

## SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE TRANSFORMAÇÃO DE FASES A PARTIR MICROGRAFIAS REAIS\*

*Eneas Pacheco Moreira Junior<sup>1</sup>*

*Júlia Mendes dos Santos<sup>1</sup>*

*Felipe da Silva Siqueira<sup>1</sup>*

*Vanessa Aparecida de Toledo Santos<sup>2</sup>*

*Yuri Duarte Schwan<sup>2</sup>*

*Marcos Felipe Braga da Costa<sup>3</sup>*

*Guilherme Dias da Fonseca<sup>3</sup>*

*Wesley Luiz da Silva Assis<sup>4</sup>*

### Resumo

A partir do advento computacional, foram possíveis novas formas de análises comportamentais de fenômenos físicos via simulação computacional. Este trabalho visa utilizar de técnicas de visão computacional e processamento de imagens digital, aliado ao método do cone causal para simular evolução microestrutural em aços. A partir de uma micrografia, um domínio real em 2d foi obtido computacionalmente por visão computacional. Os contornos da microestrutura foram detectados por processamento de imagem digital. Nestes contornos foram simulados nucleação e crescimento de novos núcleos, pelo método do cone causal. Ao fim do trabalho foram apresentados, dados da evolução microestrutural do sistema estudado na forma de fração volumétrica versus tempo, área superficial por unidade de volume versus tempo e uma microestrutura discreta simulada. Apresenta-se neste trabalho uma nova ferramenta computacional para estudar reações de nucleação e crescimento em 2d a partir de microestruturas reais.

**Palavras-chave:** Recristalização; Cone Causal; Transformação de Fase; Evolução Microestrutural.

### COMPUTATIONAL SIMULATION OF PHASE TRANSFORMATION FROM REAL MICROGRAPHS

#### Abstract

From the computational advent, new forms of behavioral analysis of physical phenomena through computational simulation were possible. This work aims to use computational vision and digital image processing techniques, coupled with the causal cone method to simulate microstructural evolution in steels. From a micrograph, a real domain in 2d was obtained computationally by computer vision. The contours of the microstructure were detected by digital image processing. In these contours were simulated nucleation and growth of new nuclei by the causal cone method. At the end of the work were presented, data of the microstructural evolution of the system studied in the form of volumetric fraction versus time, surface area per unit volume versus time and a discrete simulated microstructure. In this work a new computational tool is presented to study nucleation and 2d growth reactions from real microstructures.

**Keywords:** Recrystallization; Causal Cone; Phase Transformation; Microstructural Evolution.

<sup>1</sup> Engenharia Metalúrgica, Graduando, Estudante, Departamento de Engenharia Metalúrgica, Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, Rio de Janeiro, Brasil.

<sup>2</sup> Engenharia Mecânica, Graduando, Estudante, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, Rio de Janeiro, Brasil

<sup>3</sup> Engenheiro Metalúrgico, Mestre em Engenharia Metalúrgica, Estudante, Departamento de Engenharia Metalúrgica, Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, Rio de Janeiro, Brasil.

<sup>4</sup> Engenheiro Químico, Mestre e Doutor em Engenharia Metalúrgica, Professor, Departamento de Ciências Exatas Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, Rio de Janeiro, Brasil.

## 1 INTRODUÇÃO

Processos de nucleação e crescimento são aqueles nos quais se encontram uma matriz inicial e em algum momento durante a reação, surgem novos núcleos e a partir destes, novas fases. Esta ou estas, novas fases geralmente são caracterizadas por terem propriedades diferentes das já existentes da matriz original. Tais propriedades podem ser cor, textura, densidade, propriedades elétricas, magnéticas, difusionais, orientações cristalográficas dentre outras. O processo de surgimento dessa nova fase é chamado rotineiramente de nucleação. Durante o processo de nucleação podem ser apresentadas mais de uma fase. São denominadas nucleações simultâneas quando as “n” fases surgem todas ao mesmo tempo, ou nucleação sequencial, quando estas surgem em posições distintas na linha do tempo.

Uma das aplicações do fenômeno de nucleação e crescimento são as transformações de fase que os metais sofrem em determinadas variações de temperatura, que conseqüentemente alteram propriedades como resistência mecânica, dureza, ductilidade e etc.

Modelos computacionais são tentativas de analisar predições físicas ou conseqüências de teorias científicas. As simulações computacionais, também fornecem importante alternativa para o auxílio em técnicas da ciência experimental, quando os fenômenos não são observáveis ou quando as medidas são impraticáveis ou inviáveis financeiramente. A experimentação numérica ou computacional, tem se tornado uma tendência real nas últimas décadas. Esta nova tendência de pesquisa foi apresentada por Mukhopadhyay, Loeck e Gottstein [1] em trabalhos recentes. O trabalho de Mukhopadhyay, Loeck e Gottstein [1] era uma simulação de evolução microestrutural que recebia alimentação indireta de dados experimentais. Os dados eram indiretamente fornecidos para a simulação computacional. Primeiro era realizado um procedimento experimental estatísticos para se obter os resultados, e somente depois disto os dados eram fornecidos para simulação computacional. Recentemente Assis [2] publicou um trabalho, no qual eram simuladas recristalizações de diferentes componentes de texturas cristalográficas. Rios *et al* [3] também publicou um artigo sobre a evolução de reações simultâneas simuladas pelo método do cone causal, na qual os dados de entrada do programa foram obtidos via bibliografia de trabalhos experimentais de outros grupos de pesquisa. Em todos estes trabalhos citados foram utilizados dados do mundo real como entrada para a simulação computacional, todavia, o domínio no qual foi realizada a análise numérica era apenas uma aproximação volumétrica com geometrias diferentes.

A ideia principal deste projeto foi utilizar matrizes computacionais que representam um sistema físico real para simular reações de nucleação e crescimento em materiais metálicos no estado sólido. Neste trabalho foi utilizada uma microestrutura de aço duplex 2205. A micrografia do material em questão foi obtida através de um microscópio ótico. E a partir desta foi possível fazer uma simulação computacional de nucleação e crescimento nos contornos de grãos desse aço, aplicando o Método do Cone Causal. O método estocástico (Cone Causal) usado neste trabalho já foi validado e publicado em diversas revistas previamente.

## 2 MATERIAIS E MÉTODOS

### 2.1 Obtenção da micrografia do Aço Duplex

O material em estudo é o aço inoxidável duplex 2205, de especificação UNS S31809, o qual foi fabricado e cedido pela empresa Villares Metals, na forma de barras redondas laminadas com dimensões de 500 mm de comprimento e 38,10 mm de diâmetro, tendo recebido de acordo com o certificado do produto que consta em anexo, tratamento de solubilização conforme a norma ASTM A182 grade F51, usinadas, com composição química na Tabela 1. Foram cortadas um total de 13 amostras em forma de cilíndrica medindo aproximadamente 38 mm de diâmetro x 14 mm de espessura, onde 12 amostras sem a necessidade de embutimento foram preparadas metalograficamente para sofrerem tratamento térmico de envelhecimento e uma para critério de comparação.

**Tabela 1** Composição química do aço inoxidável duplex fornecido pela Villares Metals (% em peso).

V	Nb	Ni	N	Co	W	Ti	Al
0,06	0,01	4,63	0,18	0,04	0,02	0,005	0,009
C	Mn	P	S	Si	Cu	Cr	Mo
0,016	1,61	0,020	0,0010	0,48	0,09	22,61	2,60

#### 2.1.1 Preparação Metalográfica

Após a realização dos tratamentos, as amostras foram preparadas para análise microestrutural, onde todas as amostras foram lixadas com lixa d'água de carbo de silício de granulometria de 120 a 2500 mesh utilizando uma lixadeira metalográfica manual.

Posteriormente ao lixamento, as amostras foram polidas para que se obtivessem superfícies planas e isentas ou com o mínimo de arranhões em uma politriz manual utilizando panos para polimento para diferentes granulometrias de pasta de alumina, realizados em duas etapas, inicialmente com pasta de 1 µm e finalizando com a pasta de 0,05 µm.

Na análise microestrutural, a fim de se revelar as microestruturas presentes no material, procedeu-se o ataque eletrolítico seletivo, no qual é composto por uma solução de 40 g de hidróxido de potássio (KOH), 100 ml de H<sub>2</sub>O, com imersão de 20s, utilizando uma voltagem de 5v, uma placa de aço inoxidável como catodo e foi utilizado uma fonte Instrutherm FA-3050.

#### 2.1.2 Microscopia óptica

Após as etapas de preparação metalográfica, ataque, as amostras foram analisadas no laboratório da EEIMVR através do microscópio Óptico OLYMPUS BX51M, com auxílio de uma câmera digital OLYMPUS SC30, conectada a um sistema de aquisição de imagens e acoplada ao microscópio óptico para análise da

microestrutura e obtenção das imagens para utilização no projeto, conforme descrito a seguir.

## 2.1 Processamento de Imagens

Os processos de visão computacional, muitas vezes, necessitam de uma etapa de pré-processamento envolvendo o processamento de imagens. As imagens de onde queremos extrair alguma informação em alguns casos precisam ser convertidas para um determinado formato ou tamanho e precisam ainda ser filtradas para remover ruídos provenientes do processo de aquisição da imagem.

Os ruídos podem aparecer de diversas fontes, como por exemplo, o tipo de sensor utilizado, a iluminação do ambiente, as condições climáticas no momento da aquisição da imagem, a posição relativa entre o objeto de interesse e a câmera. Note que ruído não é apenas interferência no sinal de captura da imagem, mas também interferências que possam atrapalhar a interpretação ou o reconhecimento de objetos na imagem.

Os filtros são as ferramentas básicas para remover ruídos de imagens, neste caso, o ruído é aquele que aparece no processo de aquisição da imagem. Os filtros podem ser espaciais (filtros que atuam diretamente na imagem) ou de frequência, onde a imagem é inicialmente transformada para o domínio de frequência usando a transformada de Fourier (geralmente através da transformada de Fourier discreta) e então é filtrada neste domínio e em seguida a imagem filtrada é transformada de volta para o domínio de espaço.

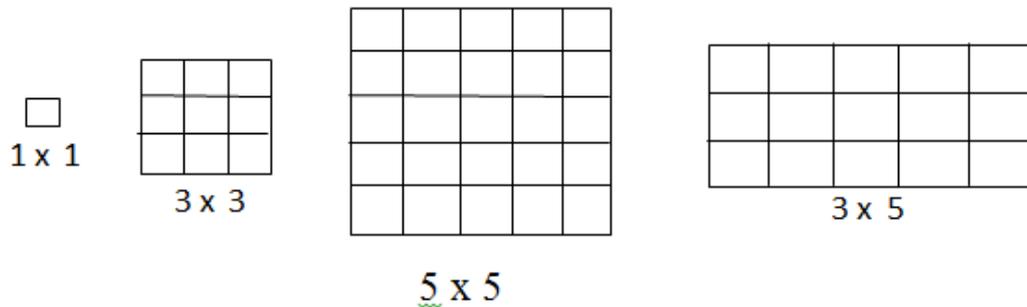
## 2.3 Domínio de Espaço

O termo domínio espacial se refere à imagem em si, e métodos que atuam no domínio espacial estão baseados na manipulação direta dos pixels da imagem. Os processos no domínio espacial são caracterizados pela equação 1:

$$g(x, y) = T(f(x, y)) \quad (1)$$

Onde:

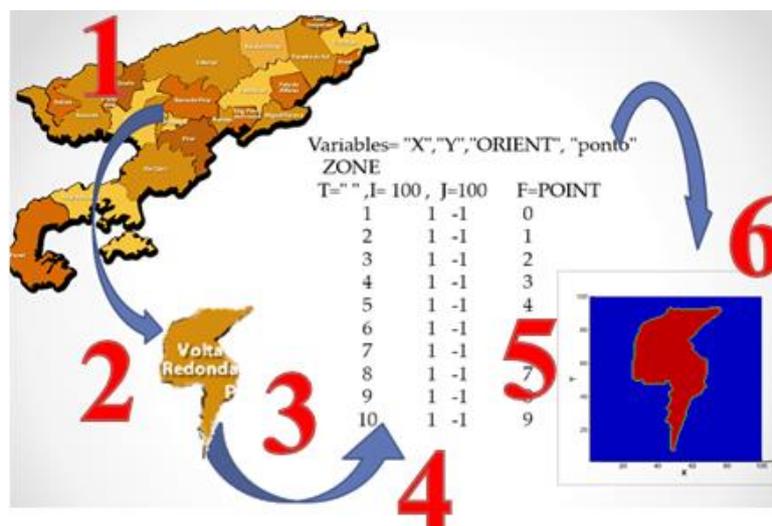
$f(x,y)$  é a imagem original,  $T( . )$  é uma transformação na imagem e  $g(x,y)$  é a imagem transformada.  $T$  é uma operação definida sobre uma vizinhança de influência do pixel que está localizado na posição  $x, y$ . A ideia de vizinhança de influência considera os pixels ao redor da posição  $x, y$ . Esta vizinhança é definida por uma região quadrada (ou retangular) e de tamanho (lado) impar. A Figura 1 mostra alguns exemplos de vizinhança com tamanhos variados, estas regiões, que definem matrizes nas operações de transformação, também são chamadas de máscaras Bradski e Kaehler [4].



**Figura 1:** Regiões de vizinhança (máscaras) de tamanhos diferentes, porém, todos com lado ímpar.

## 2.4 Virtualização em 2-d (Discretização em coordenadas cartesianas)

A virtualização em 2-d nada mais é do que obter informações das posições de cada pixel que forma a imagem e salva-la em um vetor ou matriz de estados que possa ser interpretado por um programa de visualização de grids. Cada imagem será transformada em uma matriz bidimensional, utilizando-se um programa que será desenvolvido pelo proponente juntamente com o aluno de iniciação científica. O código fonte do programa será escrito em código C/C++. Nesse programa será utilizada a biblioteca livre OpenCV. Esta biblioteca como descrita acima, vide revisão bibliográfica é uma biblioteca específica de análise e processamento de imagens digitais. A obtenção da imagem real (digital) e transformação em um vetor de estados podem ser mais bem elucidadas a partir da Figura 2.



**Figura 2:** Representação esquemática da transformação dos pixels em vetores e representação em programa de visualização em 2-d.

Depois do desenvolvimento do código computacional em C++ com auxílio das bibliotecas necessárias inicia-se a fase de aplicação da metodologia desenvolvida. O algoritmo de utilização do programa pode ser entendido via legenda numérica apresentada na Figura 2, e descrita no parágrafo adiante:

1. Escolha da imagem a ser representada numericamente;
2. Edição e tratamento da imagem para delimitar o domínio ou região de estudo;
3. Conversão dos pixels em matriz numérica;
4. Escrita dos dados numéricos em arquivo de saída no formato de coordenadas cartesianas;

5. Abertura do resultado (arquivo de saída) em um programa de visualização gráfica para validação visual da malha gerada a partir da imagem;  
6. Após validado o domínio pode ser utilizado como dado de entrada de diversos modelos numéricos, tais como: Volumes Finitos, Diferenças Finitas, Autômato Celular, Phase Field, Monte Carlo, Cone causal dentre outros Salazar, Assis e Rios [6].

As matrizes reescritas em forma de coordenadas cartesianas da etapa 4 serão visualizadas (teste de visualização) na etapa 5 no programa de representação gráfica, Tecplot 360. Além disso, também serão possíveis a utilização dessas matrizes por programas de simulação computacional de códigos abertos.

## 2.5 Validação da simulação com os modelos analíticos

Para primeira avaliação da validade da simulação proposta, utilizando-se o software Wolfram Mathematica®, os dados da simulação foram comparados com as equações analíticas da fração volumétrica versus tempo ( $V_V$ ) e da área superficial por unidade de volume ( $S_V$ ) versus tempo. As equações 2 e 3 representam o modelo de JMAK [7-10] e o modelo DeHoff respectivamente.

$$V_V(t) = 1 - \exp(-\pi N_V G^2 t^2) \quad (2)$$

$$S_V(t) = 0.65 * 2\pi N_V G^2 t (\exp(-\pi N_V G^2 t^2)) \quad (3)$$

## 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A partir das técnicas de metalografia, obteve-se a micrografia apresentada na figura 3:

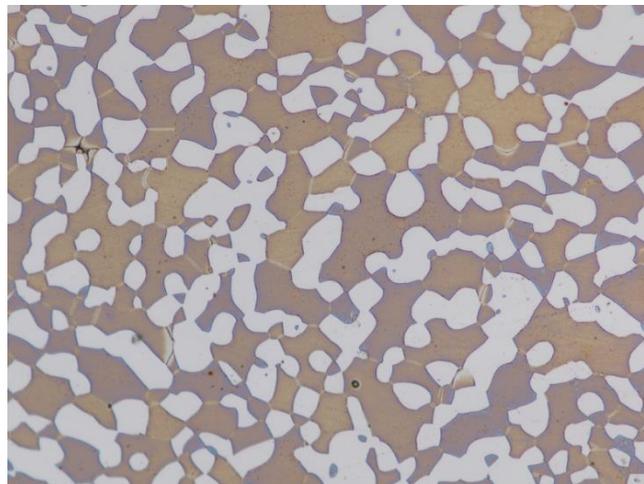
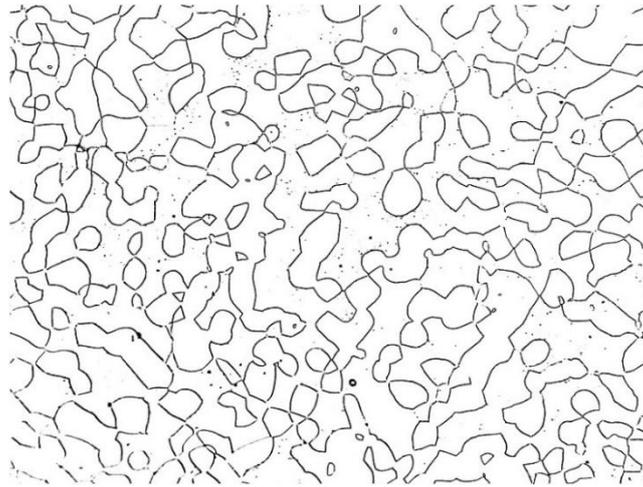


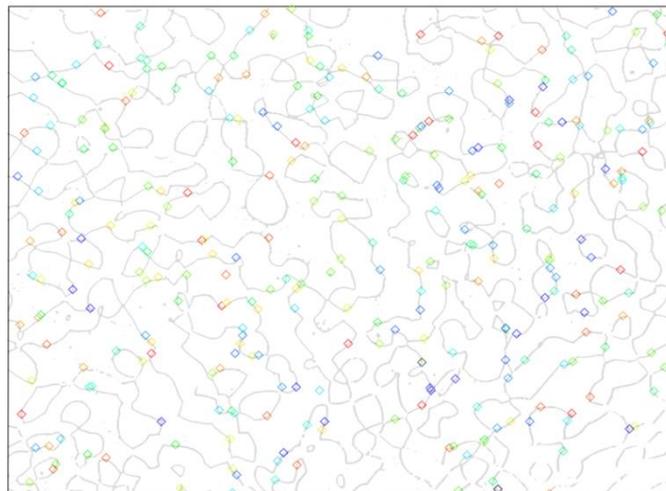
Figura 3: Micrografia do aço duplex 2205.

Subsequentemente, para o estudo da transformação de fase nos contornos de grãos, foi necessário o tratamento da imagem para que fossem destacados os mesmos. Pois, o método utilizado depende do contraste entre interior do grão e seus contornos, para que a nucleação no contorno ocorra. Após o tratamento, verificou-se o resultado exibido na figura 4.



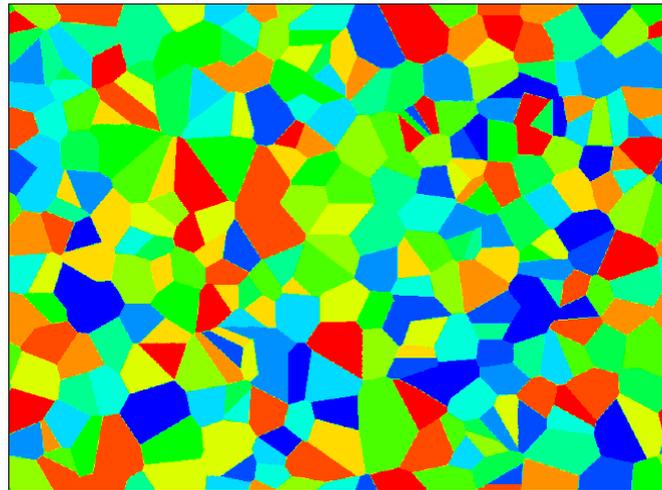
**Figura 4:** Micrografia do aço duplex submetida ao tratamento de imagem.

De posse da Figura 4, através do código desenvolvido em C++, foi gerada uma malha computacional baseada na micrografia em questão. Utilizando o Método do Cone Causal, fez-se a simulação da transformação de fase com trezentos núcleos da nova fase. Na figura 5 é exposta a micrografia tratada após o surgimento dos núcleos.



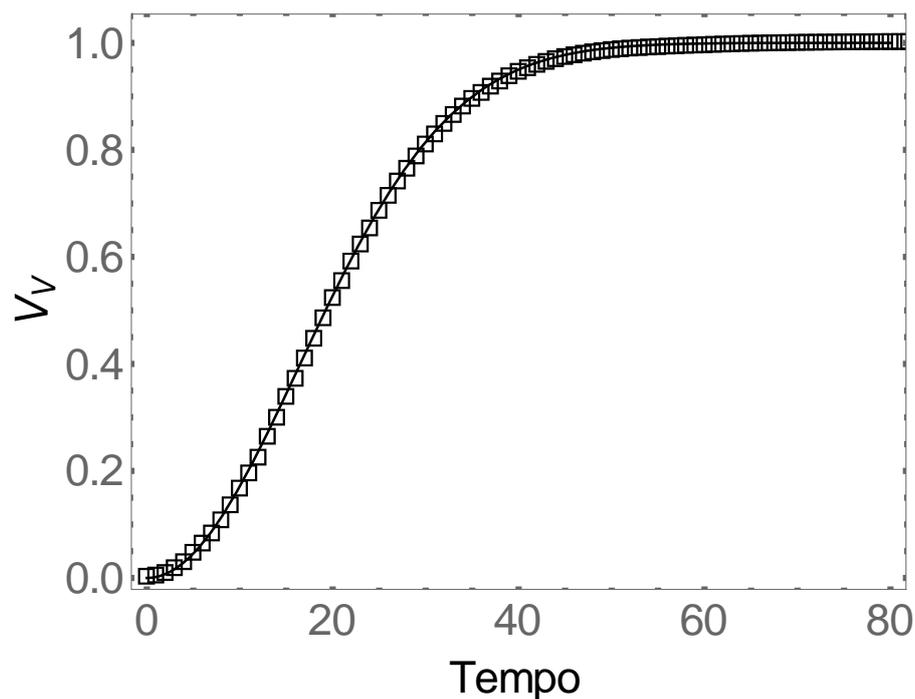
**Figura 5:** Microestrutura tratada após o surgimento dos núcleos

No esquema prático da figura 5 foi considerado nucleação por saturação de sítios, no qual todos os núcleos surgem num mesmo instante ' $t$ ' de transformação. A partir do método do cone causal foi feita a simulação do crescimento dos núcleos mostrados na figura 5. Ao final da simulação, uma nova microestrutura foi obtida, conforme mostrado na figura 6.



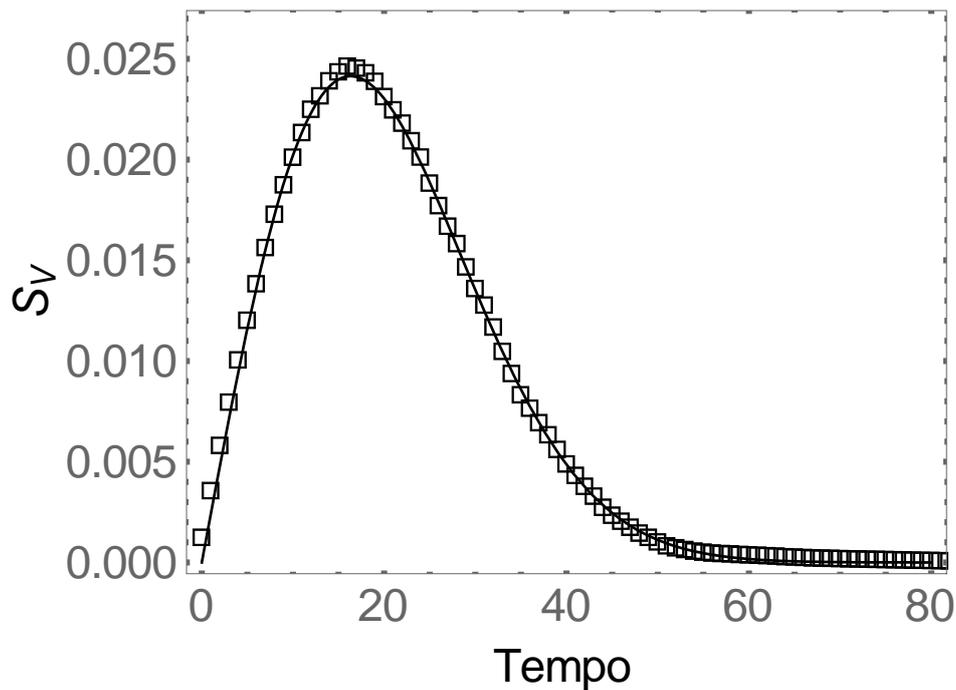
**Figura 6:** Estrutura obtida através da simulação.

Na figura 6 estão apresentados grãos de Voronoi típicos de crescimentos com velocidades constantes de crescimento. Com os dados obtidos da simulação e as equações (2) foi construído um gráfico de  $V_V$  versus tempo de transformação analíticos e numéricos, onde o modelo analítico é mostrado por uma linha e os dados obtidos na simulação por quadrados.



**Figura 7:** Comparação de  $V_V$  obtido na simulação com a equação analítica

Observa-se uma boa concordância entre o modelo analítico e o numérico na figura 7. A figura 8 é a representação da área superficial por unidade de volume em função do tempo de recozimento simulado e analítico.



**Figura 8:** Comparação de  $S_v$  obtido na simulação com a equação analítica

É válido ressaltar que os não existe ajuste de curvas entre o modelo numérico e o modelo computacional. Pois as circunstâncias nas quais foram realizadas a simulação computacional atendem com boa concordância a predição analítica.

#### 4 CONCLUSÃO

Este trabalho apresentou um excelente método que aproxima o mundo real da simulação computacional via visão computacional

O método de nucleação nos contornos é bem representada pelo programa computacional conforme a figura 5.

Mesmo com a ocorrência da nucleação nos contornos (não aleatória) o modelo JMAK de demonstrou corroborante com a simulação computacional

A microestrutura final apresenta grãos equiaxiais, provavelmente pela baixa quantidade de núcleos iniciais para a matriz apresentada no estudo.

Os resultados obtidos são bastante satisfatórios e sugerem uma maior exploração desta nova ferramenta computacional criada neste trabalho.

#### Agradecimentos

Agradecemos primeiramente a Deus, aos nossos pais e familiares envolvidos, ao professor Wesley Luis da Silva Assis, aos amigos e aos membros do grupo de trabalho do Núcleo de Modelamento Microestrutural, por toda força e contribuição dadas.

#### REFERÊNCIAS

- 1 Mukhopadhyay P., Loeck M., Gottstein G., A cellular operator model for the simulation of static recrystallization, Acta Mater. 55 (2) 551–564, 2007.

- 2 W.L.S. Assis, 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.
- 3 Rios P.R., Vilela H., Oliveira S.C., New methodology to model simultaneous and sequential reactions: Main results and applications. Materials Science forum vols. 706-709, 149-156, 2012.
- 4 Bradski G., Kaehler A., Learning OpenCV Computer Vision with the OpenCV Library, Gravenstein Highway North, O'Reilly, 2008.
- 5 Salazar T.C., Assis W.L.S., Rios P.R., Simulation of recrystallization in iron single crystals, Materials Research, Vol. 11 No 1, 109-115, 2008.
- 6 JOHNSON, W. A. AND MEHL, R. F. Reaction kinetics in processes of nucleation and growth, Transactions Metallurgical Society, A.I.M.E, vol.135, 416-441, 1939.
- 7 Kolmogorov A.E., On the static theory of metal crystallization, Akad. Nauk SSSR, Izv., Ser. Mater. 1 355, 1937.
- 8 Avrami M., Kinetics of phase change. I. General theory, J. Chem. Phys. 7 1103–1112, 1939.
- 9 Avrami M., Kinetics of phase change. II. Transformation-time relations for random distribution of nuclei, J. Chem. Phys. 8 212–224, 1940.
- 10 Avrami M., Kinetics of phase change. III. Granulation, phase change and microstructure, J. Chem. Phys. 9 177–184, 1941.