DESENVOLVIMENTO DO CÓDIGO EM 3D PARA SIMULAR A RECRISTALIZAÇÃO PELO MÉTODO DO AUTÔMATO CELULAR⁽¹⁾

Valmir Torres de Oliveira⁽²⁾ Paulo Rangel Rios⁽³⁾ José Adilson de Castro⁽⁴⁾

Resumo

Modelos analíticos como o modelo clássico de Johnson-Mehl, Avrami e Kolmogorov (JMAK) são usados para modelar o fenômeno da recristalização. Atualmente a evolução microestrutural simulada é feita por simulação computacional. Neste Trabalho, a simulação computacional é feita pelo método do autômato celular em 3D. As teorias cinéticas e do caminho microestrutural são comparadas com a simulação do autômato celular, e é observado um bom acordo. Também é avaliado o efeito da distribuição dos núcleos na cinética e no caminho microestrutural. Este trabalho é baseado na recristalização mas seus resultados podem ser usados em qualquer transformação de nucleação e crescimento.

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

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

² Engenheiro Metalúrgico, aluno do curso de Mestrado em Engenharia Metalúrgica na Universidade Federal Fluminense – UFF. valmir_amo@amsted-maxion.com.br

³ Professor Ph. D, coordenador do curso de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica da EEIMVR/UFF. prrios@metal.eeimvr.uff.br.

⁴ Professor Ph. D, do curso de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica da EEIMVR/UFF. <u>adilson@metal.eeimvr.uff.br</u>.

1 INTRODUÇÃO

Os materiais metálicos têm suas propriedades mecânicas alteradas quando o mesmo é deformado a frio. O tratamento térmico, de recristalização, é uma das ferramentas capazes de recuperar a microestrutura e as propriedades dos metais deformados. Durante a recristalização, grãos "novos", livres de deformação, se formam. Após a recristalização, o metal apresenta microestrutura similar à que existia antes da deformação. A recristalização ocorre através da nucleação e do crescimento desses novos grãos[1, 2].

A teoria fenomenológica de Johnson e Mehl[3], Avrami[4] e Kolmogorov[5], a teoria de JMAK, é muito empregada no modelamento analítico da recristalização. A teoria JMAK e o conceito de caminho microestrutural de DeHoff[6], utilizada por Vandermeer[7], são ferramentas matemáticas utilizadas para descrever analiticamente a recristalização.

Neste trabalho, um código computacional que simula a recristalização, utilizando o método do autômato celular[8,9] em *3D* é apresentado. Quando as mesmas considerações utilizadas na teoria analíticas são empregadas na simulação do autômato celular em *3D*, os resultados têm uma boa concordância com as soluções analíticas matematicamente exatas. Além da comparação da simulação com a teoria, é feita uma avaliação do efeito da distribuição dos núcleos na cinética e no caminho microestrutural.

2 DESENVOLVIMENTO DOS MODELOS ANALÍTICOS EM 3D

2.1 A Teoria de JMAK (Saturação de Sítios)

O processo de recristalização tem seu início na nucleação de novos grãos na matriz deformada e na próxima etapa, estes novos grãos crescem consumindo a matriz deformada. Portanto a recristalização pode ser tratada como um processo de nucleação e crescimento. Neste presente trabalho será considerada apenas a situação de saturação de sítios, ou seja, todos os núcleos são formados no instante inicial (t = 0). Sendo assim, as grandezas fundamentais são: número de núcleos por unidade de volume, N_V , e velocidade de crescimento do núcleo recristalizado, *G*.

Assumindo que os núcleos são todos formados em t = 0, N_V , e que os grãos crescem dentro do material deformado em uma taxa linear *G*, temos que, considerando que os núcleos são esféricos de raio *R*, os seus volumes variam ao cubo de seus diâmetros, e a fração do material recristalizado (X_V) aumenta rapidamente com o tempo. Entretanto, os novos grãos colidirão um com o outro e a taxa de recristalização então diminuirá, tendendo a zero quando X_V tende a 1.

Supondo que os núcleos crescem sem nenhuma interferência, colisão, é obtida a fração recristalizada no espaço estendido, X_{VEX} . Durante um intervalo de tempo dt, há um aumento na parcela do volume estendido, dX_{VEX} ($dX_V + dX_{Vfantasma}$). Considerando que $dX_{Vfantasma} = X_V.dX_{VEX}$, têm-se as seguintes equações:

$$dX_{VEX} = dX_V + X_V \cdot dX_{VEX}$$
(1)

$$dX_{V} = dX_{VEX} - X_{V} dX_{VEX}$$
(2)
$$dX_{V} = (1 - X_{V}) dX_{VEX}$$
(3)

Sendo que
$$(1 - X_v)$$
 é a fração do material não recristalizado, e aplicando o seguinte desenvolvimento à Eq.3, é obtido a Eq.9, para fração recristalizada, em função do volume estendido.

$$dX_{VEX} = \frac{dX_V}{1 - X_V} \tag{4}$$

$$\int_{0}^{X_{V}} dX_{VEX} = \int_{0}^{X_{V}} \frac{dX_{V}}{1 - X_{V}}$$
(5)

$$X_{VEX} = ln \frac{1}{1 - X_V} \tag{6}$$

$$\exp(X_{VEX}) = \frac{1}{1 - X_V}$$
(7)

$$1 - X_{V} = \frac{1}{exp(X_{VEX})}$$
(8)

$$X_{V} = 1 - exp(-X_{VEX})$$
(9)

O raio do grão será dado pelo produto entre a taxa de crescimento, G, e o tempo, t: R = G.t (10)

Se o volume de um grão recristalizado é *V*, no tempo *t*, então a fração do material, o qual teria recristalizado se os núcleos fantasma fossem reais (X_{VEX}), é conhecido como o volume estendido, e é dado pela Eq.11.

$$X_{VEX} = V.N_V \tag{11}$$

Logo o volume do grão recristalizado, V, será dado pela Eq.12:

$$V = \frac{4\pi}{3}R^3 \tag{12}$$

Assim, se a velocidade de crescimento *G* é constante, e combinando as Eqs. 10 a 12 obtêm-se a Eq.13::

$$X_{VEX} = \frac{4\pi}{3} N_V G^3 t^3$$
 (13)

Aplicando a Eq.13 à Eq. 9, é obtida a fração recristalizada, Eq.14:

$$X_{v} = 1 - \exp\left(-\frac{4\pi N_{v} \cdot G^{3} t^{3}}{3}\right)$$
(14)

Escrevendo a Eq.14 de uma forma mais geral é obtida a Eq.15:

$$X_{v} = 1 \exp\left(-kt^{n}\right) \tag{15}$$

onde *k* e *n* são constantes. Esta equação é freqüentemente chamada de equação de JMAK.

2.2 Caminho Microestrutural

Da mesma forma que no modelo JMAK, é conveniente usar o conceito de volume estendido (X_{VEX}), cuja relação com a fração recristalizada (X_V) é dada pela Eq.9. Existem dois tipos de interfaces: entre regiões recristalizadas e deformadas (não recristalizadas), e entre duas regiões recristalizadas. Portanto, as quantidades de área interfacial entre regiões recristalizadas e não recristalizadas por unidade de volume são representadas por S_V e as quantidades de área interfacial entre duas regiões recristalizadas por S_{VRR} .

A microestrutura é caracterizada pela área interfacial por unidade de volume entre material recristalizado e não recristalizado (S_V), que é relacionada com a área interfacial estendida (S_{VEX}), pela fórmula a seguir:

Como no modelo JMAK, esta relação só é valida para grãos recristalizados distribuídos aleatoriamente.

Considerando que a nucleação é por saturação de sítios e os grãos são esféricos, é possível construir a equação do caminho microestrutural analítico para recristalização em três dimensões, como é mostrado a seguir:

$$S_{VEX} = \frac{S_V}{1 - X_V} \tag{16}$$

A Eq.16 mostra a área interfacial estendida (S_{VEX}) relacionada com $S_V \ e \ X_V$. A equação é matematicamente exata quando a distribuição dos núcleos não é aleatória. Esta equação só é válida para frações transformadas, menores que a unidade. Visto que à medida que as transformações vão acontecendo, um grão impede o crescimento do grão vizinho. Neste momento ocorre a interferência.

Para o cálculo do S_{VEX} é necessário que seja calculado, o produto da área superficial dos núcleos, pelo número de núcleos por unidade de volume, conforme Eq.17:

$$S_{VEX} = 4\pi . R^2 . N_V \tag{17}$$

Utilizando as Eqs. 16 e 17, podemos obter a área interfacial entre as regiões transformadas e não transformadas por unidade de volume, S_V , e o número de núcleos por unidade de volume, N_V .

$$S_V = 4\pi R^2 N_V (1 - X_V)$$
 (18)

$$N_{\rm V} = \frac{S_{\rm VEX}}{4\pi . R^2} \tag{19}$$

Com a Eq.19 aplicada às Eqs. 11 e 12, obtem-se a expressão para o raio do núcleo, conforme a Eq. 20.

$$R = \frac{3X_{VEX}}{S_{VEX}}$$
(20)

Com esta nova relação é possivel construir a Eq.21 para o caminho microestrutural, considerando que os núcleos tem a forma esférica, aplicando-a juntamente com as Eqs. 6 e 16 na Eq.18.

$$S_{V} = 3 \cdot \left(\frac{4\pi \cdot N_{V}}{3}\right)^{\frac{1}{3}} \cdot \left(1 - X_{V}\right) \cdot \left[ln\left(\frac{1}{1 - X_{V}}\right)\right]^{\frac{2}{3}}$$
(21)

A Eq.21, é o caminho microestrutural onde é considerada nucleação por saturação de sítios distribuídos aleatoriamente

2.3 Descrição da Simulação

A recristalização foi simulada através de um programa computacional utilizando o método do autômato celular em *3D*[10,11]. Foi considerado dois estados, transformado e não transformado para cada célula. O tipo de vizinhança adotada foi à vizinhança de von Neumann com seis vizinhos, conforme mostra a Figura 1.



Figura 1. Configuração de von Neumann em 3D considerando os vizinhos mais próximos; a célula central é o núcleo e as células cinzas são os seis vizinhos.

A matriz tem a forma regular de um cubo, com um total de $272 \times 272 \times 272$ células. O número total de núcleos escolhido para as simulações é 4096. É considerado que cada célula tem uma unidade de volume. O número de núcleos por unidade de volume, N_V , é igual à 1/4913. Foi assumido que a nucleação ocorre por saturação de sítios, que normalmente é uma suposição razoável para recristalização. Os núcleos são distribuídos aleatoriamente na matriz conforme a teoria, dessa forma foi validado o código. Além da simulação com os núcleos distribuídos aleatoriamente outros tipos de distribuição dos núcleos na matriz foram considerados, partindo do periódico para o aleatório. O arranjo periódico consistiu em dividir a matriz em 4096 grupos de 17 × 17 × 17 células e no centro de cada grupo foi formado um núcleo. Para variar o local dos núcleos de periódico para aleatório, o arranjo periódico original foi transformado como segue. Cada núcleo foi forçado a fazer um caminho aleatório de sua posição inicial, no periódico. Este caminho foi construído por saltos. Cada salto consistiu de um salto aleatório de cada núcleo para um de seus seis vizinhos mais próximos. Quanto maior o número de saltos, mais a distribuição de núcleos se aproximou da aleatória. Foram executadas simulações para um número crescente de saltos. Três situações foram escolhidas para o presente trabalho: 100, 300 e 1000 saltos.

2.4 Geometria e Cinética da Evolução de um Único Grão no AC em 3D

Quando um único grão cresce isoladamente na matriz, é possível encontrar uma expressão analítica para sua evolução geométrica e cinética. As expressões desenvolvidas nesta seção, são específicas para a vizinhança de von Neumann. Todas as equações aqui encontradas, somente são válidas para distribuição aleatória dos núcleos, por saturação de sítios. É considerado neste trabalho que quando t = 0, a fração transformada, X_V será igual a zero ($X_V = 0$). Como foi adotado que todo evento de nucleação ocorre no instante t = 0, será considerado que o tamanho de todos os núcleos, nesse instante, será igual a zero. Portanto, o volume, v, e a área interfacial, a, em t = 0, será igual a:

$$v(0) = 0$$
 (22)
 $a(0) = 0$ (23)

O volume de um único grão, v, em função do tempo, para $t \ge 1$, é:

$$v(t) = \frac{4}{3}t^3 - 2t^2 + \frac{8}{3}t - 1$$
(24)

Devido à condição descrita anteriormente, esta equação não é válida quando t = 0. Utilizando apenas o termo de terceira ordem, e negligenciando os demais:

$$v(t) \cong \frac{4}{3}t^3 \tag{25}$$

Ao utilizar a Eq.25 é necessário que a matriz tenha grandes dimensões com uma pequena quantidade de núcleos, para que nos primeiros instantes, a mesma obtenha frações transformadas pequenas, amenizando o erro criado quando foram desconsiderados os outros termos.

Utilizando a Eq.25 para transformação global teremos um novo valor de X_{VEX} , Eq.26:

$$X_{VEX} = N_V v = \frac{4}{3} N_V t^3$$
(26)

Com a Eq.26 é possível calcular a fração transformada real, X_V , que é:

$$X_{v} = 1 - \exp\left(-\frac{4}{3}N_{v}t^{3}\right)$$
(27)

$$X_{V} = 1 - exp(-0,00027t^{3})$$

A área interfacial de um único grão, *a*, em função do tempo, para $t \ge 1$, é:

$$a(t) = 12t^2 - 12t + 6 \tag{28}$$

Considerando apenas o termo de maior ordem, tem-se:

$$a(t) \cong 12t^2 \tag{29}$$

Utilizando a Eq.29 para transformação global:

$$S_{VEX} = a(t)N_V = 12N_V t^2 \tag{30}$$

Aplicando as Eqs. 27 e 30 na Eq.16, tem-se a Eq.31 para a área interfacial entre regiões recristalizadas e não recristalizadas por unidade de volume:

$$S_{v} = 12N_{v}t^{2}\exp\left(-\frac{4}{3}N_{v}t^{3}\right)$$
(31)

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 Comparação da Simulação do Autômato com as Teorias Analíticas

Nesta seção as equações obtidas na seção anterior são utilizadas. Dessa forma, teremos as Figuras 2 e 3 que compara os resultados da simulação com as expressões calculadas. É claramente visto que para a fração transformada em função do tempo a concordância é muito boa, e que para o caminho microestrutural a concordância não é total, isto é devido a uma maior sensibilidade do caminho microestrutural às aproximações feitas na seção anterior. Vale ressaltar que neste trabalho não foi empregado nenhum tipo de ajuste para as curvas simuladas.



Figura 2. Fração transformada, X_V , em função do tempo.

Os resultados da simulação têm uma boa concordância com a Eq. 21.



Figura 3. Caminho microestrutural: a área interfacial entre região recristalizada e não recristalizada por unidade de volume, S_V , em função da fração recristalizada, X_V . As curvas se aproximam.

3.2.Influência da Distribuição dos Núcleos na Cinética e no Caminho Microestrutural

A Figura 4 mostra a evolução da fração transformada em função do tempo e da forma como os núcleos foram distribuídos na matriz, variando do periódico para o aleatório. Todos os resultados são oriundos da simulação. Para todos os tipos de nucleação as curvas tiveram a mesma forma, ou seja, sigmodal[12]. O tempo para completa recristalização aumenta do periódico para o aleatório, devido à interferência entre os grãos, quando a nucleação é periódica os núcleos ficam eqüidistantes, permitindo que a interface do grão se movimente livremente por um bom período de tempo resultando numa completa recristalização em menor tempo[12]. Para os outros casos há um aumento no tempo de recristalização, pois, os grãos se tocam mais rapidamente imobilizando a interface do grão e com isso provocando um retardamento no tempo de recristalização. Quanto mais aleatoriamente os núcleos se distribuem na matriz deformada, mais forte é essa interação entre os núcleos.



Figura 4. Evolução da fração transformada em função do tempo, variando o tipo de nucleação.



Figura 5. Caminho Microestrutural, variando o tipo de nucleação.

O caminho microestrutural, área interfacial entre região transformada e não transformada em função da fração transformada, mostra o mesmo efeito da distribuição dos núcleos observado na fração transformada em função do tempo, que pode ser visto na Figura 5. Isto revela que o caminho microestrutural tem maior sensibilidade quando há variação dos núcleos em função do tempo, revelando que o gráfico do caminho microestrutural é uma ferramenta melhor para avaliarmos a distribuição dos núcleos.

4 CONCLUSÃO

A concordância entre as curvas simuladas e as expressões teóricas revela que o código desenvolvido para simular recristalização pelo método do autômato celular está válido. A concordância entre as curvas simuladas e calculadas mostra que o autômato celular é capaz de reproduzir situações onde a nucleação é por saturação de sítios e os núcleos são distribuídos aleatoriamente na matriz deformada.

A forma como os núcleos são distribuídos afeta consideravelmente a cinética e o caminho microestrutural, devido à interferência entre os grãos recristalizados, e que o caminho microestrutural tem uma maior sensibilidade na forma como os núcleos são distribuídos o que faz dele uma boa ferramenta para avaliar o a forma como os núcleos são distribuídos.

Vale ressaltar que nenhum tipo de parâmetro que poderia ser ajustado aos dados simulados foi utilizado neste trabalho.

Todo este trabalho foi baseado na recristalização, mas os resultados obtidos são gerais, ou seja, podem ser aplicados a qualquer tipo de transformação que envolva nucleação e crescimento.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1. Ângelo Fernando Padilha, Fulvio Siciliano Jr., Encruamento, Recristalização, Crescimento de Grão e Textura, ABM, 1996.
- 2. F. J. Humphreys and M. Hatherly, Recrystallization and Related Annealing Phenomena, Pergamon Press, reimpresso em 1966.
- 3. Johnson, W.A.; Mehl, R.F. Transactions AIME, v. 135, p. 416-441,1939.
- 4. Avrami, M.J. Journal of Chemical Physics, v. 7, p.1103-1112, 1939.
- 5. Kolmogorov, A.N. Izv. Akad. Nauk. USSR-Ser. Matemat., v. 1. p. 355-359, 1937.

- 6. 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.
- 7. R. A Vandermeer, Microstructural and Crystalographic Aspects of Recrystallization, Risø National Laboratory, Roskilde, Denmark, 1995, pp193-213.
- 8. Hesselbarth, H.W.; Göbel I.R. Acta Metall Mater., v. 39, p. 2135-2143, 1991.
- 9. Marx V.; Reher F. R.; Gottstein G. Acta Mater., v. 47, p. 1219-1230. 1999.
- 10. Hesselbarth, H.W.; Göbel I.R. Acta Metall Mater., v. 39, p. 2135-2143, 1991.
- 11. Oliveira, V. T., trabalho não publicado.
- 12. Oliveira J. C., M. Sc. thesis, Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, Brasil, 2004.

DEVELOPMENT OF THE CODE IN THREE DIMENSIONS TO SIMULATE THE RECRYSTALLIZATION FOR THE METHOD OF THE CELLULAR AUTOMATA⁽¹⁾

Valmir Torres de Oliveira⁽²⁾ Paulo Rangel Rios⁽³⁾ José Adilson de Castro⁽⁴⁾

Abstract

Analytical Models as the classic model of Johnson-Mehl, Avrami and Kolmogorov (JMAK) are used to model the phenomenon of the recrystallization. Actually the simulated microstructural evolution is done to computational simulation. In this work, the computational simulation is done by Cellular automata method in 3D. The kinetic and the microstructural path theories are compared with cellular automata simulation, and it is observed a good agreement. Also is evaluated the effect of the distribution of the nuclei in the kinetic and in the microstructural path. This work is based on recrystallization but its results can be used to any nucleation and growth transformation.

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

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

² Metallurgical Engineer and Student of the degree Master course in Metallurgical Engineering at Universidade Federal Fluminense – UFF. valmir_amo@amsted-maxion.com.br

³ Professor Ph. D, coordinator of the Doctor and Master degree course in Metallurgical Engineering of UFF/ EEIMVR. prrios@metal.eeimvr.uff.br

⁴ Professor Ph. D of the Doctor and Master degree course in Metallurgical Engineering of UFF/ EEIMVR. adilson@metal.eeimvr.uff.br