

# COMPARAÇÃO DO MODELAMENTO, EM 3D, DA RECRISTALIZAÇÃO PELO MÉTODO DO AUTÔMATO CELULAR COM RESULTADOS EXPERIMENTAIS<sup>1</sup>

Tatiana Caneda Salazar<sup>2</sup>  
Wesley Luiz da Silva Assis<sup>3</sup>  
Paulo Rangel Rios<sup>4</sup>

## Resumo

A recristalização de um monocristal de ferro puro foi estudada em detalhes por Vandermeer e Rath (V&R). Neste trabalho, a simulação em três dimensões pelo método do Autômato Celular (AC) é comparada com os dados experimentais de Vandermeer e Rath e com o tratamento analítico correspondente. Foi obtida uma boa correlação entre a simulação, os dados experimentais e a descrição analítica dos dados feita por V&R. Foi necessário obter uma dimensionalização do tempo e do espaço e utilizar uma correção para a forma do grão da simulação do AC.

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

## COMPARISON OF THE MODELAMENTO, IN 3D, OF THE RECRYSTALLIZATION FOR THE METHOD OF THE CELLULAR AUTOMATA WITH EXPERIMENTAL RESULTS

## Abstract

Recrystallization of an iron single crystal was studied in detail by Vandermeer and Rath (V&R). In this work, Cellular Automata (CA) simulation in three dimensions is compared with Vandermeer and Rath's experimental data and with its corresponding analytical treatment. Good agreement was obtained between CA simulations, experimental data and Vandermeer and Rath's analytical description of the data. It was necessary to get a dimensionalization of the time and the space and to use a correction for the form of the grain of the Cellular Automata simulation.

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

<sup>1</sup> *Contribuição técnica ao 63º Congresso Anual da ABM, 28 de julho a 1º de agosto de 2008, Santos, SP, Brasil*

<sup>2</sup> *Engenheira Metalúrgica; Mestre em Engenharia Metalúrgica; aluna do curso de Doutorado em Engenharia Metalúrgica na Universidade Federal Fluminense – tatiana@metal.eeimvr.uff.br.*

<sup>3</sup> *Engenheiro Químico, Mestre em Engenharia Metalúrgica, aluno do curso de Doutorado em Engenharia Metalúrgica na Universidade Federal Fluminense – wesley@metal.eeimvr.uff.br*

<sup>4</sup> *Professor Ph.D. em Engenharia Metalúrgica da EEIMVR/UFF. prrios@metal.eeimvr.uff.br.*

## 1 INTRODUÇÃO

A recristalização pode ser classificada como uma reação de nucleação e crescimento. A nucleação depende da microestrutura do início da reação e seu mecanismo não é normalmente descrita pela teoria da flutuação. Neste caso é importante conhecer o estado deformado.

No estado deformado a distribuição heterogênea de energia armazenada e a orientação dos grãos podem estar presentes. Além disso, a migração da interface depende da força motriz local, ou seja, da diferença de potencial químico entre a interface do grão e da matriz e da mobilidade dessa interface.

Recristalização pode ser interpretada quantitativamente e qualitativamente por modelos analíticos e simulação computacional. Esses métodos podem ser usados juntos ou separadamente. Em situações onde as hipóteses da teoria analítica não são totalmente válidas, a obtenção de uma idéia preliminar e quais os parâmetros relevantes é importante para um posterior modelamento analítico.

A teoria analítica utilizada para modelar a recristalização é baseada nos estudos de Johnson-Mehl<sup>(1)</sup>, Avrami<sup>(2-4)</sup> and Kolmogorov<sup>(5)</sup> (JMAK).

Essa teoria se baseia em suposições como nucleação aleatória, crescimento com velocidade constante, forma dos grãos esférica e homogeneidade energética na matriz deformada. Posteriormente, DeHoff e Gokhale<sup>(6-7)</sup> propuseram outra maneira de descrever a microestrutura: através do caminho microestrutural. As quantidades reais são transformadas em estendidas pelas seguintes relações:

$$V_V = 1 - \exp(-V_{VE}) \quad (1)$$

$$S_{VE} = \frac{S_V}{1 - V_V} \quad (2)$$

onde  $V_V$  e  $V_{VE}$  correspondem a fração de volume transformada no espaço real e no espaço estendido, respectivamente e  $S_V$  e  $S_{VE}$  correspondem a área interfacial por unidade de volume no espaço real e no espaço estendido, respectivamente. O espaço estendido é quando se considera que os grãos crescem livremente, ou seja, aumentam de tamanho livremente sem a ocorrência do *impingement*.

A evolução microestrutural pode ser simulada computacionalmente e pontos complexos que os modelos analíticos não descrevem podem ser tratados. É importante sempre que possível acoplar os dois métodos. Entre várias técnicas de simulação, uma técnica conveniente para recristalização é a do Autômato Celular (AC) introduzida por Hesselbarth e Göbel<sup>(8)</sup> e tem sido utilizado para simular a recristalização. Rios e colaboradores mostraram, em 2D<sup>(9)</sup> e em 3,<sup>(10)</sup> que o Autômato Celular reproduz a teoria analítica, impondo à simulação as mesmas hipóteses da teoria analítica. O estudo da influência da não aleatoriedade da distribuição dos núcleos também tem sido feita utilizando o método do AC. Aplicar o AC para simular dados experimentais reais ainda não é utilizado. Por isso esse trabalho simulará os dados obtidos por Vandermeer e Rath<sup>(11)</sup> para a recristalização de um monocristal de ferro puro.

## 2 MATERIAIS E MÉTODOS

### 2.1 Dados Experimentais e as Expressões Analíticas de Vandermeer e Rath

V&R estudaram a recristalização de um monocristal de ferro puro deformado 70% a frio e recozido a temperaturas entre 450-600°C. Os dados experimentais foram digitalizados a partir das figuras contidas no trabalho. Eles normalizaram os dados das várias temperaturas para obter um tempo adimensional,  $\tau$ . As equações para fração de volume estendido e da área interfacial em função do tempo adimensional é:

$$V_{VE} = B_n \tau^n \quad (3)$$

$$S_{VE} = K_m \tau^m \quad (4)$$

onde  $\tau$  é o tempo adimensional normalizado e igual a

$$\tau_i = \frac{t}{t_i} \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (5)$$

onde  $t$  é tempo em minutos,  $t_i$  é uma constante;  $i=v$  para dados de fração de volume ou  $s$  para dados de área interfacial por unidade de volume. A tabela 1 mostra as constantes referentes às equações 3,4 e 5.

**Tabela 1.** Constantes obtidas por V&R para o modelamento analítico da recristalização de um monocristal de ferro puro.

$t_v$	$1,836 \cdot 10^{-20}$ s	$B_n$	$0,118 \mu\text{m}^{-1}$
$t_s$	$1,614 \cdot 10^{-20}$ s	$K_m$	$0,0157 \mu\text{m}^{-1}$
$n$	1,9	$Q$	335KJ/mol
$m$	1,28	$R$	8,3144J/mol

Então  $\tau_s$  ou  $\tau_v$  foi utilizado por Vandermeer e Rath para a normalização do tempo quando se referia a  $V_{VE}$  ou  $S_{VE}$  respectivamente.

Neste trabalho, o tempo do autômato será relacionado com apenas um tempo adimensional:  $\tau_v$ . Então,  $\tau_s$  e  $\tau_v$  serão substituídos por  $\tau$ . Por esse motivo, os dados experimentais de  $S_{VE}$  vs.  $\tau_s$  tiveram que ser corrigidos multiplicando  $\tau_s$  (experimental) por  $t_s/t_v$  e  $S_{VE}$  (experimental) por  $(t_s/t_v)^{1,28}$ . Essa correção é para assegurar que a equação 4 mantém a mesma forma e que o valor de  $K_m$  não muda quando  $\tau_s$  é representado por  $\tau$ . Obviamente, os dados experimentais de  $S_{VE}$  vs.  $V_{VE}$  não precisam de correção. A razão pela qual V&R usaram dois tempos adimensionais distintos foi porque eles adotaram  $V_V = 0,1$  e  $S_V = 0,01 \mu\text{m}^{-1}$  como sendo os valores de referência, provavelmente para facilitar a determinação os tempos de referencia em cada temperatura. A utilização  $\tau = \tau_v$ , implica em  $S_V = 0,014 \mu\text{m}^{-1}$  como sendo o novo valor de referência.

## 2.2 Metodologia da Simulação pelo Método do Autômato Celular em 3D

A matriz consiste de um reticulado cúbico com 300x300x300 células. É utilizada velocidade de avanço das interfaces dependente do tempo implementada por Assis.<sup>(13)</sup> Para efeito de comparação com os dados de V&R, será utilizada uma velocidade que decresce com o tempo como uma função (tempo)<sup>-0,4</sup>, porém serão mostradas outras simulações variando a velocidade .

A comparação de dados reais com dados da simulação requer uma dimensionalização do tempo e do espaço.

A dimensionalização do espaço é feita atribuindo um valor a cada aresta das células. Para esse trabalho foi atribuído o valor de 1,5  $\mu\text{m}$ . Esse valor permitiu simular com 220 núcleos iniciais mantendo o número de núcleos por unidade de volume encontrado por V&R:  $2,4 \cdot 10^{-6}$  núcleos/ $\mu\text{m}^3$ . Variando o número de células da matriz e mantendo o valor da aresta de 1,5  $\mu\text{m}$ , é preciso variar o número de núcleos iniciais para manter o  $N_v$  de V&R.

O método pelo qual o tempo do AC,  $t_{AC}$  foi relacionado com o tempo adimensional de V&R,  $\tau$ , é direto. Para  $\tau=1$  e  $\tau=8$  o tempo correspondente do AC,  $t_{AC}(\tau=1)$  e  $t_{AC}(\tau=8)$  que tem o mesmo valor de  $V_{VE}$  foram encontrados, por exemplo,  $V_{VE}(\tau=1) = V_{VE}(t_{CA}(\tau=1))$ . A relação entre  $t_{AC}$  e  $\tau$  foi feita pela razão entre os intervalos.

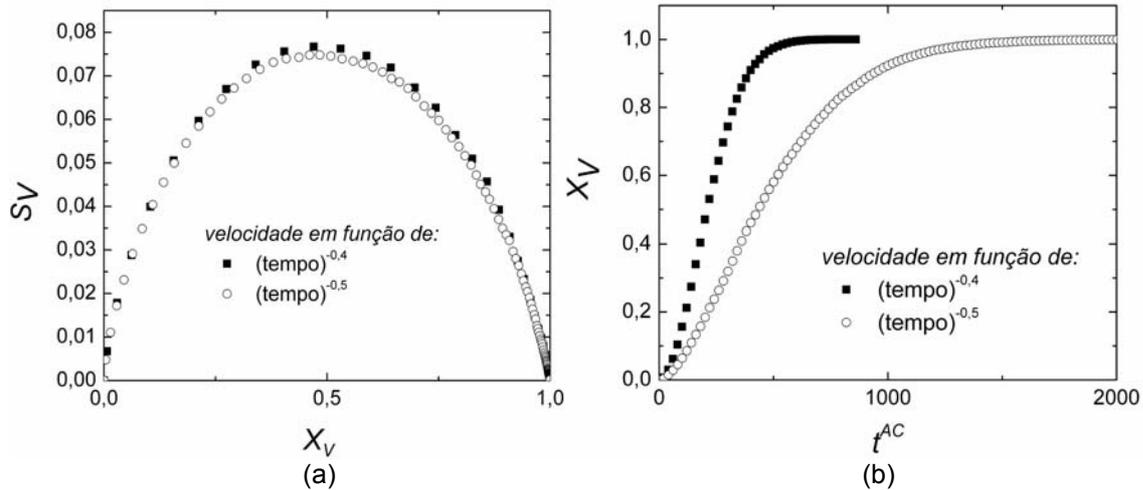
$$\tau = \left( \frac{8-1}{t_{AC}(\tau=8) - t_{AC}(\tau=1)} \right) t_{AC} \cong \frac{t_{AC}}{81,7} \quad (6)$$

A nucleação foi por saturação de sítios, ou seja, todos os núcleos aparecem no tempo  $t=0$ , como foi suposto pelo tratamento analítico de V&R.

## 3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

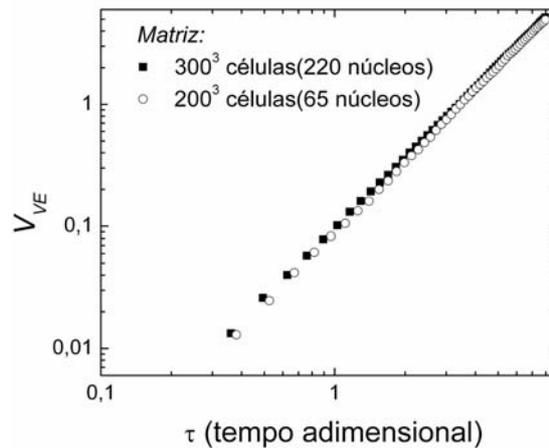
Os gráficos das Figuras 1(a e b) e 2 mostram parâmetros da simulação a serem determinados que podem ou não alterar os resultados, como: velocidade de avanço das interfaces a ser adotado e a relação entre o tamanho da matriz e o número de núcleos iniciais,

A Figura 1a compara duas simulações, que se diferenciam apenas na velocidade de avanço das interfaces. Neste gráfico não há dimensionalização dos dados. Podemos observar que para nucleação com saturação de sítios o caminho microestrutural não depende da velocidade da interface. Porém, como mostrado na Figura 1b, a cinética é alterada.



**Figura 1.** Simulações que se diferenciam na velocidade de avanço da interface: a) caminho microestrutural e b) fração volumétrica em função do tempo.

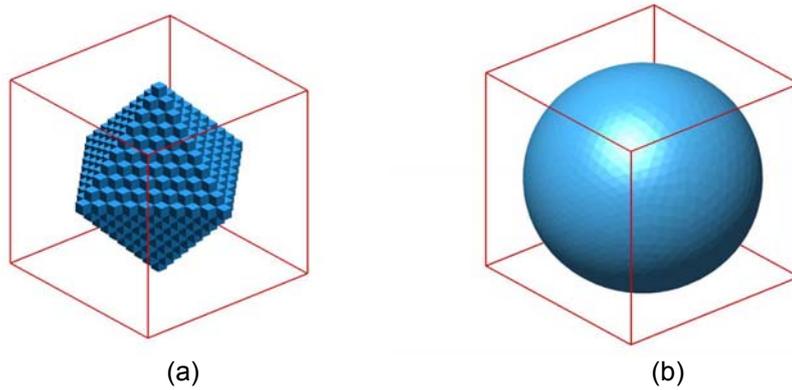
A Figura 2 mostra que ao dimensionalizar o valor da aresta em  $1,5\mu\text{m}$ , a mudança do tamanho da matriz implica em mudança do número de núcleos para manter o  $N_V$  e não alterar o resultado.



**Figura 2.** Fração de volume transformado como uma função do tempo adimensional,  $\tau$ , para duas matrizes de tamanhos diferentes, valor da aresta igual e número de núcleos iniciais diferentes.

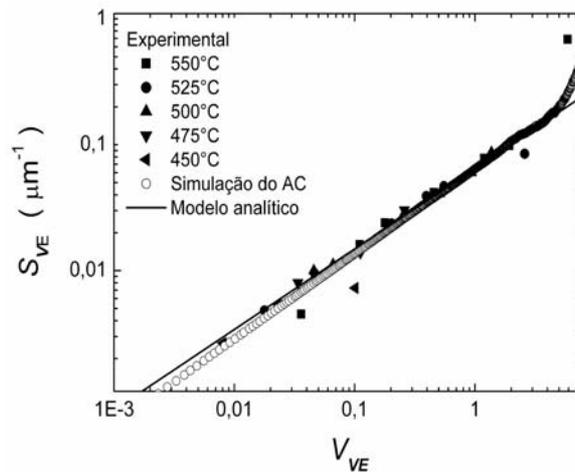
No entanto, o ponto principal ao se comparar a simulação com o tratamento analítico feito por V&R é a diferença da forma como o grão cresce. As micrografias mostradas no trabalho de V&R são de um estágio inicial de transformação, mas sugerem uma forma esférica dos grãos. Os grãos do AC não são esféricos. Foi preciso calcular um fator de forma capaz de corrigir essa diferença. Esse fator é calculado a partir da equação do caminho microestrutural. O fator de forma utilizado nesse trabalho é descrito na equação 7. A Figura 3 mostra essa diferença.

$$\frac{S_{VE}^{AC}}{S_{VE}^{esf.}} \cong 2,048 \tag{7}$$



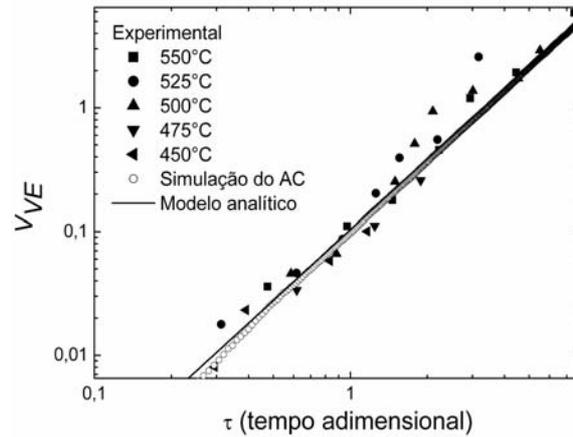
**Figura 3.** Formato de grão com mesmos volumes: (a) Autômato Celular e (b) esférico.

A Figura 4 mostra os dados do caminho microestrutural no espaço estendido para os dados experimentais de V&R, analítico e do AC. As aproximações feitas dão uma descrição razoável dos dados experimentais, considerando os erros experimentais.



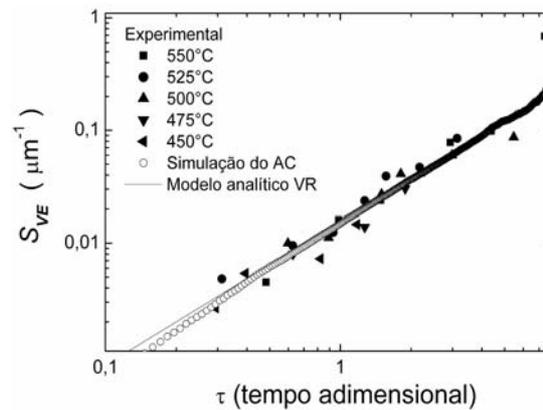
**Figura 4.** Caminho microestrutural: área interfacial por unidade de volume entre regiões transformadas e não transformadas em função da fração de volume estendido transformada: no espaço estendido.

Para as próximas comparações, foi utilizada a relação entre o tempo do autômato,  $t_{AC}$ , e o tempo adimensional de V&R,  $\tau$ , mostrada na seção 2.2. A Figura 5, em escala log, mostra que existe uma boa concordância entre a simulação e os dados de V&R. A simulação do AC e a linha que corresponde ao tratamento analítico (equação 3) são muito próximas.



**Figura 5.** Fração de volume transformado como uma função do tempo adimensional,  $\tau$ , para os dados da recristalização de um monocristal de ferro e para a simulação do A.C no espaço estendido.

A Figura 6, em escala log, mostra que existe uma boa concordância entre a simulação e os dados de V&R, para a área interfacial estendida por unidade de volume em função do tempo. A simulação do AC e a linha que corresponde ao tratamento analítico (equação 4) são muito próximas.



**Figura 6.** Área interfacial por unidade de volume entre regiões transformadas e não transformadas em função do tempo adimensional,  $\tau$ , para os dados da recristalização de um monocristal de ferro e para a simulação do AC: no espaço estendido.

A velocidade de avanço das interfaces pode ser descrita pela equação de Cahn e Hagel<sup>[12]</sup>.

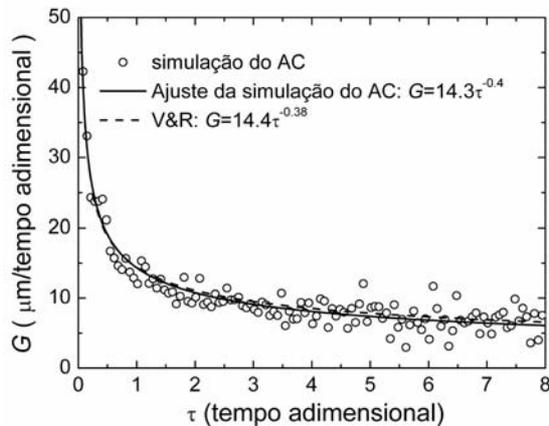
$$G = \frac{1}{S_{VE}} \frac{dV_{VE}}{dt} = \frac{1}{S_V} \frac{dV_V}{dt} \quad (8)$$

Para V&R, substituindo as equações 3 e 4 na equação 8, temos:

$$G_{V\&R} = 14,4\tau^{-0,38} \mu\text{m}/\text{tempo adimensional} \quad (9)$$

Para a simulação, a velocidade foi avaliada numericamente, por uma expressão analítica, obtida a partir da simulação, como mostrado na figura 7. Essa expressão é:

$$G_{AC} = 14,4\tau^{-0,4} \mu\text{m}/\text{tempo adimensional} \quad (10)$$



**Figura 7.** Velocidade de avanço da interface,  $G$ , como uma função do tempo adimensional,  $\tau$ , para dados experimentais de V&R e para simulação do AC.

#### 4 CONCLUSÃO

- A comparação entre a simulação do AC com os dados experimentais da recristalização de um monocristal de ferro puro e com a descrição analítica desses dados obteve uma boa correlação.
- Foi necessário uma dimensionalização do tempo e do espaço assim como a consideração da diferença de forma entre os grãos do AC e dos grãos experimentais (esféricos).
- O fato de obter uma reprodução correta, pelo AC, usando as quantidades extraídas da análise analítica valida não somente a simulação do AC mas também o próprio tratamento analítico feito por VR.
- Uma metodologia de análise é proposta neste acoplamento do AC com a descrição analítica. Uma simulação do AC usando as conclusões e parâmetros obtidos do tratamento analítico podem confirmar ou não os resultados analíticos dependendo do grau de realidade das suposições feitas pelo tratamento analítico.

#### 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 JOHNSON, W.A; MEHL, R.F. Reaction Kinetics in processes of nucleation and growth. **Transactions Metallurgical Society. A.I.M.E.**, vol. 135, p.416–441, 1939.
- 2 AVRAMI, M. Kinetics of phase change I general theory. **Journal of Chemical Physics**, v. 7(12), p.1103-1112, 1939.
- 3 AVRAMI, M. Kinetics of phase change II general theory. **Journal of Chemical Physics**, v. 8(2),p.214-224,1940.
- 4 AVRAMI, M. Kinetics of phase change III general theory. **Journal of Chemical Physics**, v. 9(2),p.177-184,1941.

- 5 KOLMOGOROV, N.A. The statistics of crystal growth in metals. **Isvestiia Akademii Nauk, SSSR- Seria Matematicheskaja**, vol.1 (3), p.333-359, 1937.
- 6 GOKHALE, A.M.; ISWARAN, C.V.; DEHOFF, R.T. Use of the stereological counting measurements in testing theories of growth-rates. **Metallurgical Transactions A**, v.10A(9), p.1239-1245,1979.
- 7 DEHOFF, R.T. IN: HANSEN,N.; JENSEN,D.J.; LEFFERS,T.; RALPH,B.; editors Annealing Processes—Recovery, Recrystallization and Grain Growth, **Proceedings of the 7th Conference of Risø National Laboratory**; 1986, Roskilde, Denmark. Roskilde: Risø National Laboratory, p. 35-52,1986.
- 8 HESSELBARTH, H.W.; GÖBEL, I.R. Simulation of recrystallization by cellular automata. **Acta Metallurgica et Materialia**, v. 39(9), p.2135-2143, 1991.
- 9 RIOS, P.R.; OLIVEIRA, J.C.P.T.; OLIVEIRA, V.T.; CASTRO, J.A. Comparison of analytical models with cellular automata simulation of recrystallization in two dimensions. **Materials Research**, v.8(3), p.341-345,2005.
- 10 RIOS, P.R.; PEREIRA, L.O.; OLIVEIRA, V.T.; PEREIRA, M.R.; CASTRO, J.A. Cellular automata simulation of site-saturated and constant nucleation rate transformations in three dimensions. **Materials Research**, v. 9(2), p.223-230,2006.
- 11 VANDERMEER, R.A.; RATH, B.B. Modeling recrystallization kinetics in a deformed iron single crystal. **Metallurgical Transactions A**, v.20A(3),p.391-401,1989.
- 12 CAHN, J.W.; HAGEL, W. Theory of the pearlite reaction. In: Zackay ZD, Aaronson HI, editors. **Decomposition of austenite by Diffusional Processes**. New York: Interscience; 1960.
- 13 ASSIS, W.L.S. Investigação do Efeito da Nucleação, da Velocidade de Crescimento e da Distribuição da Energia Armazenada na Recristalização pelo Método do Autômato Celular em Três Dimensões. **Dissertação de Mestrado – PG Engenharia Metalúrgica**, UFF Volta Redonda, 2006.