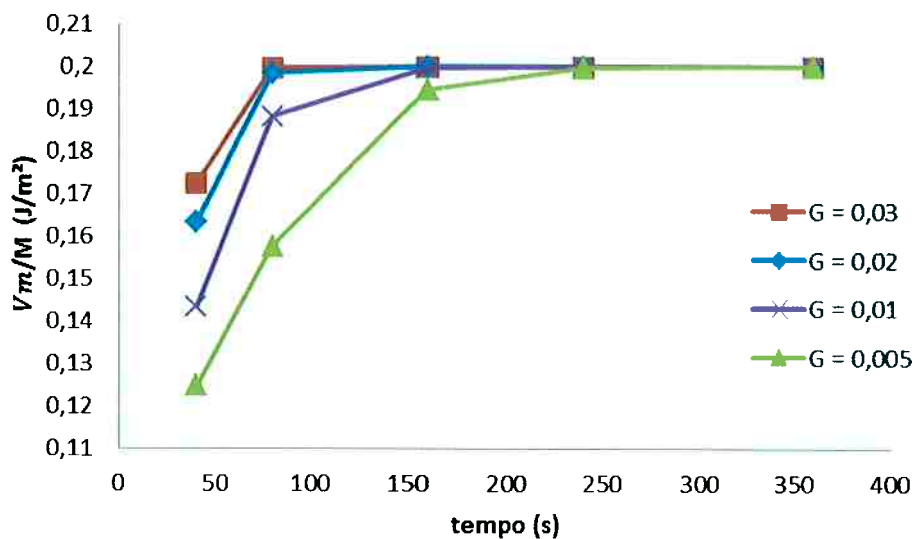


Figura 17 - Evolução da velocidade da interface da frente de solidificação para o caso linear, com $G=0,005$ K/m, $G=0,01$ K/m, $G=0,02$ K/m e $G=0,03$ K/m.

Através destas figuras, nota-se que quanto maior o gradiente de temperatura, mais rápido o perfil da variável de fase entra no estado estacionário. Através da equação (16) podemos calcular, utilizando o V fixado, o valor esperado para o super-resfriamento na interface no caso de temperatura homogênea. Assim podemos comparar com os valores obtidos através da simulação com o valor analítico (teórico) para temperatura homogênea, gradiente igual a 0, por meio da Figura 18.

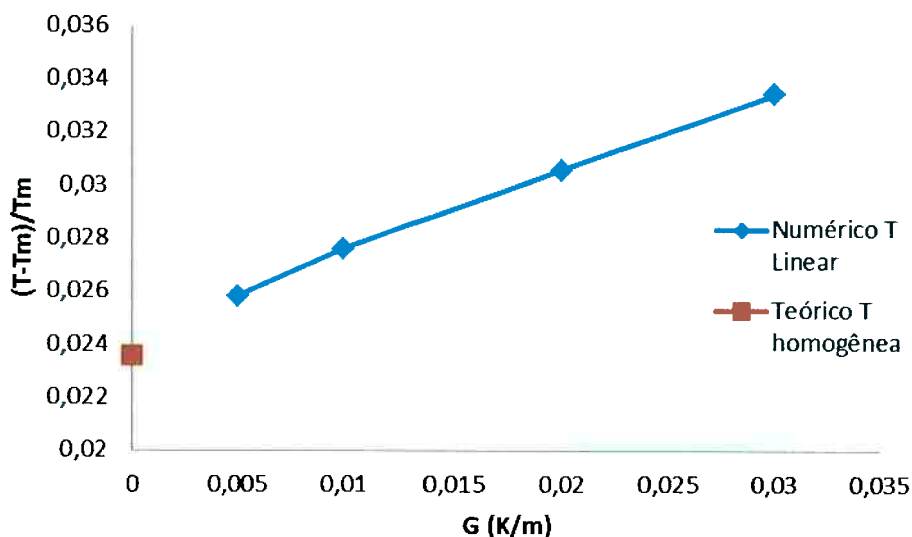


Figura 18 - Super-resfriamento para mesma velocidade e vários gradientes de temperatura. Caso com temperatura linear forma uma reta. Caso de temperatura homogênea é representado como ponto, uma vez que $G = 0$.

Observa-se que o super-resfriamento aumenta com o aumento do gradiente de temperatura, de forma que quando o gradiente tende a zero, o super-resfriamento vai de encontro ao caso analítico para temperatura é homogênea. Comparando-se o perfil obtido para a variável de fase, no caso com gradiente diferente de 0, com aquele dado pela solução analítica, para o caso de temperatura homogênea, observa-se, por meio da Figura 19, uma discrepância, evidenciando uma vez mais o efeito do gradiente de temperatura no perfil da variável de fase. A diferença entre os formatos dos perfis da variável de fase está realçada na Figura 20, mostrando uma discrepância simétrica em relação à posição da interface resultante de um estreitamento da região da interface com o aumento do gradiente.

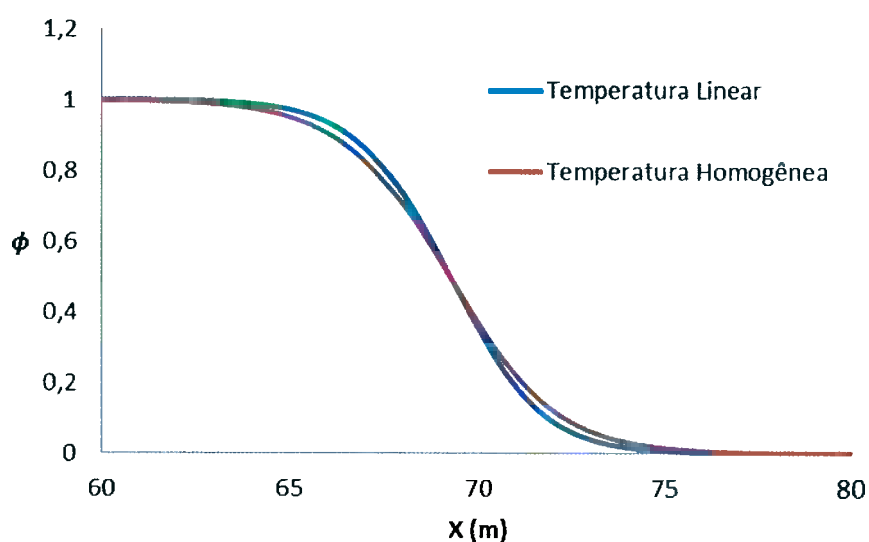


Figura 19 – Comparação da interface para os casos de temperatura linear e homogênea.

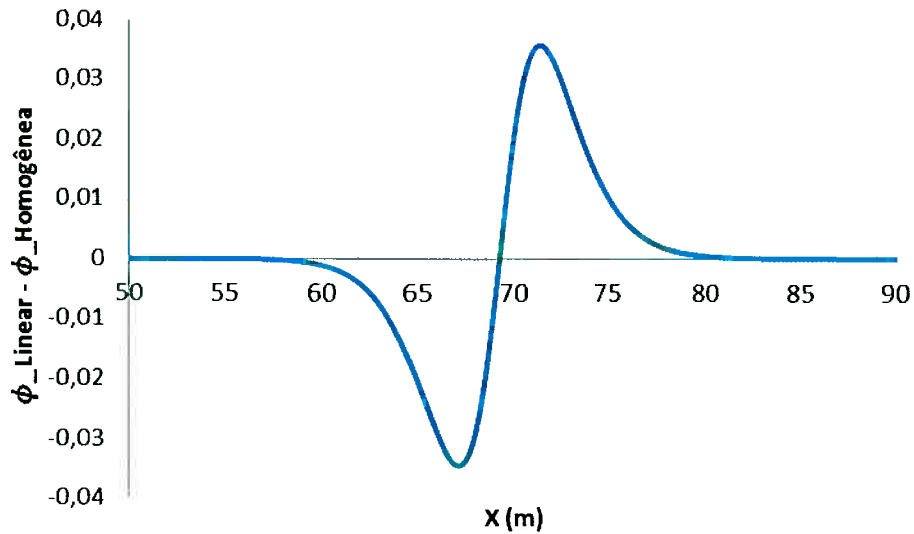


Figura 20 - Diferença entre os perfis de interface de solidificação.

Tendo em vista a Figura 12 e a Figura 18, pode-se dizer que o super-resfriamento segue uma relação matemática expressa pela equação (69). Nota-se uma série de Taylor.

$$\frac{T_m - T}{T_m} = AG + BV + CVG \quad (69)$$

Sendo A, B e C constantes. Este caso se reduz a equação (16) se considerarmos $G = 0$ K/m.

4.1.3 Solidificação de Metal Puro e Campo de Temperaturas Desconhecido

Neste caso estudado, o perfil de temperatura não foi imposto, mas calculado a partir da equação da conservação de energia. Logo, a equação (23) também foi discretizada, mas agora utilizando o método dos volumes finitos. Utilizou-se o método de Gauss-Seidel para resolução numérica da equação com um erro de convergência de 10^{-7} , uma malha de 1000 nós, um domínio adimensional de comprimento 1 e um passo de tempo de 10^{-7} . Agora as equações diferenciais da variável de fase e da energia estão acopladas, pois as duas variáveis aparecem nas duas equações. Este aspecto exige que, durante a solução das equações algébricas resultantes das discretização, a convergência global das duas variáveis (ϕ e T) seja

verificada, além da convergência de cada variável individualmente. Tal convergência ocorre quando após convergência de uma das variáveis a outra não necessite de convergência, ou seja, uma pequena variação de ϕ não promove uma alteração de T significativa e vice versa.

Foi solucionado o problema da solidificação de um metal puro utilizando-se os parâmetros adimensionais $M' = 21204,38$, $E = 1,66 \times 10^{-6}$ e $Ste = 3,06$. Para instantes de tempo adimensionais entre 0,001 e 0,1, diversos perfis de temperatura e variável de fase estão mostrados na Figura 21. Uma ampliação para ilustrar a região da interface está apresentada na Figura 22. A Figura 23, representa a o super-resfriamento da interface em função da sua velocidade durante sua evolução com o tempo. Este super-resfriamento, chamado de super-resfriamento cinético, é sempre muito reduzido quando comparado ao super-resfriamento máximo possível para o líquido e aumenta com o aumento da velocidade, como esperado.

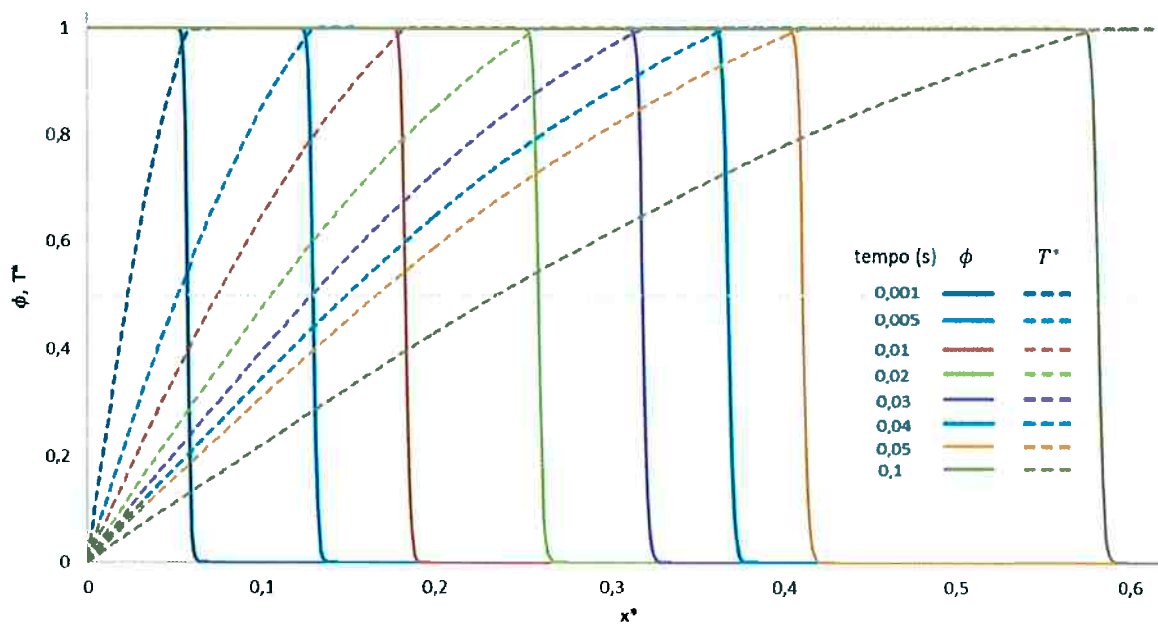


Figura 21 – Perfil da variável de fase e de temperatura para diversos tempos.

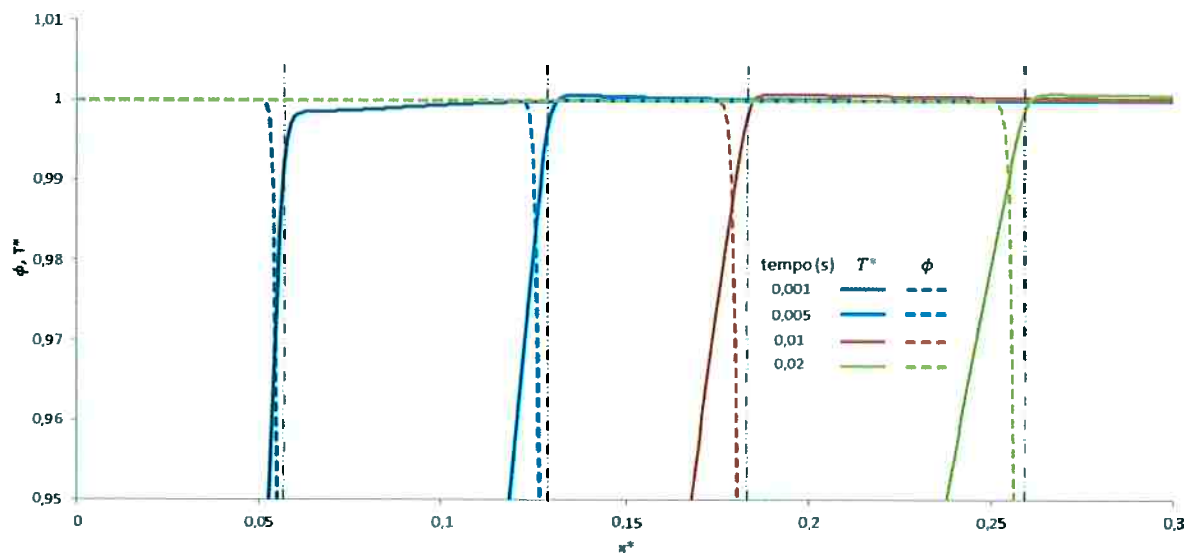


Figura 22 – Detalhe do perfil de temperatura para a solidificação de um metal no caso adimensional, com interface em preto tracejado.

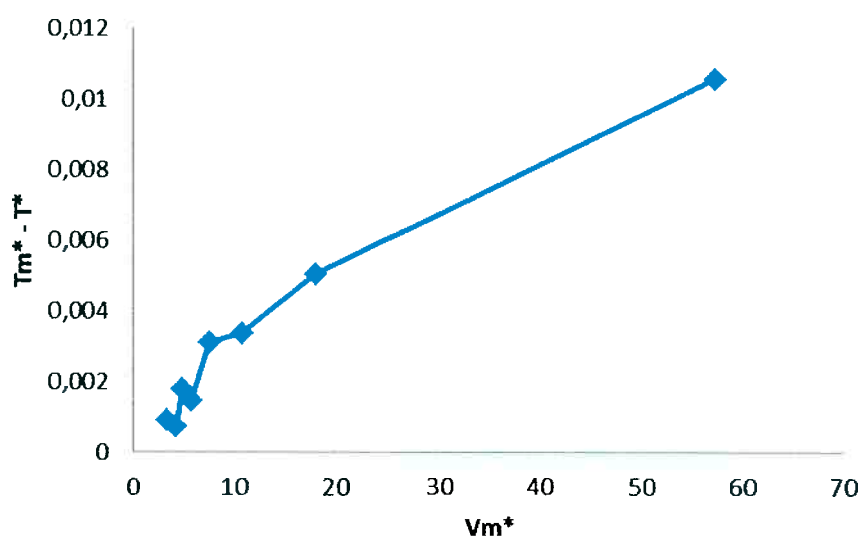


Figura 23 – Comportamento do super-resfriamento em relação à velocidade da interface sólido/líquido.

Na Figura 24, um dos perfis de temperatura no sólido para o instante adimensional 0,01 foi comparado com a solução analítica disponível para este problema, mostrando uma aderência excelente. Na A Figura 25, as posições da interface sólido-líquida obtida pelo modelo e pela solução analítica são comparadas, mostrando novamente uma excelente aderência. Conclui-se, portanto que a resolução numérica das equações acopladas da variável de fase e da energia foi implementada corretamente.

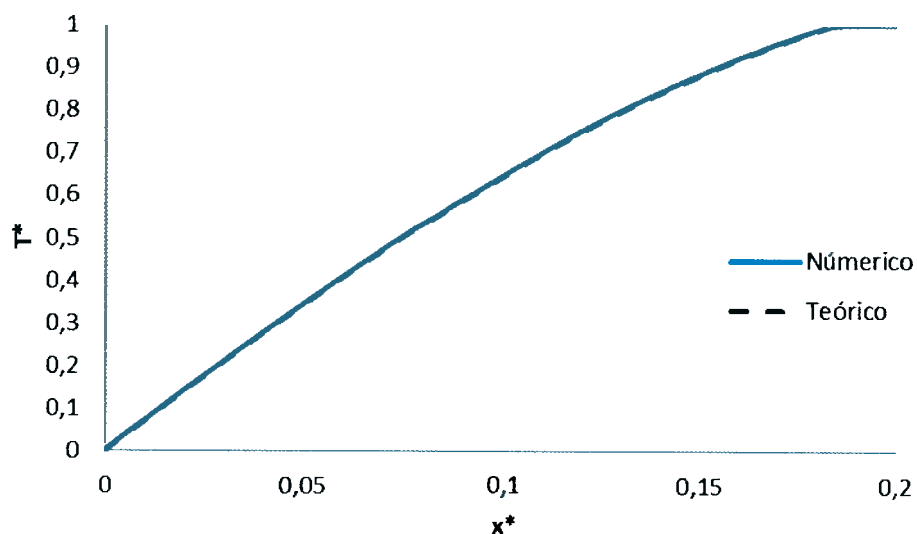


Figura 24 – Comparação do perfil de temperatura obtida numericamente (numérico) com a solução analítica de Stefan (teórico).

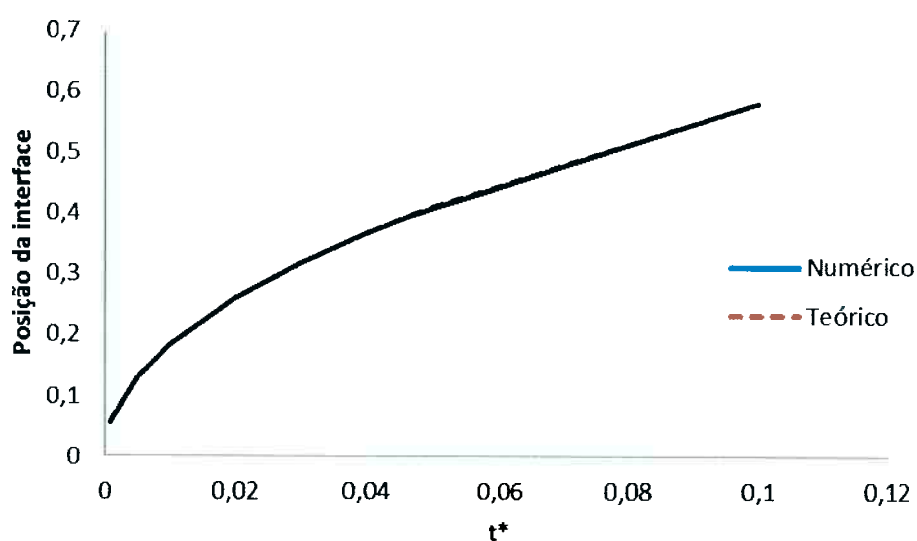


Figura 25 – Posição da interface para solidificação obtida através da solução numérica (numérico) e analítica de Stefan (teórico).

4.1.4 Solidificação de Metal Puro em um Domínio Bidimensional

Neste item, foi simulada a solidificação de um metal puro hipotético em um domínio bidimensional utilizando os parâmetros adimensionais $M' = 270000$, $E = 1,23 \times 10^{-6}$ e $Ste = 1$. A forma discretizada das equações (43) e (44), obtidas através de diferenças finitas e volumes finitos, respectivamente, foram solucionadas numericamente usando o método de Gauss-Seidel com tolerância para o erro de

convergência de 10^{-6} , uma malha quadrada de 300x300 nós, domínio adimensional de comprimento 1 e um passo de tempo de $2,5 \times 10^{-6}$. Como $\beta(T)$ é calculado pela equação (54), os parâmetros κ e γ são iguais a 0,9 e 10, respectivamente. Novamente, como o campo de temperaturas também teve que ser obtido a partir da solução da equação da conservação da energia, as duas equações estão acopladas e devem ser solucionadas simultaneamente.

Dois tipos de solidificação foram simulados: a solidificação com extração de calor pelo sólido, típica de crescimento colunar, e solidificação com extração de calor pelo líquido, típica de crescimento equiaxial. Durante a solidificação com extração de calor pelo sólido, a extração de calor para o ambiente ocorre através das paredes do domínio e do sólido que se forma nesta parede. No caso de extração de calor pelo líquido, o líquido está inicialmente super-resfriado e o domínio passa a ser adiabático.

A solidificação típica de crescimento colunar, com a extração de calor pelas paredes de um domínio bidimensional quadrado, foi simulada e os perfis de temperaturas calculados para diversos tempos estão apresentados na Figura 26. Nesta figura também está indicada por uma linha preta a posição da interface sólido/líquida em cada instante. O resultado obtido não é comparável com o resultado reportado por Kobayashi [4], observado na Figura 27, para instantes de tempo maiores que 0,012. Contudo o resultado é comparável com a solução de Stefan, apresentando uma pequena discrepância provocada pela maneira de se calcular $\beta(T)$, nos indicando que o trabalho de Kobayashi apresenta uma condição de contorno diferente ou outra diferença não reportada em artigo.

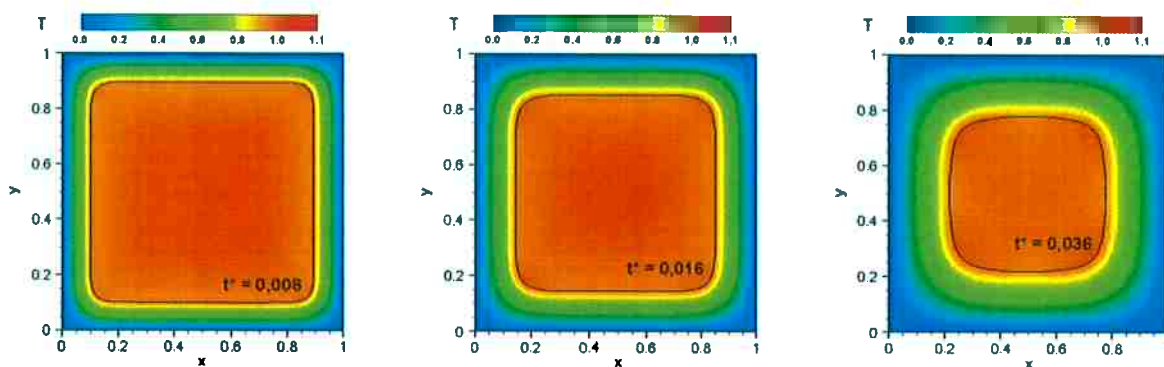


Figura 26 – Perfil de temperaturas para a solidificação colunar nos instantes $t^* = 0,012$, $t^* = 0,016$ e $t^* = 0,036$. A interface sólido/líquida está indicada pela linha cheia.

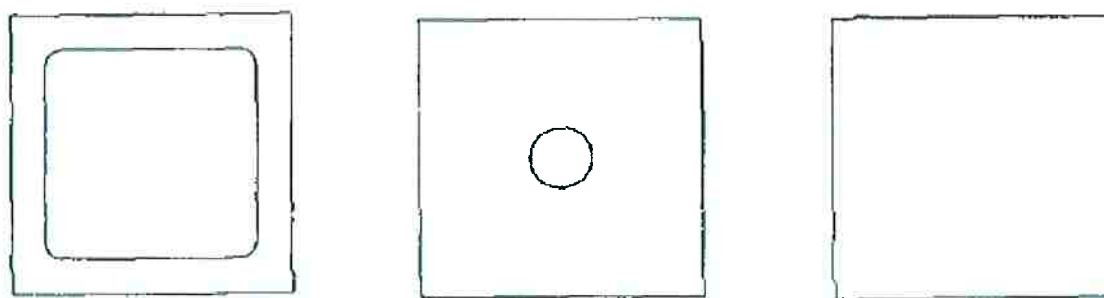


Figura 27 – Resultado de simulação em solidificação colunar de Kobayashi [4], para os tempos de $t^* = 0,01$, $t^* = 0,015$ e $t^* = 0,11$, na escala adimensional do presente trabalho.

A Figura 28 demonstra a posição da interface utilizando a solução numérica e a solução de Stefan apresentando uma pequena discrepância devido à forma de se calcular $\beta(T)$, contudo ambas as soluções divergem da apresentada por Kobayashi.

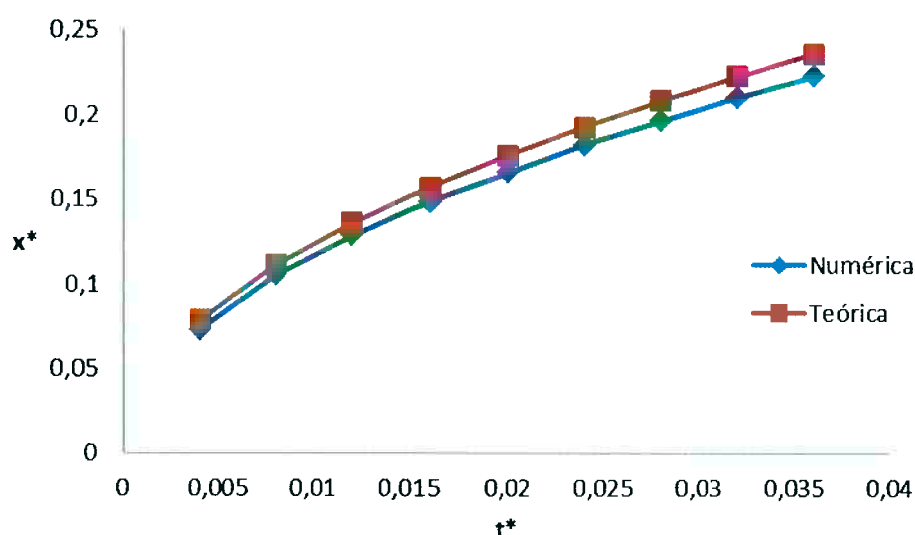


Figura 28 – Posição pelo tempo da interface para caso de solidificação colunar. Resultados obtidos por meio de simulação (numérica) em comparação com o obtido pela solução de Stefan (teórica).

Note que a extração de calor se dá pelo sólido em contato com a parede do domínio, que esfria rapidamente ficando mais resfriado do que o líquido que permanece na temperatura de fusão. Nota-se que não houve o aparecimento de dendritas, como era esperado, pois metais puros solidificando na forma colunar não apresentam as ramificações dendríticas.

A simulação da solidificação equiaxial foi conduzida a partir de um líquido inicial super-resfriado e contornos adiabáticos, posicionando-se um núcleo esférico no centro do domínio. Os resultados deste caso estão mostrados na Figura 29 para

diferentes instantes de tempo. No caso adiabático o metal líquido encontra-se super-resfriado e o sólido ao se solidificar libera calor latente que é conduzido para o líquido formando uma camada de maior temperatura. Nota-se que não se formaram ramificações dendríticas, apesar da teoria do super-resfriamento constitucional mostrar que o crescimento dendrítico deve ocorrer durante a solidificação equiaxial de um metal puro. Esta discrepância pode ter ocorrido devido a uma baixa liberação de calor na solidificação aliado a boa condução de calor pela interface, ou seja, um número de Stefan muito elevado. Outro fator é que a energia interfacial tende a estabilizar a interface sólido/líquida, evitando a formação de ramificações. Contudo espera-se que para um Ste menor (maior liberação de calor) surjam estruturas dendríticas por essas facilitarem o transporte de calor para o líquido, uma vez que esta apresenta maior superfície específica. Neste caso, o aumento da energia da superfície é compensado com a diminuição da energia do metal superaquecido, ou seja, há um ponto de mínimo na equação de energia.

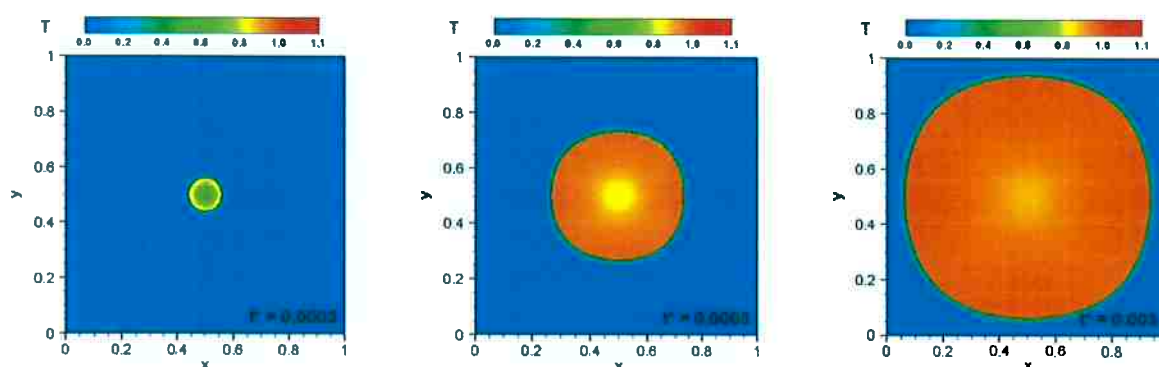


Figura 29 – Perfil de temperatura durante a solidificação de um metal puro e isotrópico a partir de um núcleo cristalino em meio adiabático com $Ste = 1$ para $t^* = 0,0003$, $t^* = 0,0015$ e $t^* = 0,003$. A linha preta indica a posição da interface sólido/líquida.

Nota-se que o sólido acaba assumindo um formato um pouco quadrado, mas deveria ser circular já que o crescimento é isotrópico. Este aspecto está diretamente relacionada à transferência de calor no domínio quadrado, que ocorre de forma diferente ao longo das diagonais em comparação com as direções verticais ou horizontais.

Repetindo a simulação de solidificação típica equiaxial utilizando $Ste = 0,5$ é possível a observação da tendência à formação de braços de dendrita. Os resultados para essa simulação pode ser observado na Figura 30 para diferentes instantes de tempo.

É possível observar que ocorre a refusão do metal onde a temperatura se encontra acima da temperatura de fusão e que surgem ramificações, principalmente nas as diagonais do domínio onde a troca de calor é maior, devido ao fato das ramificações promoverem uma maior superfície específica, portanto maior troca de calor entre sólido e líquido. Logo a presença de ramificações dendríticas é um fenômeno térmico em metais puros isotrópicos.

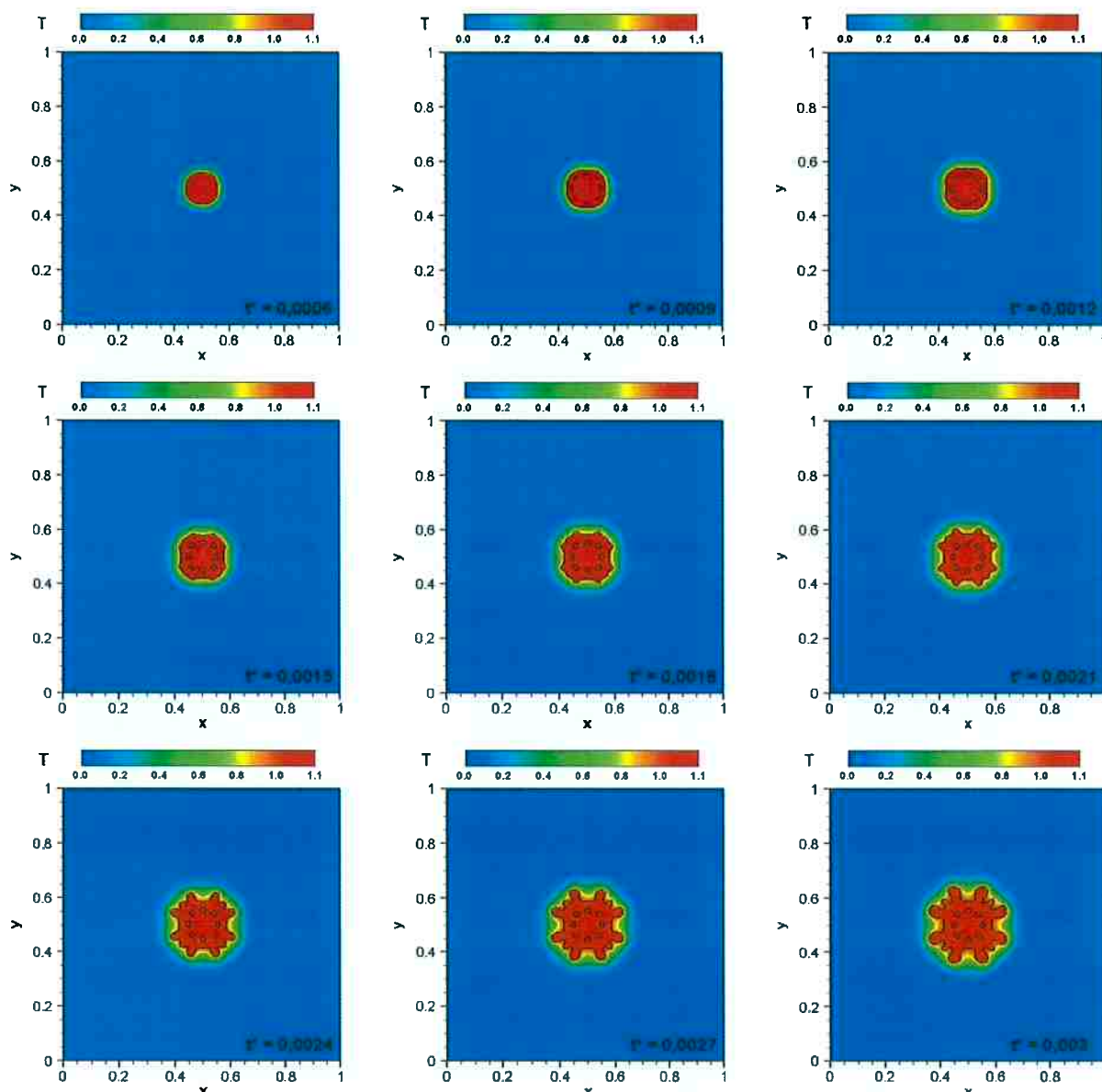


Figura 30 – Perfil de temperatura durante a solidificação de um metal puro e isotrópico a partir de um núcleo cristalino em meio adiabático com $Ste = 0,5$ para diversos instantes de tempo. A linha preta indica a posição da interface sólido/líquida.

4.1.5 Solidificação de Metal Puro Anisotrópico em um Domínio Bidimensional

O caso do item anterior envolvendo a solidificação típica equiaxial foi simulada novamente neste item, porém a anisotropia da energia de interface sólido/líquida foi introduzida. Neste caso, a equação (58) foi discretizada por diferenças finitas de modo implícito e a equação (44) foi discretizada pelo método dos volumes finitos. As equações foram resolvidas numericamente usando o método de Gauss-Seidel com tolerância para o erro de convergência de 10^{-6} , com uma malha quadrada de 300×300 nós, domínio adimensional de comprimento 1 e um passo de tempo de $2,5 \times 10^{-6}$. Os valores de θ , ε e ε' são calculados pelas equações (57), (56) e (70), respectivamente.

$$\varepsilon' = -\bar{\varepsilon}s\vartheta \sin \vartheta(\theta - \theta_0) \quad (70)$$

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 $\vartheta = 6$, variando o número de Stefan em diversos tempos diferentes, como demonstrado na Figura 31 para $Ste = 1$, Figura 33 para $Ste = 0,83$ e Figura 35 para $Ste = 0,625$, que podem ser comparadas com a Figura 32, Figura 34 e Figura 36 de Kobayashi [4], respectivamente, notando-se uma equivalência entre os resultados.

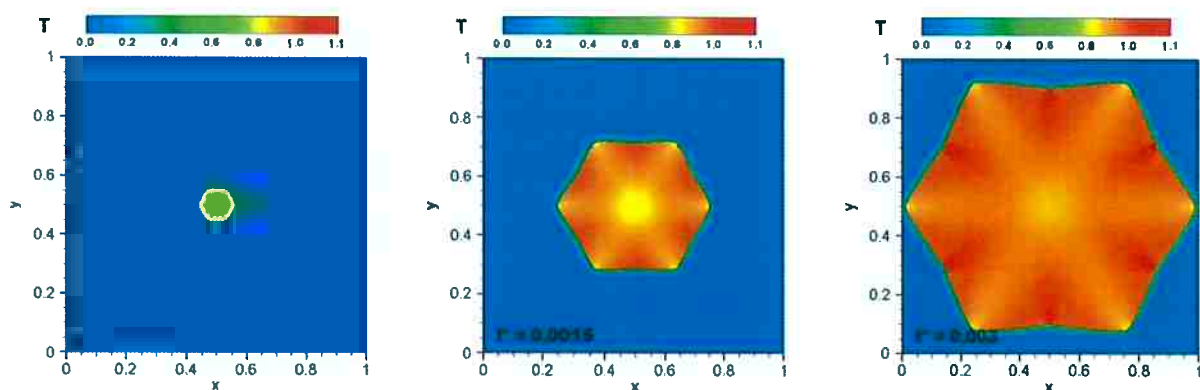


Figura 31 – Solidificação de metal a partir de semente cristalina em meio adiabático para $s = 0,04$ e $Ste = 1$ em $t^*=0,0003$, $t^*=0,0015$ e $t^*=0,003$.

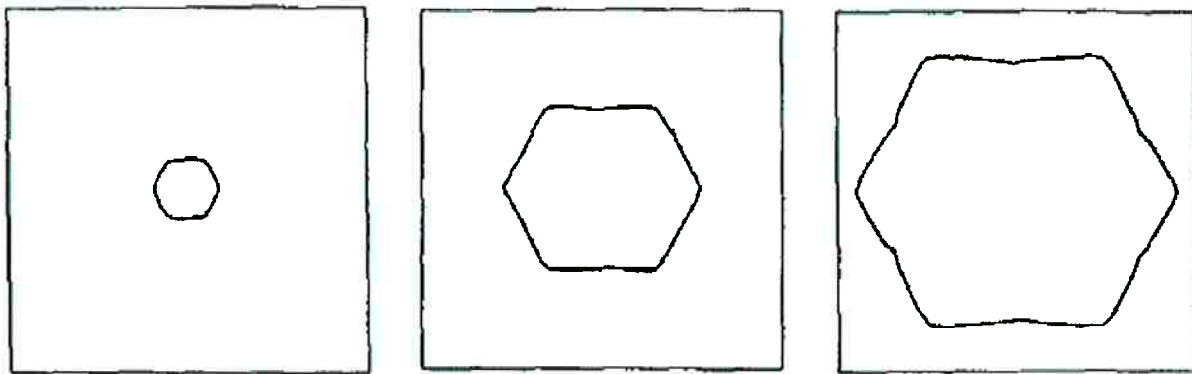


Figura 32 – Resultado de simulação em solidificação de metal a partir de semente cristalina em meio adiabático para $s = 0,04$ e $Ste = 1$ de Kobayashi [4], para os tempos de $t^* = 0,0006$, $t^* = 0,0018$ e $t^* = 0,003$, na escala adimensional do presente trabalho.

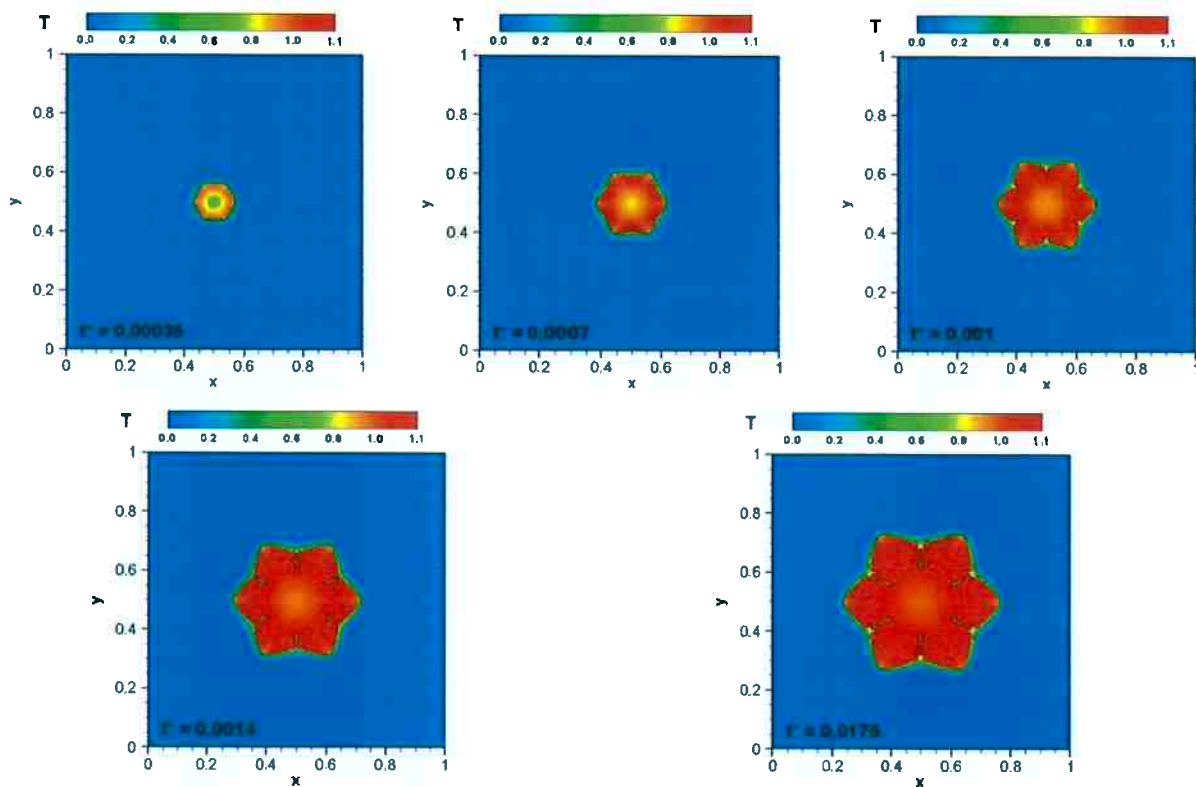


Figura 33 - Solidificação de metal a partir de semente cristalina em meio adiabático para $s = 0,04$ e $Ste = 0,83$ em $t^*=0,00035$, $t^*=0,0007$, $t^*=0,001$, $t^*=0,0014$ e $t^*=0,00175$.

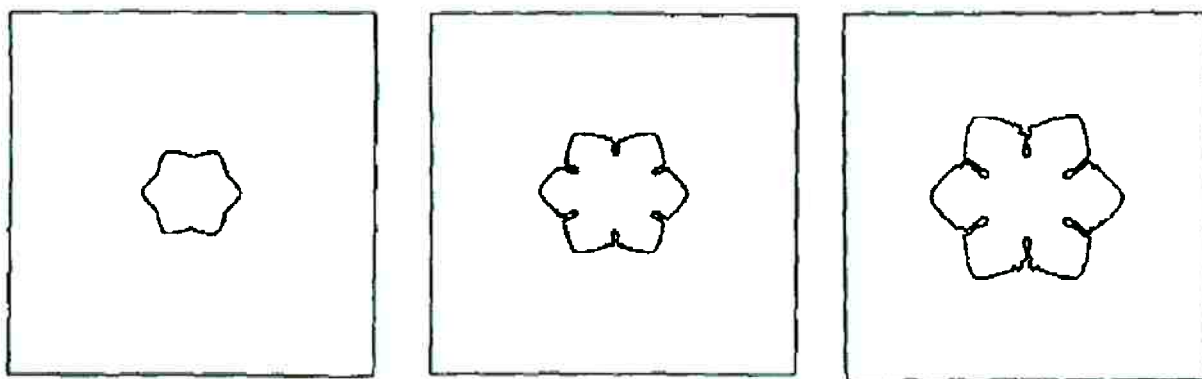


Figura 34 – Resultado de simulação em solidificação de metal a partir de semente cristalina em meio adiabático para $s = 0,04$ e $Ste = 0,83$ de Kobayashi [4], para os tempos de $t^* = 0,001$, $t^* = 0,0015$ e $t^* = 0,002$, na escala adimensional do presente trabalho.

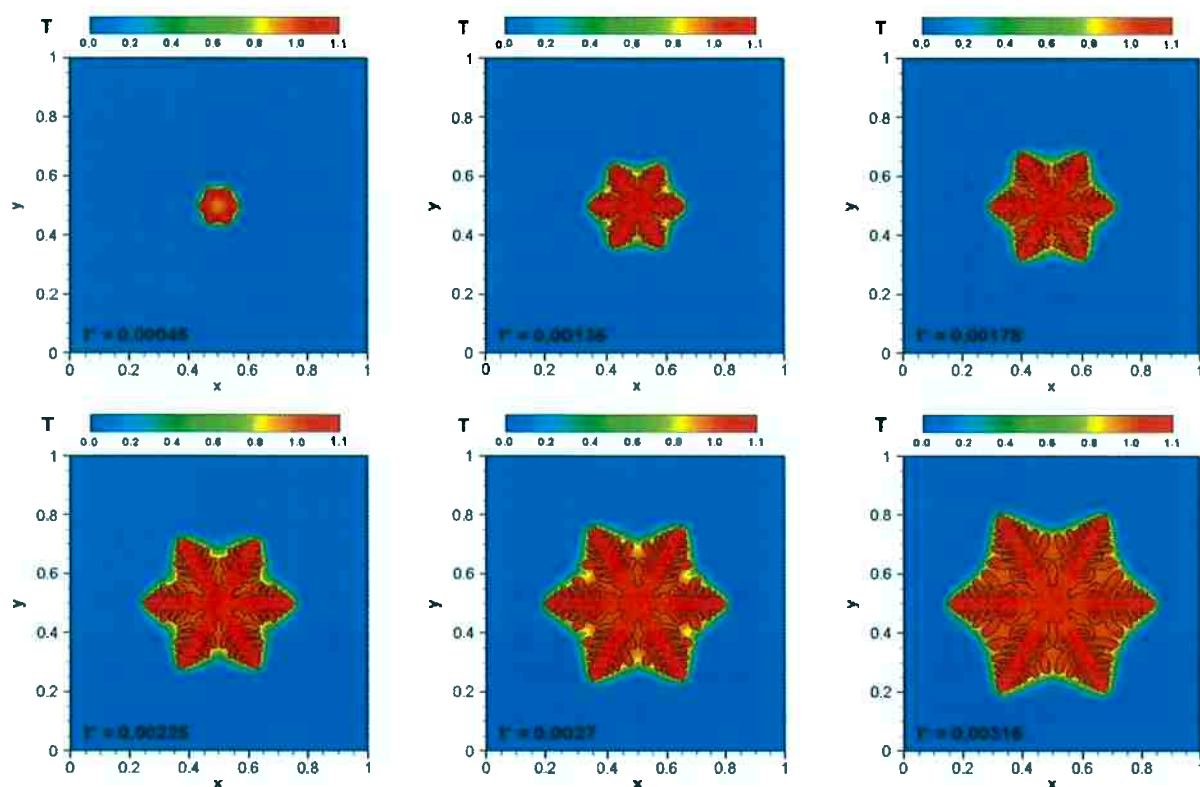


Figura 35 - Solidificação de metal a partir de semente cristalina em meio adiabático para $s = 0,04$ e $Ste = 0,625$ em $t^*=0,00045$, $t^*=0,00135$, $t^*=0,00178$, $t^*=0,00225$, $t^*=0,0027$ e $t^*=0,00315$.

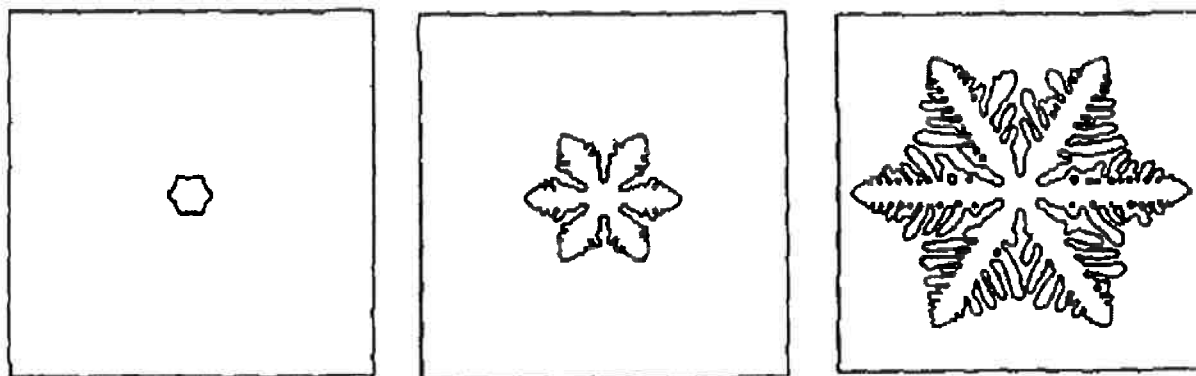


Figura 36 – Resultado de simulação em solidificação de metal a partir de semente cristalina em meio adiabático para $s = 0,04$ e $Ste = 0,625$ de Kobayashi [4], para os tempos de $t^* = 0,0005$, $t^* = 0,002$ e $t^* = 0,0044$, na escala adimensional do presente trabalho.

Pode-se observar que a introdução de uma anisotropia resultou, para o caso $Ste = 1$, em um crescimento anisotrópico, preferencial nas direções de menor energia interfacial. No entanto, ainda não se observam ramificações dendríticas, que começam a aparecer com a diminuição do número de Stefan, ou seja, com o aumento do calor latente liberado durante a solidificação. Este comportamento está consistente com o fato de que uma maior liberação de calor latente exige uma maior ramificação do sólido para poder conduzir este calor para fora do sistema e assim permitir a solidificação. Uma estrutura ramificada possui uma maior quantidade de superfície específica, que resulta em uma maior capacidade de trocar calor com o líquido, e cresce mais rapidamente que uma estrutura menos ramificada.

Com os dados obtidos na simulação é possível plotar a temperatura e a variável de fase ao longo de uma linha horizontal através da metade do domínio, ou seja, $y^* = 0,5$. O caso escolhido foi o de $s = 0,04$ e $Ste = 0,625$ para diversos tempos crescentes, mostrando a evolução da estrutura na Figura 37 e na Figura 38. A Figura 39 apresenta os perfis para um tempo mais avançado, a saber, $t^*=0,00314$.

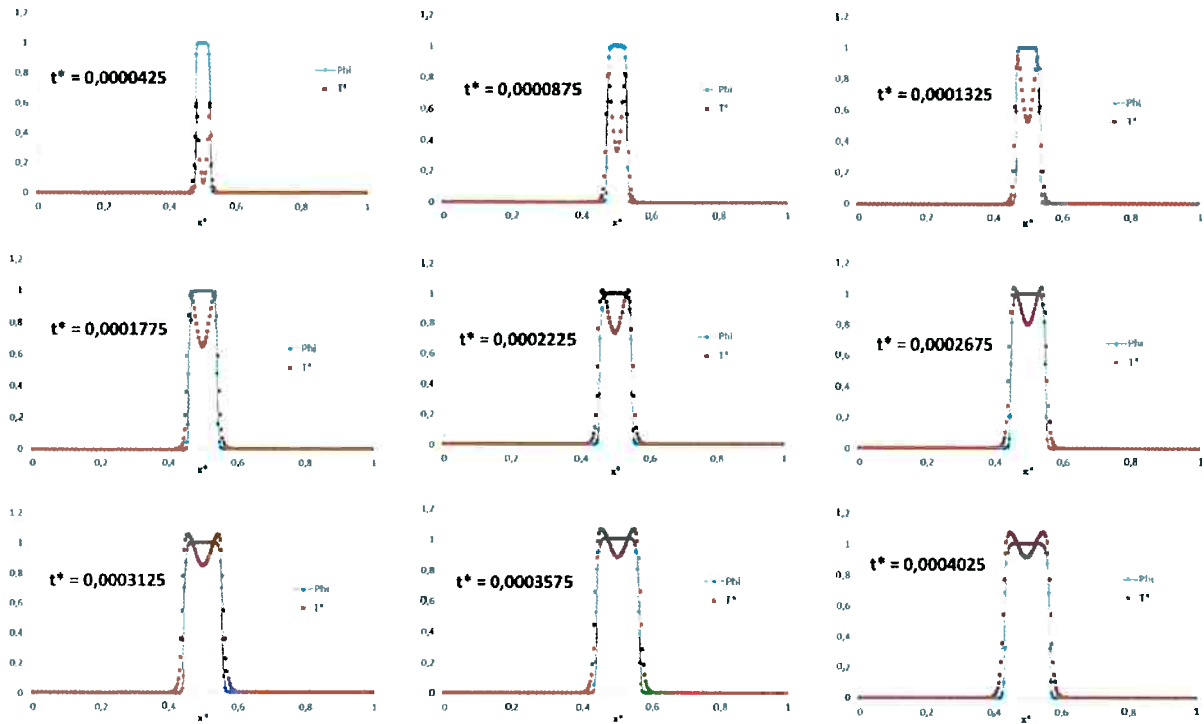


Figura 37 – Corte para $y^*=0,5$ para diversos tempos da solidificação de dendrita com $s = 0,04$ e $Ste = 0,625$.

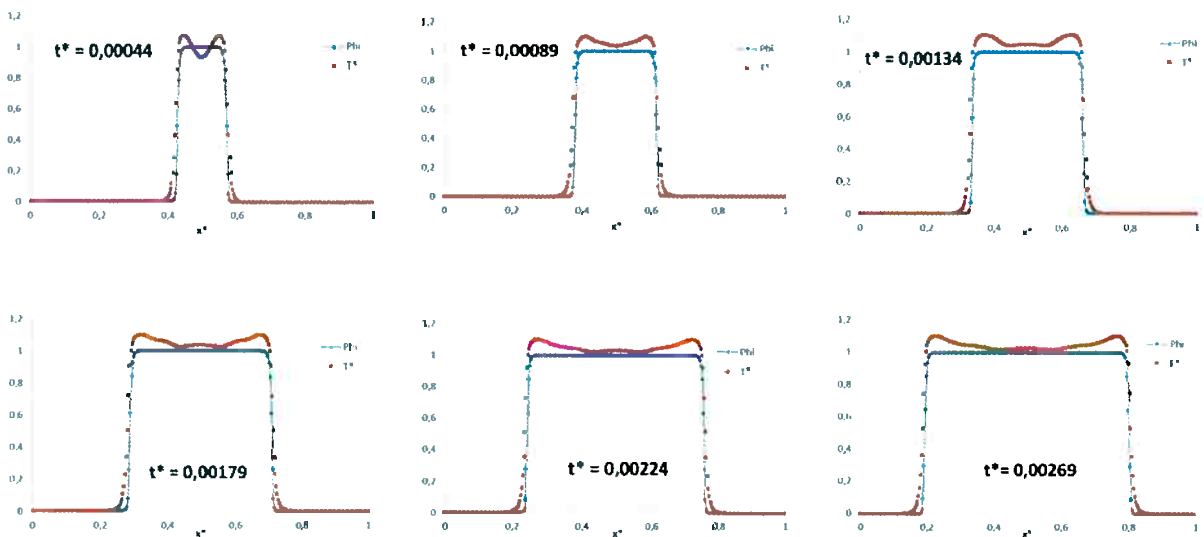


Figura 38 – Corte para $y^*=0,5$ para diversos tempos da solidificação de dendrita com $s = 0,04$ e $Ste = 0,625$.

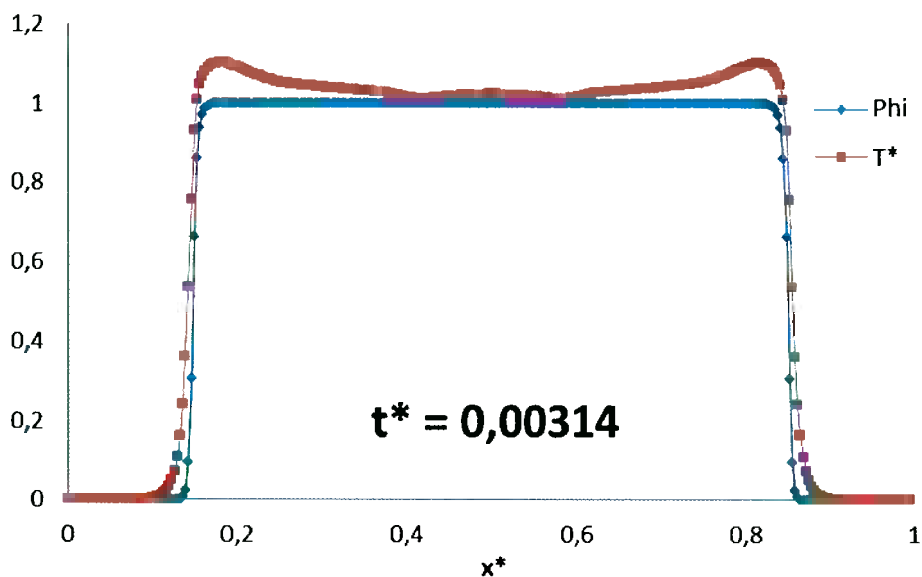


Figura 39 - Corte para $y^*=0,5$ para $t^*=0,00314$ da solidificação de dendrita com $s = 0,04$ e $Ste = 0,625$.

Nota-se que o sólido fica superaquecido na região central, apesar da temperatura na interface, na posição da ponta dendrítica permanecer super-resfriada. O fenômeno parece ocorrer devido à liberação de calor latente durante solidificação, resultando em um aquecimento da ponta e uma condução tanto para o líquido como para o interior do sólido, como observado na Figura 37. Nos modelos clássicos de condução de calor na ponta, sempre se assume que o sólido está mantido completamente na temperatura da interface, impossibilitando o mecanismo de dendritas para o caso isotrópico. As simulações apresentadas mostram que na verdade algum calor é conduzido para o interior do sólido, elevando a sua temperatura acima da temperatura da interface e acima da temperatura de fusão, o que deveria causar a refusão do sólido (resultados para sem anisotropia), esta não ocorre devido à anisotropia na energia de interface. No entanto, como observável na Figura 35, esse acúmulo de energia resulta em um mecanismo de degeneração pelo transporte de calor que refundirá alguns braços de dendrita no ponto de contato entre os braços, que são regiões onde o transporte de calor para o líquido é prejudicado devido à menor superfície específica.

Um novo caso de solidificação equiaxial foi simulado. Agora, o núcleo sólido foi posicionado na parede do domínio, como descrito pelas equações (59) e equação (60). Adotou-se $Ste = 0,5$ e $\vartheta = 4$ para diversos tempos e diversas forças de anisotropia (s), como demonstrado na Figura 40, Figura 41, Figura 42 e Figura 43. Nota-se que para o caso sem anisotropia, onde $s = 0$ (Figura 40) as ramificações

dendríticas apareceram. Quando se compara com a Figura 31, conclui-se que o número de Ste menor (aumentando o calor latente liberado durante a solidificação) adotado na Figura 40 deve ter causado o aparecimento das ramificações. O aumento da força de anisotropia introduzido nas simulações apresentadas na Figura 41, Figura 42 e Figura 43, mostra que as ramificações passam a ocorrer nas direções de menor energia interfacial, como observado em experimentos de crescimento dendrítico.

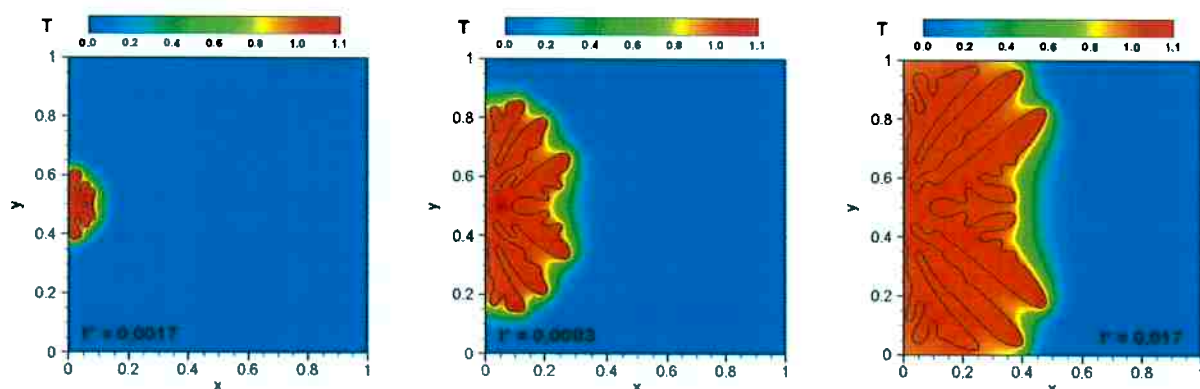


Figura 40 - Solidificação de metal a partir de semente na parede do domínio em meio adiabático para $s = 0$ em $t^*=0,0017$, $t^*=0,0083$ e $t^*=0,017$.

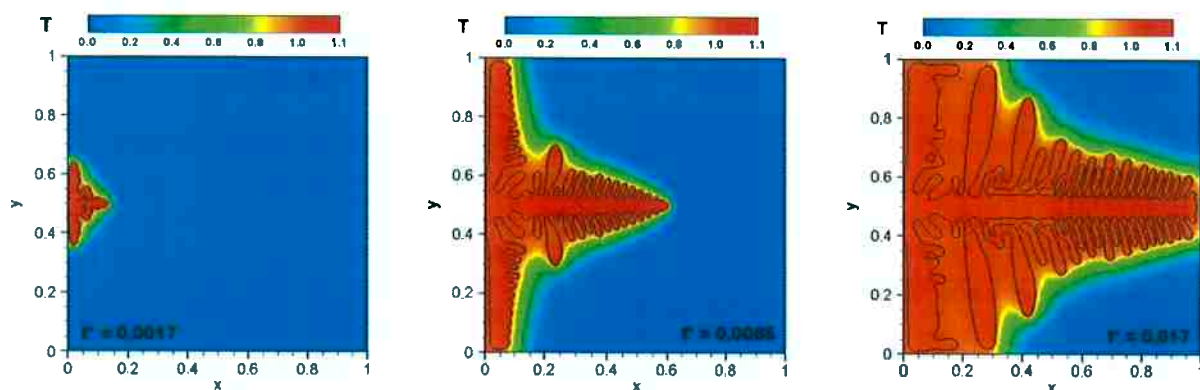


Figura 41 - Solidificação de metal a partir de semente na parede do domínio em meio adiabático para $s = 0,02$ em $t^*=0,0017$, $t^*=0,0083$ e $t^*=0,017$.

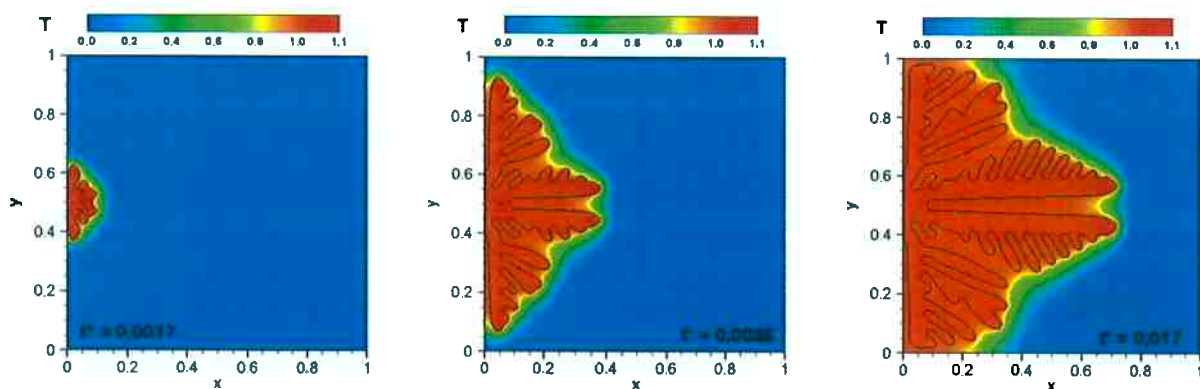


Figura 42 - Solidificação de metal a partir de semente na parede do domínio em meio adiabático para $s = 0,005$ em $t^*=0,0017$, $t^*=0,0083$ e $t^*=0,017$.

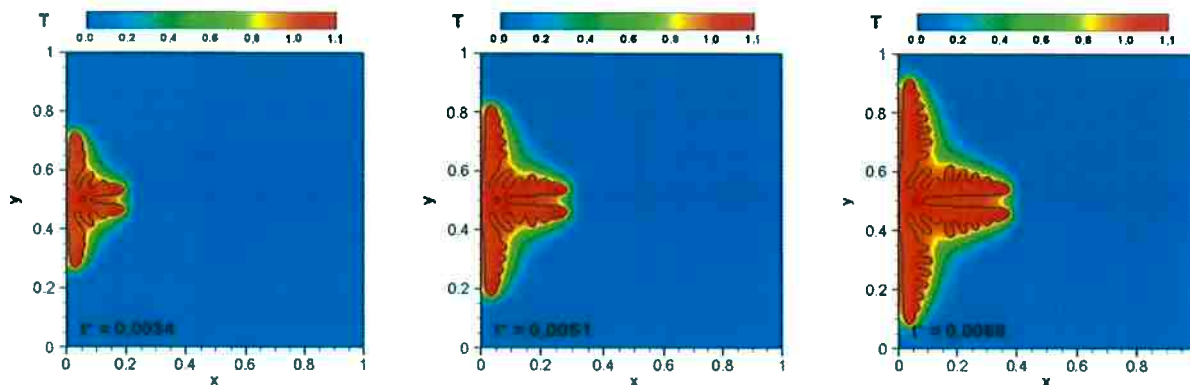


Figura 43 - Solidificação de metal a partir de semente na parede do domínio em meio adiabático para $s = 0,01$ em $t^* = 0,0034$, $t^* = 0,0051$ e $t^* = 0,0068$.

4.1.6 Solidificação de Metal Puro Anisotrópico em um Domínio Tridimensional

O caso do item anterior envolvendo a solidificação típica equiaxial foi simulada novamente neste item, porém em três dimensões. Neste caso, a equação (62) foi discretizada por diferenças finitas de modo implícito e a equação (63) foi discretizada pelo método dos volumes finitos. As equações foram resolvidas numericamente usando o método de Gauss-Seidel com tolerância para o erro de convergência de 10^{-6} , com uma malha quadrada de $100 \times 100 \times 100$ nós, domínio adimensional de comprimento 1 e um passo de tempo de $2,5 \times 10^{-6}$. 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 0 e diversos números de Stefan, podemos estudar o efeito exclusivo do transporte de calor. A Figura 44, Figura 45, Figura 46, Figura 47 e Figura 48 obtidas como resultado das simulações mostram que, desde o início, o crescimento da interface é morfologicamente instável, para o caso de crescimento equiaxial, e que ao alterarmos o número de Stefan alteramos a velocidade de solidificação e de crescimento das protuberâncias, o que afeta diretamente o formato do grão. Quanto maior o número de Stefan, menor o calor latente, logo maior a velocidade de solidificação, a fração volumétrica solidificada pelo tempo, porém, devido ao menor gradiente de temperatura na ponta da dendrita, menor a velocidade de crescimento das protuberâncias em relação à velocidade de solidificação, deixando a protuberância mais grossa. Os gradientes de temperatura podem ser observados para um corte em $x^* = 0,5$, na Figura 49, Figura

50, Figura 51, Figura 52 e Figura 53, onde as diagonais do domínio cúbico representam as direções de maior transferência de calor, como resultado ocorre maior gradiente de temperatura nessas direções, favorecendo o crescimento das protuberâncias em uma morfologia cúbica.

Variando a força de anisotropia para 0,05 e 0,1 estudamos o comportamento morfológico, além da observação do fenômeno térmico. Os resultados observados na Figura 54, Figura 55, Figura 56, Figura 57, Figura 58, Figura 59, Figura 60, Figura 61 e Figura 62 nos apontam que a anisotropia compete com o fenômeno térmico, isso se dá devido à forma como o domínio foi montado. A anisotropia aplicada favorece, matematicamente, o crescimento do grão na direção dos eixos do sistema de coordenadas adotado, enquanto a transferência de calor favorece, fenomenologicamente, o crescimento do grão nas direções diagonais, devido à maior transferência de calor. Esse fato não permitiu a observação de uma dendrita bem formada, mas nos permite estudar uma situação particular do crescimento de um grão orientado de maneira não favorável termicamente.

Os resultados apontam que, para esse caso em especial, uma maior força de anisotropia resulta em uma diminuição significativa na velocidade de solidificação, devido à forte inibição do fenômeno térmico. No entanto uma força de anisotropia moderada, apenas induz o crescimento em direções termodinamicamente menos favoráveis e permite o crescimento nas direções diagonais, de maior energia de interface, como resultado observa-se uma dendrita com um formato muito próximo ao observado na solidificação real de um metal puro, o que nos indica que resultados mais condicentes com a realidade podem ser obtidos com outra configuração de domínio, onde o formato do domínio não influencie no crescimento do grão, como o caso de um domínio esférico, ou um domínio grande o suficiente para o formato do domínio não influenciar no resultado.

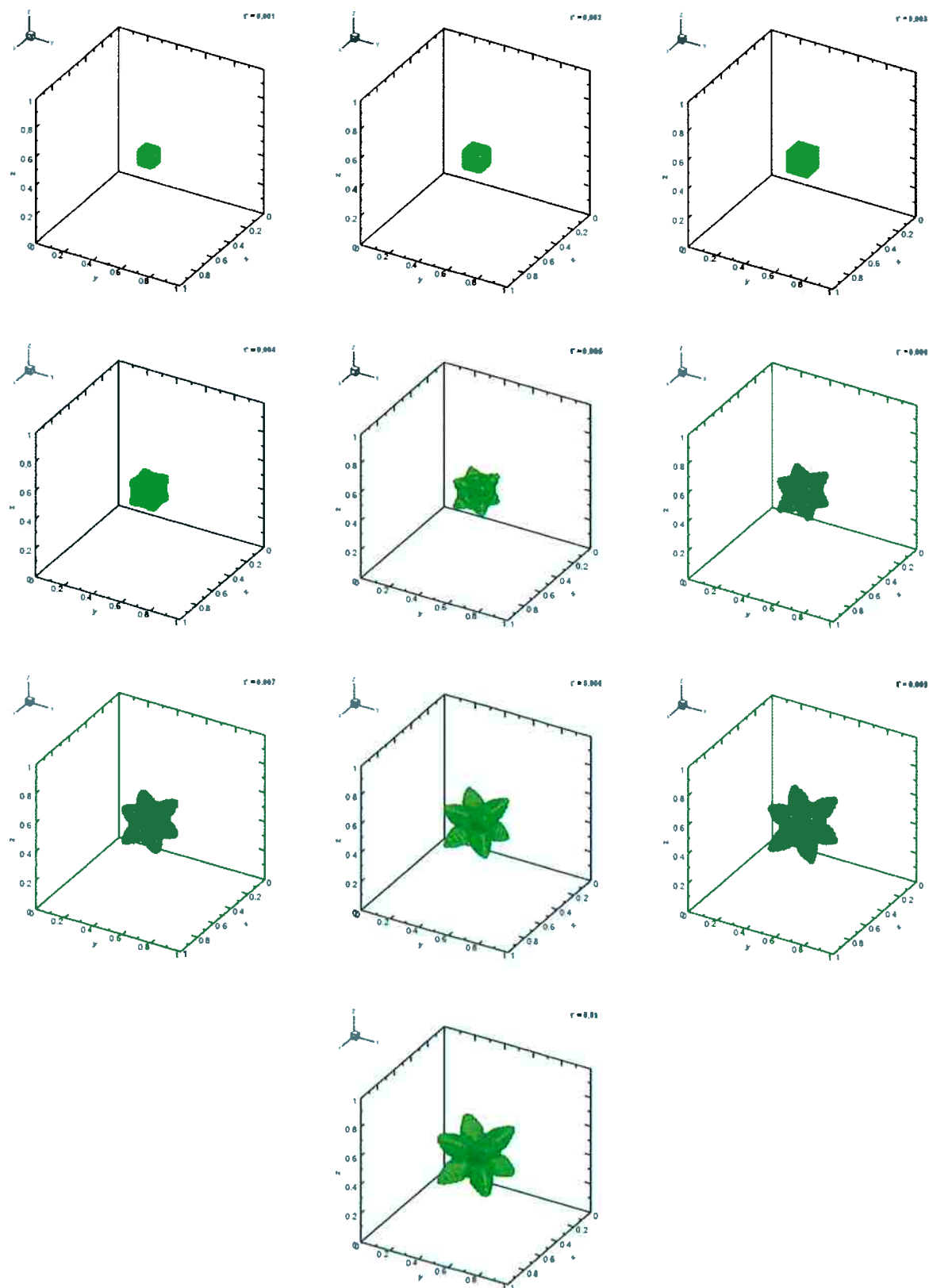


Figura 44 – Evolução da morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=0,5$ para diversos instantes de tempo.

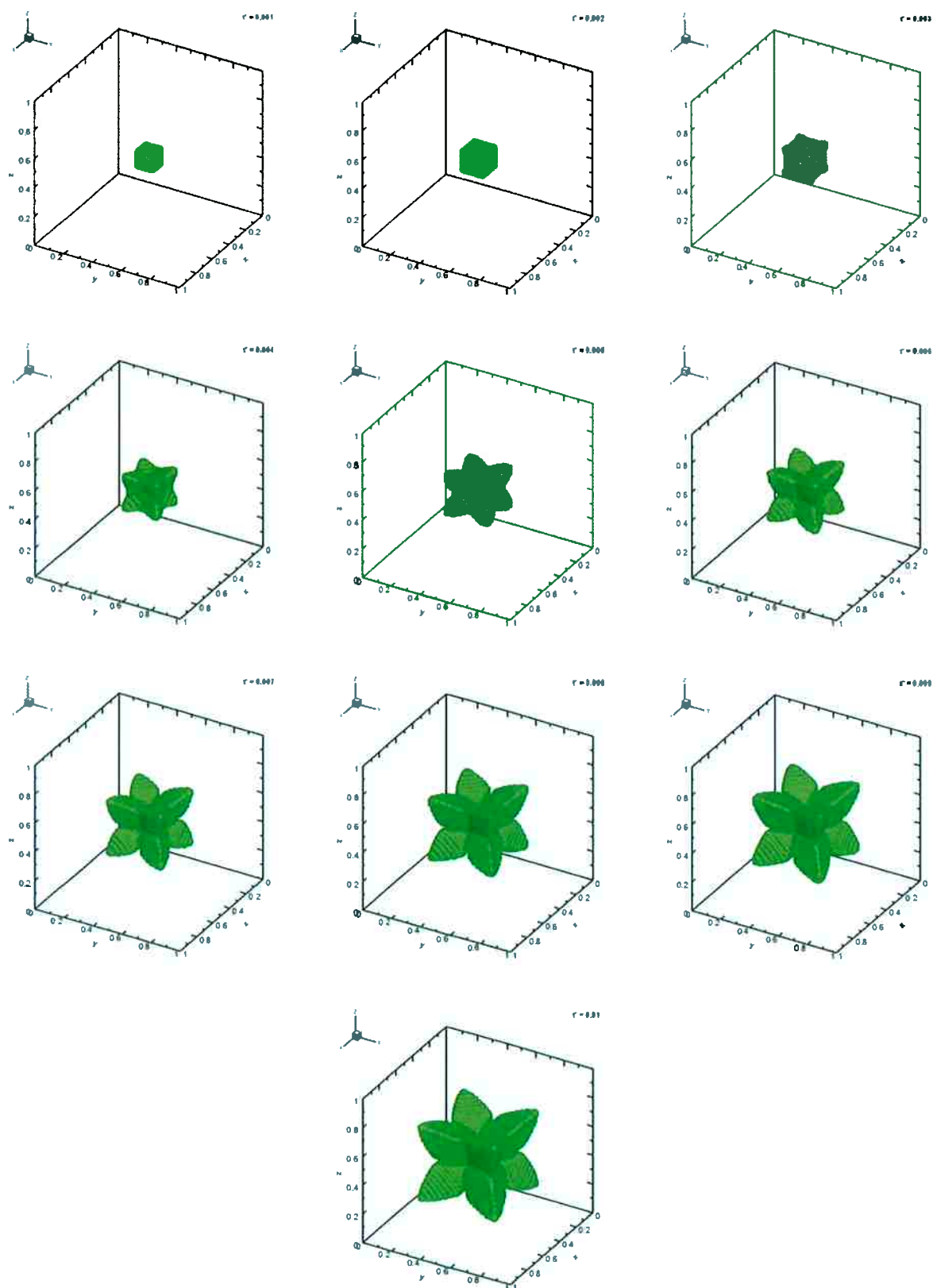


Figura 45 – Evolução da morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=0,75$ para diversos instantes de tempo.

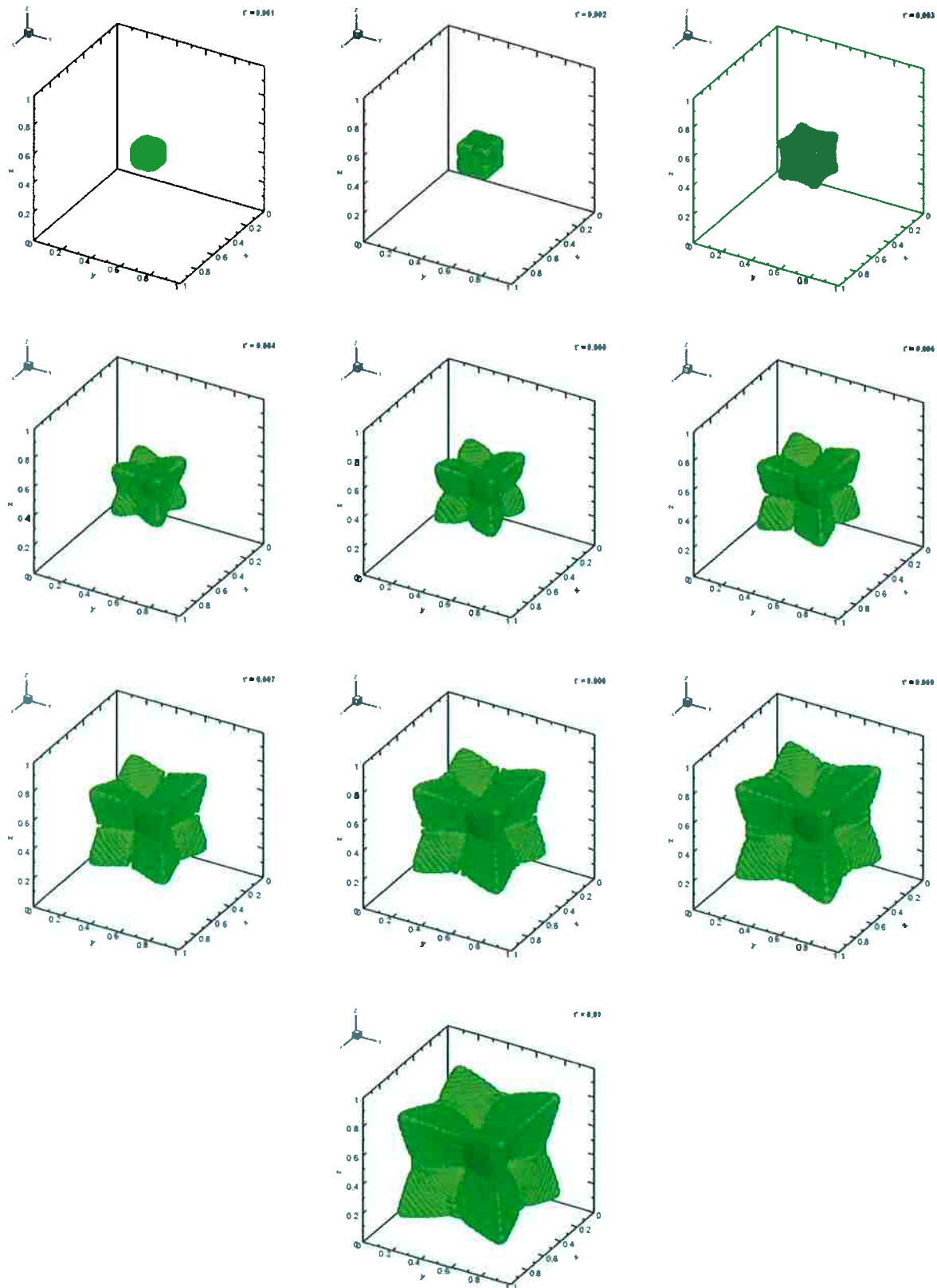


Figura 46 – Evolução da morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=1$ para diversos instantes de tempo.

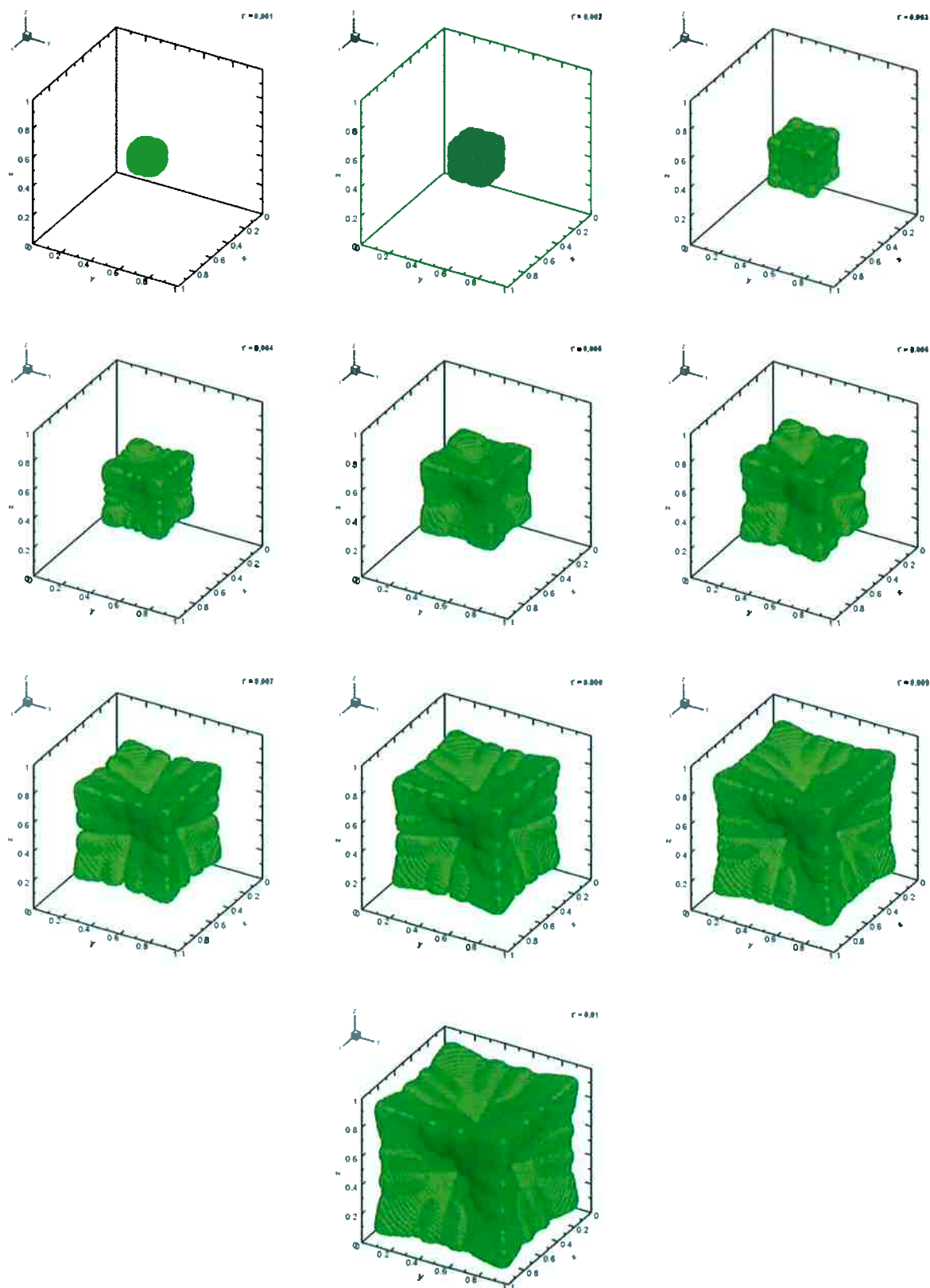


Figura 47 – Evolução da morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=1,25$ para diversos instantes de tempo.

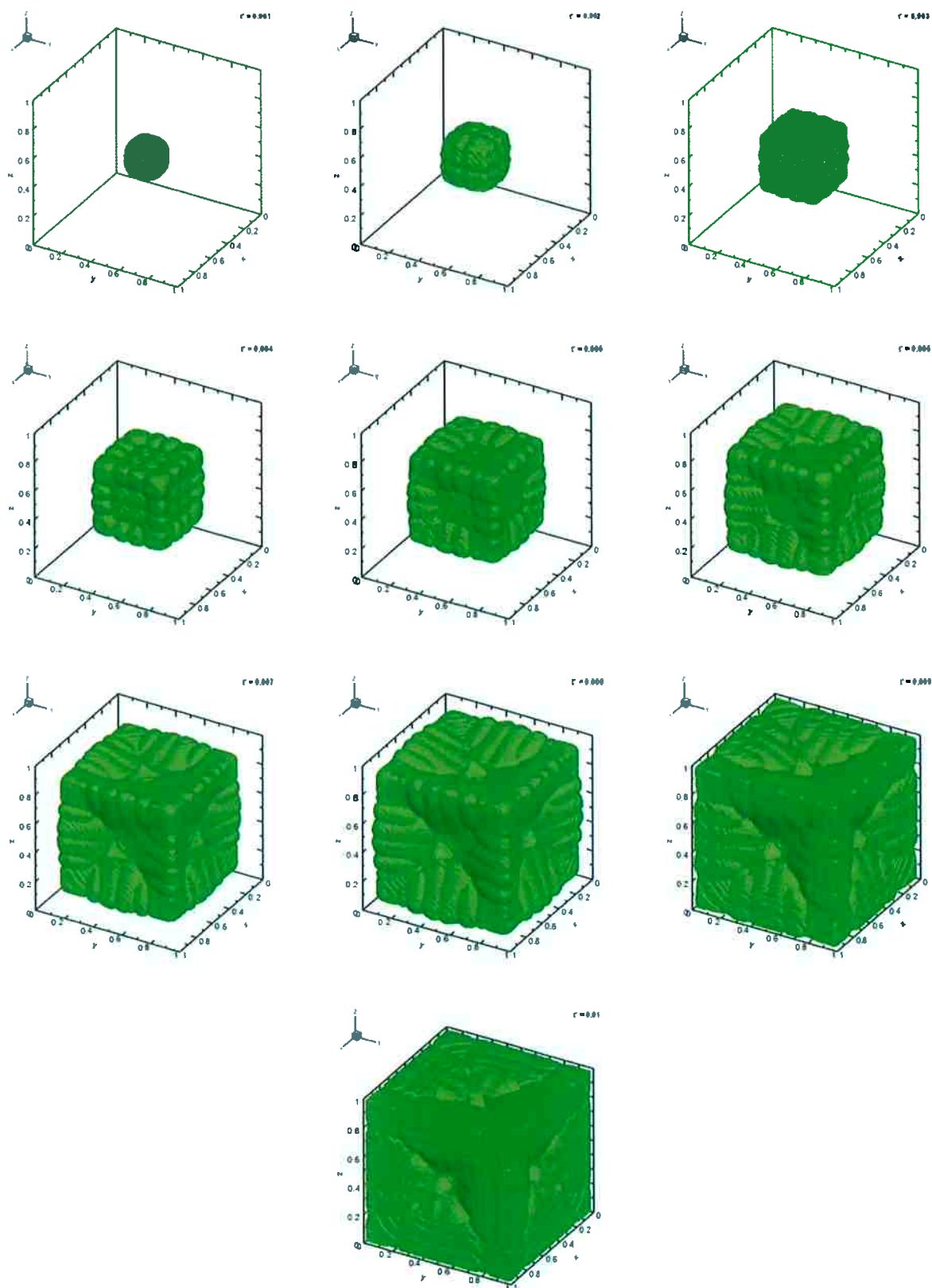


Figura 48 – Evolução da morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=1,5$ para diversos instantes de tempo.

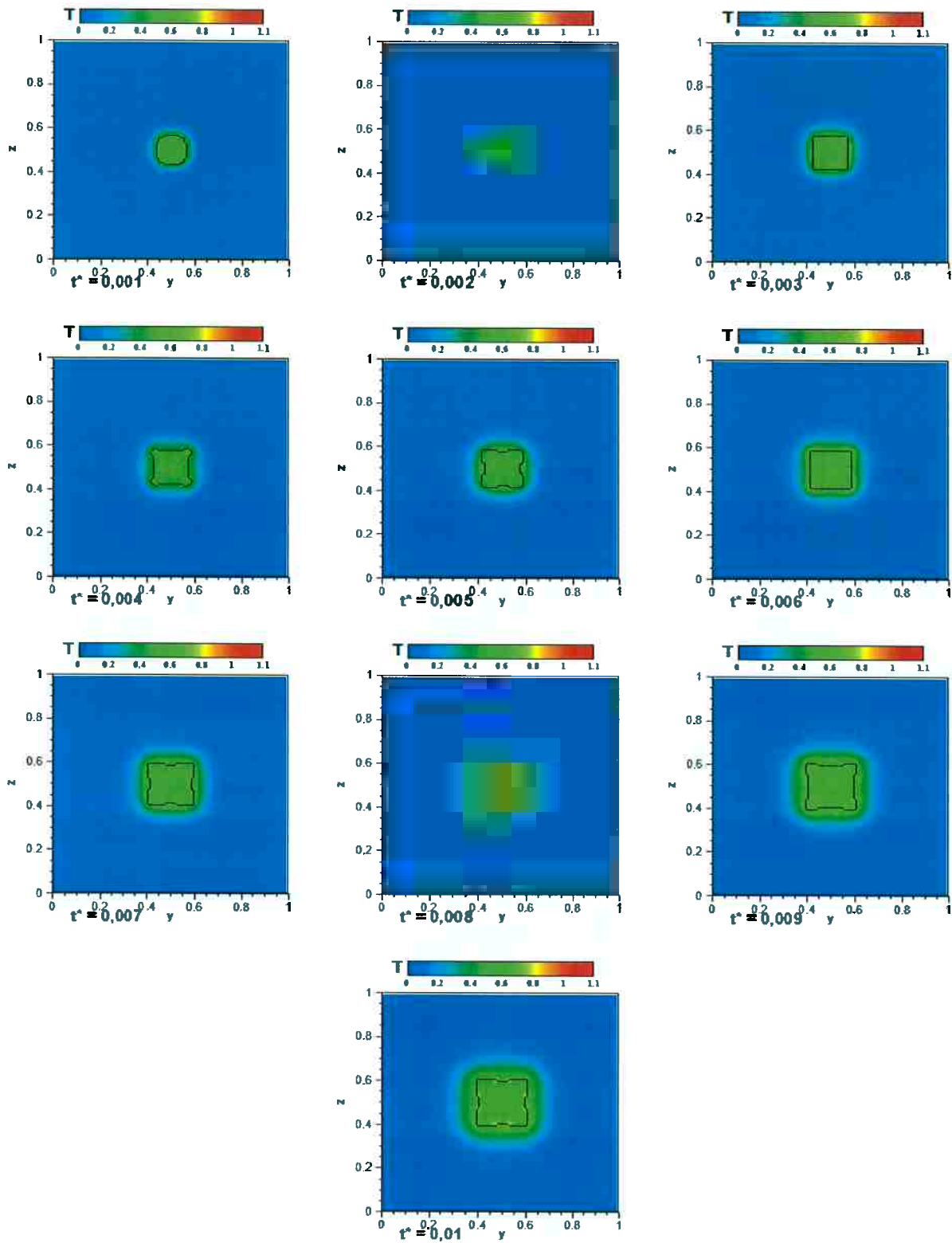


Figura 49 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=0,5$ para diversos instantes de tempo.

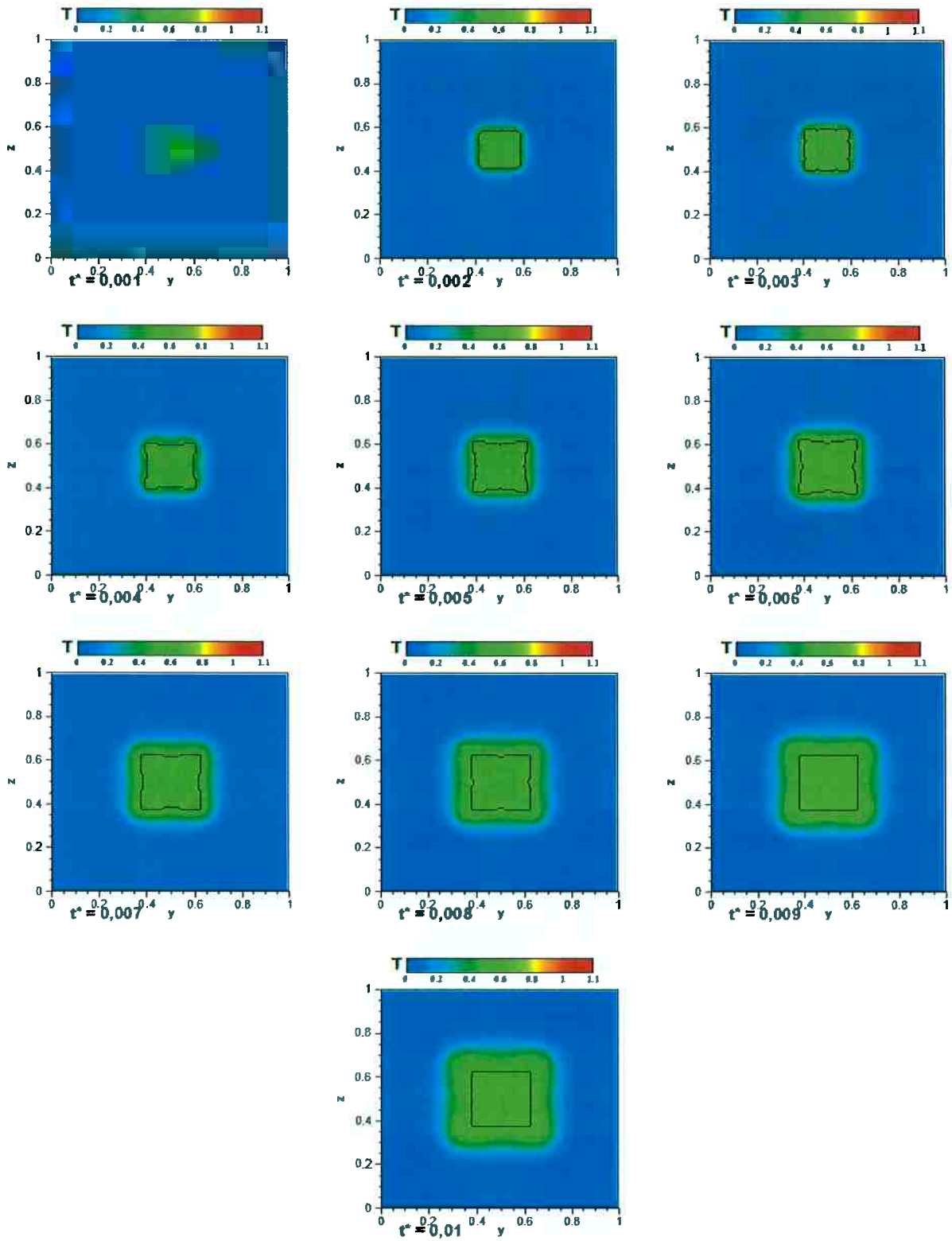


Figura 50 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=0,75$ para diversos instantes de tempo.

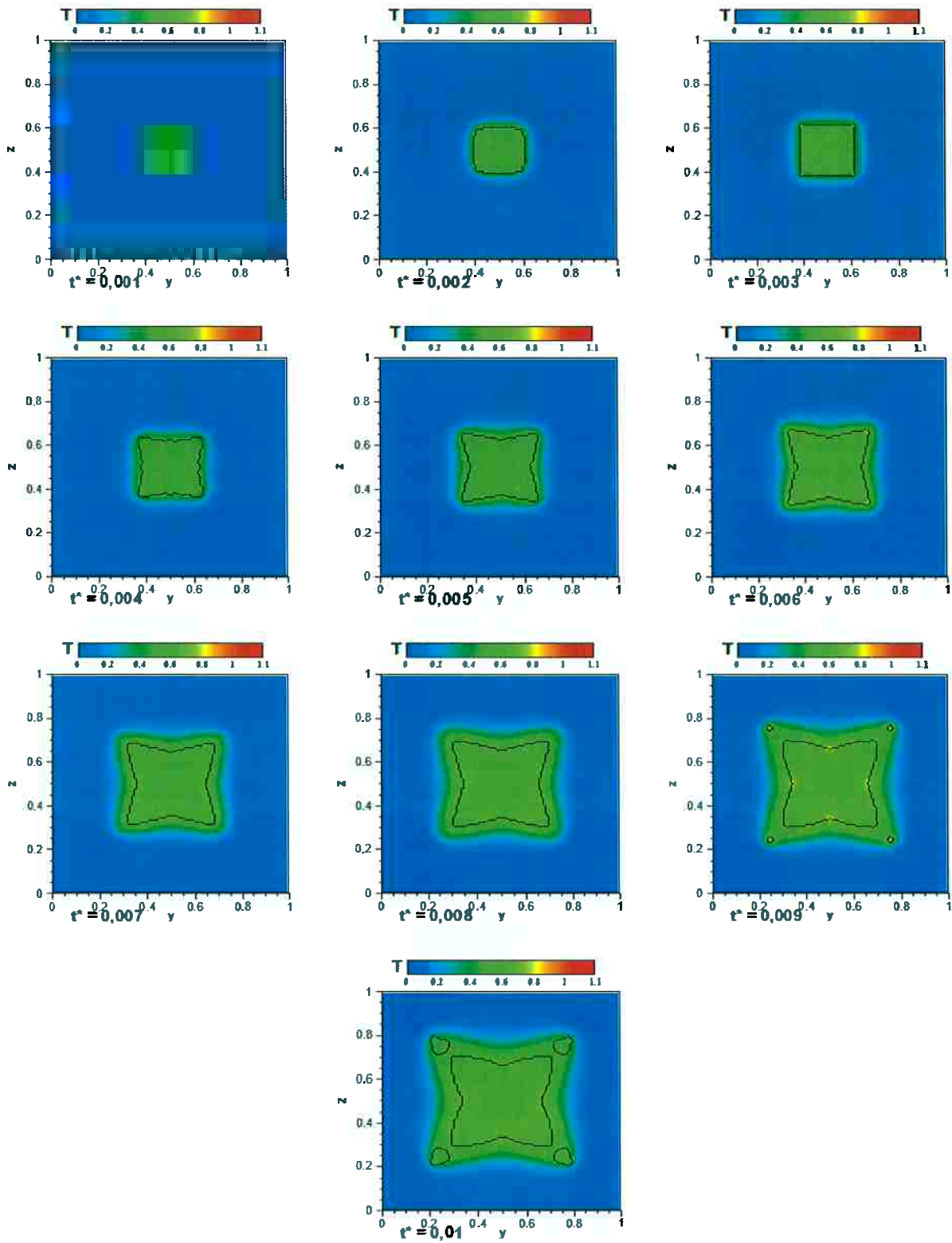


Figura 51 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=1$ para diversos instantes de tempo.

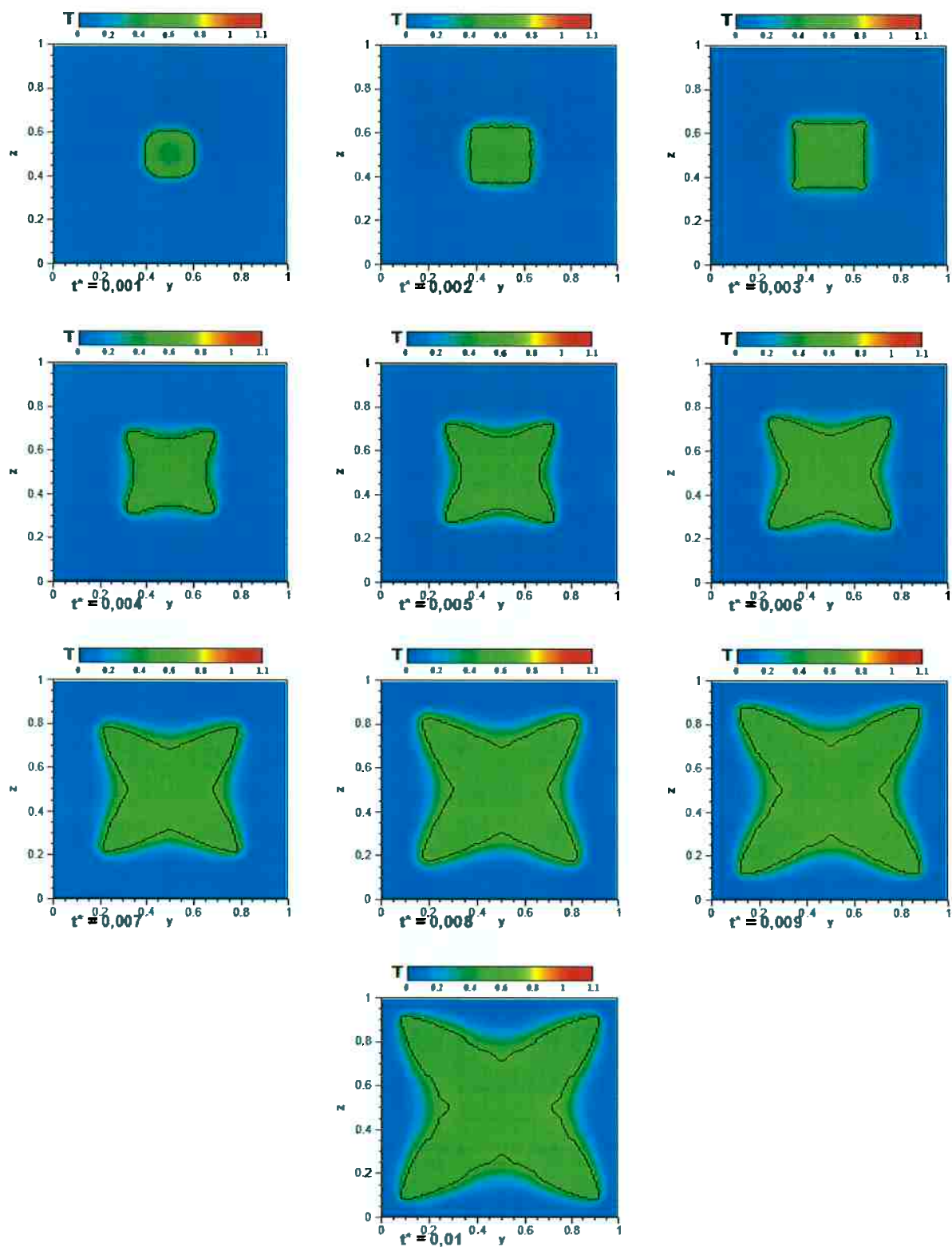


Figura 52 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=1,25$ para diversos instantes de tempo.

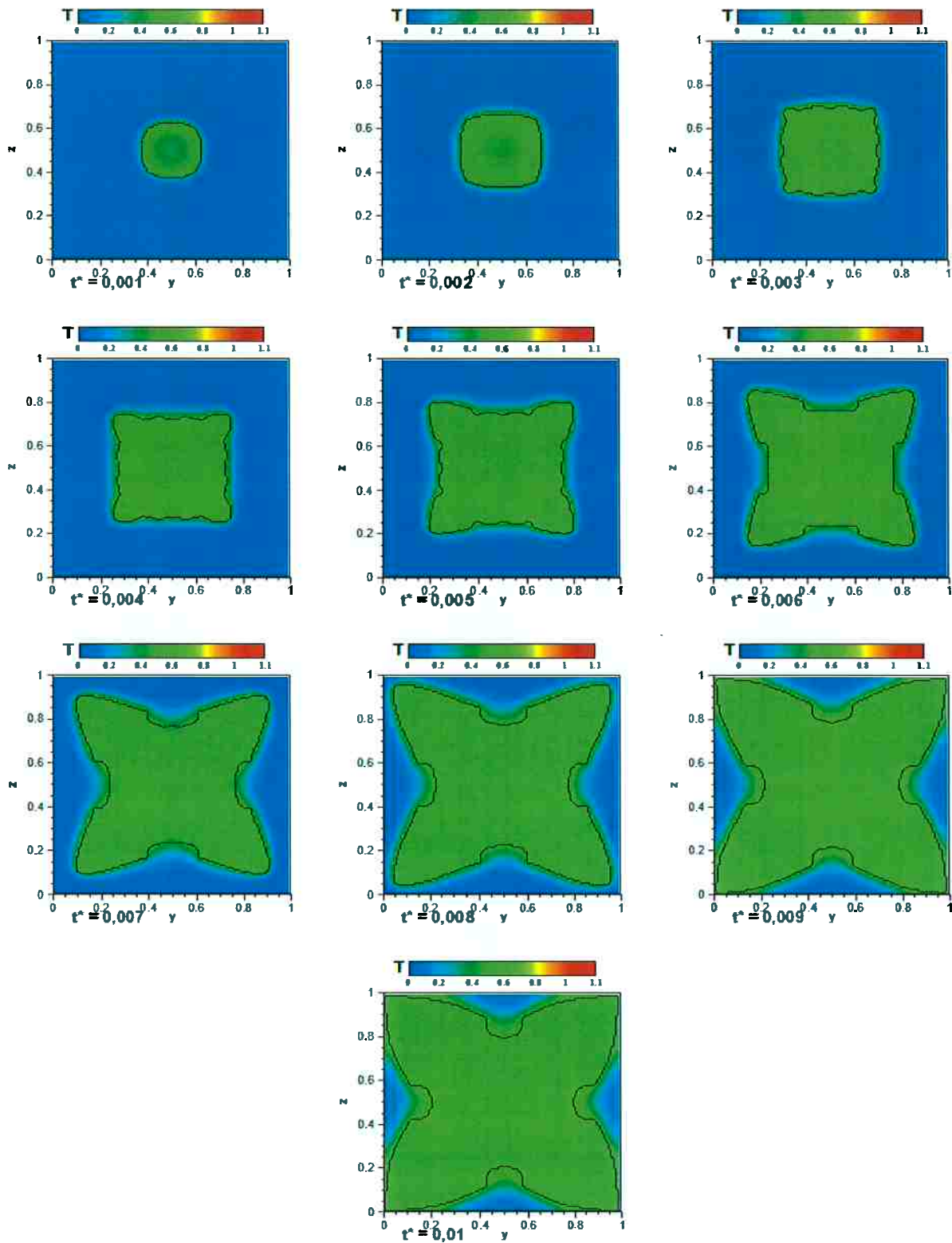


Figura 53 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia nula e $Ste=1,5$ para diversos instantes de tempo.

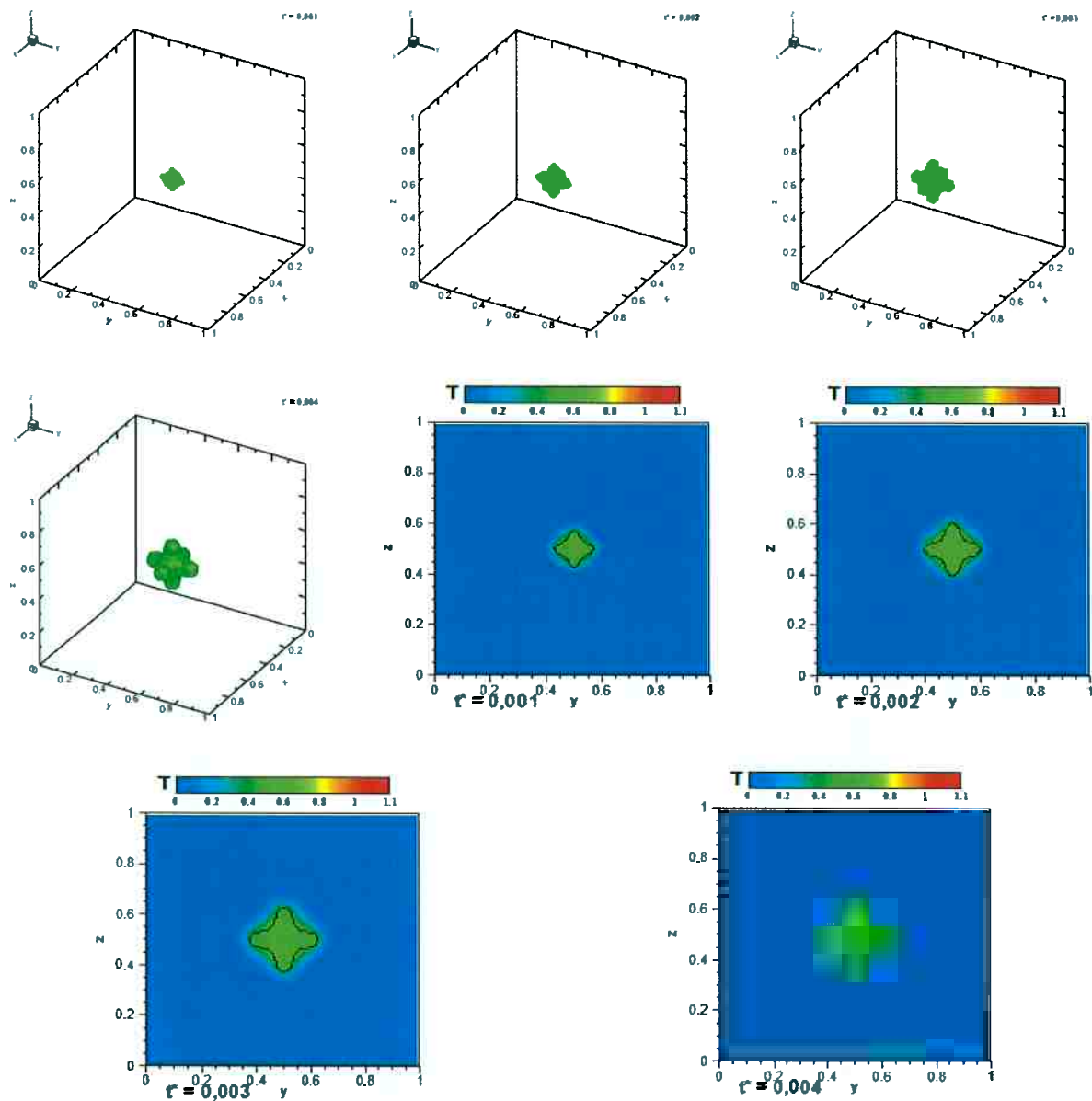


Figura 54 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ e morfologia 3D do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,05 e $Ste=0,5$ para diversos instantes de tempo.

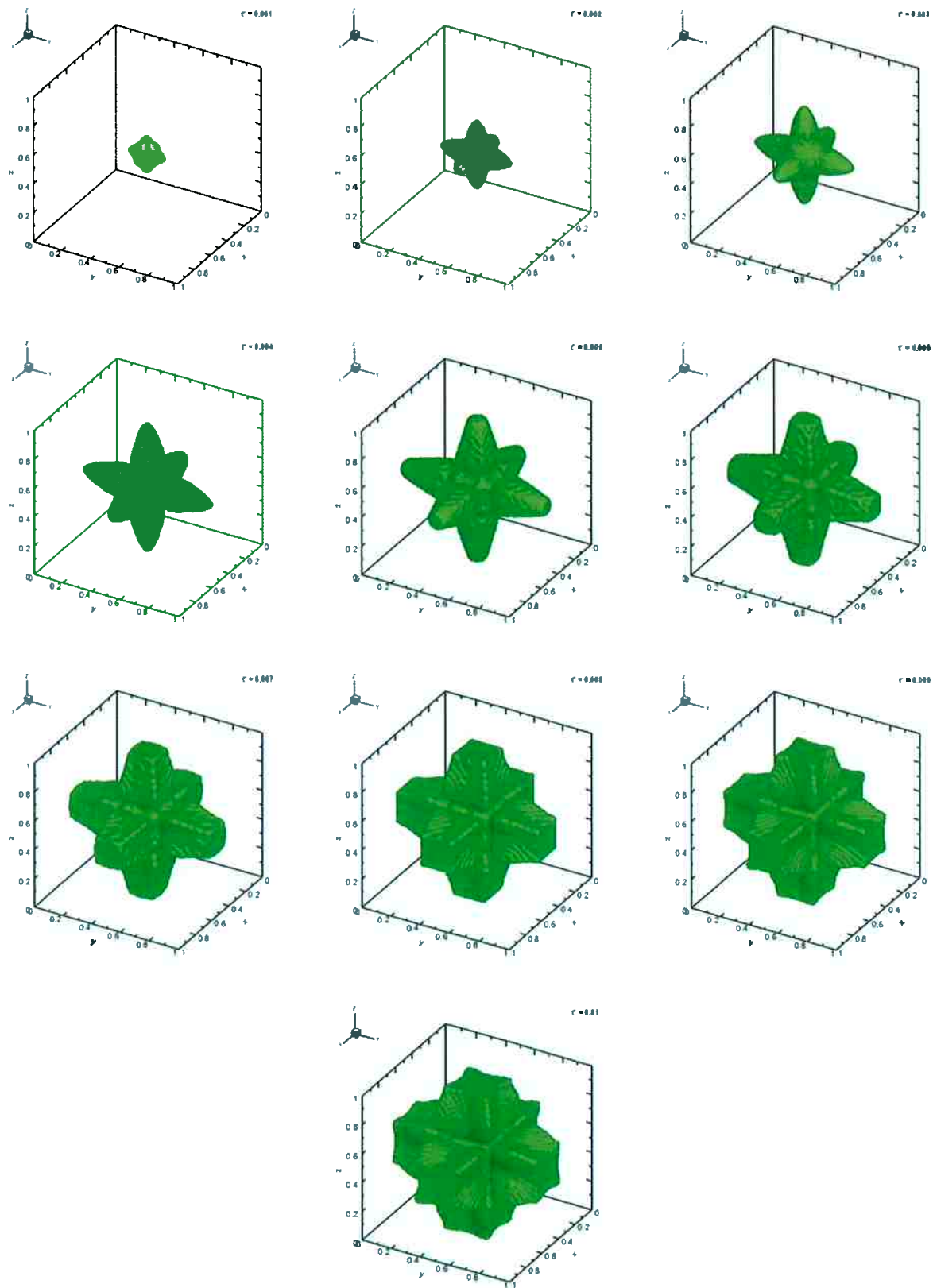


Figura 55 – Evolução da morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,05 e $Ste=1$ para diversos instantes de tempo.

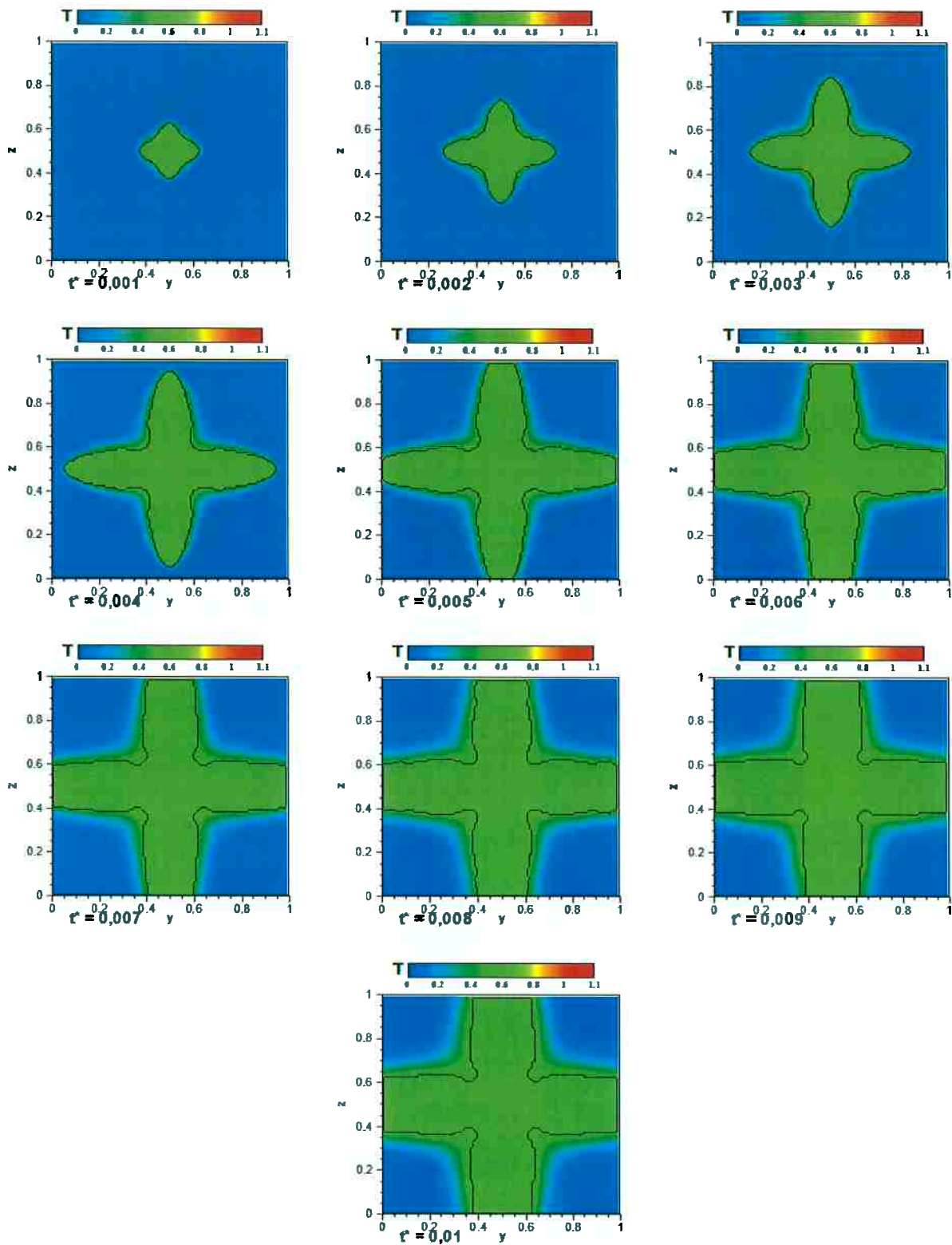


Figura 56 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,05 e $Ste=1$ para diversos instantes de tempo.

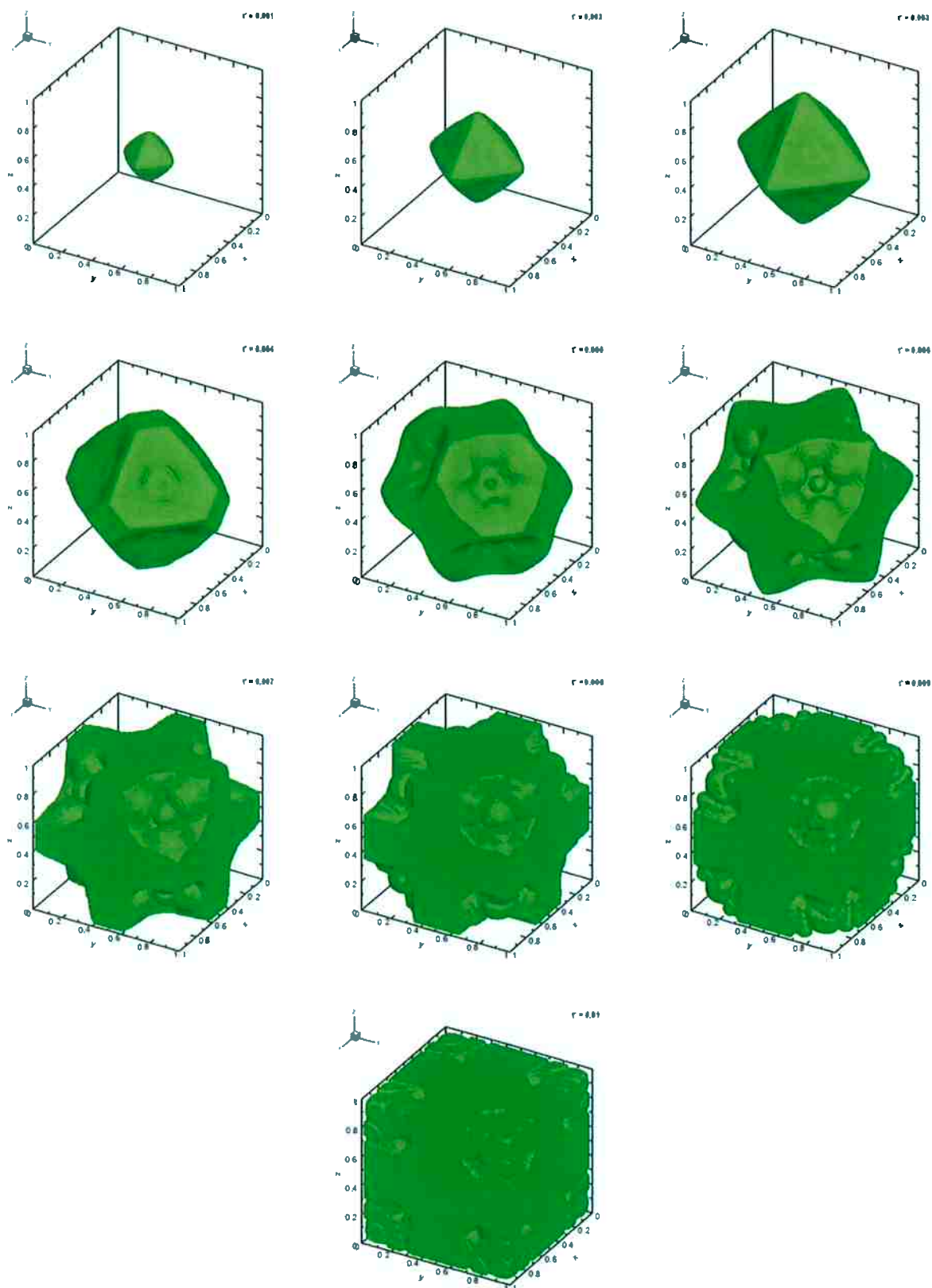


Figura 57 – Evolução da morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,05 e $Ste=1,5$ para diversos instantes de tempo.

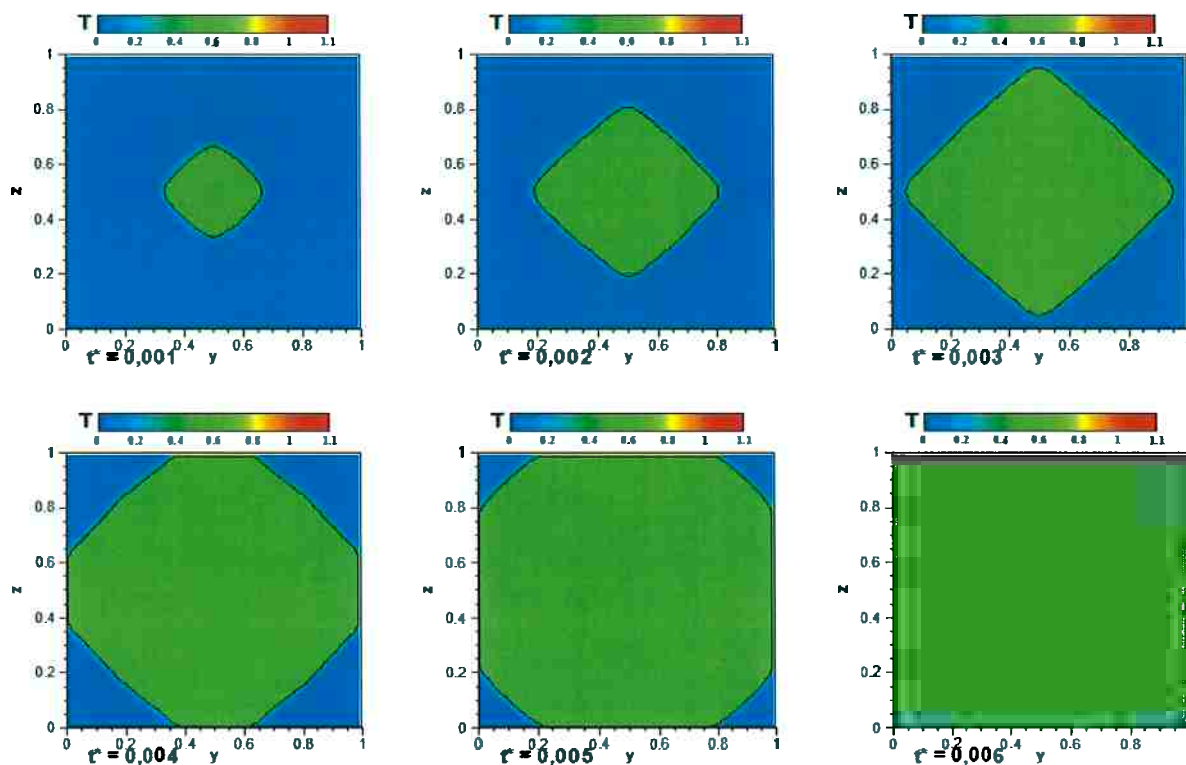


Figura 58 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,05 e $Ste=1,5$ para diversos instantes de tempo.

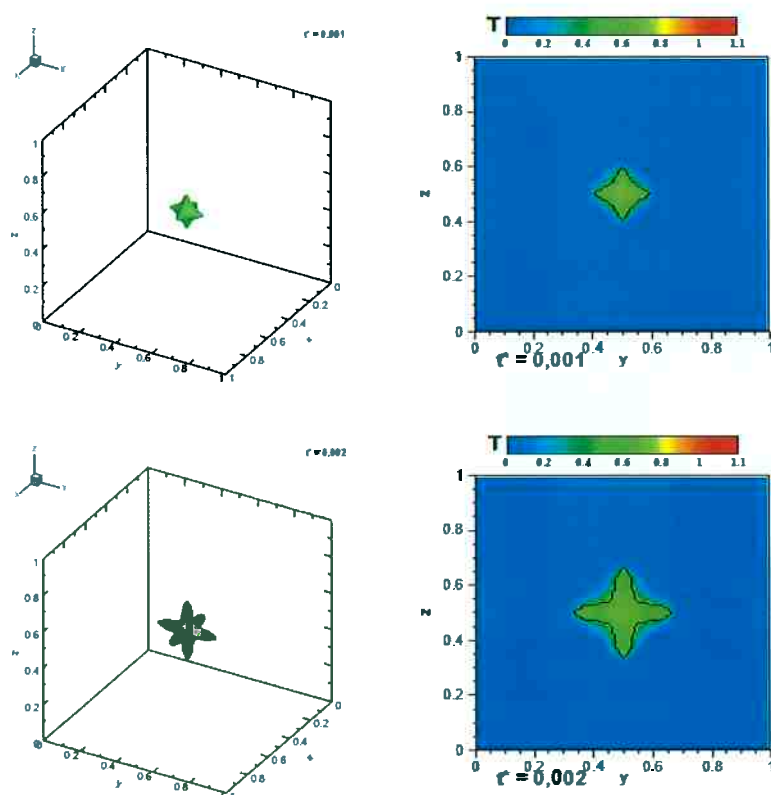


Figura 59 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ e morfologia 3D do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,1 e $Ste=0,5$ para diversos instantes de tempo.

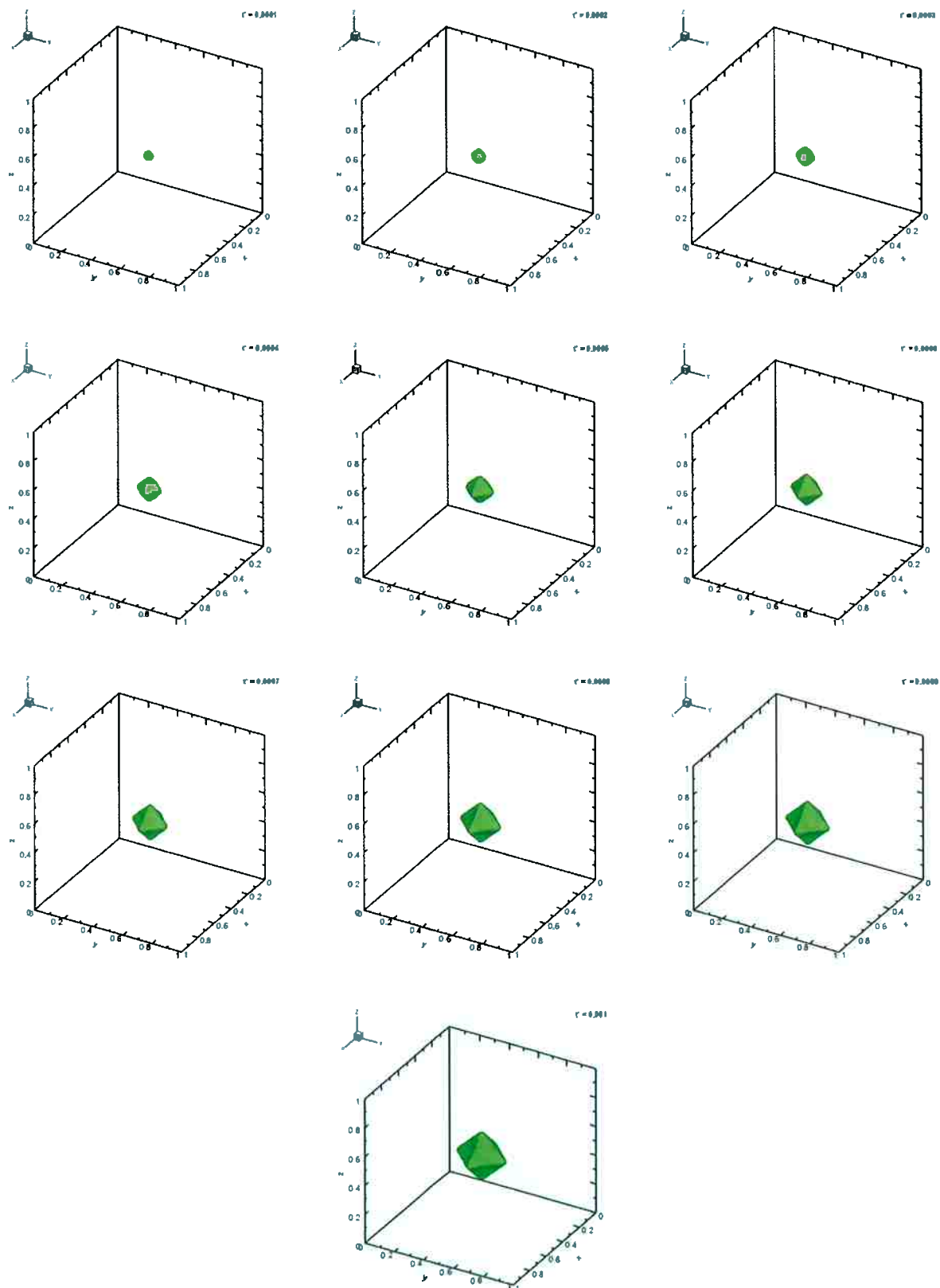


Figura 60 – Evolução da morfologia de interface 3D durante a solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,1 e $Ste=1$ para diversos instantes de tempo.

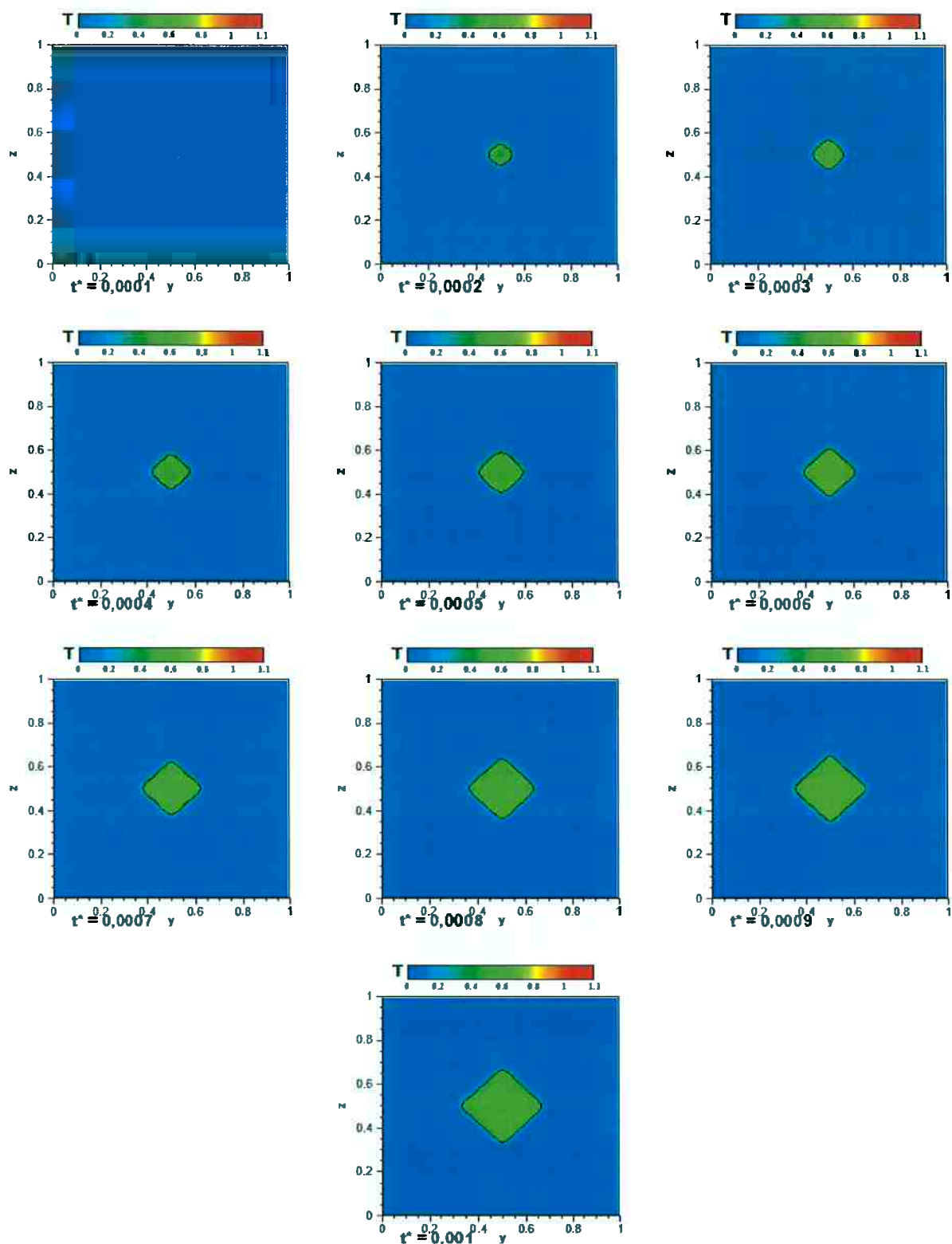


Figura 61 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,1 e $Ste=1$ para diversos instantes de tempo.

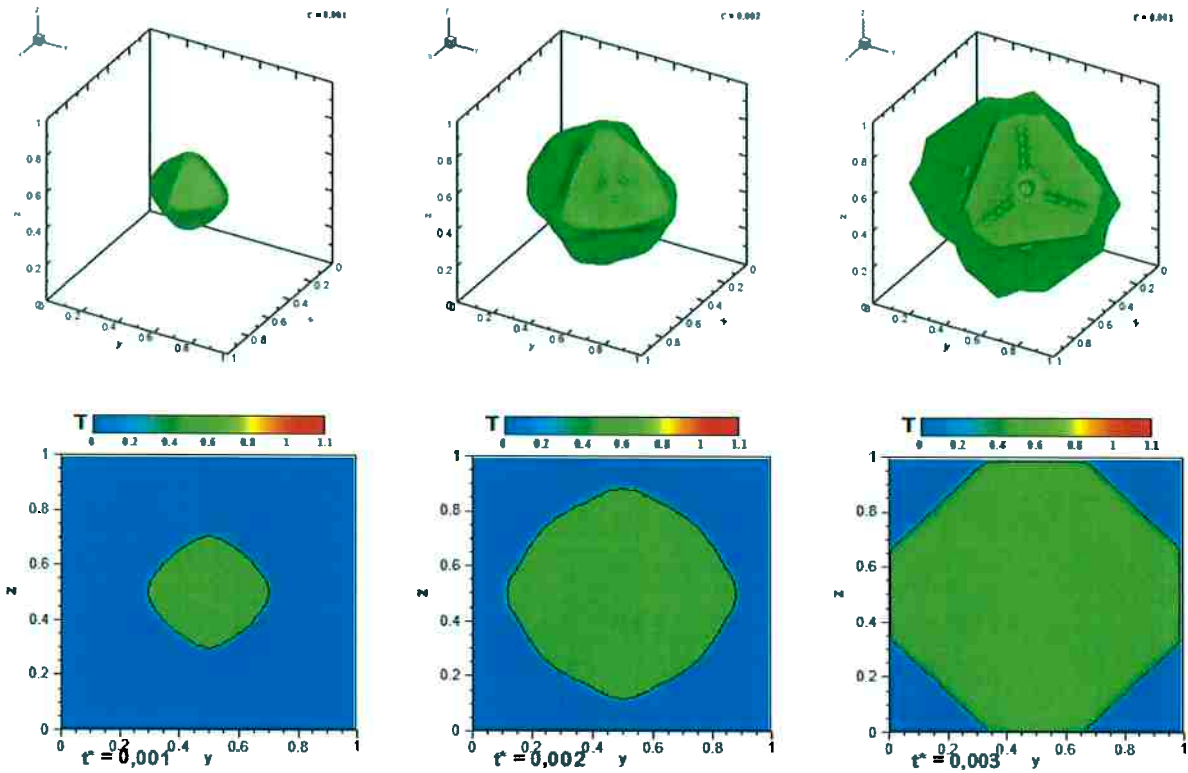


Figura 62 – Gradiente de temperatura para um corte em $x=0,5$ e morfologia 3D do resultado de simulação em solidificação de metal puro com força de anisotropia 0,1 e $Ste=1,5$ para diversos instantes de tempo.

5 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, nota-se que o crescimento colunar não evolui para o caso dendrítico, o que está em concordância com a teoria clássica do super-resfriamento constitucional. No entanto, 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 podemos concluir ao analisarmos apenas os efeitos de transporte de calor que alterando o número de Stefan alteramos 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.

6 REFERÊNCIAS

- [1] J. CAMPBELL, Castings, Elsevier Science, 2003.
- [2] H. K. D. H. BHADSHIA, "Mathematical models in materials science," *Materials Science and Technology*, vol. 24, no. 2, pp. 128-136, 2008.
- [3] D. A. KESSLER, J. KOPLIK and H. LEVINE, "Geometrical models of interface evolution. III. Theory of dendritic growth.," *Physical Review*, vol. A 31, no. 3, pp. 1712-1717, 1985.
- [4] R. KOBAYASHI, "Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth," *Physica D*, vol. 63, no. 3-4, pp. 410-423, 1993.
- [5] J. CAHN and J. HILLIARD, "Free energy of a nonuniform system .1. Interfacial free energy," *Journal of Chemical Physics*, vol. 28, no. 2, pp. 258-267, 1958.
- [6] H. EMMERICH, The diffuse interface approach in materials science – Thermodynamic concepts and applications of Phase-Field models, Springer-Verlag, 2003.
- [7] S. WANG, R. SEKERKA, A. WHEELER, B. MURRAY and S. CORIELL, "Thermodynamically-consistent phase-field models," *Physica D*, vol. 69, pp. 189-200, 1993.
- [8] Y. ZHANG, C. WANG, D. LI and Y. LI, "Phase Feld modeling of dendrite growth," *Acta Metall*, vol. 22, no. 3, pp. 197-201, 2009.
- [9] J. KAGEYAMA, Y. SASAJIMA, M. ICHIMURA and J. ONUKI, "Determination of the Phase-Field Parameters for Computer Simulation," *Materials Transactions*, vol. 48, no. 8, pp. 1998-2001, 2007.
- [10] A. F. FERREIRA, A. J. SILVA and J. A. CASTRO, "Simulation of the Solidification of Pure Nickel Via the Phase-field Method," *Materials Research*, vol. 9, no. 4, pp. 349-356, 2006.
- [11] J. A. WARREN and W. J. BOETTINGER, "PREDICTION OF DENDRITIC GROWTH AND MICROSEGREGATION PATTERNS IN A BINARY ALLOY USING THE PHASE-FIELD METHOD," *Acta metall*, vol. 43, no. 2, pp. 689-703, 1995.

- [12] K. KANG, C. WEINBERGER and W. CAI., A Short Essay on Variational Calculus., Stanford University: Department of Mechanical Engineering, 2006.
- [13] W. J. BOETTINGER and J. A. WARREN, "The Phase-Field Method: Simulation of Alloy Dendritic," *METALLURGICAL AND MATERIALS TRANSACTIONS A*, vol. 27A, pp. 657-669, 1996.
- [14] W. BOETTINGER and J. WARREN, "The phase-field method: Simulation of alloy dendritic solidification during recalescence.," *Metallurgical and Materials Transactions a-Physical Metallurgy and Materials Science*, vol. 27, no. 3, pp. 657-669, 1996.
- [15] A. A. WHEELER, W. J. BOETTINGER and G. B. McFADDEN, "Phase-field model for isothermal phase transitions in binary alloys," *PHYSICAL REVIEW A* , vol. 45, no. 10, pp. 7424-7439, 1995.
- [16] H. KOBAYASHI, M. ODE, S. G. KIM, W. T. KIM and T. SUZUKI, "Phase-field model for solidification of ternary alloys coupled with thermodynamic database," *Scripta Materialia*, vol. 48, pp. 689-694, 2003.
- [17] K. OGUCHI and T. SUZUKI, "Phase-Field Simulation of Free Dendrite Growth of Aluminum-4.5 mass% Copper Alloy," *Materials Transactions*, vol. 48, no. 9, pp. 2280-2284, 2007.
- [18] W. W. MULLINS and R. F. SEKERKA, "Morphological Stability of a Particle Growing by Diffusion or Heat Flow," *JOURNAL OF APPLIED PHYSICS*, vol. 34, no. 2, pp. 323-329, 1963.
- [19] W. W. MULLINS and R. F. SEKERKA, "Stability of a Planar Interface During Solidification of a Dilute Binary Alloy," *JOURNAL OF APPLIED PHYSICS*, vol. 35, no. 2, pp. 444-451, 1964.
- [20] H. BHADESHIA, "Lecture 15: Phase Field Modelling.," in *Course MP6, Kinetics and Microstructure Modelling*.
- [21] D. W. O. PETER R. HARROWELL, "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.
- [22] M. E. GLICKSMAN, Principles of Solidification - An introduction to modern casting and crystal growth concepts, Gainesville, FL - USA: Springer, 2011.

- [23] H. SINGER, I. SINGER-LOGINOVA, J. BILGRAM and G. AMBERG, "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.
- [24] A. KARMA and W. RAPPEL, "Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions," *PHYSICAL REVIEW E*, vol. 57, no. 4, pp. 4323-4349, 1998.
- [25] M. JOHNSON, " Grain refinement of aluminium studied by use of a thermal analytical technique," *Elsevier- Thermochemica Acta*, vol. 256, pp. 107-121, 1995.
- [26] Y. LEE, A. DAHLE, D. STJOHN and J. HUTT, " The effect of grain refinement and silicon content on grain formation in hypoeutectic Al-Si alloys.," *Materials Science and Engineering A*, vol. 259, no. 1, pp. 43-52, 1999.
- [27] C. H. ASANO and E. COLLI, *Cálculo Numérico — Fundamentos e Aplicações*, São Paulo: Departamento de Matemática Aplicada – IME-USP, 2009.

APENDICE A - TRANSPORTE DE SOLUTO POR DIFUSÃO

O transporte de massa só será necessário para a simulação da solidificação de ligas metálicas. O caso estudado neste item consiste no transporte de massa bidimensional com condições de contorno de fluxo zero (condição de Neumann), representadas pelas equações (71), (72) e (73). Como condição inicial tem-se concentração igual a C_{in} para os pontos internos a um quadrado de comprimento $l/3$ localizado no centro de um domínio quadrado de comprimento l , onde a concentração é C_{out} , como representado na Figura 63.

$$D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (71)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0, \text{ para } x = 0 \text{ e } x = l \quad (72)$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0, \text{ para } y = 0 \text{ e } y = l \quad (73)$$

Onde D é a difusividade do elemento no meio e C a concentração.

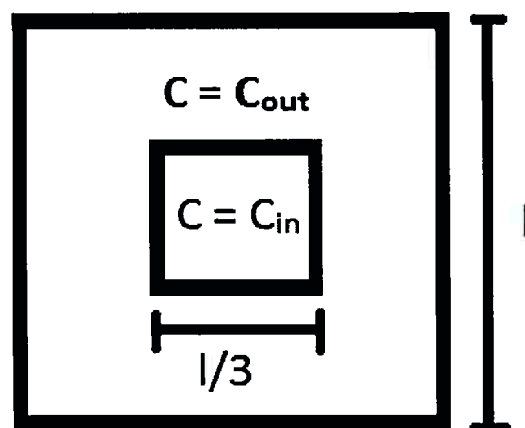


Figura 63 – Condição inicial para o modelo de difusão simples.

O problema foi adimensionalizado utilizando os adimensionais expressos nas equações (74), (75), (76) e (77).

$$C^* = \frac{C - C_{out}}{C_{in} - C_{out}} \quad (74)$$

$$y^* = \frac{y}{l} \quad (75)$$

$$x^* = \frac{x}{l} \quad (76)$$

$$t^* = \frac{t\alpha}{l^2} \quad (77)$$

Desta forma obtemos a equação adimensional (78), onde D' é dado pela equação (79).

$$D' \left(\frac{\partial^2 C^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 C^*}{\partial y^{*2}} \right) = \frac{\partial C^*}{\partial t^*} \quad (78)$$

$$D' = \frac{D}{\alpha} \quad (79)$$

Aplicando o método de diferenças finitas no modelo obtém-se a equação (80).

$$C_{i,j}^{*t} = \frac{\frac{D'\Delta t}{h^2} (C_{i+1,j}^{*t} + C_{i-1,j}^{*t} + C_{i,j+1}^{*t} + C_{i,j-1}^{*t}) + C_{i,j}^{*t-\Delta t}}{\left(1 + \frac{4D'\Delta t}{h^2}\right)} \quad (80)$$

Para os contornos temos as equações (81), (82), (83) e (84).

$$C_{-1,j}^{*t} = C_{1,j}^{*t} \quad (81)$$

$$C_{m,j}^{*t} = C_{m-2,j}^{*t} \quad (82)$$

$$C_{i,-1}^{*t} = C_{i,1}^{*t} \quad (83)$$

$$C_{i,m}^{*t} = C_{i,m-2}^{*t} \quad (84)$$

Onde i e j são os índices da malha do método de diferenças finitas, m é o numero de nós em uma das dimensões tal que m^2 é o numero de nós total, Δt é o passo de tempo, e h é o passo da malha obtido numericamente como l/m .

Desenvolveu-se a solução analítica para este caso, possibilitando avaliar o resultado do modelo numérico. A partir da equação (78), considerando D' igual a 1 para simplificação, aplicou-se o método de separação de variáveis, segundo as equações (85) e (86).

$$C^* = X(x^*)Y(y^*)T(t^*) \quad (85)$$

$$\frac{\partial(XYT)}{\partial t^*} = \frac{\partial^2(XYT)}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2(XYT)}{\partial y^{*2}} \rightarrow \frac{T'}{T} = \frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} \quad (86)$$

Considerando $\frac{T'}{T} = \tau$, $\frac{X''}{X} = -\alpha^2$ e $\frac{Y''}{Y} = -\beta^2$ pode-se escrever a equação (87).

$$\tau = -(\alpha^2 + \beta^2) \quad (87)$$

Logo podemos afirmar que X , Y , T podem ser escritas pelas equações (88), (89) e (90) respectivamente.

$$X = A \sin(\alpha x^*) + B \cos(\alpha x^*) \quad (88)$$

$$Y = C \sin(\beta y^*) + E \cos(\beta y^*) \quad (89)$$

$$T = F e^{\tau t^*} \quad (90)$$

Onde A , B , C , D , E e F são constantes. Aplicando-se as equações de (88) a (90) na equação (85) e aplicando as condições de contorno encontramos os valores para as constantes, obtendo, assim, a equação geral será expressa pela equação (91).

$$C^*(x^*, y^*, t^*) = \sum_{n,m=0}^{\infty} K_{mn} \cos(\alpha_n x^*) \cos(\beta_m y^*) e^{\tau_{nm} t^*} \quad (91)$$

Onde α_n , β_m e τ_{nm} são expressos pelas equações (92), (93) e (94) respectivamente.

$$\alpha_n = n\pi \quad (92)$$

$$\beta_m = m\pi \quad (93)$$

$$\tau_{nm} = -(m^2 + n^2)\pi^2 \quad (94)$$

Utilizando a série de Fourier para o instante inicial e fazendo uso da condição inicial, é possível determinar K_{mn} como apresentado na equação (95).

$$K_{mn} = \frac{16 \left[\text{sen} \left(\frac{2\alpha_n}{3} \right) - \text{sen} \left(\frac{\alpha_n}{3} \right) \right] \left[\text{sen} \left(\frac{2\beta_m}{3} \right) - \text{sen} \left(\frac{\beta_m}{3} \right) \right]}{[\text{sen}(2\alpha_n) + 2\alpha_n][\text{sen}(2\beta_m) + 2\beta_m]} \quad (95)$$

Para calcular os termos onde n e m são iguais a 0 foi realizado o estudo do limite de K_{mn} com n e m tendendo a 0, obtendo as equações (96), (97) e (98).

$$K_{0n} = \frac{16 \left[\text{sen} \left(\frac{2\alpha_n}{3} \right) - \text{sen} \left(\frac{\alpha_n}{3} \right) \right]}{12[\text{sen}(2\alpha_n) + 2\alpha_n]} \quad (96)$$

$$K_{m0} = \frac{16 \left[\text{sen} \left(\frac{2\beta_m}{3} \right) - \text{sen} \left(\frac{\beta_m}{3} \right) \right]}{12[\text{sen}(2\beta_m) + 2\beta_m]} \quad (97)$$

$$K_{00} = \frac{16}{144} \quad (98)$$

Esta solução, desenvolvida completamente no presente trabalho, não foi encontrada em nenhuma referência.

A solução encontrada pela equação (80), descrita em diferenças finitas de modo implícito, foi resolvida numericamente usando o método de Gauss-Seidel. Para definir o erro numérico a ser tolerado no método, foi realizada uma série de simulações utilizando valores adimensionais de $D' = 1$, tempo de 0,001, passo de tempo de $2,5 \times 10^{-5}$, e uma malha de 300×300 nós em um domínio quadrado de comprimento $l = 1$ para as tolerâncias ao erro de 10^{-5} , 10^{-6} e 10^{-7} . Os resultados obtidos são plotados a partir de um corte na metade do domínio, ou seja, onde $y^* = 0,5$, como observado na Figura 64.

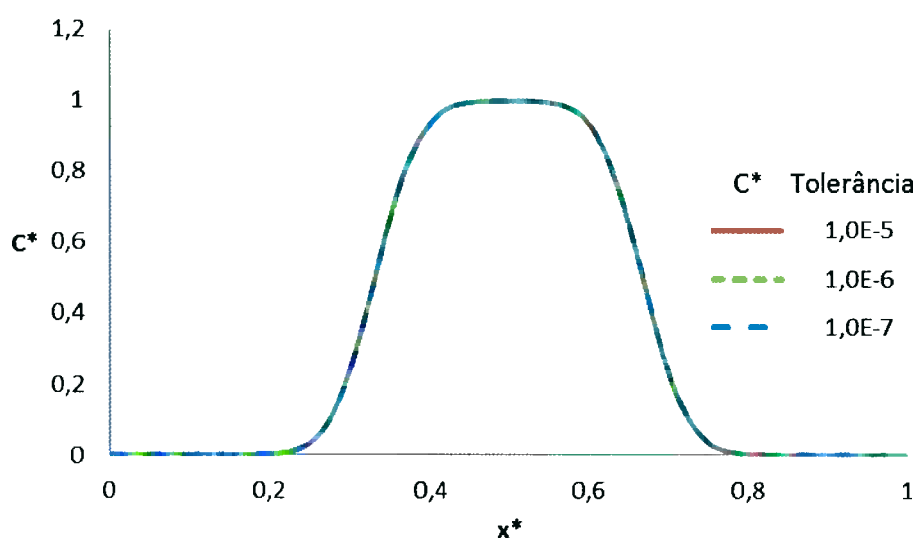


Figura 64 – Perfil de concentração para um corte no meio do domínio, onde $y^* = 0,5$, para erros de tolerância no método de Gauss-Seidel de 10^{-5} , 10^{-6} e 10^{-7} .

Pode-se observar que o perfil de concentração não variou com a tolerância ao erro nas iterações do método Gauss-Seidel. A solução é, então, dita convergida para uma tolerância ao erro de 10^{-6} .

O próximo teste foi executado com o objetivo de definir a malha de nós adequada. Observa-se na Figura 65, a variação do perfil de concentração, no mesmo corte no domínio, para diferentes números de nós na malha, utilizando $D' = 1$, tempo de 0,001, passo de tempo de $2,5 \times 10^{-5}$ e uma tolerância para o método de Gauss-Seidel igual a 10^{-6} .

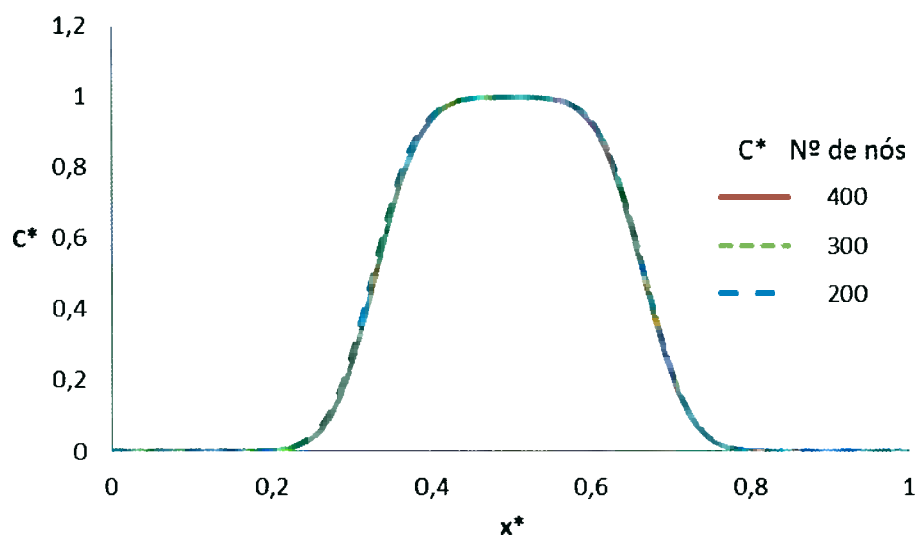


Figura 65 - Perfil de concentração em um corte no meio do domínio, para diferentes números de nós na malha.

Mais uma vez os perfis de concentração são idênticos tornando uma malha com 300 nós refinada o bastante para obter-se uma solução convergida. Tendo o número de nós fixado como 300, o passo de tempo foi alterado para verificar se o seu valor é suficientemente pequeno. A Figura 66 mostra este teste.

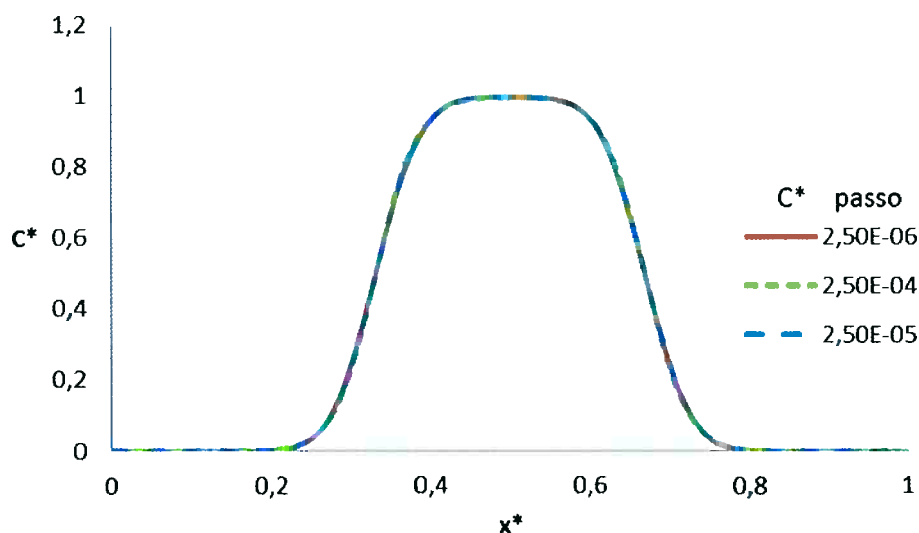


Figura 66 - Perfil de concentração para um corte no meio do domínio, para diversos passos de tempo.

Como, novamente, os perfis coincidem, um passo de tempo de $2,5 \times 10^{-5}$ garante um perfil convergido.

Finalmente, após um estudo dos parâmetros numéricos necessários para obter uma solução convergida, foi feita a comparação entre a solução numérica e a solução analítica obtida dada pela equação (91). A Figura 67, mostra a variação entre os perfis de concentração obtidos pela equação (91) ao aumentarmos o número de termos da série infinita para um tempo dimensional de 0,0, mostrando que pelo menos 25×10^6 termos são necessários. A Figura 68 mostra um detalhe deste resultado. Esta solução foi então comparada com a solução numérica na Figura 69, para um tempo adimensional de 0,001. Na figura observa-se que ambas as soluções apresentam os mesmos resultados.

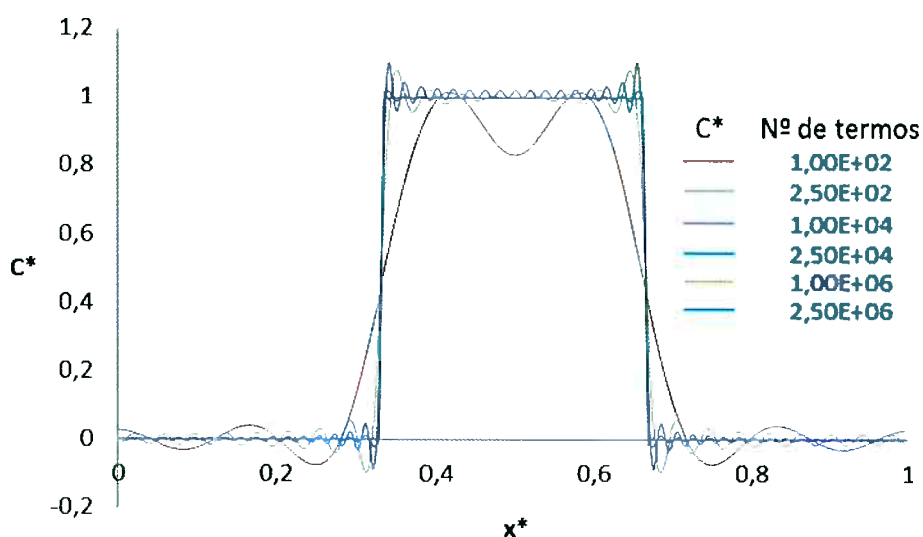


Figura 67 – Perfil de concentração para solução analítica variando o número de termos da série de Fourier.

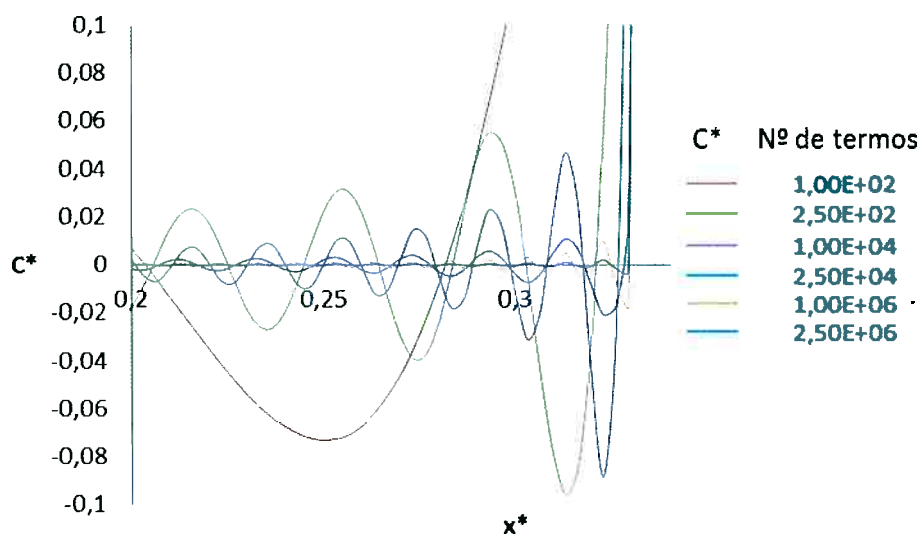


Figura 68 – Detalhe do Perfil de concentração para solução analítica variando o número de termos da série de Fourier.

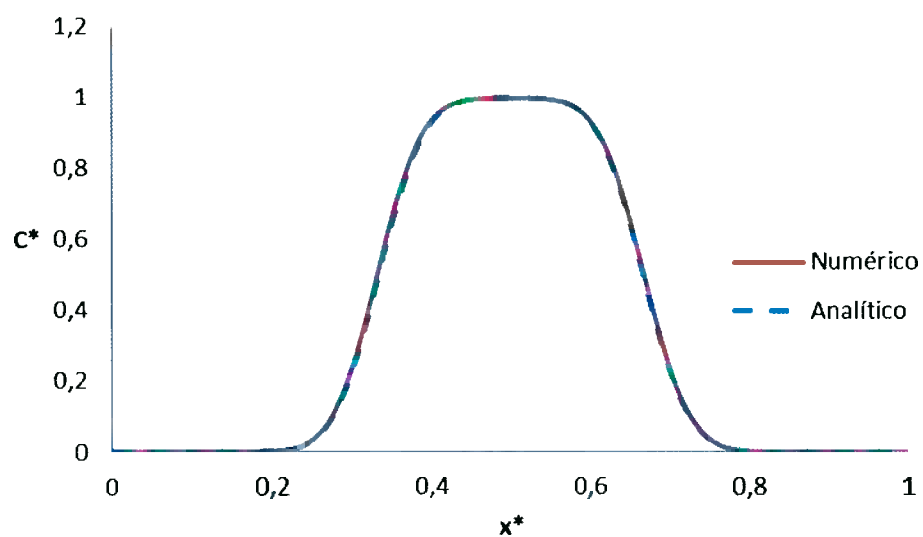


Figura 69 – Perfil de concentração comparativo entre as soluções numérica e analítica para difusão simples em um tempo de 0,001.