

# SIMULAÇÃO DA RECRISTALIZAÇÃO PELO MÉTODO DO AUTÔMATO CELULAR EM 2D: COMPARAÇÃO COM MODELOS ANALÍTICOS EXATOS E AVALIAÇÃO DO EFEITO DA DISTRIBUIÇÃO DOS NÚCLEOS <sup>(1)</sup>

*Janaina da Costa Pereira Torres de Oliveira*<sup>(2)</sup>

*Valmir Torres de Oliveira*<sup>(3)</sup>

*Paulo Rangel Rios*<sup>(4)</sup>

*José Adilson de Castro*<sup>(5)</sup>

## Resumo

A simulação da recristalização em duas dimensões é realizada pelo método do autômato celular. A evolução microestrutural simulada é comparada em detalhes com as teorias analíticas matematicamente exatas que consideram tanto os aspectos cinéticos quanto os geométricos. Uma concordância muito boa é observada entre a simulação do autômato celular e os resultados teóricos. A forma como os núcleos são distribuídos afeta consideravelmente a cinética, o caminho microestrutural e a contigüidade. Este trabalho focaliza a recristalização, mas seus resultados são aplicáveis a qualquer transformação de nucleação e crescimento.

**Palavras-chave:** Cinética; Recristalização; Simulação computacional; Autômato celular.

<sup>1</sup> 60° Congresso da ABM – Internacional; 25 a 28 de julho de 2005, Minas Centro – Centro de Convenções e Feiras. Belo Horizonte – MG – Brasil.

<sup>2</sup> Engenheira Metalúrgica, Mestre em Engenharia Metalúrgica, aluna do curso de Doutorado em Engenharia Metalúrgica da EEIMVR/UFF. E-mail: janainacpt@bol.com.br

<sup>3</sup> Engenheiro Metalúrgico, aluno do curso de Mestrado em Engenharia Metalúrgica da EEIMVR/UFF. E-mail: valmir\_amo@amsted-maxion.com.br

<sup>4</sup> Professor Ph. D do curso de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica da EEIMVR/UFF. E-mail: prrios@metal.eeimvr.uff.br

<sup>5</sup> Professor Ph. D do curso de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica da EEIMVR/UFF. E-mail: adilson@metal.eeimvr.uff.br

## 1 Introdução

Recentemente tem-se observado um grande aumento na simulação computacional da evolução microestrutural. Por exemplo, há muitos trabalhos de simulação computacional da evolução do crescimento de grão, utilizando uma extensiva faixa de técnicas de simulação. Um pouco menos de atenção foi dada à recristalização. Uma técnica promissora para recristalização é a do autômato celular. Hesselbarth e Göbell aplicaram-a para a recristalização em trabalhos anteriores. Outros trabalhos também aplicaram essas técnicas[2-8].

Uma importante questão que surge quando um modelo computacional é escolhido, é se ele é capaz de prever os resultados processados. Em outras palavras, até que ponto se pode confiar, se o modelo simula realmente o processo ou o fenômeno desejado. Embora o teste final de todo o modelo deva representar exatamente a realidade, seu primeiro teste deve determinar sua habilidade de descrever o fenômeno nos casos simples para o qual há matematicamente uma solução analítica exata. Um "bom" modelo deve ser capaz de concordar o mais próximo com as soluções analíticas matematicamente exatas. Além disso, se válida, a simulação pode ajudar no desenvolvimento da própria teoria analítica. A simulação não pode fornecer dados exatos para as situações em que não há ainda nenhuma teoria disponível.

A base do modelamento analítico da recristalização são os resultados matematicamente exatos de Johnson-Mehl[9], Avrami[10-12] e Kolmogorov[13], a teoria de JMAK, estendida pelo conceito de DeHoff[14] do caminho microestrutural. Vandermeer e colaboradores têm usado com sucesso esta aproximação e a desenvolveram recentemente[15-17]. A descrição detalhada desta teoria tem sido dada recentemente por Rios e Padilha[18]. Nesta teoria, a nucleação é suposta ocorrer em locais situados aleatoriamente na matriz. A suposição mais simples é que toda a nucleação ocorre no começo da recristalização. Isto é chamado normalmente de saturação de sítios, e é uma suposição razoável para a recristalização por ter sido comprovada experimentalmente[19].

Neste trabalho, uma simulação da recristalização é realizada no autômato celular (AC). A evolução microestrutural simulada é comparada em detalhes com as teorias analíticas matematicamente exatas que consideram tanto os aspectos cinéticos quanto os geométricos. Além da comparação da simulação com a teoria, foi feita uma avaliação do efeito da variação da distribuição dos núcleos (aglomerados)[20] na cinética, no caminho microestrutural e na contigüidade. Vale salientar que embora este trabalho focalize a recristalização, seus resultados são aplicáveis a qualquer transformação de nucleação e crescimento.

## 2 SIMULAÇÃO DO AUTÔMATO CELULAR

### 2.1 Descrição da Simulação

A metodologia do autômato celular foi usada para simular a recristalização. A implementação seguida por Hesselbarth e Göbel[1,7,8] utiliza o critério da vizinhança de von Neumann. A matriz consistiu em uma matriz quadrada com *812x812 células* e *784 núcleos*. É considerado que uma célula tem uma unidade de área e conseqüentemente o lado de uma única célula tem um comprimento de unidade. As unidades de todas as quantidades relatadas aqui, seguem as mesmas. O número de núcleos por unidade de área,  $N_A$ , é igual a 1/841. O tamanho da matriz e o número de núcleos foram escolhidos pelas razões descritas em um trabalho

anterior[7,8]. Os núcleos foram distribuídos aleatoriamente na matriz. A nucleação é por saturação de sítios: onde todos os núcleos apareceram em  $t = 0$ . A simulação produz uma seqüência de matrizes como uma função do tempo. O tempo no AC é discreto e ele toma os valores inteiros que partem de  $t = 0$ . Uma unidade de tempo, corresponde ao intervalo entre duas matrizes consecutivas atualizadas[1,8]. Da matriz simulada, todas as quantidades desejadas poderiam ser extraídas. Hesselbarth e Göbel relatam, no geral, com mais detalhes o autômato celular bidimensional. Oliveira[8] dá detalhes adicionais da presente simulação.

Além da distribuição aleatória dos núcleos, outros tipos de distribuição dos núcleos foram utilizados, tais como:

- ⇒ distribuição periódica: a matriz foi dividida em 784 grupos de 29x29 células e em cada grupo foi locado um núcleo posicionado no centro do grupo. Dessa forma os núcleos ficaram distribuídos eqüidistantes (periodicamente);
- ⇒ distribuição agrupada: a matriz foi dividida em 784 grupos de 29x29 células, cada grupo foi escolhido aleatoriamente e em cada grupo foi distribuído aleatoriamente uma quantidade de núcleos, tendo quatro combinações relacionadas a seguir:
  - 392 grupos → 2 núcleos distribuídos aleatoriamente em cada grupo;
  - 196 grupos → 4 núcleos distribuídos aleatoriamente em cada grupo;
  - 98 grupos → 8 núcleos distribuídos aleatoriamente em cada grupo;
  - 49 grupos → 16 núcleos distribuídos aleatoriamente em cada grupo.

## 2.2 Geometria e Cinética da Evolução de um Único Grão em Autômato Celular

Quando um único grão cresce isolado, sozinho em uma matriz deformada, é possível encontrar expressões analíticas para a sua evolução geométrica e cinética. As seguintes expressões são específicas para o critério da vizinhança de Von Neumann, adotado nesta simulação. A origem do tempo,  $t = 0$ , corresponde a uma fração da área,  $A_A = 0$ . Toda a nucleação ocorre em  $t = 0$ , e nesse instante o tamanho de todos os núcleos é igual a zero. Conseqüentemente, a área de um único grão,  $a$ , e seu perímetro,  $l$ , em  $t = 0$  é igual a:

$$a(0) = 0 \quad (1a)$$

$$l(0) = 0 \quad (1b)$$

A área de um único grão,  $a$ , como uma função de tempo, para  $t \geq 1$ , é[8]:

$$a(t) = 2t^2 - 2t + 1 \quad (2)$$

Esta equação não é válida para  $t = 0$ . Negligenciando os termos de mais baixa ordem de tempo:

$$a(t) \cong 2t^2 \text{ unidades de área} \quad (3)$$

Há um erro na Eq.3, mas será usada mesmo assim. A Eq.3 sugere que para se obter melhores resultados com o AC, é melhor usar uma matriz de dimensões maiores com um número pequeno de núcleos.

O perímetro de um único grão,  $l$ , como uma função de tempo, para  $t \geq 1$ , é[8]:

$$l(t) = 8t - 4 \quad (4)$$

Novamente, negligenciando os termos de mais baixa ordem de tempo:

$$l(t) \cong 8t \text{ unidades de comprimento} \quad (5)$$

A velocidade interfacial,  $v$ , pode ser calculada com a ajuda da equação de Cahn-Hagel[21] para 2D:

$$v = \frac{da}{dt} \quad (6)$$

Inserindo as Eqs. 3 e 5, temos:

$v = 0,5$  unidades de comprimento/unidades de tempo

As unidades serão omitidas de agora em diante.

A velocidade interfacial é uma constante. Então, para um único grão, a simulação foi capaz de produzir uma taxa de crescimento constante.

A integral da curvatura de qualquer figura fechada ao longo do seu perímetro é  $2\pi$ , assim a curvatura interfacial comum de um único grão é, para  $t \geq 1$ :

$$k = \frac{2\pi}{l(t)} \quad (7)$$

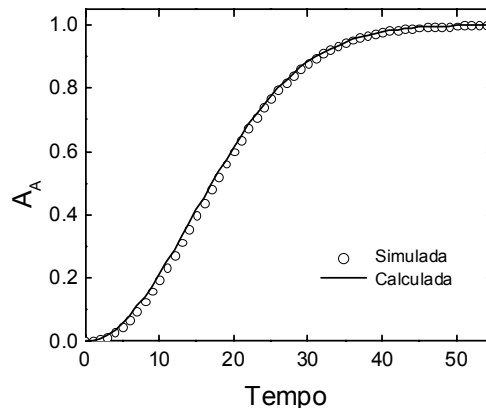
$$k = \frac{\pi}{4(t-1/2)} \cong \frac{\pi}{4t} \quad (8)$$

Se considerar o grupo de todos os grãos crescendo como se eles estivessem isolados, é comum referir a este grupo como "espaço estendido" e as propriedades geométricas deste grupo como "quantidade estendida". Por exemplo, a soma da área de todos os grãos crescendo como se eles estivessem isolados dividido pela área total é normalmente chamada de "fração de área estendida". Essa terminologia será usada nos tópicos seguintes.

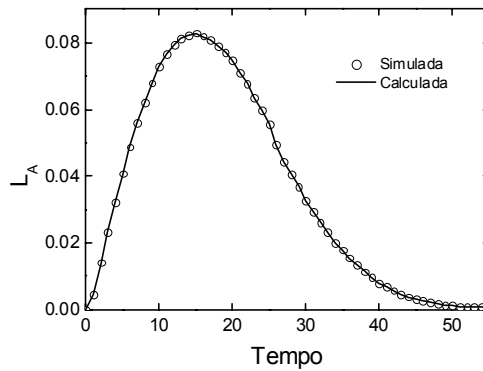
### 3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

#### 3.1 Comparação das Teorias Analíticas Exatas com a Simulação Aleatória

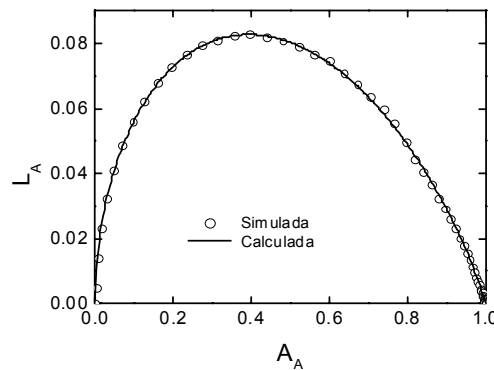
As Figuras 1-4 mostram os resultados obtidos da simulação comparado com as expressões teóricas. Nesta seção, as expressões derivadas das seções anteriores para a evolução de um único grão são utilizadas para obter as expressões de medidas "globais", isto é, as medidas médias tais como fração de área e comprimento interfacial por unidade da área. As expressões calculadas são comparadas com os resultados da simulação.



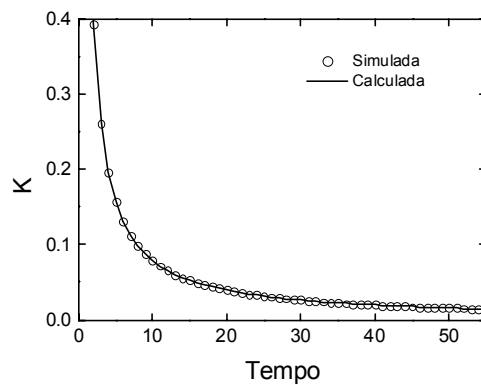
**Figura 1.** Fração de área,  $A_A$ , contra o tempo. Os resultados da simulação têm uma concordância muito boa com aqueles calculados na cinética de um único grão, Eq.10.



**Figura 2.** O comprimento interfacial entre região recristalizada e não recristalizada por unidade de área,  $L_A$ , contra o tempo. Os resultados da simulação têm uma concordância muito boa com os calculados na cinética de um único grão, Eq.12.



**Figura 3.** Caminho microestrutural: o comprimento interfacial entre região recristalizada e não recristalizada por unidade de área,  $L_A$ , contra a fração de área,  $A_A$ . Os resultados da simulação têm uma concordância muito boa com aqueles calculados na cinética de um único grão, Eq.14.



**Figura 4.** A curvatura média interfacial entre região recristalizada e não recristalizada, interfaces móveis, por unidade de área,  $k$ , contra o tempo. Os resultados da simulação têm uma concordância muito boa com aqueles calculados na cinética de um único grão, Eq.8.

A fração de área estendida,  $A_{AE}$ , é a soma da área de todos os grãos individuais, supondo que eles crescem sem colidirem. O subscrito "E" é reservado

para as “quantidades estendidas” definindo de uma maneira similar para a fração de área estendida.

$$A_{AE} = N_A a = 2N_A t^2 \quad (9)$$

Para núcleos localizados aleatoriamente, a fração de área estendida é relacionada à fração de área real,  $A_A$ , pela expressão de JMAK[9-13]:

$$A_A = 1 - \exp(-2N_A t^2) \quad (10)$$

A Figura 1 mostra uma comparação entre  $A_A$  calculado da solução analítica e a obtida da simulação do AC. A concordância é muito boa. O comprimento interfacial estendido entre regiões transformadas e não transformadas,  $L_{AE}$ , é a soma do comprimento interfacial de todos os grãos individuais supondo que eles crescem sem se tocarem:

$$L_{AE} = N_A l = 8N_A t \quad (11)$$

Para núcleos situados aleatoriamente, o comprimento interfacial estendido está ligado ao comprimento interfacial real,  $L_A$ , pela expressão de DeHoff[14]:

$$L_A = L_{AE}(1 - A_A) = 8N_A t \exp(-2N_A t^2) \quad (12)$$

A Figura 2 mostra uma comparação entre  $L_A$  calculado da solução analítica e o obtido da simulação do AC. A concordância é muito boa. O caminho microestrutural, em duas dimensões, pode ser visto como uma curva ( $A_A$ ,  $L_A$ ) no plano.

Das Eqs. 3 e 5:

$$l = 4\sqrt{2}\sqrt{a} \quad (13)$$

Multiplicando ambos os lados por  $N_A$  e usando a Eq.13:

$$L_A = \sqrt{32N_A}(1 - A_A) \sqrt{\ln\left(\frac{1}{1 - A_A}\right)} \quad (14)$$

A Figura 3 mostra uma comparação entre os valores calculados, utilizando a expressão teórica para o caminho microestrutural obtido anteriormente e aqueles obtidos da simulação. A concordância é muito boa. A velocidade do contorno de grão é dada por:

$$v = \frac{da}{dt} = \frac{1}{L_{AE}} \frac{dA_{AE}}{dt} = \frac{1}{L_A} \frac{dA_A}{dt} = 0,5 \quad (15)$$

A velocidade do contorno de grão calculada dos valores simulados foi  $0,51 \pm 0,01$ , muito próximo do previsto teoricamente. Isto significa que a velocidade interfacial no espaço real é a mesma que no espaço estendido, como esperado.

A curvatura média interfacial entre região recristalizada e não recristalizada pode ser medida pelo método de varredura da tangente, de DeHoff[22]:

$$k = \frac{\pi T_A}{L_A} \quad (16)$$

$T_A$  é o número de pontos de tangência entre uma varredura da linha teste e um contorno de grão por unidade de área teste. Também pela multiplicação e divisão da Eq.9, por  $N_A$ , e utilização da Eq.12:

$$k = \frac{\pi}{4t} = \frac{2\pi N_A(1 - A_A)}{L_A} \quad (17)$$

JMAK supõe que a forma da interface permanece inalterada após a colisão. Por exemplo, a interface entre região recristalizada e não recristalizada de um grão circular após a colisão permanece como o arco de um círculo de mesmo raio do raio do círculo que ele teria se estivesse crescendo como um grão isolado. Isto implica

que a curvatura média interfacial entre região recristalizada e não recristalizada, Eq.16, é igual à curvatura média de um único grão, Eq.17.

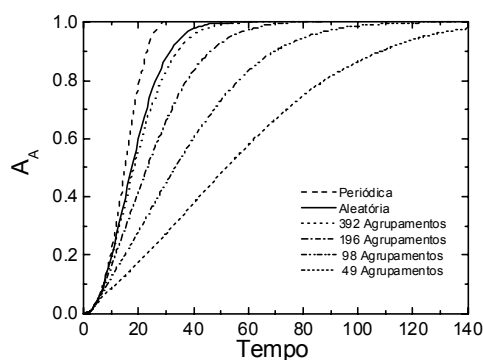
A Figura 4 mostra uma comparação entre os valores calculados usando a expressão teórica, Eqs. 8 ou 17, obtida de um único grão, para a curvatura média interfacial entre região recristalizada e não recristalizada por unidade de área,  $k$ , e os valores obtidos da simulação, por meio do método de varredura da tangente, Eq.16, a concordância é muito boa. Isto significa que a forma de interface em movimento permanece a mesma, após a colisão, como suposto na teoria de JMAK.

É importante enfatizar que as curvas calculadas nas Figuras 1-4 não foram ajustadas mas obtidas da cinética de um único grão, utilizando nada mais do que a correção de JMAK para colisão. A concordância entre a teoria e a simulação mostra que o AC é um bom modelo para a recristalização. Ele é capaz de reproduzir exatamente as situações para os quais há soluções matematicamente exatas.

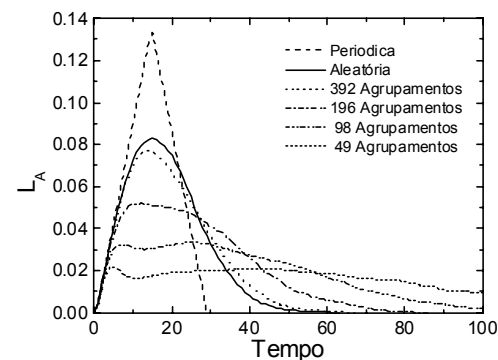
### 3.2 Influência do Desvio da Aleatoriedade

Na seção anterior mostrou que o autômato celular é um bom modelo, pois, há uma concordância entre a teoria analítica e a simulação, mas, em situações onde a distribuição dos núcleos foge da aleatoriedade não há ainda nenhuma teoria analítica. Nesta seção será mostrado o efeito da variação da distribuição dos núcleos.

Fica claro na Figura 5, que quanto maior for a concentração de núcleos numa região, agrupamento, o efeito da interação entre os núcleos, colisão, será mais forte, ou seja, a completa recristalização ocorrerá em um tempo maior, quando comparada com a distribuição aleatória dos núcleos. Esse fato não acontece quando a distribuição dos núcleos é periódica, pois, todos os núcleos tem um caminho igual para a evolução da interface antes da colisão, o que reduzirá o tempo para a recristalização. Já na Figura 6, novamente o mesmo fato é comprovado, mas, vale ressaltar que quanto maior for a interação entre os núcleos, menor será o comprimento interfacial entre região recristalizada e não recristalizada,  $L_A$ , em um mesmo tempo; para a distribuição periódica ocorre o inverso quando comparado à distribuição aleatória e distribuição aglomerada.



**Figura 5.** Fração de área,  $A_A$ , contra o tempo. Resultados da simulação variando a forma como os núcleos são distribuídos.



**Figura 6.** Efeito da distribuição dos núcleos no comprimento interfacial entre região recristalizada e não recristalizada por unidade de área,  $L_A$ , contra o tempo.

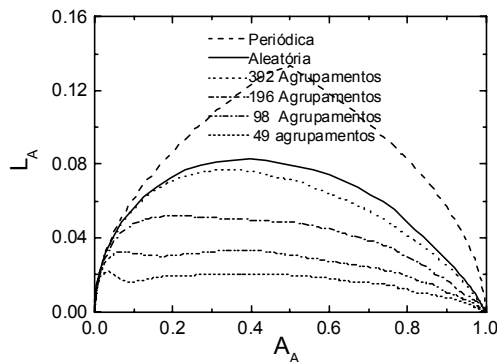
O caminho microestrutural é muito mais sensível à forma como os núcleos são distribuídos quando comparado com a fração de área em função do tempo[8].

Isto pode ser comprovado através da Figura 7 e novamente o efeito da interferência dos grãos é visto. Como eles estão aglomerados, eles se colidem mais rapidamente, diminuindo dessa forma o comprimento interfacial entre regiões recristalizadas e não recristalizadas,  $L_A$ , em função da fração transformada,  $A_A$ .

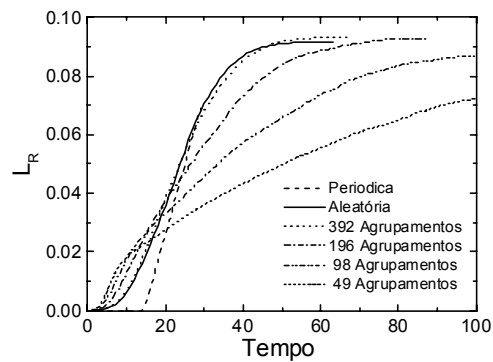
Há dois tipos de interface durante a recristalização: móvel e imóvel. A interface móvel é a interface entre a região recristalizada e a matriz deformada. Esta interface migra e sua migração determina o progresso da recristalização. A interface imóvel é uma consequência da colisão de grãos recristalizados. O tamanho de grão recristalizado é uma função da área interfacial entre grãos recristalizados quando a recristalização atinge 100%.

Tradicionalmente, o estudo da recristalização é focado na interface móvel. Isto pôde ser visto na seção anterior. Todas as equações envolvem somente  $L_A$ . Entretanto, a quantidade de interface entre grãos recristalizados é uma quantidade importante e contém informação valiosa sobre a evolução da recristalização. A simulação do AC é capaz de fornecer dados exatos destas interfaces. Na Figura 8, o comprimento interfacial entre regiões recristalizadas,  $L_R$ , aumenta do periódico para o aglomerado, *49 grupos com 16 núcleos em cada grupo*, até aproximadamente *dez unidades de tempo do autômato celular*, este fato se dá, pelo fato de no início o efeito da interação entre os núcleos ser mais forte, mas ao longo do tempo, o comprimento interfacial não tem grandes acréscimos em seu valor conforme aumenta o número de núcleos no aglomerado. O comprimento interfacial da interface entre regiões recristalizadas por unidade de área,  $L_R$ , e para a área interfacial total por unidade de área,  $L_T$ , é definida como:

$$L_T = L_A + 2L_R \quad (18)$$



**Figura 7.** Caminho microestrutural: o comprimento interfacial entre região recristalizada e não recristalizada por unidade de área,  $L_A$ , contra a fração de área,  $A_A$ . Resultados da simulação variando a forma como os núcleos são distribuídos.

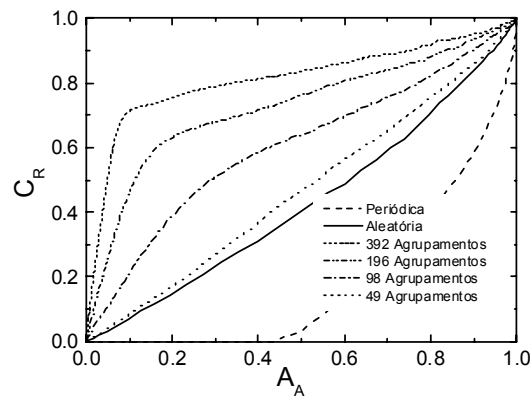


**Figura 8.** Efeito da distribuição dos núcleos no comprimento interfacial entre regiões recristalizadas,  $L_R$ , contra o tempo.

Uma outra quantidade importante é o parâmetro da contigüidade,  $C_R$ . A contigüidade é a relação do comprimento interfacial imóvel para o comprimento interfacial total e é completamente sensível aos desvios da aleatoriedade da localização dos núcleos, como mostrado recentemente por Vandermeer e Jensen[23]. Pode ser definido[23]:



$$C_R = \frac{2L_R}{L_A + 2L_R} \quad (19)$$



**Figura 9.** Contigüidade,  $C_R$ , contra o tempo. Resultado da simulação variando a forma como os núcleos são distribuídos.

A sensibilidade do parâmetro da contigüidade em relação aos desvios da aleatoriedade na distribuição dos núcleos é mostrada na Figura 9, é observado que para o caso onde os núcleos são distribuídos periodicamente a curva da contigüidade fica abaixo da curva aleatória e que para as demais situações as curvas ficam acima. Mostrando que a interferência entre os grãos produz comprimento interfacial entre grãos recristalizados maior. A curva de 392 agrupamentos é a que mais se distancia da curva aleatória e a que tem menos núcleos por grupos, pode-se dizer que a que tem mais núcleos por grupos está próximo da curva aleatória porque o parâmetro medido na contigüidade é da interface imóvel, que mesmo a interferência sendo maior, para este caso, a mesma não migrará.

É visto claramente que a forma como os núcleos são distribuídos na matriz deformada afeta consideravelmente os parâmetros utilizados neste trabalho.

#### 4 CONCLUSÕES

A concordância é muito boa entre a simulação do autômato celular (AC) e as expressões teóricas, mostrando que o AC é um bom modelo para a recristalização. O AC é capaz de reproduzir exatamente a saturação de sítios, situação de velocidade constante, para o qual há soluções exatas.

A forma como os núcleos são distribuídos, afeta consideravelmente o tempo de recristalização e os demais parâmetros utilizados neste trabalho. Quanto maior for a quantidade de núcleos no aglomerado, maior será o efeito na forma como os núcleos são distribuídos.

Vale ressaltar, que nenhum parâmetro ajustável aos dados simulados foi utilizado neste trabalho.

O presente trabalho enfatizou a recristalização, mas seus resultados são gerais e podem ser aplicados para qualquer transformação de nucleação e crescimento.

## Agradecimentos

Esse trabalho foi apoiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, CAPES, e Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, FAPERJ.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 Hesselbarth, H.W.; Göbel I.R. *Acta Metall Mater.*, v. 39, p. 2135-2143, 1991.
- 2 Pezzee C. F.; Dunand D. C. *Acta Metall. Mater.*, v. 42, p. 1509-1524, 1994
- 3 Sessa V.; Fanfoni M.; Tomellini M. *Phys. Review B*, v. 54, p. 836-841, 1996
- 4 Goetz R. L.; Seetharaman V. *Metall. Mater. Trans A*, v. 29A, p.2307-2321. 1997
- 5 Marx V.; Reher F. R.; Gottstein G. *Acta Mater.*, v. 47, p. 1219-1230. 1999
- 6 Pineda E.; Pradell T. *Phil. Mag A*, v. 82, p.107-121, 2002.
- 7 Rios P. R.; Carvalho J. J. S.; Salazar T. C.; Paula F. V. L.; Castro J. A, *Materials Science Forum*, v. 467-470, p. 659-664, 2004.
- 8 Oliveira J. C., M. Sc. thesis, Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, Brasil, 2004.
- 9 Johnson, W.A.; Mehl, R.F. *Transactions AIME*, v. 135, p. 416-441, 1939.
- 10 Avrami, M.J. *Journal of Chemical Physics*, v. 7, p.1103-1112 , 1939.
- 11 Avrami, M.J. *Journal of Chemical Physics*, v. 8, p.212-224 , 1940.
- 12 Avrami, M.J. *Journal of Chemical Physics*, v. 9, p.177-184 , 1941.
- 13 Kolmogorov, A.N. *Izv. Akad. Nauk. USSR-Ser. Matemat.*, v. 1. p. 355-359, 1937.
- 14 DeHoff, R.T. in *Annealing Processes—Recovery, Recrystallization and Grain Growth*, Proceedings, Hansen, N.; Juul Jensen, D.; Leffers, T.; Ralph, B. (Eds), p.35-52, Risø National Laboratory, Roskilde, Denmark, 1986.
- 15 Vandermeer, R.A.; Masumura, R.A. *Acta Metall. Mater.*, v. 40, p. 877-886, 1992.
- 16 Vandermeer, R.A.; Juul-Jensen, D. *Interface Science*, v. 6, p. 95-104, 1998.
- 17 Vandermeer, R.A.; Juul-Jensen, D. *Acta Materialia*, v. 49, p. 2083-2094, 2001.
- 18 Rios, P. R.; Padilha A. F. *Materials Research*, v. 6, p. 605-613, 2003.
- 19 Lauridsen E. M.; Poulsen H. F.; Nielsen S. F.; Juul-Jensen D. *Acta Materialia*, v.51, p. 4423-4435, 2003.
- 20 Oliveira, V. T., trabalho não publicado.
- 21 Cahn, J.W.; Hagel, W. *Decomposition of Austenite by Diffusional Processes*, Zackay, Z.D. and Aaronson, H.I. (Eds), Interscience Pub., New York, NY, p. 131-196, 1960
- 22 DeHoff R. T. *Trans. Metall. Soc. AIME*, v. 239, p. 617-621, 1967.
- 23 Vandermeer, R.A.; Juul-Jensen, D. *Materials Science Forum*, v. 467-470, p. 193-196, 2004.

# SIMULATION OF RECRYSTALLIZATION FOR THE METHOD OF THE CELLULAR AUTOMATA IN TWO DIMENSIONS: COMPARISON OF ANALYTICAL MODELS AND VALUATION OF THE EFFECT OF THE DISTRIBUTION OF THE NUCLEI

*Janaina da Costa Pereira Torres de Oliveira<sup>(2)</sup>  
Valmir Torres de Oliveira<sup>(3)</sup>  
Paulo Rangel Rios<sup>(4)</sup>  
José Adilson de Castro<sup>(5)</sup>*

## **Abstract**

Cellular automata simulation of recrystallization in two dimensions is carried out. The simulated microstructural evolution is compared in detail with the predictions from mathematically exact analytical theories considering both kinetic and geometrical aspects. Very good agreement is observed between the cellular automata simulation and the theoretical results. The form as the nuclei are distributed considerably affect the kinetic, the microstructural path and the contiguity. This work focuses on recrystallization but its results are applicable to any nucleation and growth transformation.

**Key-words:** Kinetics; Recrystallization; Computer simulation; Cellular automata.

<sup>1</sup> *60<sup>th</sup> Annual ABM International Congress - 25 - 28 July, 2005, Minas Centro – Centro de Convenções e Feiras. Belo Horizonte – MG – Brasil.*

<sup>2</sup> *Metallurgical Engineer, Metallurgical Master Engineer and Student of the degree Doctor course in Metallurgical Engineering at Universidade Federal Fluminense – UFF. E-mail: janainacpt@bol.com.br*

<sup>3</sup> *Metallurgical Engineer and Student of the degree Master course in Metallurgical Engineering at Universidade Federal Fluminense – UFF. E-mail: valmir\_amo@amsted-maxion.com.br*

<sup>4</sup> *Professor Ph. D of the Doctor and Master degree course in Metallurgical Engineering of UFF/EEIMVR. E-mail: prrios@metal.eeimvr.uff.br*

<sup>5</sup> *Professor Ph. D of the Doctor and Master degree course in Metallurgical Engineering of UFF/EEIMVR. E-mail: adilson@metal.eeimvr.uff.br*