



ANÁLISE TOPOLÓGICA DA MICROESTRUTURA DE FERRO PURO POLICRISTALINO COM NUCLEAÇÃO ALEATÓRIA¹

Daniel Souto de Souza²
 Wesley Luiz da Silva Assis³
 Paulo Rangel Rios⁴
 Gláucio Soares da Fonseca⁵

Resumo

A caracterização de microestruturas de materiais metálicos é de suma importância na quantificação e na qualificação das propriedades finais desejadas dos mesmos. Os materiais metálicos têm sido frequentemente caracterizados via microscopia, ótica e eletrônica. Estes mecanismos baseiam-se na análise em 2D seguidas de correções analíticas para atingir resultados em 3D. No entanto, tais correções baseiam-se em suposições aproximadas da estrutura do material. É de fundamental importância conhecer qual aproximação é aplicável a cada material. Nesse trabalho analisa-se qual destas é aplicável à microestrutura gerada a partir da simulação por autômato celular. A partir de resultados obtidos pela análise estereológica de ferro puro policristalino, obteve-se valores que foram utilizados como dados de entrada na simulação. A partir da microestrutura gerada pelo autômato, houve a análise estereológica e finalmente ocorreu a comparação de resultados com dados analíticos relativos a diferentes tipos de poliedros encontrados na bibliografia.

Palavras-chave: Autômato celular; Recristalização; Topologia; Ferro puro.

TOPOLOGICAL ANALYSIS OF THE MICROSTRUCTURE OF PURE POLYCRYSTALLINE IRON WITH RANDOM NUCLEATION

Abstract

Microstructural characterization of metallic materials is of paramount importance in the quantification and qualification of the desired final properties of the same. Metallic materials have often been characterized via microscopy, optical and electronic. These mechanisms are based on 2D analysis followed by corrections in order to achieve analytical results in 3D. However, such corrections are based on assumptions of approximate of the material structure. Is of fundamental importance know which approach is applicable to each material. In this paper we analyze which of these is applicable to the microstructure generated from the cellular automata simulation. From results obtained by stereological analysis of polycrystalline pure iron, obtained values that were used as input in the simulation. From the microstructure generated by the automata, there was the stereological analysis, and finally there was the comparison of results with analytical data to different types of polyhedra found in the bibliography.

Key words: Cellular automata; Recrystallization; Topology; Pure iron.

¹ Contribuição técnica ao 66º Congresso Anual da ABM, 18 a 22 de julho de 2011, São Paulo, SP, Brasil.

² Graduando em Engenharia Mecânica, Aluno de Iniciação Científica da Universidade Federal Fluminense – UFF, Volta Redonda, RJ.

³ Engenheiro Químico, Dr. em Engenharia Metalúrgica na Universidade Federal Fluminense – UFF, Volta Redonda, RJ.

⁴ Prof. Ph.D. em Engenharia Metalúrgica, Prof. Titular dos cursos de graduação e pós-graduação em Engenharia Metalúrgica da Universidade Federal Fluminense – UFF.

⁵ Prof. Dr. em Engenharia Metalúrgica, Prof. Adjunto I dos cursos de graduação e pós-graduação em Engenharia Metalúrgica da Universidade Federal Fluminense – UFF

1 INTRODUÇÃO

A caracterização de microestruturas de materiais metálicos é de suma importância na quantificação e na qualificação das propriedades finais dos mesmos. Dentre os métodos mais utilizados para esse fim está a metalografia, que consiste na análise morfológica e estrutural da microestrutura metálica.

Todavia, as técnicas tradicionais de metalografia não permitem que sejam deduzidas certas informações, geométricas e morfológicas, sobre uma microestrutura tridimensional a partir de observações metalográficas numa única seção plana. Num policristal, informações fundamentais, como a distribuição de volumes e de números de faces dos grãos, não podem ser obtidas com precisão por métodos de metalografia quantitativa bidimensional. Tendo em vista as limitações das técnicas metalográficas bidimensionais e impulsionada pela crescente necessidade de materiais cada vez melhores, que dependem de um detalhado conhecimento da microestrutura, há uma transição dos estudos microestruturais de 2D para 3D. Especificamente, hoje se tem simulações computacionais 3D, teorias analíticas 3D e técnicas de caracterização microestrutural 3D. O número de seções sobre técnicas e teorias 3D em congressos internacionais, por exemplo, TMS, atestam esta tendência.

Particularmente, as teorias analíticas demonstraram serem muito convenientes, pois através de manipulações analíticas advindas de aproximações do grão do material a formas geométricas, torna-se possível a obtenção de diversos dados metalográficos. No entanto, certas limitações, como a imprecisão e a aplicabilidade seletiva, destas teorias geram a necessidade de um estudo prévio sobre estas, para que se possa saber qual seria a mais adequada para ser utilizada em cada situação. Dado que características como o material a ser analisado e os tipos de tratamentos ao qual este foi submetido interferem na seleção desta.

Nesse trabalho serão apresentadas deduções de aproximações do grão à esfera e ao cubo, além das aproximações aos poliedros de Voronoi⁽¹⁾ e a Grãos Reais.⁽²⁾ Esta última, foi deduzida a partir da união dos trabalhos de Rutherford, Aborn e Bain,⁽³⁾ Kaiser⁽⁴⁾ e Gulliver,⁽⁵⁾ e diz que o grão real pode ser aproximado de um grupo de poliedros formado por: cubo, prisma hexagonal, dodecaedro rômico e ortotetraidecaedro.⁽²⁾ Sendo o grão mais aproximado do ortotetraidecaedro. As equações obtidas a partir dessa aproximação estão apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1. Expressões exatas e aproximadas para Grãos Reais⁽²⁾

	N_L	N_A	N_V
S_V	$= 2N_L$	$= \frac{7}{3}N_A^{1/2}$	$= \frac{8}{3}N_V^{1/3}$
N_V	$= 0,422N_L^3$	$= \frac{2}{3}N_A^{3/2}$	
N_A	$= 0,735N_L^2$		

Em que N_L é o número de interseção dos contornos de grãos por unidade de comprimento, N_A é o número de grãos por unidade de área, N_V é o número de grãos por unidade de volume e S_V é a área interfacial dos contornos de grão por unidade de volume.

Já para poliedros de Voronoi, são válidas as expressões reunidas na Tabela 2.

Tabela 2. Expressões para poliedros de Voronoi⁽¹⁾

$$\frac{N_A = 0,6887N_L^2}{S_V = 2,910N_V^{1/3}}$$

Além das teorias analíticas, outra técnica muito utilizada nos estudos em metais e que será utilizada nesse trabalho é a simulação computacional. Neste trabalho, a simulação é realizada por um autômato celular desenvolvido no Núcleo de Modelamento Microestrutural (NMM) da Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda (EEIMVR – UFF).⁽⁶⁾ Um autômato celular consiste em um programa que a partir de um conjunto de regras determinísticas permite a simulação de um fenômeno físico. O autômato celular desenvolvido no NMM tem como objetivo simular a recristalização do metal a partir de dados de entradas simples como o tamanho da malha, o N_V a ser utilizado e o tipo de nucleação desejada, dando origem a uma malha representativa de uma amostra metálica.

Neste trabalho busca-se encontrar a teoria analítica mais adequada para ser utilizada na análise do ferro puro policristalino e para a malha obtida através da simulação computacional através do autômato. A partir disso realizar a comparação entre os dados experimentais obtidos e os resultados apresentados pela simulação computacional.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

O material utilizado foi uma amostra de ferro puro policristalino laminada até atingir uma deformação final de 80% e cortada numa máquina de precisão com disco diamantado a 150 rpm. A amostra tem composição em ppm em massa de: 41C, 940Mn, 15P, 20S, 160Si, 20Al, 80N, 10Ti, 30Cu, 100Cr, 20Mo, 10Nb, 10V, 4B, 165O.

A amostra passou por um processo de preparação iniciado por recozimento a 500°C por um período de 1 hora. Para a realização deste tratamento, a amostra foi encapsulada em tubos de quartzo contendo uma atmosfera inerte de argônio.

Posteriormente, a amostra foi embutida e lixada com uma sequência de lixas de carbeto de silício (320 Mesh, 600 Mesh, 800 Mesh, 1.000 Mesh, 1.200 Mesh e 2.200 Mesh). Em seguida, a amostra foi duas vezes polida: primeiramente por uma pasta de diamante de 6 μm , 3 μm e 1 μm ; e logo após isto, por uma solução de sílica coloidal OPU de 1 μm . Finalizado o polimento, foi realizado o ataque químico com Nital 3%, a temperatura ambiente. Após o ataque o Nital foi removido com a utilização de álcool etílico 98 GL, e sofreu secamento forçado com ar quente.

Após a preparação ocorreu a captação de imagens da amostra através de um microscópio ótico Nikon Eclipse LV150 acoplado com uma câmera Nikon DS-Fi1 e utilizando o programa NIS-Elements D 3.0. Foram obtidas 30 imagens, para que através delas fossem realizadas as medidas estereológicas de N_L e N_A da amostra. A medida de N_L foi realizada traçando-se duas retas de comprimento conhecido e arranjadas em formato de cruz, através da quais foi contabilizado o número de interseções dos contornos de grãos presente nestas. O N_A foi medido através da contagem de grãos numa área conhecida, excetuando aqueles em contato com os cantos esquerdo e inferior da imagem.⁽⁷⁾

Após as medições, foi realizada uma simulação computacional a fim de obter uma malha genérica, aonde seriam repetidas as medições realizadas na amostra de

ferro puro. Realizou-se esta simulação utilizando como parâmetros à escolha do usuário: nucleação aleatória, vizinhança de Von Neuman, malha cúbica com 27 milhões de pontos de resolução e 1 mm^3 de volume, e N_V aleatório igual a 22.328 mm^{-1} .

Gerada a malha, iniciou-se o processo de seccionamento serial desta, para que se obtivessem as 30 imagens necessárias para as medições estereológicas. O seccionamento serial foi realizado utilizando-se o programa Tecplot 360TM, e as secções possuem um espaçamento de 0,03 mm entre si. Então, através das imagens obtidas, foram realizadas as medições estereológicas de N_L e N_A .

Em seguida, de posse dos valores estereológicos medidos do ferro puro e da malha simulada pelo autômato celular, iniciou-se uma etapa de manipulações analíticas e comparações utilizando-se dos métodos apresentados anteriormente. Na sequência, obteve-se analiticamente um valor de N_V para o ferro puro, e utilizando este novo valor realizou-se uma nova simulação.

Na nova malha simulada foram repetidos o seccionamento serial e a medição do N_L , para que se pudesse comparar este último ao valor medido no ferro puro.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

As etapas de preparação da amostra de ferro puro policristalino e conseguinte obtenção das imagens desta via microscopia ótica, resultaram em 30 imagens. Pode-se ver um exemplo destas imagens na Figura 1. A partir das medições estereológicas realizadas nas imagens, obteve-se como valor de N_L e N_A do ferro puro $673 \pm 42 \text{ mm}^{-1}$ e $332965 \pm 22288 \text{ mm}^{-2}$, respectivamente.

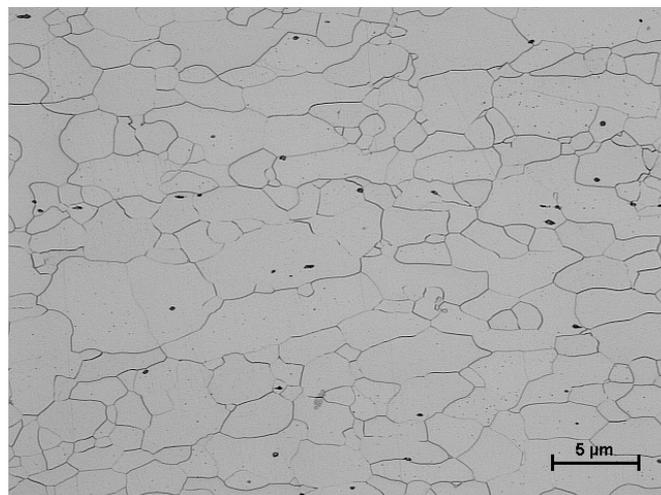


Figura 1. Micrografia da amostra de ferro puro policristalino completamente recristalizada.

Realizadas as medições estereológicas no ferro puro, simulou-se a malha genérica de $N_V 22328 \text{ mm}^{-1}$. A malha e um exemplo de imagem obtida através do seccionamento serial desta podem ser vistos Figura 2. Através das medições realizadas nas 30 imagens obtidas foram encontrados valores de N_L e N_A de $42,5 \pm 1,5 \text{ mm}^{-1}$ e $1188 \pm 11 \text{ mm}^{-2}$, respectivamente.

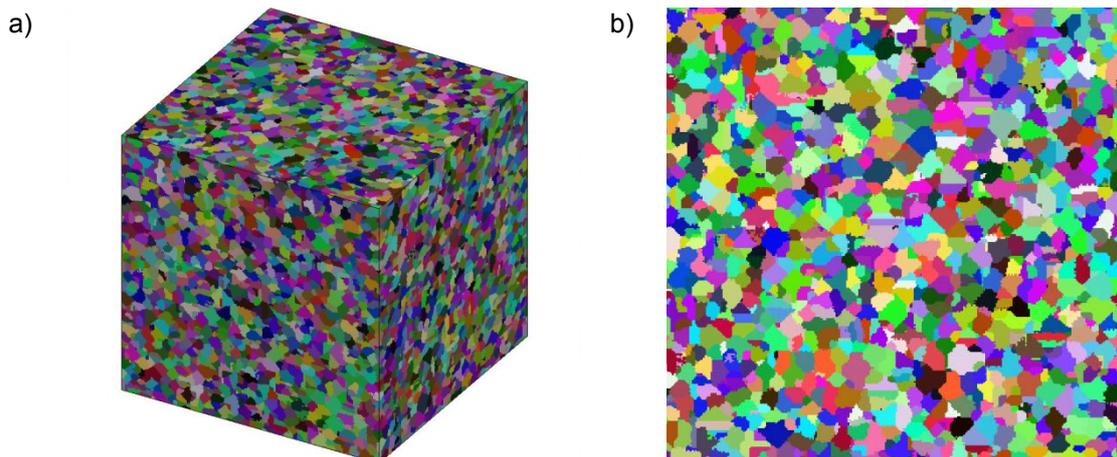


Figura 2. a) Malha genérica simulada, com N_V 22328 mm^{-1} e referente a uma amostra de 1 mm^3 .
b) Imagem obtida pelo processo de secção serial realizado na malha genérica da Figura 2a.

Com os valores estereológicos medidos, puderam-se iniciar as manipulações analíticas necessárias para se deduzir as melhores aproximações para o ferro puro e para as malhas geradas pelo autômato celular. No entanto, as teorias analíticas referentes à esfera e ao cubo careciam de inúmeras expressões para que fossem utilizadas neste trabalho.

3.1 Esfera

Conhecer os valores de N_A e N_V é fundamental para que se possam realizar as manipulações desejadas. Primeiramente será deduzido o N_A , que consiste na razão do número de grãos pela área na qual estes grãos se apresentam. No entanto, considerando que os grãos sejam esferas curvadas, a área de uma secção qualquer é formada pela soma das áreas de diversos círculos curvados. Sendo N o número de grãos na área A da secção realizada e R_i o raio do i ésimo grão esférico, o qual é aproximado ao raio do i ésimo círculo caso a secção tenha ocorrido aproximadamente na região medial da esfera, pode-se representar esta conjectura pela Equação 1.

$$N_A = \frac{N}{A} \approx \frac{N}{\sum_{i=1}^N \pi R_i^2} = \frac{N}{\pi \sum_{i=1}^N R_i^2} \quad (1)$$

Todavia, se mostra inviável conhecer o valor do raio de cada um destes círculos. Para eliminar esse empecilho, foi encontrada uma aproximação adequada ao somatório, ilustrada pela Equação 2, onde R é o valor médio das raios dos círculos. Esta aproximação se mostrou válida em caso de uma distribuição normal do tamanho dos raios das esferas curvadas, ou seja, do tamanho dos grãos. E sua comprovação foi realizada a partir de testes com valores de N entre 30 e 20000, apresentando um erro percentual de aproximadamente 1%.

$$\sum_{i=1}^N R_i^2 \approx NR^2 \quad (2)$$

Então, substituindo a Equação 2 na Equação 1 e realizando o algebrismo necessário, tem-se a Equação 3.

$$N_A \cong \frac{1}{\pi R^2} \quad (3)$$

Sabe-se que, como demonstrado por Russ e DeHoff⁽⁷⁾, a Equação 4 é verdadeira para a esfera. Onde λ é o comprimento médio entre as interseções dos contornos de grãos.

$$\lambda = \frac{4}{3}R \quad (4)$$

Pode-se então manipular a Equação 4 de forma que λ seja a variável independente, obtendo-se a Equação 5. E então, substituindo-a na Equação 3 e realizando o algebrismo adequado, obtém-se a Equação 6.

$$R = \frac{3}{4}\lambda \quad (5)$$

$$N_A \cong \frac{16}{9\pi\lambda^2} \quad (6)$$

Como, pelos princípios da estereologia, é verdadeira a Equação 7⁽⁷⁾, substituindo na Equação 6 e obtém-se a Equação 8. Esta última é a expressão de N_A em função de N_L válida para um grupo de grãos esféricos com uma distribuição normal de tamanho.

$$\lambda = \frac{1}{N_L} \quad (7)$$

$$N_A \cong \frac{16}{9\pi(1/N_L)^2} = \frac{16}{9\pi}N_L^2 \quad (8)$$

A partir dos mesmos preceitos a partir dos quais foi deduzida a expressão para o N_A da esfera será deduzido o N_V desta. Primeiramente, parte-se do conceito de que N_V é a razão do número de grãos N pelo espaço V no qual estes grãos estão situados. Sabendo que o volume V é constituído pela soma dos volumes de N grãos esféricos, obtém-se a Equação 9.

$$N_V = \frac{N}{V} = \frac{N}{\sum_{i=1}^N \frac{4}{3}\pi R_i^3} = \frac{N}{\frac{4}{3}\pi \sum_{i=1}^N R_i^3} \quad (9)$$

A partir da mesmo princípio, também mostrou-se verdadeira, para uma distribuição normal do tamanho dos raios, a aproximação apresentada na Equação 10.

$$\sum_{i=1}^N R_i^3 \approx NR^3 \quad (10)$$

Substituindo a Equação 10 na Equação 9 e realizando as manipulações necessárias obtém-se a Equação 11.

$$N_V \approx \frac{3}{4\pi R^3} \quad (11)$$

Com a substituição da Equação 5 e a sequencial substituição da Equação 7 na Equação 11, obtém-se a expressão desejada para N_V em função de N_L , como mostrado na Equação 12.

$$N_V \approx \frac{3}{4\pi(3\lambda/4)^3} = \frac{16}{9\pi\lambda^3} = \frac{16}{9\pi(1/N_L)^3} = \frac{16}{9\pi} N_L^3 \quad (12)$$

Finalmente é necessário inverter as Equações 8 e 12, obtendo as Equações 13 e 14, respectivamente, para posteriormente utilizá-las na etapa de comparações.

$$N_L \cong \sqrt{\frac{9\pi}{16}} N_A^{1/2} \quad (13)$$

$$N_L \approx \sqrt[3]{\frac{9\pi}{16}} N_V^{1/3} \quad (14)$$

Deduzidas as expressões necessárias para utilizar-se o método de aproximação do grão à esfera, faz-se necessário observar que enquanto a dedução de N_V depende somente de uma aproximação, a de N_A depende de duas, sendo uma delas idealizada. O conhecimento desse fato se faz importante, pois, devido à necessidade de que a secção ocorra aproximadamente na região medial dos grãos para que a Equação 1 seja verdadeira, a aplicabilidade da Equação 8 é limitada. No entanto, a Equação 12, por não depender de nenhuma situação ideal e sim somente da distribuição normal dos tamanhos dos grãos, apresentará um resultado muito mais preciso caso o grão possa ser aproximado de uma esfera.

3.2 Cubo

A dedução das expressões para o método de aproximação do grão ao cubo segue os mesmos princípios dos da esfera. Primeiramente se expressa N_A como a razão entre o número de grãos N presentes na área A . Após isso, supondo que os grãos cúbicos estejam alinhados de forma conveniente para que possa-se tomar como aresta do iésimo quadrado a aresta a_i do iésimo cubo, encontra-se a Equação 15.

$$N_A = \frac{N}{A} \approx \frac{N}{\sum_{i=1}^N a_i^2} \quad (15)$$

Utilizando agora a Equação 2 para a aresta, supondo que a distribuição dos tamanhos dos grãos, e conseqüentemente das arestas destes, é normal, obtém-se a Equação 16, onde a é o valor médio das arestas dos grãos cúbicos.

$$N_A \approx \frac{N}{\sum_{i=1}^N a_i^2} \approx \frac{1}{a^2} \quad (16)$$

A partir dos conhecimentos apresentados por Russ e DeHoff em seu livro, tem-se a possibilidade de se obter λ para certo corpo geométrico através da razão de quatro vezes o volume deste por sua área superficial⁽⁷⁾. Utilizando deste meio, encontra-se uma função para a aresta do grão em função de λ , como ilustrado pela Equação 17. Onde V é o volume do corpo e S é a área superficial deste.

$$\lambda = \frac{4V}{S} = \frac{4a^3}{6a^2} = \frac{2}{3}a \Rightarrow a = \frac{3}{2}\lambda \quad (17)$$

Substituindo sequencialmente as Equações 17 e 7 na Equação 14, obtém-se a expressão desejada para N_A para o método de aproximação ao cubo, Equação 18.

$$N_A \cong \frac{1}{a^2} = \frac{1}{(3\lambda/2)^2} = \frac{4}{9\lambda^2} = \frac{4}{9(1/N_L)^2} = \frac{4}{9}N_L^2 \quad (18)$$

O N_V será deduzido utilizando a Equação 10 para a aresta, e substituindo sequencialmente esta e as Equações 19 e 7, chega-se a Equação 19.

$$N_V = \frac{N}{V} = \frac{N}{\sum_{i=1}^N a_i^3} \approx \frac{1}{a^3} = \frac{1}{(3\lambda/2)^3} = \frac{8}{27\lambda^3} = \frac{8}{27(1/N_L)^3} = \frac{8}{27}N_L^3 \quad (19)$$

Agora serão invertidas as expressões deduzidas para o cubo, obtendo as Equações 20 e 21, para que possam ser utilizadas nas futuras comparações.

$$N_L \cong \frac{3}{2}N_A^{1/2} \quad (20)$$

$$N_L \approx \frac{3}{2}N_V^{1/3} \quad (21)$$

Novamente é de suma importância observar que, devido a idealização de uma das aproximações utilizadas na obtenção da expressão para N_A , esta, assim como no método de aproximação ao círculo, possui menor aplicabilidade que a expressão deduzida por N_V , a qual não depende de idealizações.

3.3 Voronoi e Grãos Reais

Antes de iniciar as comparações visadas, resta deduzir as fórmulas para poliedros de Voronoi e para o N_L dos Grãos Reais. Utilizando a expressão encontrada na segunda linha da Tabela 2 e a Equação 22, apresentada por DeHoff e Rhines como válida para qualquer formato de grão,⁽²⁾ encontra-se a Equação 23 para poliedros de Voronoi.

$$S_V = 2N_L \quad (22)$$

$$S_V = 2,910N_V^{1/3} \Rightarrow N_V = \left(\frac{S_V}{2,910}\right)^3 = \left(\frac{2N_L}{2,910}\right)^3 = 0,3247N_L^3 \quad (23)$$

Invertendo a expressão da primeira da Tabela 2 e a Equação 23, encontram-se as Equações 24 e 25, respectivamente.

$$N_L = 1,205N_A^{1/2} \quad (24)$$

$$N_L = 1,455N_V^{1/3} \quad (25)$$

Já as fórmulas para o N_L dos Grãos Reais são facilmente encontradas multiplicando por meio (1/2) as fórmulas para o S_V deste método, encontradas na segunda linha nas terceira e quarta colunas da Tabela 1. Desta forma, encontram-se as Equação 26 e 27.

$$N_L = \frac{7}{6}N_A^{1/2} \quad (26)$$

$$N_L = \frac{8}{6}N_V^{1/3} \quad (27)$$

3.4 Comparações

Agora, com todas as expressões necessárias deduzidas (Tabela 3), serão iniciadas as comparações. Iniciando pelo ferro puro, serão utilizadas as equações reunidas na Tabela 3 nas linhas 2 e 3, chegando aos resultados apresentados na Tabela 4. Lembrando que os valores medidos para N_L e N_A do ferro puro foram $673 \pm 42 \text{ mm}^{-1}$ e $332.965 \pm 22.288 \text{ mm}^{-2}$, respectivamente.

Tabela 3. Formulário utilizado na obtenção dos resultados apresentadas nas Tabelas 4 e 5

Método de Aproximação	Grãos Reais ⁽²⁾	Voronoi ⁽¹⁾	Esfera	Cubo
$N_L \text{ (mm}^{-1}\text{)}$	$= \frac{7}{6}N_A^{1/2}$	$= 1,205N_A^{1/2}$	$\cong \sqrt{\frac{9\pi}{16}}N_A^{1/2}$	$\cong \frac{3}{2}N_A^{1/2}$
$N_A \text{ (mm}^{-2}\text{)}$	$= 0,735N_L^2$	$= 0,6887N_L^2$	$\cong \frac{16}{9\pi}N_L^2$	$\cong \frac{4}{9}N_L^2$
$N_V \text{ (mm}^{-1}\text{)}$	$= 0,422N_L^3$	$= 0,3247N_L^3$	$\approx \frac{16}{9\pi}N_L^3$	$\approx \frac{8}{27}N_L^3$

Tabela 4. Resultados de N_L e N_A obtidos através dos Métodos de Aproximação Analíticos para o Ferro Puro Policristalino

Método de Aproximação	Grãos Reais ⁽²⁾	Voronoi ⁽¹⁾	Esfera	Cubo
$N_L \text{ (mm}^{-1}\text{)}$	673 ± 22	695 ± 23	767 ± 26	866 ± 29
$N_A \text{ (mm}^{-2}\text{)}$	332903 ± 41551	311932 ± 38934	256305 ± 31991	201302 ± 25125

O método de aproximação dos Grãos Reais se mostrou o mais adequado, em comparação com as medidas estereológicas, para ser utilizado para o ferro puro policristalino. Pois, comparando o N_L medido com o obtido analiticamente, o erro percentual foi nulo para o N_L e de aproximadamente $1,9 \times 10^{-4} \%$ para o N_A .

As comparações entre os valores obtidos pelos métodos de aproximação e as medidas estereológicas foram realizadas na malha genérica utilizando as fórmulas apresentadas na Tabela 3. Tais resultados das comparações estão apresentadas na Tabela 5. Lembrando que os valores medidos para N_L e N_A da malha genérica foram $42,5 \pm 1,5 \text{ mm}^{-1}$ e $1188 \pm 11 \text{ mm}^{-2}$, respectivamente.

Tabela 5. Resultados de N_L , N_A e N_V obtidos através dos Métodos de Aproximação Analíticos para a simulação computacional da Malha Genérica

Método de Aproximação	Grãos Reais ⁽²⁾	Voronoi ⁽¹⁾	Esfera	Cubo
$N_L \text{ (mm}^{-1}\text{)}$	$40,21 \pm 0,19$	$41,53 \pm 0,19$	$45,82 \pm 0,21$	$51,70 \pm 0,24$
$N_A \text{ (mm}^{-2}\text{)}$	1328 ± 94	1244 ± 88	1022 ± 72	802 ± 57
$N_V \text{ (mm}^{-1}\text{)}$	32395 ± 3430	24926 ± 2639	43440 ± 4600	22745 ± 2408

Diferentemente do ferro puro, a malha genérica não apresentou uma aproximação que se adequasse excepcionalmente a ela. No entanto por três motivos distintos, é de se considerar os grãos das malhas simuladas pelo autômato celular do NMM aproximáveis de poliedros de Voronoi. Primeiramente porque, ao todo, foi a aproximação de Voronoi que manteve seus valores mais próximos das medições estereológicas. Depois, porque o autômato celular foi desenvolvido para gerar uma malha com características similares as poliedros de Voronoi, o que torna sensato considerá-lo Voronoi. Por último, porque as imperfeições da malha relativas a sua resolução alteram os resultados das medições estereológicas. Como cada ponto da malha é cúbico, cada grão apresenta uma área maior do que seria condizente, pois o cubo apresenta uma área superficial maior do que a região amorfa respectiva. Desta maneira, o S_V da malha é deturpado, já que depende diretamente da área superfície do grão.



Figura 3. Recorte de imagem da Malha Genérica demonstrando as imperfeições relativas ao serrilhado dos contornos de grão.

Após as comparações, utilizando o método de aproximação dos grãos reais, foi calculado o N_V do ferro puro utilizando o valor de N_L medido e a expressão encontrada na segunda coluna e terceira linha da Tabela 1. Feito isso, obteve-se o valor de $128653137 \text{ mm}^{-1}$, com o qual se realizou uma simulação computacional a fim de contestar ou não a validade do uso do autômato celular para representar o ferro puro policristalino.

A malha de teste gerada e uma de suas seções estão apresentadas na Figura 4. Através do processo de seccionamento serial seguido por medições estéreo-lógicas, foi obtido um valor de N_L de $756 \pm 24 \text{ mm}^{-1}$. Comparando este valor ao encontrado para o ferro puro e observando que características como a perfeita aleatoriedade dos grãos da malha, a homogeneidade dos tamanhos destes, a inexistência de qualquer deformação na malha e o serrilhado dos contornos – que são todas inexistentes no ferro puro – fazem com o autômato celular não seja capaz de simular o ferro puro de forma quantitativa, necessitando de correções como fatores de forma. No entanto é aceitável de forma qualitativa.

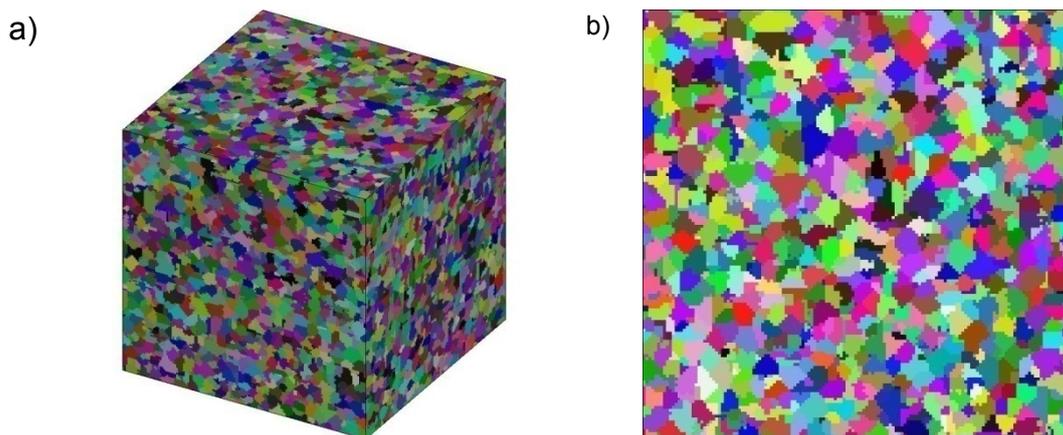


Figura 4. a) Malha de teste, com N_V 128653137 mm^{-1} e referente a uma amostra de 125000 μm^3 . b) Imagem obtida pelo processo de seccionamento serial realizado na malha de teste da Figura 4a. Com aresta medindo 50 μm e área de 2500 μm^2 .

Todavia, aprimoramentos no programa e utilização de resoluções consideravelmente maiores podem, se não extinguir, abrandar as deturpações nos resultados finais obtidos pelo trabalho com o autômato celular.

4 CONCLUSÃO

Através dos resultados obtidos, constatou-se que o método de aproximação a Grãos Reais⁽²⁾ é o mais adequado para ser aplicado ao ferro puro policristalino com nucleação aleatória e completamente recristalizado. Mostrando precisão excepcional, que em números é apresentada por um erro máximo encontrado durante os testes de $1,9 \times 10^{-4} \%$ em relação aos valores medidos estereologicamente.

No entanto, embora tenha sido constatado também que a aproximação a poliedros de Voronoi é a mais adequada para ser aplicada a malha gerada pelo autômato celular desenvolvido no NMM, devido às imperfeições na resolução da malha, mostrou obter valores apenas próximos aos valores medidos estereologicamente.

Além destas constatações, o trabalho proporcionou a obtenção de várias expressões relativas aos métodos de aproximação dos grãos às Esferas, aos Cubos e aos poliedros de Voronoi. E, por fim, constatou-se que o autômato celular não simula o ferro puro de forma quantitativa, necessitando de correções como fatores de forma, mas é aceitável de forma qualitativa.



Agradecimentos

A Universidade Federal Fluminense (UFF) pela concessão da bolsa de Iniciação Científica a Daniel Souto de Souza . E aos órgãos de fomento: Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de Rio de Janeiro (FAPERJ), Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPQ) e Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES). E a doutoranda Simone Carreiro de Oliveira pela auxílio inicial.

REFERÊNCIAS

- 1 OHSER, J.; MÜCKLICH, F. Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science. England: John Wiley & Sons, Ltd, 2000.
- 2 DEHOFF, R. T.; RHINES, F. N. Quantitative Microscopy. USA: McGraw-Hill, 1968
- 3 Rutherford, J. J. b.; ABORN, R. H.; BAIN, E. C. The Relation Between the Grain Areas on a Plane Section and the Grain Size of a Metal. Metals Alloys. Vol. 8, p. 345. December, 1937.
- 4 KAISER, H. F. The Estimation of Inter-Granular Surfaces and Volumes. Metals Alloys. Vol. 9, p. 23. 1938
- 5 GULLIVER, G. H. Note on Grain Size. J. Inst. Metals. Vol. 19, p. 145. 1918
- 6 ASSIS, W. L. S. Modelamento Numérico de Nucleação e Crescimento Via Autômato Celular. Tese de Doutorado, Setembro de 2010. Universidade Federal Fluminense (UFF), Volta Redonda, Rio de Janeiro, Brasil.
- 7 RUSS, J. C.; DEHOFF, R. T. Practical Stereology: Second Edition. New York: Kluwer Academic / Plenum Publishers, 2000.