

ANÁLISE TOPOLÓGICA DA MICROESTRUTURA GERADA POR AUTÔMATO CELULAR

Daniel Souto de Souza
Wesley Luiz da Silva Assis
Gláucio Soares da Fonseca

Resumo

A caracterização via microscopia, ótica ou eletrônica, de microestruturas dos materiais metálicos em seções planas, é a principal maneira de se quantificar e qualificar as propriedades dos mesmos. No entanto, por tal mecanismo permitir somente análises bidimensionais, faz-se necessário a utilização de técnicas adjacentes a fim de permitir uma análise tridimensional. A utilização de softwares que realizem a simulação computacional da microestrutura metálica é um meio adequado a este propósito, todavia a credibilidade dos resultados fornecidos por estes softwares é dependente de cada componente constituinte deste mesmo. Objetivando aprofundar o conhecimento a respeito de um destes softwares, particularmente o software de simulação por autômato celular utilizado por Rios et al. em seus recentes trabalhos, foi realizada a análise das microestruturas geradas através das simulações utilizando de métodos analíticos apresentados por DeHoff, Ohser e outros. A partir destas análises foi possível constatar limitações e particularidades do método de simulação, o que permite maior domínio sobre esta ferramenta e apresenta possibilidades de aprimorá-la.

Palavras-chave: Autômato celular; Recristalização; Topologia; Modelamento.

TOPOLOGICAL ANALYSIS OF THE MICROSTRUCTURE GENERATED BY CELLULAR AUTOMATA

Abstract

The characterization by microscopy, optical and electronic, of microstructures of metallic materials on plane sections, is the main way of quantify and qualify the properties of those. However, as such this mechanism allows only two-dimensional analysis, become necessary to use technics in order to allow a three-dimensional analysis. The utilization of softwares that perform the computational simulation of the metallic microstructure is an appropriate mean for this purpose, nevertheless the credibility of the provided results for these softwares is dependent of each structural component of them. Intending to deepen the knowledge about those softwares, specifically the software of simulation by cellular automata used by Rios *et al* on their recent work, was realized the analysis of the microstructures generated by simulations using analytic methods presented by DeHoff, Ohser and others. From these analysis was possible to evidence limitations and particularities of the simulation method, allowing a better control over this tool and presenting possibilities of improve it.

Key words: Cellular automata; Recrystallization; Topology; Modeling.

¹ Contribuição técnica ao 67º Congresso ABM - Internacional, 31 de julho a 3 de agosto de 2012, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

² Graduando em Engenharia Mecânica, Aluno de Iniciação Científica, Universidade Federal Fluminense (UFF), Volta Redonda, RJ, Brasil.

³ Eng. Químico, Dr. em Eng. Metalúrgica, UFF, RJ, Brasil.

⁴ Prof. Dr. em Engenharia Metalúrgica, Prof. Adjunto II do Depto. de Eng. Mecânica e do Programa de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica, UFF, RJ, Brasil.

1 INTRODUÇÃO

A crescente demanda de materiais metálicos com características aprimoradas, afim de uma melhor adequação às necessidades atuais, estimula o prosseguimento de estudos onde são analisadas criteriosamente suas estruturas.

A caracterização microestrutural dos materiais metálicos é comumente realizada através de métodos metalográficos, que consistem nas análises morfológica e estrutural da microestrutura metálica. Todavia, as técnicas metalográficas tradicionais não permitem obter informações, geométricas e morfológicas, sobre uma microestrutura tridimensional a partir de observações metalográficas de uma única seção plana. Informações fundamentais, como a distribuição do tamanho dos grãos, não podem ser precisamente obtidas por métodos de metalografia quantitativa bidimensional em metais policristalinos.

Como recurso à transposição destes limites, ocorre o surgimento de técnicas que permitem a obtenção de dados tridimensionais de uma microestrutura metálica. Entre as técnicas mais utilizadas estão as teorias analíticas e os *softwares* de simulação computacional.

Os softwares de simulação computacional se propõem a simular um fenômeno físico, a partir de um conjunto de regras determinísticas. Neste trabalho, a simulação é realizada por um autômato celular desenvolvido no Núcleo de Modelamento Microestrutural da Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda (EEIMVR – UFF).⁽¹⁾ O autômato celular tem como objetivo simular a recristalização do metal a partir de dados de entradas simples como o tamanho da malha, o número de grão por unidade de volume (N_V) a ser utilizado e o tipo de nucleação desejada, dando origem a uma malha representativa de uma amostra metálica, onde os núcleos surgem com formato octaédrico.

Além da simulação computacional, 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 a se utilizar em cada situação.

Dentre as teorias analíticas encontradas na literatura estão os métodos de aproximação Grãos Reais de DeHoff⁽²⁾ e Poliedros de Voronoi,⁽³⁾ sobre as quais foi constatado que são aproximações satisfatórias ao ferro puro policristalino.^(4,5)

O método de aproximação Grãos Reais de DeHoff, foi deduzido a partir da união dos trabalhos de Rutherford, Aborn, Bain, Kaiser e Gulliver, e tem suas equações 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 interseções dos contornos de grãos por unidade de comprimento, N_A é o número de grãos por unidade de área 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^(3,4)

$$\begin{aligned} N_A &= 0,6887N_L^{2*} \\ S_V &= 2,910N_V^{1/3*} \\ N_V &= 0,3247N_L^{3**} \end{aligned}$$

Além destas teorias, outras são encontradas na literatura, dentre as quais estão aquelas aproximações do grão a diversas formas geométricas, abordadas em trabalhos anteriores.⁽⁴⁾ No entanto, como estas últimas foram deduzidas baseadas em idealizações, aqui serão aprimoradas utilizando princípios da matemática estocástica, não necessitando, assim, de certas idealizações.

No presente trabalho, busca-se analisar criteriosamente o autômato celular, utilizando dentre outros meios as teorias analíticas citadas. Já que, tendo sido comprovado em trabalho anterior que o autômato celular, em seu estado atual, não é capaz de simular satisfatoriamente o ferro puro policristalino,⁽⁴⁾ estuda-se o porquê deste fato através da análise das limitações do autômato. E é proposto, a partir das conclusões obtidas, possibilitar um futuro aprimoramento do autômato celular, objetivando torná-lo capaz de simular o ferro puro e outros metais.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

2.1 Autômato Celular

O *software* de simulação computacional por autômato celular foi utilizado para gerar doze malhas cúbicas com resolução de 27.000.000 (300^3) pontos e com volume correspondente a $1 \mu\text{m}^3$, diferenciando-se pelos tipos de nucleação utilizados, Aleatória e Periódica (onde os núcleos surgem equidistantes uns dos outros), e pelos valores de N_V de $27.000 \mu\text{m}^{-3}$, $15.625 \mu\text{m}^{-3}$, $8.000 \mu\text{m}^{-3}$, $3.325 \mu\text{m}^{-3}$, $1.728 \mu\text{m}^{-3}$ e $1.000 \mu\text{m}^{-3}$.

Para a medição de N_L e N_A nas malhas foi criada um rotina computacional que realizava-as, a partir dos métodos apresentados Russ e DeHoff.⁽⁶⁾ A utilização da rotina se mostrou vantajosa, pois com seu uso foi possível realizar um grande número de medidas, varrendo a totalidade de linhas e planos presentes na malha, tanto exterior como interiormente. Assim foram realizadas 90.000 medições de N_L em cada uma das direções X, Y e Z da malha, e 300 medições de N_A em cada um dos planos XY, YZ e ZX da malha.

2.2 Cálculo de Adequação de Funções

Já a adequação de funções quando comparadas a resultados experimentais foi calculada pela função Qui Quadrado, onde quão menor é seu valor maior é adequação da função aos pontos experimentais. A função Qui Quadrado é dada pela Equação 1.

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{X_{Ti} - X_{Exp_i}}{\sigma_i} \right)^2 \quad (1)$$

Onde X_{T_i} é o valor teórico i-ésimo ponto obtido pela função, X_{Exp_i} é o valor experimental do i-ésimo ponto e onde σ_i é o desvio padrão do i-ésimo ponto.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 Método de Aproximação do Grão a Forma Geométricas

Serão deduzidos métodos de aproximação do grão a formas geométricas diversas. Devido à semelhança na dedução de todos eles, para facilitar a leitura, será apresentada a dedução para ao Cubo, e os outros terão somente seus resultados tabelados.

Primeiramente, para iniciarem-se as deduções, deve-se considerar que os grãos sejam cubos curvados que preencham todo o espaço da matriz e, portanto, o volume total da matriz seja o somatório do volume de todos os grãos.

Sendo N_V a razão do número de grãos N pelo volume V no qual estes grãos estão situados e a_i a aresta do i-ésimo grão cúbico. Tem-se que a Equação 2.

$$N_V = \frac{N}{V} = \frac{N}{\sum_{i=1}^N a_i^3} \quad (2)$$

Considerando que os grãos apresentem uma distribuição de seus tamanhos que se aproxime de uma Distribuição Normal ou Log Normal, é razoável utilizar a aproximação expressa na Equação 3, onde a é o valor médio das arestas. Tendo esta aproximação apresentado um erro de aproximadamente 10%, quando utilizada em amostras com desvio padrão de 20%.

$$\sum_{i=1}^N a_i^3 \approx Na^3 \quad (3)$$

Utilizando esta aproximação, obtém-se a Equação 4.

$$N_V \approx \frac{1}{a^3} \quad (4)$$

A partir dos conhecimentos apresentados por Russ e DeHoff em seu livro, tem-se a possibilidade de se obter λ , no caso comprimento médio entre intersecções dos grãos, para certo corpo geométrico através da razão de quatro vezes o seu volume por sua área superficial.⁽⁶⁾ Utilizando deste meio, encontra-se uma expressão para a aresta do cubo em função de λ , que pode ser substituída na Equação 4.

Com a substituição sequencial da Equação 5 – também apresentada por Russ e DeHoof⁽⁶⁾ – na Equação 4, obtém-se a expressão desejada para N_V em função de N_L , como mostrado na Equação 6.

$$\lambda = \frac{1}{N_L} \quad (5)$$

$$N_V \approx \frac{1}{(3/2\lambda)^3} = \frac{8}{27(1/N_L)^3} = \frac{8}{27} N_L^3 \quad (6)$$

Para se obter a equação de N_A utiliza-se a Equação 7, apresentada por Hilliard e Lawson em seu livro.⁽⁷⁾

$$N_A = N_V \cdot \bar{D} \quad (7)$$

Onde \bar{D} é o diâmetro calibre médio (mean caliper diameter). Que no caso do cubo é igual a $3/2 a$, como informado por Hilliard e Lawson.⁽⁸⁾ E dessa maneira encontra-se a Equação 8 para o N_A do cubo.

$$N_A \approx \frac{2}{3} N_L^2 \quad (8)$$

Agora, tendo demonstrado a dedução das equações de N_A e N_V para o cubo, apresenta-se a Tabela 3, resumindo os resultados obtidos para todas as formas geométricas analisadas.

Tabela 3. Valores de comprimento médio entre interseções dos contornos de grão (λ), diâmetro calibre (\bar{D}), N_A e N_V para diferentes formas geométricas

Forma Geométrica	λ	\bar{D}^*	N_A	N_V
Cubo	$\frac{2}{3}a$	$\frac{3}{2}a$	$\frac{2}{3}N_L^2$	$\frac{8}{27}N_L^3$
Esfera	$\frac{4}{3}R$	$2R$	$\frac{8}{3\pi}N_L^2$	$\frac{16}{9\pi}N_L^3$
Dodecaedro	$1,48468a$	$2,64312a$	$0,76029N_L^2$	$0,42707N_L^3$
Dodecaedro Rômbico	$1,08866a$	$2a$	$0,76979N_L^2$	$0,41902N_L^3$
Icosaedro	$\frac{3 + \sqrt{5}}{3\sqrt{3}}a$	$1,74210a$	$0,81082N_L^2$	$\frac{4(3 + \sqrt{5})^2}{135\sqrt{3}}N_L^3$
Octaedro	$\frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{3}}a$	$1,17548a$	$0,73883N_L^2$	$\frac{16}{27\sqrt{3}}N_L^3$
Ortotetraidecaedro	$1,68958a$	$3a$	$0,75696N_L^2$	$0,42632N_L^3$
Prisma Hexagonal**	$\frac{6\sqrt{3}}{6 + 3\sqrt{3}}a$	$2a$	$0,73219N_L^2$	$0,32978N_L^3$
Tetraedro	$\frac{\sqrt{2}}{3\sqrt{3}}a$	$0,91226a$	$0,57339N_L^2$	$\frac{8}{27\sqrt{3}}N_L^3$

Fonte: Os diâmetros calibres (excetuando aqueles do Dodecaedro Rômbico e do Prisma Hexagonal);⁽⁹⁾
** O prisma hexagonal utilizado possui altura igual a sua aresta a .

3.2 Análise do Autômato Celular

3.2.1 Análise de microestrutura completamente recristalizada

3.2.1.1 Nucleação periódica

A nucleação periódica tem como principal característica a equidistância entre os núcleos. Por sua vez, os núcleos gerados pelo autômato celular atingem, após algumas etapas de crescimento, um formato octaédrico regular e uma orientação comum, como visto na Figura 1a. Aquela característica exclusiva da nucleação periódica em conjunto com estas características dos núcleos, que são comuns a todos os tipos de nucleação realizados pelo autômato celular, proporcionam um contido singular entre grãos que, ao término da recristalização, gera grãos cúbicos.

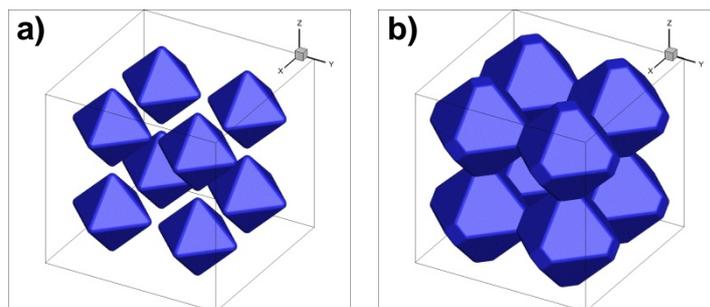


Figura 1. a) Grãos octaédricos gerados pelo autômato celular antes de entrarem em contato. b) Grãos octaédricos após contato inicial. Este contato característico é causador do formato cúbico que os grãos adquirem ao término da recristalização.

Estes grãos cúbicos podem ser perfeitos, como observado nas simulações com N_V de 1.728 e 8.000 μm^{-3} e apresentado nas Figuras 2^a e 2b, ou possuir rebarbas diminutas, como observado nas outras simulações e apresentado nas Figuras 2b e 2c.

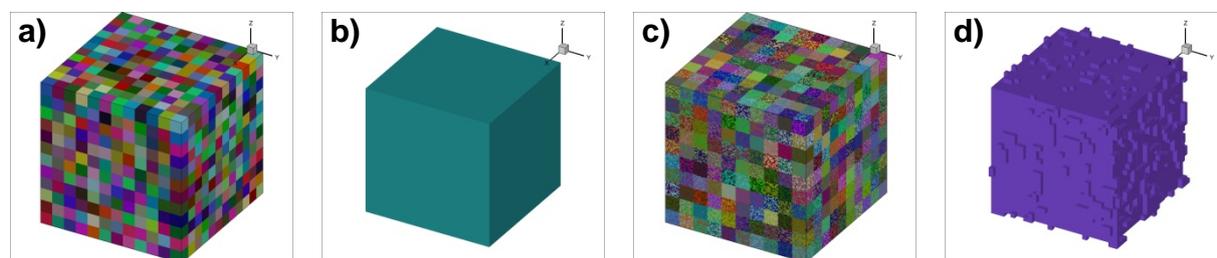


Figura 2. a) Malha simulada com N_V de 1.728 μm^{-3} , apresentando grãos cúbicos perfeitos. b) Imagem ampliada de um grão cúbico perfeito, provindo da malha da Figura 1a. c) Malha simulada com N_V de 1.000 μm^{-3} , apresentando grãos com rebarbas. d) Imagem ampliada de um grão cúbico com rebarbas, provindo da malha da Figura 2c.

Esta organização ideal dos grãos cúbicos permite que seja observada uma limitação na técnica de medição de N_L utilizada. Esta limitação se apresenta nas simulações de N_V 1.728 e 8.000 μm^{-3} , onde os cubos são perfeitos. Ela é resultado da forma ordenada como estão dispostos os grãos, que não permite que a microestrutura apresente suficiente aleatoriedade. Dessa maneira, o método de medição de N_L em linhas paralelas às direções X, Y e Z se torna tendencioso, tornando necessário um método mais adequado como, por exemplo, a medição em uma circunferência.

A Tabela 4 apresenta os valores de N_L e N_A obtidos por medição da malha simulada e N_V respectivos de cada simulação. A partir dela, é possível observar que a evolução dos valores N_V e N_A ocorre ordenadamente, enquanto os valores de N_L apresentam disparidades nas simulações já citadas. Por este motivo, estas duas simulações, de N_V 1.728 e 8.000 μm^{-3} , não serão utilizadas em comparações subsequentes, caso estas comparações necessitem da utilização dos valores de N_L medidos.

Tabela 4. Valores de N_L e N_A medidos na malha simulada e N_V de simulações com nucleação periódica e microestrutura recristalização completa

N_V (μm^{-3})	1000	1728	3325	8000	15625	27000
N_A (μm^{-2})	103,33 $\pm 1,25$	144,00 $\pm 0,00$	236,25 $\pm 3,23$	400,00 $\pm 0,00$	677,08 $\pm 14,25$	990,00 $\pm 13,49$
N_L (μm^{-1})	16,10 $\pm 0,17$	11,00 $\pm 0,00$	24,18 $\pm 0,20$	19,00 $\pm 0,00$	39,64 $\pm 0,24$	48,15 $\pm 0,36$

Todavia, a organização ideal dos grãos cúbicos também permite que os princípios que validam a equação de N_A deduzida para o Cubo, apresentada em trabalho anterior,⁽⁴⁾ sejam alcançados. Por este motivo, analisou-se bidimensionalmente a nucleação periódica utilizando não somente os métodos presentes na Tabela 3, mas também este, que a partir de agora será tratado como Cubo Ideal. Sabendo que a equação de N_A para o Cubo Ideal é $N_A = (4/9)N_L^{2(4)}$, obteve-se a Tabela 5, que compara a adequação dos diversos métodos de aproximação analíticos utilizando a Equação 1.

Tabela 5. Tabela comparativa da adequação dos métodos de aproximação à nucleação periódica, através das equações de N_A em função de N_L

Forma Geométrica	χ^2	Forma Geométrica	χ^2
Cubo	5,56E + 06	Icosaedro	1,42E + 07
Cubo Ideal	3,95E + 04	Octaedro	9,39E + 06
Dodecaedro	1,07E + 07	Ortotetraidecaedro	1,05E + 07
Dodecaedro Rômbico	1,13E + 07	Poliedros de Voronoi	6,62E + 06
Esfera	1,72E + 07	Prisma Hexagonal	9,00E + 06
Grãos Reais de DeHoff	9,16E + 06	Tetraedro	2,09E + 06

Pela análise da Tabela 5, fica claro que o Cubo Ideal, assim como esperado, é o melhor método de aproximação para a simulação de nucleação periódica. Isso é explicado pelo fato da microestrutura gerada por essa simulação, após o término da recristalização, se adequar perfeitamente aos requerimentos deste método de aproximação, como já havia sido mencionado.

Analisou-se também qual método de aproximação é mais adequado à simulação, utilizando a relação entre N_V e N_L , para que fosse possível analisar tridimensionalmente a adequação dos métodos. Contudo, antes de serem apresentados os resultados, é conveniente observar que a equação para N_V em função de N_L é a mesma para os métodos Cubo e Cubo Ideal, já que ambos se diferenciam somente pelos princípios dos quais foram obtidas as equações de N_A . E, por isto, estes serão considerados um só método quando tratar de N_V .

Tabela 6. Tabela comparativa da adequação dos métodos de aproximação à nucleação periódica, através das equações de N_V em função de N_L

Forma Geométrica	χ^2	Forma Geométrica	χ^2
Cubo e Cubo Ideal	4,42E + 08	Octaedro	1,59E + 09
Dodecaedro	5,60E + 09	Ortotetraidecaedro	5,55E + 09
Dodecaedro Rômbico	5,12E + 09	Poliedros de Voronoi	1,07E + 09
Esfera	1,74E + 10	Prisma Hexagonal	1,21E + 09
Grão Reais de DeHoff	5,29E + 09	Tetraedro	9,42E + 08
Icosaedro	8,48E + 09		

A partir da análise da Tabela 6, observa-se que o método do Cubo Ideal é o mais adequado tridimensionalmente à nucleação periódica. Dessa maneira, o conjunto de

resultados anteriores comprova, tanto quantitativa como qualitativamente, que a nucleação periódica gera grãos cúbicos que são adequados bidimensionalmente e tridimensionalmente ao método de Cubo Ideal.

Partindo disso, nota-se que, caso seja realizada a obtenção de N_L pelos valores de N_A , utilizando o método do Cubo Ideal, e utilizando o valor obtido na equação de N_V do mesmo, encontram-se valores que, quando comparados aos valores simulados, apresentam erros desprezíveis para as malhas com cubos perfeitos e erros inicialmente pequenos, mas que evoluem com o crescimento de N_V , para as malhas com cubos com rebarbas. Como apresentado na Tabela 7.

Tabela 7. Tabela comparativa dos valores de N_V inseridos como entrada e obtidos analiticamente pelo método do Cubo Ideal utilizando valores de N_A medidos

N_V (μm^{-3})	1000	1728	3325	8000	15625	27000
N_V Analítico (μm^{-2})	1050	1728	3631	8000	17618	31150
	± 29	± 0	± 112	± 0	± 834	± 955
<i>Erro</i>	5,04%	0,00%	7,59%	0,00%	12,8%	15,4%

Este resultado só comprova a limitação do método de medição de N_L quando usado na nucleação periódica. E, em contrapartida, também mostra a precisão da medição de N_A e a perfeita adequação do método do Cubo Ideal à nucleação periódica.

3.2.1.2 Nucleação aleatória

A nucleação aleatória, assim como a nucleação periódica, gera grãos octaédricos com mesma orientação no espaço. No entanto, difere daquela primeira pelos núcleos surgirem em posições aleatórias na malha. O que afere maior confiabilidade à medição de N_L , e permite que as análises sejam feitas sem maiores dificuldades. Estas análises, feitas de maneira idêntica à realizada para a nucleação periódica, tem seus resultados apresentados nas Tabelas 9 e 10, e utilizam os valores estereológicos medidos para a nucleação aleatória contidos na Tabela 8.

Após a análise das Tabelas 9 e 10 fica claro que o modelo do Cubo é o mais adequado tanto em 2D quanto em 3D à nucleação aleatória. Isso é particularmente interessante pois, com a mudança da forma convenientemente organizada gerada pela nucleação periódica para uma disposição aleatória dos grãos gerada pela nucleação periódica, os grãos continuaram a ser aproximados por cubos de forma satisfatória. No entanto, quando comparada a nucleação periódica, houve uma mudança do método adequado para análises, de Cubo Ideal para Cubo, mas que era esperada, devido às necessidades específicas para validar a utilização do Cubo Ideal, que não são satisfeitas neste caso.

Tabela 8. Valores de N_L e N_A medidos na malha simulada e N_V de simulações com nucleação aleatória e microestrutura recristalização completa

N_V (μm^{-3})	1000	1728	3325	8000	15625	27000
N_A (μm^{-2})	163,65	234,59	368,30	653,24	1017,44	1461,89
	$\pm 0,39$	$\pm 0,68$	$\pm 0,96$	$\pm 1,34$	$\pm 1,21$	$\pm 1,47$
N_L (μm^{-1})	16,61	19,77	24,77	32,63	40,27	47,91
	$\pm 0,03$	$\pm 0,04$				

Tabela 9. Tabela comparativa da adequação dos métodos de aproximação à nucleação aleatória, através das equações de N_A em função de N_L

Forma Geométrica	χ^2	Forma Geométrica	χ^2
Cubo	$1,44E + 07$	Icosaedro	$2,95E + 08$
Cubo Ideal	$2,97E + 08$	Octaedro	$1,09E + 08$
Dodecaedro	$1,55E + 08$	Ortotetraidecaedro	$1,47E + 08$
Dodecaedro Rômbico	$1,78E + 08$	Poliedros de Voronoi	$3,36E + 07$
Esfera	$4,29E + 08$	Prisma Hexagonal	$9,66E + 07$
Grãos Reais de DeHoff	$1,02E + 08$	Tetraedro	$2,73E + 07$

Tabela 10. Tabela comparativa da adequação dos métodos de aproximação à nucleação aleatória, através das equações de N_V em função de N_L

Forma Geométrica	χ^2	Forma Geométrica	χ^2
Cubo e Cubo Ideal	$4,64E + 10$	Octaedro	$1,57E + 11$
Dodecaedro	$5,37E + 11$	Ortotetraidecaedro	$5,33E + 11$
Dodecaedro Rômbico	$4,92E + 11$	Poliedros de Voronoi	$1,07E + 11$
Esfera	$1,65E + 12$	Prisma Hexagonal	$1,21E + 11$
Grão Reais de DeHoff	$5,08E + 11$	Tetraedro	$8,00E + 10$
Icosaedro	$8,09E + 11$		

3.3 Análise de Microestrutura em Processo de Recristalização

Ao autômato celular não é somente incumbida a tarefa de gerar uma malha tridimensional completamente recristalizada, mas também de realizar todo o processo de recristalização, passo a passo, seguindo os princípios da metalurgia. Por este motivo, faz-se necessária a análise da evolução das características estereológicas da microestrutura durante a recristalização.

A Figura 3 mostra a evolução dos valores de N_L entre fase recristalizada e fase não recristalizada (N_{LNR}), entre fases recristalizadas (N_{LR}) e total (N_{LT} , que consiste na soma dos dois anteriores) nas simulações com nucleação periódica e aleatória, realizadas com um valor de N_V de $27.000 \mu\text{m}^{-3}$.

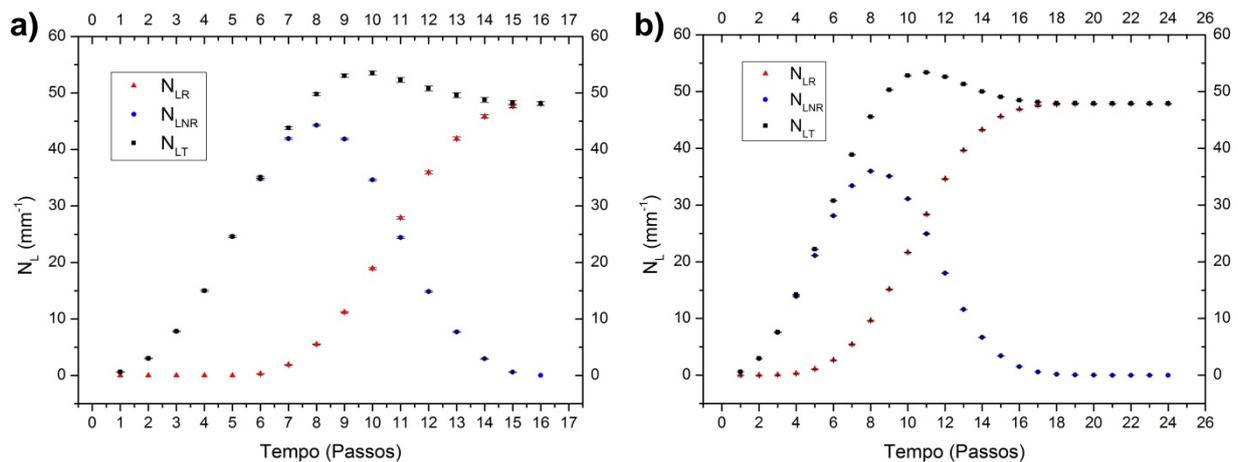


Figura 3. Gráficos de N_{LR} , N_{LNR} e N_{LT} vs. *Tempo* para simulações com N_V de $27.000 \mu\text{m}^{-3}$ realizadas por nucleação periódica (a) e nucleação aleatória (b).

Através da análise dos gráficos, nota-se que as curvas de N_L são muito semelhantes, até mesmo apresentando valores de N_{LT} muito próximos durante os 16 primeiros passos da recristalização. No entanto, também é notável uma divergência de comportamento nos estágios finais da recristalização entre os dois tipos de nucleação. Enquanto a nucleação periódica termina de forma sucinta, a nucleação aleatória apresenta um número maior de passos e pouca variação dos valores de N_L em seus passos finais. Sendo esse valor final de N_L para a nucleação aleatória distinto do encontrado para a nucleação periódica.

Anteriormente à análise sobre a adequação dos métodos analíticos a microestrutura durante a recristalização, é conveniente lembrar que tanto as equações para N_V quanto para N_A foram deduzidas tendo como base o total preenchimento da malha por grãos, o que, à primeira instância, já propõem que estas somente se adequam a uma microestrutura completamente recristalizada.

Além disso, essa não adequação é facilmente comprovada para N_V pois, sendo a recristalização no autômato celular realizada por saturação em sítio, o valor de N_V é fixo do primeiro ao último passo. Dessa maneira, é dedutível que, já que a evolução sofrida pelos valores de N_L não é acompanhada pelo valor de N_V , as equações para N_V não são válidas durante a recristalização.

Em contrapartida, a análise da adequação das expressões para N_A não é tão simplória, pois o N_A não possui valor fixo. A Figura 4 apresenta duas curvas de N_A para cada tipo de nucleação, tendo sido uma obtida por medição de N_A diretamente na malha simulada e a outra calculada a partir dos valores de N_{LT} para os tempos respectivos. Sendo as comparações realizadas utilizando os modelos analíticos do Cubo Ideal e Cubo, respectivamente para as nucleações periódica e aleatória.

A partir da análise dos gráficos da Figura 4, fica claro que os modelos analíticos para N_A , assim como esperado, não são adequáveis além das proximidades do estado de completa recristalização. Sendo isso concluído a partir do comportamento da curva analítica, que somente se adequa à curva experimental nos passos finais das simulações. E este resultado se mostra extensível aos outros métodos analíticos pois, embora os dados experimentais tenham sido comparados somente com os métodos do Cubo Ideal e Cubo, respectivamente para as nucleações periódica e aleatória, todos os outros métodos apresentam curvas de mesmo formato, e que, conseqüentemente, também não se adequariam.

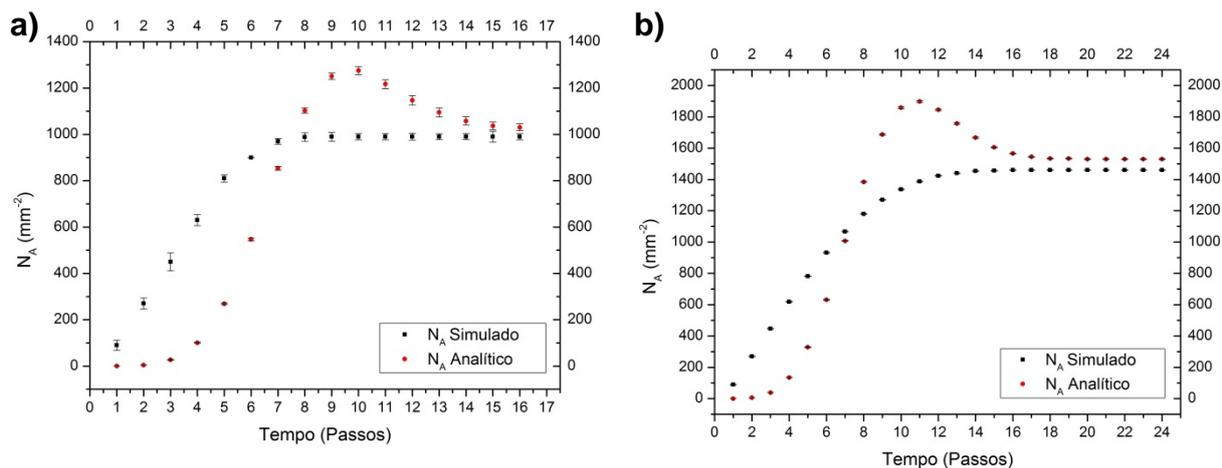


Figura 4. Gráficos de N_A Medido na Simulação e Analítico vs. Tempo para simulações com N_V de $27.000 \mu\text{m}^{-3}$ realizadas por nucleação periódica (a) e nucleação aleatória (b). Onde as comparações são realizadas utilizando os modelos analíticos do Cubo Ideal e Cubo, respectivamente para as nucleações periódica e aleatória.

3.4 Propostas de Melhorias ao Autômato Celular

Após a análise da nucleação periódica e da nucleação aleatória, ficou claro que ambas as nucleações se adequam aos modelos cúbicos, sendo uma ao modelo do Cubo Ideal e a outra ao Cubo. Esse resultado é importante pois permite obter resultados analíticos aproximados para o autômato, e além disso, enfatiza que o autômato, com já havia sido comprovado,⁽⁴⁾ não é capaz de modelar satisfatoriamente o ferro puro. Apresentando valores divergentes daqueles esperados para o ferro. Sendo assim, essa divergência é atribuída a características do autômato como: o formato octaédrico dos grãos; a orientação comum dos grãos; e o posicionamento dos grãos.

O formato dos grãos do autômato é suposto como um dos fatores de divergência por não ser fiel a realidade. Enquanto ele adquire um formato octaédrico durante o crescimento, devido a vizinhança de Von Neumann adotada, o grão real apresenta um formato irregular, apresentado por Jensen.⁽⁷⁾ Dessa maneira, a geometria de contato entre grãos, ocasionada pelos grãos octaédricos, não corresponde à realidade e, conseqüentemente, acaba influenciando no formato final dos grãos. Formato este que acaba por também não corresponder à realidade.

Por outro lado, a orientação dos grãos também foi considerada fator de divergência. Já que, devido à orientação comum a todos os grãos (Figura 1), a geometria de contato apresenta pouca variabilidade. Isto não permite, em alguns casos, que o grão apresente formatos complexos, como é comprovado pelos grãos cúbicos e cúbicos perfeitos gerados pela nucleação periódica. E, mesmo na nucleação aleatória, não gera grãos com formatos reais, por mais que estes apresentem formatos diversos.

O último fator de divergência considerado foi o posicionamento dos grãos. Isto se deve ao fato de que, enquanto a nucleação aleatória apresenta aleatoriedade ideal⁽⁸⁾ e a nucleação periódica apresenta um posicionamento equidistante entre grãos, os metais apresentam um comportamento menos restrito, apresentando regiões aleatórias e regiões com presença de clusters.

Em suma, são propostas três mudanças ao autômato celular, a fim de prepará-lo a simular o ferro puro e outros metais. Estas são: a utilização do formato real do grão metálico apresentado por Jensen; a utilização de diversas orientações espaciais

para os grãos; e o uso da nucleação em clusters, que está em fase final de desenvolvimento.

4 CONCLUSÃO

O estudo das características estereológicas do autômato celular, realizado através de comparações utilizando modelos analíticos de aproximação ao formato dos grãos da microestrutura, foi conclusivo em fornecer os métodos analíticos adequados às nucleações utilizadas. Ficou comprovado que o modelo do Cubo Ideal é o mais adequado à nucleação periódica, enquanto o modelo do Cubo é o mais adequado à nucleação aleatória.

Além disso, foram propostas três melhorias a serem implantadas no autômato celular, a fim de capacitá-lo a modelar corretamente os metais. São elas: a utilização do formato real do grão metálico apresentado por Jensen;⁽⁷⁾ a utilização de diversas orientações espaciais para os grãos; e o uso da nucleação em clusters.

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).

REFERÊNCIAS

- 1 RIOS, Paulo Rangel; JARDIM, Douglas; ASSIS, Wesley Luiz da Silva; SALAZAR, Tatiana Caneda; VILLA, Elena. Inhomogeneous Poisson point process nucleation: comparison of analytical solution with cellular automata simulation. *Materials Research*, v. 12, p. 219-224, 2009.
- 2 DEHOFF, R. T.; RHINES, F. N. *Quantitative Microscopy*. USA: McGraw-Hill, 1968
- 3 OHSER, J.; MÜCKLICH, F. *Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science*. England: John Wiley & Sons, Ltd., 2000.
- 4 SOUZA, D. S.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R.; FONSECA, G.S. Análise Topológica da Microestrutura de Ferro Puro Policristalino com Nucleação Aleatória. *Anais do 66º Congresso Anual da ABM, 2011, São Paulo*. p. 2750-2761.
- 5 SOUZA, D. S.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R.; FONSECA, G.S. Topological Analysis of the Microstructure of Pure Polycrystalline Iron at Different Levels of Recrystallization. In: *XXIII Congresso da Sociedade Brasileira de Microscopia e Microanálise, 2011, Armação de Búzios. Anais do XXIII CSBMM, 2011*.
- 6 RUSS, J. C.; DEHOFF, R. T. *Practical Stereology: Second Edition*. New York: Kluwer Academic / Plenum Publishers, 2000.
- 7 JENSEN, D. J.; SCHMIDT, S. Time Evolution in 3D Metal Microstructures – Recrystallization. *Materials Transactions*, Vol. 50, No. 7, p. 1655-1659, 2009.
- 8 RIOS, P.R.; OLIVEIRA, V.T.; PEREIRA, L.O.; PEREIRA, M.R.; CASTRO, J.A. Cellular Automata Simulation of Site-saturated and Constant Rate Transformations in Three Dimensions. *Materials Research*, Vol.9, No. 2, p. 223-230, 2006.
- 9 HILLIARD, J. E.; LAWSON, L. R. *Stereology and Stochastic Geometry: Computational Imaging and Vision*. Chap. 6, p. 269-271. First Edition. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2003.