

# ACOPLAMENTO INDIRETO DOS ELEMENTOS FINITOS AO AUTÔMATO CELULAR PARA O ESTUDO DO EFEITO DO GRADIENTE DE DEFORMAÇÃO NA RECRISTALIZAÇÃO <sup>1</sup>

Wesley Luiz da Silva Assis <sup>2</sup>

Luciana de Oliveira Pereira <sup>3</sup>

Paulo Foster Perdigão <sup>3</sup>

Paulo Rangel Rios <sup>4</sup>

## Resumo

Este trabalho é resultado do acoplamento de duas técnicas de simulação computacional: Método de Elementos Finitos e Autômato Celular. Durante a evolução microestrutural no processo de recristalização a força motriz para o avanço das interfaces é a energia armazenada na matriz deformada plasticamente. Com intuito de se obter uma estrutura contendo deformações plásticas, utilizou-se a técnica de elementos finitos para simular a deformação do material estudado. A partir da estrutura deformada foi recriada uma nova estrutura, contendo apenas as partes onde foram apresentados gradientes de deformação. Subseqüente a recriação da matriz, simulou-se o processo de recristalização pelo método do autômato celular em três dimensões dentro da mesma. O objetivo desse estudo é avaliar o efeito desses gradientes durante a evolução microestrutural. Ao fim do trabalho a influência da heterogeneidade de energia armazenada foi discutida com auxílio dos resultados obtidos na saída de dados do programa.

**Palavras-chave:** Recristalização; Autômato celular; Elemento finitos; ANSYS.

## INDIRECT CONNECTION OF THE FINITE ELEMENTS THE CELLULAR AUTOMATA FOR STUDY OF THE EFFECT OF THE STRAIN GRADIENTS IN THE RECRYSTALLIZATION

### Abstract

This work is result of the connection of two techniques of computational simulation: Finite Element Method (FEM) and Cellular Automata (CA). During the microstructural evolution in the recrystallization process, the driving force for the advance of the interfaces is the stored energy in the plastically strain matrix. With intuit of it to get a structure contend plastics strains, utilized it the FEM technique for to simulate the deformation of the material studied. From of the strain structure was been reconstructed the new structure just contend the parts where presented strain gradients. Subsequent the reconstruction of the new matrix simulate it the recrystallization process by CA method in tree dimension into the same matrix. The objective this study is to evaluate the inhomogeneous stored energy during microstructural evolution. In the finish of the work the influence of the inhomogeneous stored energy is discussed with help of the results gotten by out of data of the programs.

**Key words:** Recrystallization; Cellular automata; Finite element; ANSYS.

<sup>1</sup> *Contribuição técnica ao 62º Congresso Anual da ABM – Internacional, 23 a 27 de julho de 2007, Vitória – ES, Brasil.*

<sup>2</sup> *Engenheiro Químico, Doutorando em Engenharia Metalúrgica na Universidade Federal Fluminense – UFF, Volta Redonda RJ*

<sup>3</sup> *Graduando em Engenharia Metalúrgica / Alunos de Iniciação Científica da Universidade Federal Fluminense – UFF Volta Redonda RJ*

<sup>4</sup> *Prof. PhD em Engenharia Metalúrgica, Prof. Titular do curso de pós-graduação em Engenharia Metalúrgica da Universidade Federal Fluminense – UFF*

# 1 INTRODUÇÃO

O processo de recristalização primária tem sido frequentemente estudado com auxílio das teorias de reações de transformações de fase que acontecem por nucleação e crescimento. Este tipo de processo torna-se extremamente complexo quando analisado de maneira detalhada e específica. Entretanto, pode ser analisado de uma maneira geral, por exemplo, estudando-se apenas os aspectos geométricos e evolutivos microestruturais. Este tipo de estudo tem sido feito por meio de modelos matematicamente exatos como o modelo da teoria JMAK<sup>[1-3]</sup> e modelos computacionais. Os modelos computacionais são formas mais recentes de estudar a cinética de recristalização. Quando a física do modelo computacional se assemelha às suposições impostas ao modelo matemático, os resultados da simulação podem ser validados pelos modelos analíticos como foi feito por Hesselbësth e Göbell<sup>[4]</sup> e Rios et al.<sup>[5]</sup> Os modelos em geral utilizados, geralmente, descartam algumas perturbações ao sistema evolutivo de recristalização, tais como: impurezas, maclas, recuperação, heterogeneidade de energia armazenada na matriz e etc. O fato de desprezar alguns fatores que ocorrem em um processo real, é uma maneira de simplificar o fenômeno físico, todavia, podem induzir a pequenos erros no resultado final. Com intuito de minimizar estes tipos de erros, Mukhopadhyay e Gottstein<sup>[6]</sup> implementaram recentemente parte da física real ao modelo computacional. A implementação do fenômeno físico real á simulação computacional tem se tornado uma tendência para as novas messes de trabalhos científicos.

Este trabalho utiliza o programa autômato celular desenvolvido por Rios e et al.<sup>[7]</sup> e as correções feitas por Assis e Rios<sup>[8]</sup> para simular o processo de recristalização primária, com efeito, da heterogeneidade de energia armazenada na matriz. Neste programa foi inserido o efeito do fenômeno do gradiente de deformação em matrizes encruadas. A energia armazenada é o fator principal para auxiliar em vários estudos referentes a recristalização, por exemplo: estudo da velocidade de avanço das interfaces recristalizadas. A energia armazenada interfere na recristalização desde a formação do núcleo até o final da reação.

Após o núcleo ter sido ativado termicamente (nucleação), é observado apenas o crescimento do mesmo. Durante o crescimento, interfaces recristalizadas avançam sobre a matriz encruada varrendo discordâncias e defeitos puntiformes. A velocidade de avanço das interfaces livres de defeitos varia de acordo com energia armazenada na matriz deformada. Regiões com maior nível de energia (maior grau de deformação) têm maior velocidade de avanço, e regiões que possuem menor nível de energia terão, conseqüentemente, menores velocidades. A velocidade de avanço pode ser calculada por:

$$\langle G \rangle = \frac{\int \int G ds}{\int \int ds} = \frac{1}{s} \cdot \frac{dv}{dt} \quad (1)$$

Onde:

v = volume do grão, s = área interfacial entre região recristalizada e não recristalizada e t = tempo de reação em cada etapa.

Durante o processo de deformação do material, a energia é armazenada heterogeneamente dentro da matriz deformada. Em algumas regiões do material são encontrados gradientes de deformação. Os gradientes de deformação geram, conseqüentemente, gradientes com distintos níveis de energia, já que a energia é

armazenada na forma de defeitos durante a deformação. A energia contida por deformação é utilizada como força motriz para o avanço das interfaces. Segundo Rios<sup>[9]</sup> a queda da velocidade de avanço das interfaces recristalizadas é devido aos gradientes de deformação.

Ao decorrer deste trabalho serão apresentados resultados de simulações de carregamento de cargas deformação plástica e do processo de recristalização. Para simular a deformação plástica do material utilizou-se a técnica de elementos finitos e o programa comercial ANSYS<sup>®</sup>, e para simular a recristalização, utilizou-se o método do autômato celular em três dimensões.

## **2 MATERIAIS E MÉTODOS**

### **2.1 Descrição da Simulação por Elementos Finitos**

Com o auxílio das ferramentas de elementos finitos (programa comercial ANSYS<sup>®</sup>), foi construída uma estrutura discreta em duas dimensões (2D). Simulou-se a deformação por meio de carregamento de cargas por compressão em uma placa fina (2D). O carregamento foi distribuído de maneira uniforme sobre a parte superior da placa, foi inserida uma restrição de movimento na parte inferior da placa. Ao fim da simulação, obteve-se uma estrutura deformada contendo regiões com deformação não homogêneas como é demonstrado na figura 1. A partir da saída de dados do programa ANSYS<sup>®</sup>, representou-se graficamente as deformações equivalentes de von Mises ao longo do material.

A simulação por elementos finitos foi realizada no estado plano de deformação bidimensional em temperatura ambiente, usando o programa ANSYS<sup>®</sup> (versão 8.1). Material: tarugo de aço IF 18 de seção quadrada de 40 mm, E= 207 GPa e coeficiente de Poisson = 0,28.

O grau de deformação apresentado na região assinalada da figura 1, foi recriado em uma matriz em três dimensões em código FORTRAN 90/95. Esta matriz recriada foi utilizada como um dos dados de entrada para o programa autômato celular. A velocidade de crescimento durante a recristalização foi diferenciada dentro da matriz de acordo com o nível de energia armazenado por deformação observado na simulação. Assim, como em um processo real de recristalização, o programa gera regiões com diferentes níveis de energia, que influenciam diretamente na velocidade de avanço das interfaces. Interfaces localizadas em regiões com maior grau de deformação têm maior velocidade de crescimento. Na figura 2 encontra-se a representação da matriz encruada, com o grau de deformação e seus respectivos níveis de energia armazenada.

O código computacional do A.C. foi desenvolvido para simular puramente o efeito do gradiente de deformação dentro de uma matriz em função de: velocidade de avanço das interfaces, tempo de reação, fração volumétrica transformada, fração superficial transformada e contigüidade. A cinética evolutiva dentro da microestrutura foi estudada com suporte dos resultados gerados por simulação computacional<sup>[4]</sup>. Os parâmetros utilizados como dados de entrada durante a simulação da recristalização serão demonstrados a seguir.

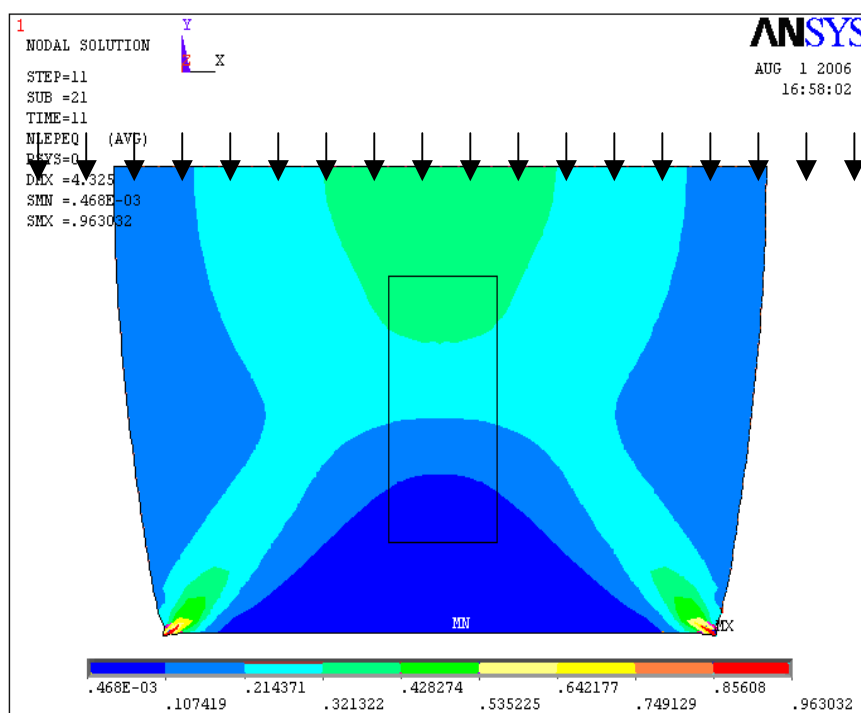
### **2.2 Descrição da Simulação por Autômato Celular**

Durante a simulação computacional foram utilizados os seguintes parâmetros como dados de entrada:

Matriz em duas dimensões implementada por Rios e Pereira [10] com dimensões de  $304^2$ ; quantidade de núcleos iniciais igual a 256; nucleação por saturação de sítios; disposições aleatória, periódica e com grupos de núcleos dentro da matriz e energia em 5 níveis distribuída na forma de gradiente dentro da matriz, vizinhança e regra de transição de von Neumann.[11] Foram utilizados matriz  $304^2$  e 256 núcleos como parâmetro de comparação entre os três casos. A nucleação periódica necessita de números com combinações exatas para se obter uma distribuição com espaçamentos perfeitos entre os núcleos. Maiores quantidades de núcleos iniciais requerem maiores matrizes, essa relação pode ser uma limitação computacional, pois compiladores em 32 bits conseguem alocar no máximo 4Gb. A partir destas limitações determinou-se a quantidade de núcleos iniciais e o tamanho da matriz.

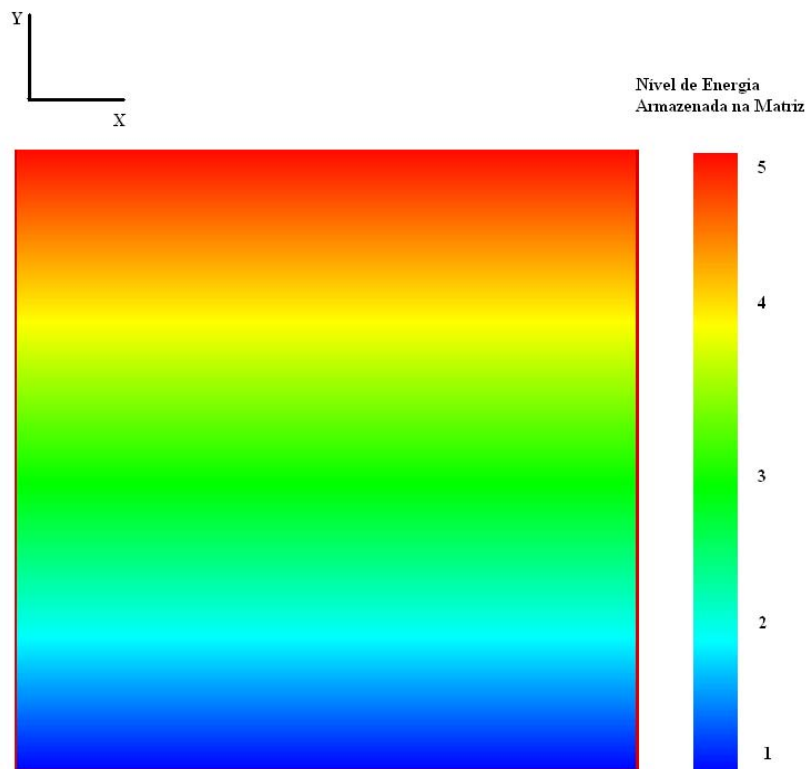
As grandezas fornecidas pela simulação computacional são todas adimensionais. Exemplo: o tempo é contado a cada atualização da matriz para um novo crescimento discreto das células transformadas. O crescimento discreto acontece após ter sido analisada a possibilidade de crescimento de todas as células da matriz, obedecendo a regra de transição. Iniciando-se do tempo zero, no qual ainda não ocorreu nenhum crescimento, até o final da simulação no qual todas as células sofreram transformação. Cada célula somada ao núcleo inicial tem uma unidade de área.[12]

### 3 RESULTADOS



**Figura 1** – Distribuição da deformação plástica na direção X durante o processo de carregamento de cargas.

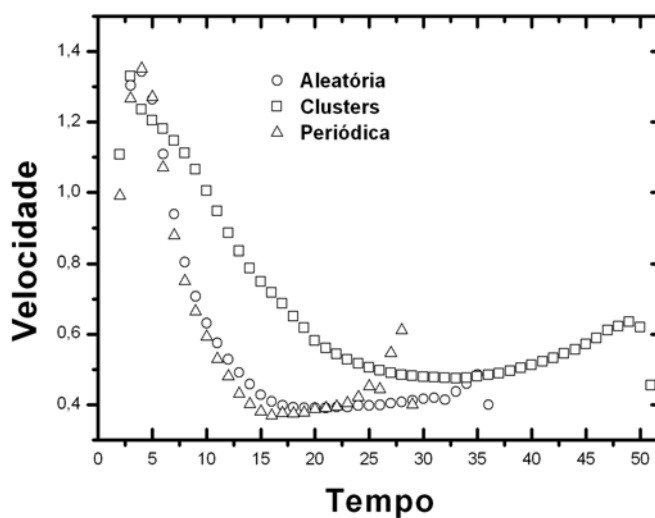
A Figura 1 é a representação da deformação plástica do metal simulado pelo programa comercial ANSYS®. O grau de deformação é demonstrado de acordo com a coloração da legenda.



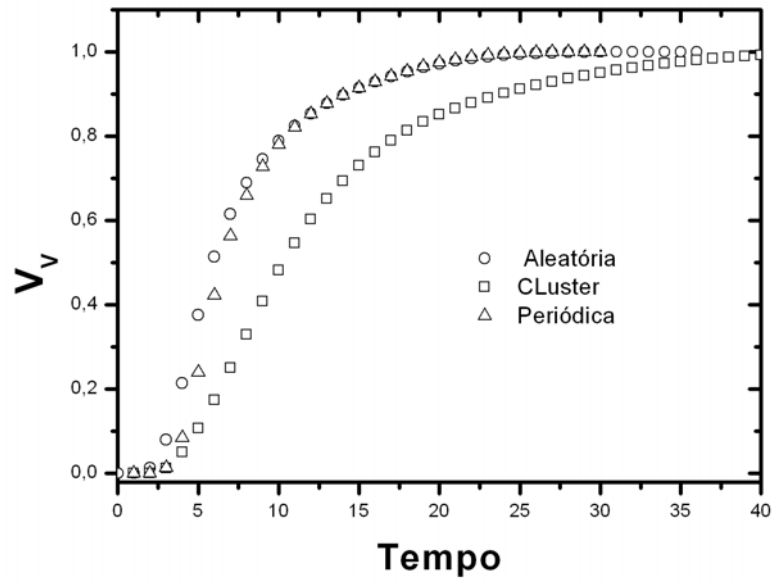
**Figura 2** – Matriz deformada com os níveis de energia armazenada, variação de energia apenas no eixo Y.

A matriz da Figura 2 é onde ocorre o processo de recristalização com gradiente de deformação pelo método do autômato celular. A matriz da Figura 2 é referente à região destacada na Figura 1. Modelo idealizado do gradiente de deformação gerado no centro da placa durante a simulação por elementos finitos.

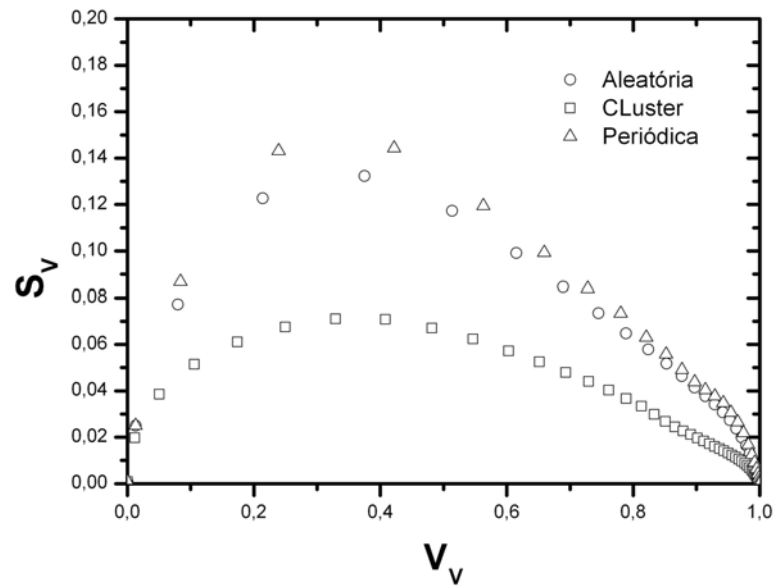
Os núcleos serão espalhados aleatoriamente dentro da matriz apresentada na Figura 2.



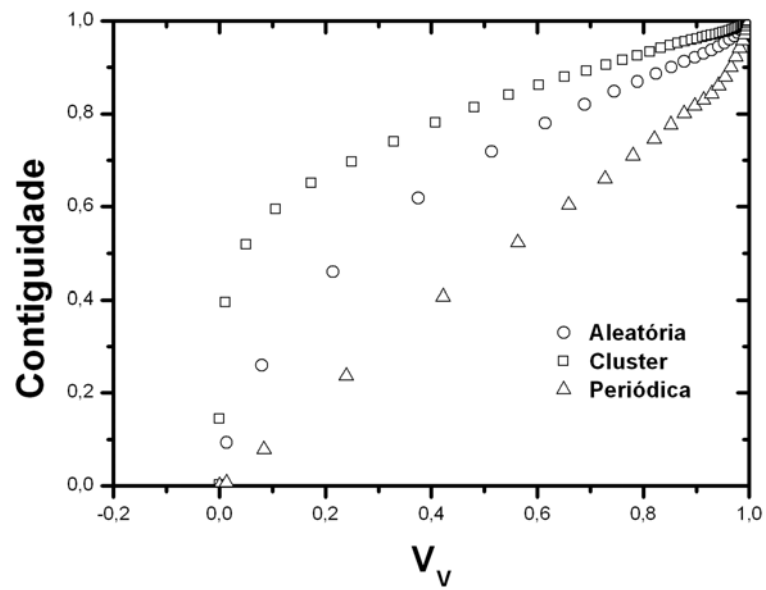
**Figura 3** – Velocidade de avanço das interfaces recristalizadas em função do Tempo de reação para os três casos de distribuição espacial dos núcleos em uma matriz com gradiente de deformação.



**Figura 4** – Fração volumétrica recristalizada em função do tempo de reação para os três casos de distribuição espacial dos núcleos em uma matriz com gradiente de deformação.



**Figura 5** – Área superficial recristalizada por unidade de volume em função da Fração volumétrica recristalizada para os três casos de distribuição espacial dos núcleos em uma matriz com gradiente de deformação.



**Figura 6** – Contigüidade (fração de interfaces recristalizadas em contato com outras superfícies recristalizadas) em função Fração volumétrica recristalizada.



**Figura 7.** Microestrutura gerada pelo método do autômato celular quando se atinge 100% de fração recristalizada.

## 4 DISCUSSÃO

Na Figura 1 foi observado alguns gradientes macroscópicos de deformação espalhados no interior da matriz deformada. Estes gradientes foram recriados em uma nova matriz para ser utilizada pelo programa autômato celular para simular a recristalização primária. A matriz contendo gradiente de deformação está apresentada na Figura 2.

Observa-se na Figura 2 que o nível de energia armazenada dentro da matriz sobe, ou desce (dependendo do referencial) gradativamente, conforme foi apresentado na saída de dados do programa ANSYS® (parte destacada da Figura 1). O nível de energia da região onde a interface recristalizada se encontra é quem determina a sua velocidade de avanço.

Na Figura 3 foi apresentado o decréscimo da velocidade de avanço das interfaces recristalizadas em função do tempo de reação, calculados a partir da equação (1). Assim como em resultados experimentais<sup>[7,9]</sup> a velocidade de crescimento decai ao decorrer da reação. A fase transformada ocupa primeiro as regiões que contém maior nível de energia, e por fim, são preenchidas as regiões que possuem menor nível de energia. Utilizando-se uma matriz contendo gradiente de deformação observa-se que a velocidade final da reação é determinada pelas regiões de menor energia.

A curva da Figura 4 apresenta o formato sigmoidal característico da evolução da fração volumétrica em função do tempo de recristalização. Quando se tem grãos distribuídos aleatoriamente e periodicamente observa-se uma grande semelhança na cinética de recristalização. O perfil da curva de cinética de reação se assemelha ainda mais a partir de 70% de fração recristalizada.

A Figura 5 mostra que a maior área interfacial alcançada é de reações que se iniciam com disposição periódica dos núcleos. Reações com núcleos distribuídos aleatoriamente tem área interfacial máxima muito próxima do caso anterior. Por último, como já era de se esperar, tem-se a matriz que contém grupos de núcleos. Muitos núcleos que estão no centro do grupo não contribuem como interface entre região transformada e não transformada. Núcleos que se localizam no interior dos grupos geralmente são cercados de grãos recristalizados muito rapidamente, enquanto, grãos das extremidades dos grupos têm maior liberdade de crescimento.

Na Figura 6 apresenta o perfil do desvio da aleatoriedade é mantido com o novo código, tendo acima da curva de evolução de núcleos aleatórios, a curva de evolução contendo clusters e abaixo, a curva de evolução de núcleos periódicos.

A Figura 7 é a representação gráfica da microestrutura discreta virtual gerada pelo programa autômato celular e representada pelo programa Tecplot®. Existem grandes semelhanças das microestruturas reais encontradas na literatura com a microestrutura simulada. A Figura 7 foi gerada a partir da malha contendo o gradiente de deformação apresentada na Figura 2 que por sua vez foi extraída da Figura 1.

## 5 CONCLUSÃO

Os gradientes de deformação causam retardamento local do avanço das interfaces recristalizadas durante processo de recristalização.

O espaçamento entre um grão e outro pode acelerar ou retardar o início do *impingement*, afetando assim a mobilidade de cada grão.



A forma macroscópica de armazenamento de energia na matriz deformada tem grandes influências sobre a evolução microestrutural durante o processo de recristalização primária.

Os gradientes de deformação somados ao tipo de disposição espacial dos núcleos têm grande influência dentro de uma matriz encruada. A ferramenta de elementos finitos foi uma ótima ferramenta para auxiliar o estudo de evolução microestrutural. Com a união de diferentes técnicas foi possível encontrar resultados (qualitativamente) semelhantes aos resultados experimentais.

## Agradecimentos

Este trabalho teve o suporte do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoa de Nível Superior, CAPES e a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, FAPERJ.

## REFERÊNCIAS

- 1 JOHNSON, W. A. and MEHL, R. F, Transactions Metall. Soc. A.I.M.E., vol. 135, p.416–441, 1939.
- 2 KOLMOGOROV, A. N. Izv. Akad. Nauk. USSR-Ser-Matemat, vol.1(3), p.355, 1937.
- 3 AVRAMI, M. Journal of Chemical Physics, vol. 7, p.1103-1112, 1939.
- 4 H.W, HESSELBARTH and I.R GÖBEL, *Simulation of Recrystallization by Cellular Automata*, Acta Metall. Mater., vol. 39, nº. 9, p.2135–2143, 1991.
- 5 RIOS, P. R., OLIVEIRA, J.C.P.T., OLIVEIRA, V.T., CASTRO, J. A. *Comparison of Analytical Models with Cellular Automata Simulation of Recrystallization in Two Dimensions* Materials Research, Vol. 8, No. 3, 341-345, 2005.
- 6 MUKHOPADHYAY, P. LOECK, M. GOTTSTEIN, G. *A cellular operator model for the simulation of static recrystallization*. Acta Materialia, vol 55, 551–564, 2007.
- 7 RIOS, P.R. *Modeling Time Dependence of the Average Interface Migration Rate in Site Saturated Recrystallization*. Metallurgical and Materials Transactions A, vol 28 nº pp. 939-946, 1997.
- 8 ASSIS, W.L.S. *Investigação do Efeito da Nucleação, da Velocidade de Crescimento e da Distribuição da Energia Armazenada na Recristalização pelo Método do Autômato Celular em Três Dimensões*. – Dissertação de Mestrado - PG Engenharia Metalúrgica, UFF, Volta Redonda, 2006.
- 9 RIOS, P.R. and PADILHA, A.F. *Microstructural path of recrystallization in a commercial AlMn-Fe-Si (AA3003) alloy*. Materials Research (Brazil), vol.6pp605-613, 2003.
- 10 RIOS, P. R. OLIVEIRA V T; PEREIRA. L O. PEREIRA M. R. CASTRO, J. A. *Cellular automata simulation of site-saturated and constant nucleation rate transformations*. Materials Research Mat. Res. vol.9 no.2 São Carlos Apr./June 2006
- 11 VON NEUMANN, J. *Theory of self-reproducing automata*, in: A.W. Burks (Ed.), University of Illinois Lectures on the Theory and Organisation of Complicated Automata, University of Illinois Press, Urbane, 1949.
- 12 Assis, W. L. S Pereira,. L.O. Oliveira, F. F. Castro J. A. e Rios, P. R *Estudo Da Evolução de Grãos Individuais e Distribuição de Tamanhos Finais pelo Método dos Autômatos Celulares*, Seções Técnico-Científicas, 308-002, 2006, Foz do Iguaçu Anais CBECIMAT 2006 CD1.