

SIMULAÇÃO DA EVOLUÇÃO MICROESTRUTURAL EM 3D DE REAÇÕES DE NUCLEAÇÃO E CRESCIMENTO PELO MÉTODO DO AUTÔMATO CELULAR ¹ EFEITO DO MODO DE NUCLEAÇÃO E DA VELOCIDADE DE CRESCIMENTO

Wesley Luiz da Silva Assis ²
Paulo Rangel Rios ³
José Adilson de Castro ⁴
Flávio Faria de Oliveira ⁵
Luciana Lopes de Oliveira ⁶

Resumo

A simulação da transformação de fase/recristalização é simulada com o autômato celular em três dimensões. A evolução microestrutural simulada é comparada em detalhe com as predições das teorias analíticas matematicamente exatas (quando possível), que consideram a cinética de crescimento e os aspectos geométricos das fases. Um acordo muito bom é observado entre a simulação do autômato celular e os resultados teóricos. Além disso, os dados simulados são usados para testar as expressões novas derivadas recentemente para descrever a evolução das relações entre grãos transformados/recristalizados. Os resultados deste trabalho são aplicáveis a todo tipo transformação por nucleação e do crescimento.

Palavras-chave: Recristalização; Autômato celular; Transformação de fase; Simulação.

SIMULATION OF THE MICROSTRUCTURE EVOLUTION IN 3D OF REACTIONS OF NUCLEATION AND GROW BY CELLULAR AUTOMATA METHOD EFFECT OF KIND OF NUCLEATION AND THE VELOCITY OF GROWTH

Abstract

The simulation of the transformation of Phase/recrystallization simulated with the cellular automata in three dimensions. The simulated microstructural evolution is compared in detail with the predictions of accurate the theories analytical mathematically when this is possible, that consider kinetic of growth and the geometric aspects of the phases. A very good agreement is observed enters the theoretical simulation of the cellular automaton and results. Moreover, the simulated data are used to test the new expressions derivatives recently to describe the evolution of the relations between transformed/recrystallized daughter nodules. The results of this work are applicable the all type transformation for nucleation and of the growth.

Key words: Recrystallization; Cellular automata; Transformation of phase; Simulation

¹ Contribuição técnica apresentada na 61º Congresso Anual da ABM, de 24 a 27 de julho de 2006, Rio de Janeiro – RJ

² Engenheiro Químico, Mestrando em Engenharia Metalúrgica na Universidade Federal Fluminense – UFF, Volta Redonda RJ

³ Prof. PhD em Engenharia Metalúrgica, coordenador do curso de pós-graduação em Engenharia Metalúrgica da Universidade Federal Fluminense – UFF

⁴ Prof. PhD em Engenharia Metalúrgica, Volta Redonda RJ

⁵ Graduando em Engenharia de Produção / Aluno de Iniciação Científica da Universidade Federal Fluminense – UFF Volta Redonda RJ

⁶ Graduanda em Engenharia Metalúrgica / Aluna de Iniciação Científica da Universidade Federal Fluminense – UFF Volta Redonda RJ

INTRODUÇÃO

Velocidade de Avanço de Interfaces

Nos trabalhos anteriores,^[1,2] o estudo da evolução microestrutural não levou em consideração a variação da velocidade de avanço das interfaces. Foi utilizado o método dos Autômatos Celulares (A.C) implementado em linguagem Fortran 90, com objetivo de simular a transformação de fase/recristalização. Durante a simulação era considerado que todos os núcleos cresciam com velocidade constante.

Por meio da técnica 3DXRD Juul Jensen^[3] mostra que estas considerações não são exatas em um processo experimental real para a recristalização e em muitos outros casos de transformação de fase. Observa-se um decréscimo da velocidade de avanço das interfaces em função do tempo de reação total. No caso da recristalização, segundo Rios e Padilha^[4] o decréscimo da velocidade de avanço das interfaces das regiões transformadas durante a recristalização, se dá basicamente em função de dois fatores: da concorrência entre a recuperação e a própria recristalização que acontecem simultaneamente, e da diferença entre os gradientes de energia armazenada entre regiões deformadas. Sabe-se, que uma avaliação equivocada de dados, pode acarretar num decréscimo de velocidade de transformação/recristalização. Um clássico exemplo é quando se analisam dados de uma matriz que contém núcleos agrupados “clusters” supondo que estes tenham distribuição aleatória na matriz.

A cinética da recristalização primária é tradicionalmente analisada usando a teoria clássica de Johnson e Mehl, Avrami e Kolmogorov (teoria JMAK).^[5-7] Nesta teoria supõe-se que a nucleação aconteça em locais aleatórios na matriz deformada. Esta suposição é importante porque a aleatoriedade permite o uso de uma relação geométrica exata para corrigir o efeito da interferência, “impingement”, entre as regiões recristalizadas. A interferência ocorre quando o tamanho das regiões recristalizadas é tal que uma região impede ou interfere no crescimento da outra. Além da suposição de que a nucleação é aleatória, a teoria de JMAK também supõe que a taxa de crescimento é constante e uniforme, que a interferência é uniforme e que a forma dos grãos é esférica. Na realidade a idéia de que a distribuição seja aleatória é questionável. Fora destas circunstâncias a aplicação da teoria de JMAK não seria em princípio válida. Na prática, entretanto, ela é utilizada mesmo quando se têm dúvidas sobre se premissas são obedecidas.

Neste trabalho é feita uma investigação do efeito do modo de nucleação e da velocidade de crescimento. Foram estudados dois modos de nucleação: por saturação de sítios e nucleação constante.

O novo código utilizado foi idealizado para simular a recristalização com velocidade decrescente de avanço das interfaces. Porém, pode ser adaptado para outras transformações de fase por nucleação e crescimento.

MATERIAL E MÉTODOS

Simulação

A simulação da transformação de fase foi realizada utilizando-se o método dos autômatos celulares seguindo a implementação da técnica de Hesselbarth e Gobel^[8] para transformações/recristalização, utilizando von Neumann como critério de vizinhança e condições de contorno periódicas. Utilizou-se nesse novo código a regra de transição probabilística^[9] para autômatos celulares. Além de seguir ao fator

vizinhança transformada para ocorrer novas transformações nos tempos seguintes, têm-se também uma probabilidade sobre desse fator. Sendo assim, se existir uma célula não transformada próximo à um vizinho que está transformado, no próximo tempo ela não se transformará impreterivelmente como antes, e sim provavelmente. Essa mudança de estado dependerá de uma probabilidade, que no caso do código em questão foi utilizada $1/\sqrt{t}$, onde t é o tempo de reação. Sendo assim, quanto maior for o tempo de reação menor será a probabilidade de transformação.

A simulação nos fornece uma seqüência de matrizes em função do tempo de reação. Com essas matrizes, várias análises quantitativas foram feitas. Uma batelada suficiente de dados é fornecida para fazer um estudo estereológico e quantitativo para acompanhar a evolução (cinética) das transformações de fase. Alguns exemplos dos parâmetros que podem ser medidos são: quantidade de núcleos iniciais por unidade de volume, N_V , fração transformada por unidade de volume, V_V , área das interfaces entre regiões transformadas e não transformadas, S_V , e etc.

Após a simulação, foram feitos vários gráficos para a representação das quantidades acima, e posteriormente uma comparação com a teoria analítica que será descrita a seguir.

Desenvolvimento Teórico

A evolução microestrutural do processo é proposta para ser representada formalmente em termos de nucleação e crescimento. Segundo Vandermeer e Masumura,^[10] a nucleação constante e o avanço das interfaces transformadas em uma matriz acontecem até que a transformação desta se complete. A dependência da taxa de nucleação, \dot{N} , e da velocidade de avanço de interfaces, G , pelo tempo pode ser representada por:

$$\dot{N} = N_1 * t^{\delta-1} \quad (1)$$

$$G = r * P * t^{r-1} \quad (2)$$

Onde t é o tempo de reação e N_1 , quantidade inicial de núcleos, P é a taxa de avanço de interfaces e r , constante que determina a inclinação da curva. Sendo que r pode assumir valores entre 0 e 1 para existir um crescimento. Interfaces que se recolhem têm valores negativos de r , neste caso, não existe crescimento. Quando r é igual a 1 o crescimento é constante, ou seja, a interface transformada avança constantemente para dentro da matriz. Se o parâmetro r assume um valor igual a 0,5 tem-se crescimento do tipo parabólico e para outros valores de r , há aceleração ou desaceleração do movimento de avanço da interface.

A base da teoria do modelo analítico de recristalização/transformação é matematicamente exata, resultante da teoria JMAK e posteriormente, reformulada por DeHoff^[11] com o conceito de caminho microestrutural. Sabendo-se que a teoria JMAK é aplicável apenas para nucleações aleatórias, existe a possibilidade de converter um espaço estendido em espaço real. Dessa forma, pode-se calcular a fração volumétrica transformada real e a área interfacial por unidade de volume real através das seguintes fórmulas:

$$X_V = 1 - \exp(-V_{VEX}) \quad (3)$$

$$S_V = (1 - V_V) * S_{VEX} \quad (4)$$

Onde V_V é a fração transformada por unidade de volume, V_{VEX} é o espaço estendido de fração transformada por unidade de volume, S_V é área interfacial por

unidade de volume e S_{VEX} é área interfacial estendida por unidade de volume. Já a adaptação de DeHoff ao modelo JMAK mostra a variação da área interfacial entre região transformada e não transformada por unidade de volume, S_V , em função da fração transformada, V_V . Essa variação pode ser dada por:

$$S_{VEX} = C * (V_{VEX})^q \quad (5)$$

Onde q e C são constantes e podem ser calculadas por:

$$q = \frac{2r + \delta}{3r + \delta} \quad (6)$$

Para nucleação constante tem-se que δ é um valor fixo e igual à 1. Sendo r uma constante que pode assumir diferentes valores e com limites entre 0 e 1, para cada reação distinta. A constante C , pode ser determinado pela seguinte equação:

$$C = K_V K_S^{-q} P^{2-3q} N_1^{1-q} \Gamma(s) \Gamma(x)^{-q} \quad (7)$$

Quando a nucleação é do tipo saturação de sítios tem-se um valor nulo para δ , sendo assim, o parâmetro C pode ser calculado pela seguinte equação:

$$C = \left(\frac{K_S^3}{K_V^2} N_1 \right)^{1/3} \quad (8)$$

Substituindo-se as equações (3) e (4) na equação (5), pode-se obter uma equação onde a área interfacial real por unidade de volume é função da fração transformada real por unidade de volume. Como é demonstrado na seguinte equação:

$$S_V = C * \left((1 - X_V) * \ln \left(\frac{1}{1 - X_V} \right) \right)^q \quad (9)$$

RESULTADOS

Descrição da Simulação

Durante as simulações foram utilizadas matrizes com volume de 304^3 células e 4096 núcleos iniciais quando a nucleação é do tipo saturação de sítios. Para nucleação constante foi utilizada uma taxa de 5 núcleos por unidade de volume por unidade de tempo. Os núcleos foram distribuídos aleatoriamente na matriz, para que a teoria JMAK fosse utilizada. Utilizou-se também, durante a simulação, velocidade decrescente de avanço das interfaces. As grandezas fornecidas pela simulação computacional são todas adimensionais. Por 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 não ocorreu nenhum crescimento, até o final da simulação.

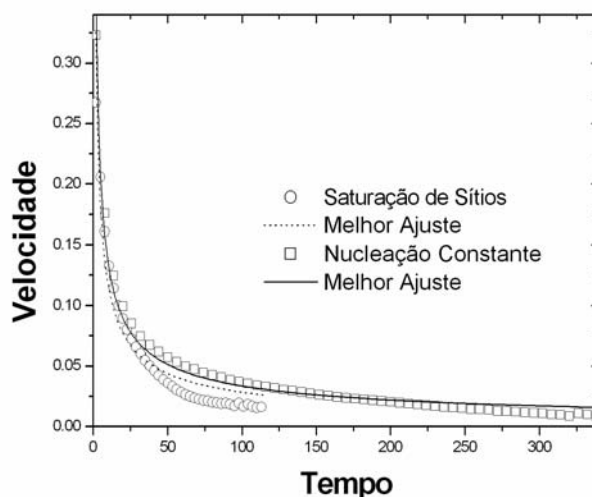


Figura 1. Velocidade de avanço versus tempo de reação

Na Figura 1 é demonstrado o comportamento microestrutural em relação à velocidade de reação. Nesta Figura, é apresentado que a velocidade média de reação é maior no caso de nucleação constante do que para nucleação por saturação de sítios. Entretanto, o término da reação de transformação de matrizes nucleadas por saturação de sítios é antecipado em relação ao fim da reação em matrizes que são nucleadas constantemente.

Por meio da equação (2) foi possível ajustar os parâmetros r e P . Foram encontrados os seguintes valores para saturação de sítios e nucleação constante.

Tabela 1. Parâmetros P e r ajustados

Tipo de Nucleação	P	r	R^2
Saturação de Sítios	$1,32905 \pm 0,09243$	$0,37718 \pm 0,01382$	0,93772
Constante	$1,44125 \pm 0,03028$	$0,38902 \pm 0,00388$	0,97958

O gráfico abaixo demonstra o clássico perfil da curva do caminho microestrutural, onde S_v fica em função de V_v .

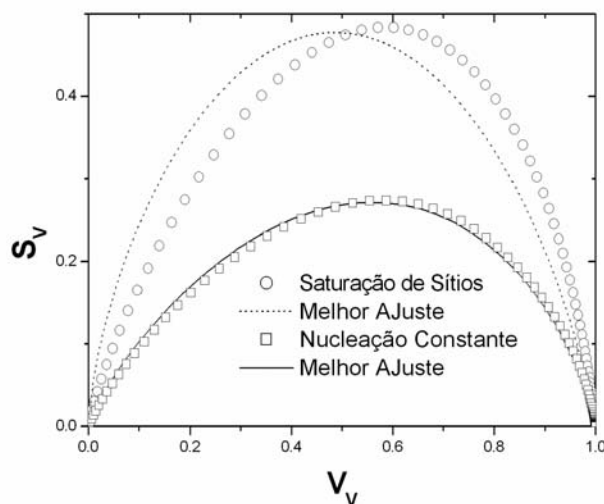


Figura 2. Caminho Microestrutural

Com o auxílio da equação (9) ajustou-se o parâmetro C e encontraram-se os seguintes valores para nucleação por saturação de sítios e nucleação constante respectivamente:

Tabela 2. Parâmetro C ajustado

Tipo de Nucleação	C	R ²
Saturação de Sítios	1,21875 ± 0,01694	0,95883
Constante	0,725 ± 0,00143	0,99733

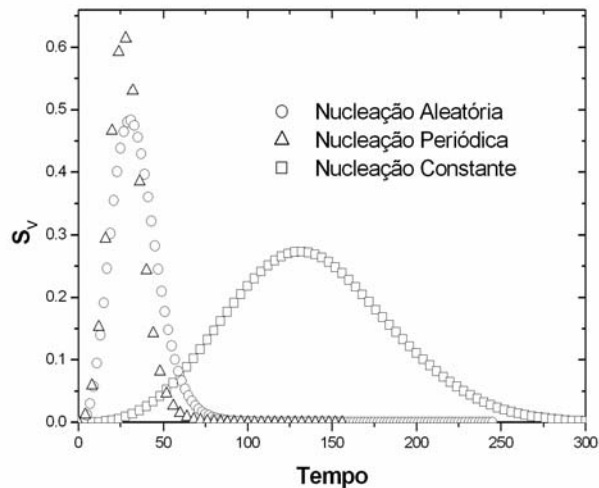


Figura 3. S_v versus Tempo de reação

A Figura (3) apresenta o comportamento da evolução da área interfacial por unidade de volume em função do tempo de reação. E ainda exibe o comportamento de uma matriz com núcleos equidistantes.

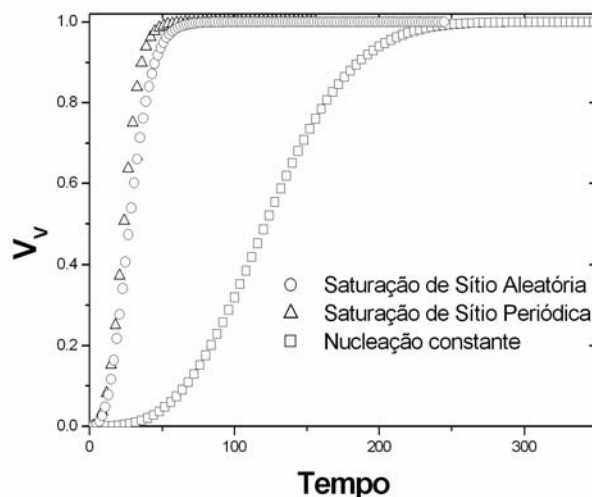


Figura 4. V_v versus Tempo de reação

A Figura (4) proporciona a visualização da evolução da fração transformada por unidade de volume. A Figura acima também exibe uma matriz contendo núcleos equidistantes para meio de comparação.

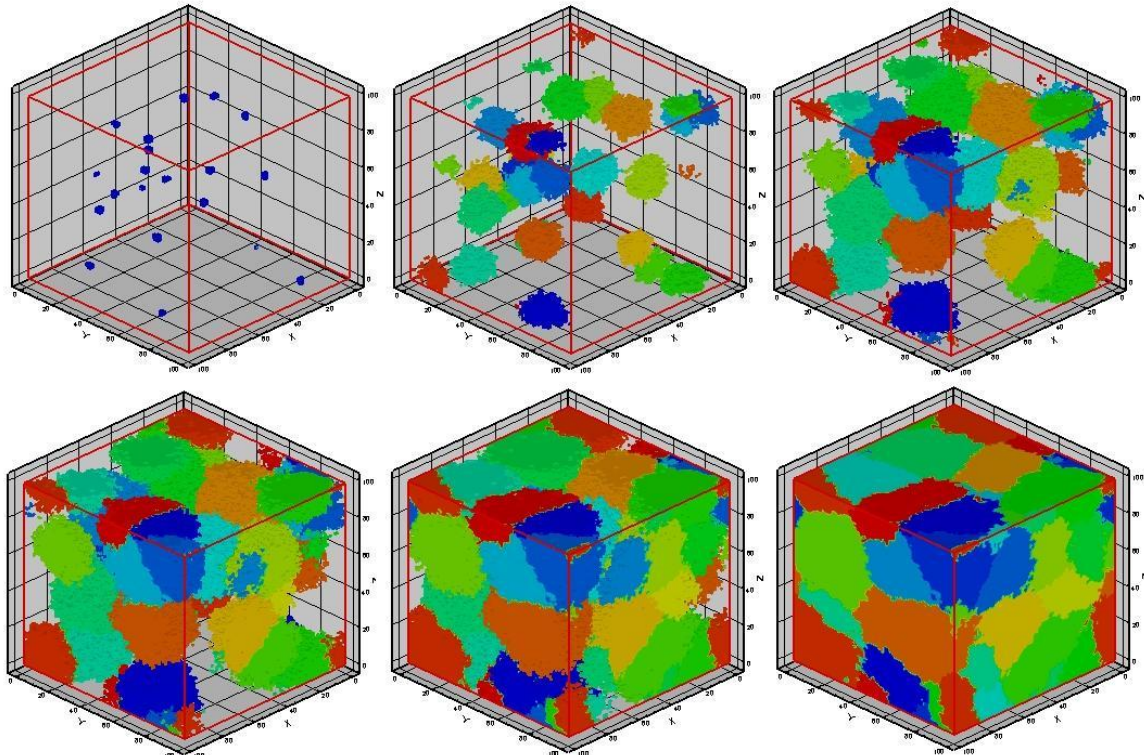


Figura 5. Evolução da microestrutura durante a simulação.

A Figura 5 representa uma microestrutura gerada por um programa de visualização gráfica utilizando os resultados da simulação. Demonstra a evolução microestrutural durante da transformação em uma matriz em três dimensões, com volume de 100^3 células com 20 núcleos. A primeira matriz esboçada contém os núcleos com seus tamanhos iniciais e logo a seguir, proporciona-se a ideia de evolução microestrutural de 20 em 20% de fração transformada até atingir a recristalização total na última imagem.

DISCUSSÃO

O método dos autômatos celulares foi escolhido devido à sua simplicidade, facilidade de implementação e flexibilidade, permitindo modificações para introdução de novas considerações.

Quando utilizadas hipóteses da teoria JMAK o modelo produz resultados semelhantes aos teóricos previstos.

Pode-se observar que as curvas analíticas ajustadas apresentaram uma boa concordância com o novo método, quando se leva em conta a variação de velocidade durante a reação. Houve um pequeno deslocamento entre as curvas do modelamento matemático e as curvas geradas pelos dados de simulação.

A aproximação da curva de caminho microestrutural também foi razoável para uma matriz de 304^3 e 4096 núcleos iniciais, pois nota-se que o coeficiente de correlação para nucleação constante é um pouco mais exato do que quando se utiliza nucleação do tipo saturação de sítios para simulação.

Para o caso da nucleação periódica não temos equações exatas, mas pode-se observar uma curva com um perfil muito semelhante ao da nucleação aleatória, essa semelhança pode ser observada na Figura 4. A diferença está no tempo de reação para a curva de fração volumétrica em função do tempo onde a simulação com nucleação periódica termina num tempo bem menor em relação à nucleação

aleatória. Observa-se também que a área interfacial máxima por unidade de volume alcançada para matrizes com nucleação periódica é maior do que a área interfacial por unidade de volume em matrizes com nucleação aleatória.

CONCLUSÃO

Com a concordância obtida entre simulado e calculado, conclui-se que o método é viável para simulações de transformações de nucleação e crescimento. Com o auxílio da Figura 5 pode-se concluir também que a evolução microestrutural por meio de simulação computacional se assemelha muito a uma evolução real. E também pode ser uma ótima ferramenta para o estudo de casos que ainda não existem equações analiticamente exatas para descrever fenômenos de transformações com nucleação e crescimento. Como no caso de reações com disposição de núcleos não aleatórias, tipo matrizes contendo clusters ou com núcleos dispostos periodicamente (eqüidistantes).

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 a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, FAPERJ.

REFERÊNCIAS

- 1 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).
- 2 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
- 3 Juul Jensen, D. *Recrystallization kinetics: from statics to dynamics and from 2D to 3D*. *Materials Science and Technology* v. 21 n° 12 2005
- 4 Rios, P. R.; Padilha, A. F. *Microstructural Path of Recrystallization in a Commercial Al-Fe-Mn-Si (AA3003) Alloy* *Materials Research*. V.6 n° 4, 605-613, 2003.
- 5 A. N. Kolmogorov, *Izv. Akad. Nauk. USSR-Ser-Matemat*, vol.1(3), p.355, 1937.
- 6 W. A. Johnson e R. F. Mehl, *Transactions Metall. Soc. A.I.M.E.*, vol. 135, p.416–441, 1939.
- 7 M. Avrami, *Journal of Chemical Physics*, vol. 7, p.1103-1112, 1939.
- 8 Hesselbarth H.W.; Gobel, I.R. *Simulation of recrystallization by cellular automata*. *Acta Metall. Mater* v. 39 n.º 9, p 2135-2143, 1991
- 9 Dewri, R.; Chakraborti. *Simulating recrystallization through cellular automata and genetic algorithms*. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. V13 (173-183) 2005
- 10 Vandermeer, R.A.; Masumura, R.A.; Rath, B.B. *Microstructural paths of shape-preserved nucleation and growth transformation* *Acta metal. Mater* v.39 p383-389, 1991
- 11 R. T. DeHoff, *Annealing Processes Recovery, Recrystallization and Grain Growth* (editado por N. Hansen, D. Juul-Jensen, T. Leffers e B. Ralph), p. 35–52. Risø National Laboratory, Roskilde, Dinmark, 1986.