

ESTUDO DA EVOLUÇÃO INDIVIDUAL DE GRÃOS RECRISTALIZADOS SOB EFEITO DA VELOCIDADE VARIADA DE CRESCIMENTO¹

Wesley Luiz da Silva Assis²

Tatiana Caneda Salazar³

Tháís Dias Nascimento⁴

Paulo Rangel Rios⁵

Resumo

A cinética de recristalização/transformação de fase foi investigada por simulação computacional pelo método dos autômatos celulares. As curvas de distribuição de tamanho final total e de evolução individual dos grãos foram traçadas utilizando-se os volumes em função do tempo de reação. A saída de dados ao fim da transformação simulada, fornece informações sobre a nucleação e o crescimento dos grãos individuais. Observando-se as curvas de crescimentos individuais, nota-se que cada grão adquire uma cinética própria de crescimento ao longo da reação. Baseado na análise das curvas de crescimento, distribuições de tamanho final de grão e taxa de crescimento, é feita uma comparação qualitativa com resultados experimentais obtidos via 3DXRD encontrados na literatura. Após esta checagem, realiza-se uma discussão sobre os resultados obtidos por meio de simulação e observa-se uma razoável concordância com os resultados experimentais.

Palavra-chave: Recristalização; Autômato celular; Transformação de fase; Distribuição de tamanho de grão.

EVOLUTION'S STUDY OF INDIVIDUAL GRAINS AND DISTRIBUTION OF FINAL SIZES BY THE CELLULAR AUTOMATA METHOD

Abstract

The nucleation and growth transformation kinetic is simulated by cellular automata method. The distribution curves of final size and growth of each grain had been traced using the volumes in function of the reaction time. The exit of data showed in the end of simulation, supplies to information about nucleation and growth of the individual grains. Of the comments of some individual curves of growth, one meets that each grain has its proper kinetic one of growth. Based in the analysis of the curves of growth, distributions of final size of grain and tax of growth, a qualitative and detailed comparison with experiments of other authors is made. After this checking, becomes fulfilled a quarrel about the results gotten by computational simulation, good agreements with experimental results was shown in the work finesh.

Key-words Recrystallization; Cellular automata; Transformation of phase; Distribution of grain size.

¹ *Contribuição técnica ao 63º Congresso Anual da ABM, 28 de julho a 1º de agosto de 2008, Santos, SP, Brasil*

² *Engenheiro Químico, Mestre em Engenharia Metalúrgica, aluno do curso de Doutorado em Engenharia Metalúrgica na Universidade Federal Fluminense –weslley@metal.eeimvr.uff.br*

³ *Engenheira Metalúrgica; Mestre em Engenharia Metalúrgica; aluna do curso de Doutorado em Engenharia Metalúrgica na Universidade Federal Fluminense – tatiana@ metal.eeimvr.uff.br.*

⁴ *Aluna do curso de Engenharia Metalúrgica na Universidade Federal Fluminense, aluna de iniciação científica-tdiasnascimento@yahoo.com.br*

⁵ *Professor Ph.D. em Engenharia Metalúrgica da EEIMVR/UFF. prrios@metal.eeimvr.uff.br.*

1 INTRODUÇÃO

Transformações que ocorrem por nucleação e crescimento no estado sólido são freqüentemente estudadas com suporte das teorias de cinética formal. Estes estudos também têm sido realizados com grande freqüência para descrever a recristalização, e são geralmente embasados em modelos matematicamente exatos. Os modelos analíticos tem sido a anos uma das melhores maneiras de se representar as características geométricas e evolutivas de uma microestrutura. Todavia, tais modelos não apresentam satisfatórios esclarecimentos em relação aos mecanismos de transformação que acontecem por nucleação e crescimento. A base dos estudos de cinética formal é a união das teorias de Johnson-Mehl, Avrami e Kolmogorov (JMAK).⁽¹⁻³⁾ A teoria JMAK é fundamentada apenas em um parâmetro de descrição microestrutural, a fração volumétrica da fase transformada (V_V). Subseqüentemente ao desenvolvimento desta teoria DeHoff criou uma extensão ao estudo de JMAK, no qual foi introduzido um novo parâmetro microestrutural, a área superficial por unidade de volume, (S_V). Os modelos de JMAK e de DeHoff serviram como base para o desenvolvimento de uma nova teoria sugerida por Vandermeer e coautores, o caminho microestrutural. A metodologia do caminho microestrutural envolve uma relação entre V_V e S_V . Posteriormente aos desenvolvimentos de JMAK, DeHoff e Vandermeer Cahn desenvolveu um modelo, cujo, existe a possibilidade de descrição da velocidade média das interfaces transformadas apenas relacionando S_V , V_V e o tempo de reação.

Os modelos analíticos e as teorias de cinética formal, tem sido de grande importância e praticidade para descrição de evoluções microestruturais. Contudo, apresentam várias limitações, estas teorias apresentam razoáveis resultados apenas quando: os núcleos estão alocados aleatoriamente na microestrutura, todos os núcleos têm formatos aproximadamente esféricos e a velocidade de crescimento de todos os núcleos são iguais. Estas suposições nem sempre são verdadeiras, sendo assim, a utilização das metodologias citadas acima podem apresentar resultados insatisfatórios de acordo com o desvio à idealidade sugerida ao fenômeno. Existem comprovações na literatura de que estas suposições podem ser postas a baixo. Em um antigo trabalho de Vandermeer, são apresentados grãos de um monocristal de ferro puro que crescem com formatos alongados. Assis, em um estudo recente apresenta grãos formados a partir de núcleos que se encontravam concentrados, forma de *clusters*. Lauridsen et al.⁽⁴⁾ realizaram um importante trabalho no qual são estudados grãos que crescem com diferentes velocidades durante a recristalização primária de um alumínio puro.

Atualmente os estudos teóricos, analíticos e experimentais têm sido auxiliados pelos modelos computacionais, com objetivo de se desvencilhar das limitações encontradas em cada método de estudo. Este trabalho é um exemplo das novas implementações da metodologia computacional, em que existe a busca de uma maior proximidade da representação das evoluções microestruturais. Foi realizado um estudo semelhante ao estudo experimental de Lauridsen et al.,⁽⁴⁾ na qual foi acompanhada a evolução microestrutural *in situ* de vários grãos individuais. No presente estudo via metodologia computacional, a análise além de ser realizado individualmente para cada grão, foi implementada uma nova forma de evolução. Foi utilizado o método dos Autômatos Celulares Probabilísticos em três dimensões. O método foi desenvolvido para simular o efeito da velocidade variada de crescimento dos grãos. Após as simulações terem sido realizadas, foram construídos gráficos de evolução de tamanhos de grão, taxa de crescimento, distribuição de freqüência dos

tamanhos finais de grão e microestruturas simuladas. Os resultados obtidos via simulação computacional, foram comparados aos resultados experimentais encontrados na literatura. Após finalização das análises, foi observada uma razoável concordância entres os resultados simulados e os analisados experimentalmente.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

Para a realização da simulação computacional foram utilizados os seguintes recursos: computador com dois processadores físicos Pentium Xeon 3.20 Ghz, memória Ram de 8Gb e HD de 160Gb em sistema operacional Windows XP 64Bits . O desenvolvimento do código foi realizado em ambiente de programação Fortran 90/95 com a IDE e compilador 64 bits Absoft do Fortran versão 10.1. O método empregado foi o dos Autômatos Celulares probabilísticos com vizinhança de von Neumann seguindo como base as implementações determinísticas de Hesselbarth e Gobel⁽⁵⁾ e as alterações sugeridas por Rios et al.^(6,7)

2.1 Descrição da Simulação

Durante a simulação computacional foram utilizados os seguintes parâmetros como dados de entrada: matriz em 3 dimensões implementada por Rios e Pereira⁽⁸⁾ com dimensões de 100^3 ; quantidade de núcleos iniciais igual a 125; nucleação por saturação de sítios; disposição aleatória dos núcleos dentro da matriz e velocidade decrescente de avanço das interfaces. As grandezas fornecidas pela simulação computacional são todas adimensionais. Exemplo: o tempo é contado a cada atualização da matriz para um novo crescimento discreto da célula transformada. Iniciando-se do tempo zero, no qual ainda não ocorreu nenhum crescimento, até o final da simulação. Cada célula somada ao núcleo inicial tem uma unidade de volume. O conceito de evolução celular pode ser melhor interpretado com o auxílio da Figura 1.

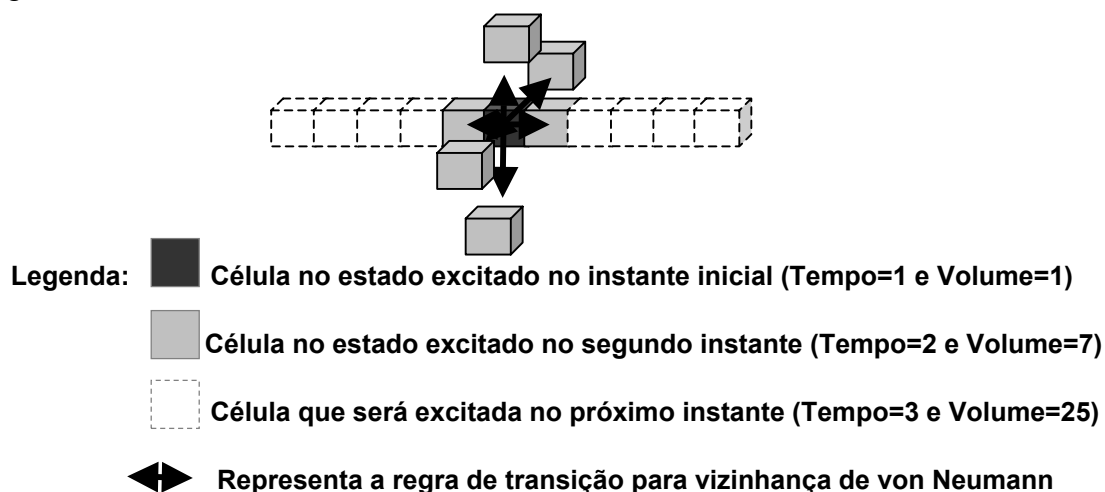


Figura 1 - Esquema da regra de transição para uma um sistema dinâmico de automação celular em 3D.

Algumas suposições foram adotadas para o desenvolvimento do código computacional A.C.:

-Evolução com velocidade decrescente das interfaces recristalizadas durante a reação;

- Material isento de maclas e bandas de deformação;
- Material isotrópico e isento de impurezas e partículas;

A simulação computacional fornece dados individuais de volume de cada núcleo dentro da matriz em cada tempo discreto. Porém, nem todos os dados foram utilizados nesse trabalho. Esta análise baseia-se em trabalhos experimentais, em que apenas alguns núcleos de uma matriz são observados durante a evolução microestrutural.

Para uma reprodução de resultados mais aceitáveis, foram seguidos passos semelhantes aos experimentais durante a simulação e elaboração gráfica. Sortearam-se seis núcleos aleatoriamente dentro da malha e acompanhou-se a evolução de cada grão em função do tempo. Ao fim da simulação, foram extraídos os volumes de cada grão individualmente em cada tempo de atualização da matriz. Com os volumes obtidos, calculou-se o raio equivalente ao raio da esfera para cada grão. O crescimento dos núcleos e a cinética para o processo inteiro são traçados com $R(t)$ e com a taxa dR/dt . Para maior confiabilidade dos resultados, após o término da simulação, foram feitos cálculos de distribuição de tamanho final de todos os grãos da matriz.

Os dados experimentais foram obtidos por meio da literatura,⁽⁹⁾ as medidas foram realizadas no Laboratório Nacional Risø, localizado na Dinamarca. O material analisado foi um alumínio 90% deformado a frio. Durante o experimento, a amostra foi recozida à 270°C e teve seis grãos escolhidos aleatoriamente para investigação do aspecto evolutivo.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 Estudo da Matriz Completa

A Figura 2 representa a cinética de recristalização simulada pelo código do autômato celular probabilístico. A curva apresenta o clássico formato sigmoidal geralmente observadas em transformações de nucleação e crescimento.

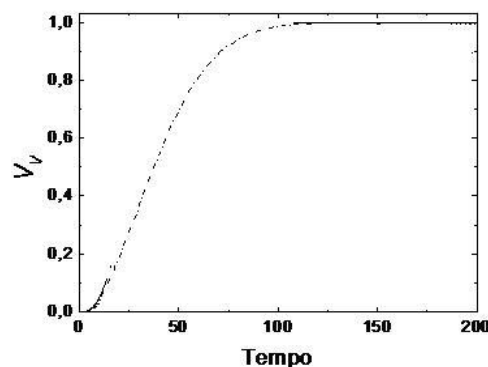


Figura 2 - Fração volumétrica recristalizada V_v em função do tempo de reação.

3.2 Estudo de Cada Grão Individualmente

A Figura 3a e a Figura 3b representam a evolução dos grãos durante a recristalização primária. Foram escolhidos seis grãos para serem monitorados durante a simulação. Esta metodologia foi adotada para tentar reproduzir via simulação computacional os resultados obtidos por Lauridssen e Juul Jensen.

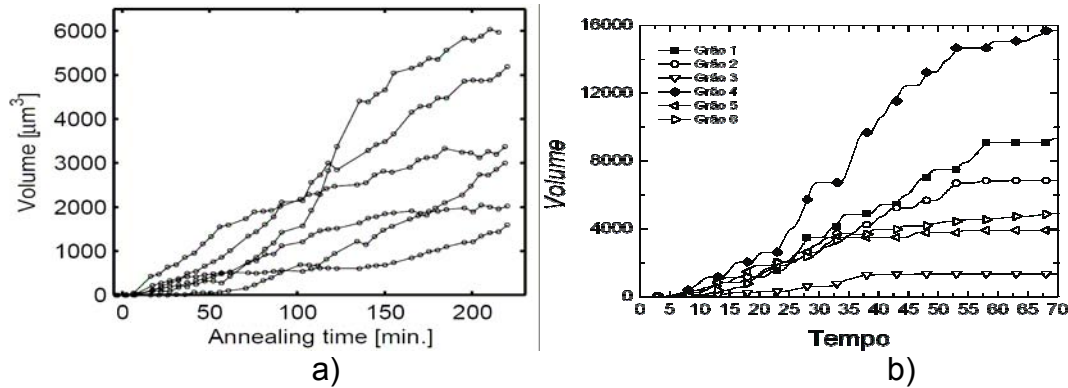


Figura 3- Volume X tempo de reação: a) experimental e b) simulados pelo AC.

Nas Figuras 3a e 3b são apresentados os gráficos de evolução do volume de grãos individuais em função do tempo de reação. Nos dois casos os dados extraídos foram de até 96% da recristalização total. São apresentadas as evoluções de 6 núcleos medidos experimentalmente (da literatura) e 6 núcleos medidos via metodologia computacionalmente.

A Figura 4a e a Figura 4b foram construídas a partir dos grãos utilizados para fazer os gráficos das Figuras 3a e 3b. Representam a evolução do raio em função do tempo de reação.

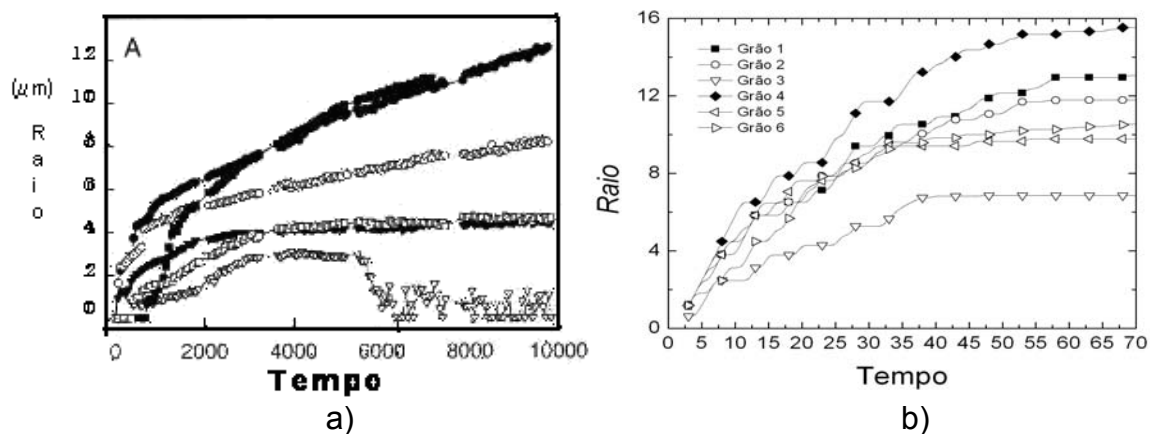


Figura 4 - Tamanho X tempo de reação: a) experimental e b) simulados pelo AC.

As considerações utilizadas para implementar o método dos autômatos celulares, ajudaram na boa concordância entre a parte experimental obtida por meio da literatura e a parte simulada pelo A.C. As divergências encontradas são todas aceitáveis, pois o método é uma aproximação do fenômeno, porém regido por um universo discreto.

A interferência na mobilidade das interfaces referente a partículas, maclas, bandas de deformação e etc., não existem para todos os grãos durante a simulação. Sendo assim, todas as interfaces transformadas se movem com a mesma velocidade e de forma constante. Conforme Rios e Padilha,⁽¹⁰⁾ a velocidade de avanço das interfaces transformadas diminui em função do tempo em uma situação real.

A Figura 5a é a taxa de crescimento sem correções para o *impingement* calculada experimentalmente e a Figura 5b é a taxa de crescimento sem correções para o *impingement* calculada computacionalmente.

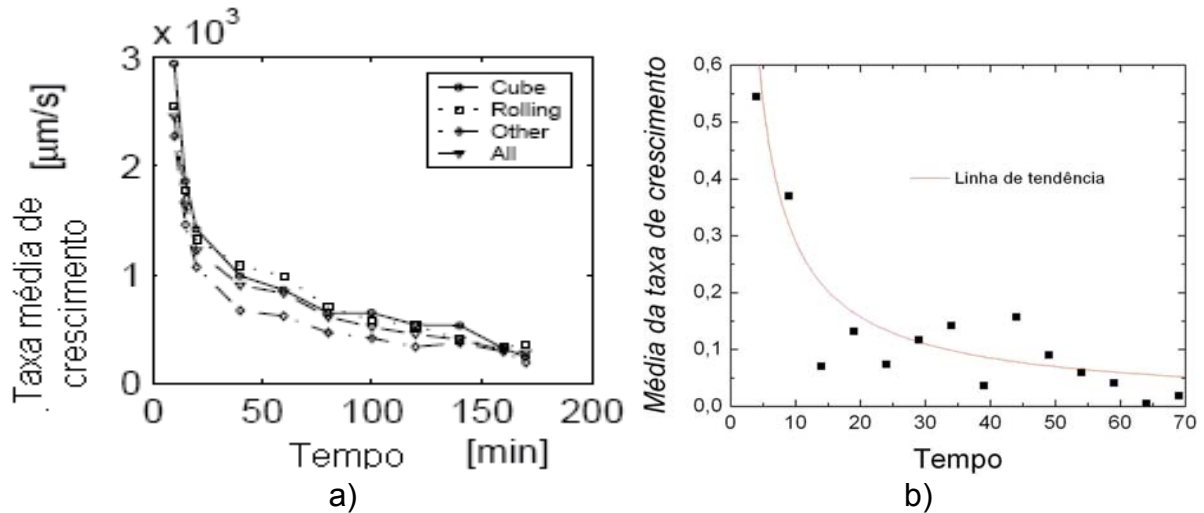


Figura 5 - Taxa de crescimento X tempo de reação: a) experimental e b) simulados pelo AC.

A Figura 6 é a representação gráfica da microestrutura final simulada pelo método dos autômatos celulares probabilísticos.

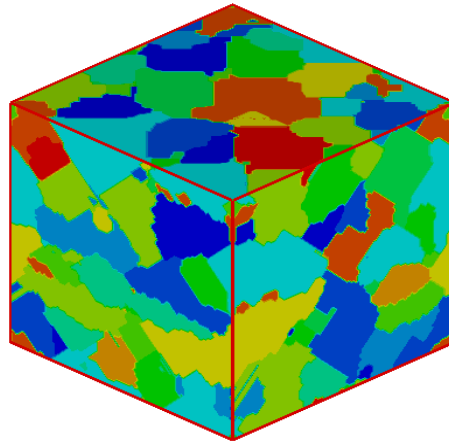


Figura 6 - Representação gráfica da microestrutura simulada. A figura acima representa uma microestrutura 100% recristalizada ao fim da simulação

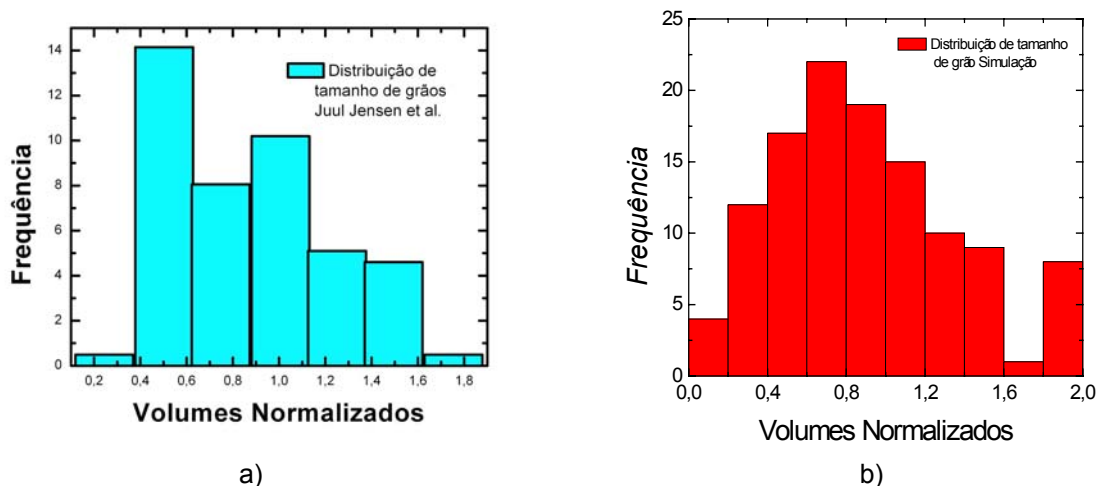


Figura 7 - Distribuição de volumes de grão: a) experimental e b) simulados pelo AC.

As Figuras 7a e 7b apresentam a distribuição estatística dos volumes finais dos grãos. No final da reação foram coletados dados de volumes finais de todos os grãos pertencentes a matriz. Com os volumes extraídos da simulação e dos experimentos foram montados histogramas de frequências dos volumes. Os dados experimentais⁽⁹⁾ e simulados foram normalizados para a realização de comparações entre os estudos.

4 CONCLUSÕES

Após ser feita uma detalhada comparação com a parte experimental, concluiu-se que:

A evolução dos grãos apresentou comportamento razoável, já que até os a diferenças entre os tempos de incubação foram semelhantes ao modelo experimental.

O crescimento com formas eqüiaxiais é afetado apenas pelo *impingement*.

A distribuição de tamanhos finais de grão da simulação se assemelha a do método experimental.

O crescimento acontece desde o início da reação, pois não é admitido tempo de incubação para a simulação.

Cada núcleo tem sua característica individual de evolução desde o início da reação.

Agradecimentos

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

REFERÊNCIAS

- 1 A. N. KOLMOGOROV, IZV. The statistics of crystal growth in the metals. **Investiia Akademii Nauk. USSR-Ser-Matematica**, vol.1(3), p.355, 1937.
- 2 W. A. JOHNSON E R. F. MEHL, Reaction Kinetics in process of nucleation and growth. **Transactions Metallurgical Society of A.I.M.E.**, vol. 135, p.416–441, 1939.
- 3 M. AVRAMI, Kinetics of phase I general theory. **Journal of Chemical Physics**, vol. 7, p.1103-1112, 1939.
- 4 LAURIDSEN E.M., POULSEN H.F., S.F. NIELSEN, JUUL JENSEN D. *Recrystallization kinetics of individual bulk grains in 90% cold-rolled aluminium* **Acta Materialia** 51 (May 2003) 4423–4435
- 5 HESSELBARTH H.W.; GOBEL, I.R. *Simulation of recrystallization by cellular automata* **Acta Metallurgica and Materialia** v. 39 n.º 9, p 2135-2143,1991
- 6 RIOS, P R, OLIVEIRA, J C P T, OLIVEIRA V T *et al. Comparison of analytical models with cellular automata simulation of recrystallization in two dimensions.* **Materials Research.**, July/Sept. 2005, vol.8, no.3, p.341-345. ISSN 1516-1439.
- 7 RIOS PR, OLIVEIRA JCPT, OLIVEIRA VT, CASTRO JA. *Microstructural descriptors and cellular automata simulation of the effects of non-random nuclei location on recrystallization in two dimensions.* **Materials Research.** 2006; 9(2).
- 8 RIOS PR, PEREIRA LO, CASTRO JA. *Cellular Automata Simulation of Site-saturated and Constant Nucleation Rate Transformations in Three Dimensions,* **Materials Research**, Vol. 9, No. 2, 00-00, 2006
- 9 E.M. LAURIDSEN, D. JUUL JENSEN and H.F. POULSEN *Kinetics of Individual Grains During Recrystallization,* **Scripta Materialia.** 43 (2000) 561–566
- 10 RIOS, P. R.; PADILHA, A. F. *MICROSTRUCTURAL Path of Recrystallization ia a Commercial Al-Fe-Mn-Si (AA3003) Alloy* **Materials Research.** V.6 nº 4, 605-613, 2003.