

ESTUDO DA RECRISTALIZAÇÃO EM 3D¹

Thais Dias do Nascimento²

Tatiana Caneda Salazar³

Paulo Rangel Rios⁴

Resumo

No modelamento, pelo método do Autômato Celular (AC), dos dados experimentais para a recristalização de um monocristal de ferro puro, verificou-se uma discrepância entre S_v (área interfacial por unidade de volume) em função do tempo, obtida pelo modelamento e os dados experimentais em ferro puro. A diferença ocorre porque a forma do grão gerado pelo Autômato Celular não é esférica. Na recristalização do ferro puro, o formato dos grãos se aproxima de uma esfera. Neste trabalho é proposto um fator de forma geométrico, independente do tempo, que corrige a diferença entre a forma do grão simulado e o grão de formato esférico.

Palavras-chave: Recristalização; Autômato celular; Modelamento.

STUDY OF RECRYSTALLIZATION IN THREE DIMENSIONS

Abstract

Modeling the recrystallization in a single crystal of pure iron by the method of Cellular Automata (AC), it was observed that there was a systematic difference between the simulated and experimental data for S_v (interface area per unit volume) as a function of time. This difference was caused by the fact that the simulated grain is not spherical whereas the grains in recrystallized pure iron could be approximated by spheres. In this work a geometric factor, independent of time, is proposed that corrects this difference between the simulation and experimental result.

Key-word: Recrystallization; Cellular automata; Modeling.

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

² Graduando em Engenharia Metalúrgica / Alunos de Iniciação Científica da Universidade Federal Fluminense – UFF Volta Redonda RJ

³ Engenheira Metalúrgica, Doutoranda em Engenharia Metalúrgica na Universidade Federal Fluminense – UFF, Volta Redonda RJ

⁴ Prof. PhD em Engenharia Metalúrgica, Prof. Titular do curso de pós-graduação em Engenharia Metalúrgica da Universidade Federal Fluminense – UFF

1 INTRODUÇÃO

Durante o processamento, grande parte dos aços produzidos sofre tanto recristalização a quente quanto a frio. Por esse motivo é de grande importância o conhecimento de fenômenos como encruamento, recuperação, recristalização, crescimento de grão, não só para se processar corretamente esses materiais, mas também para controlar suas microestruturas e conseqüentemente suas propriedades.

O estudo da evolução microestrutural durante a recristalização utilizando a técnica do Autômato Celular iniciou-se, no Núcleo de Modelamento Microestrutural (NMM), com o desenvolvimento do código em duas dimensões e prosseguindo com o desenvolvimento do código em três dimensões.^[1]

Esse método possui grande versatilidade, podendo ser usado em diversas áreas.

A base formal da modelagem cinética de recristalização é o início da clássica teoria de Johnson-Mehl, Avrami e Kolmogorov (JMAK),^[2-4] que utilizou a descrição de uma grandeza microestrutural, V_v . Este trabalho foi posteriormente desenvolvido por Dehoff,^[5] que propôs uma grandeza adicional, S_v . Essa teoria tem em seu desenvolvimento suposições como: nucleação aleatória, crescimento com velocidade constante, forma dos grãos esférica e homogeneidade energética na matriz deformada.

Rios et al.,^[6] promoveram uma comparação de expressões analíticas da fração volumétrica em função do tempo, área da interface entre regiões transformadas e não transformadas e do caminho microestrutural com resultados obtidos da simulação pelo método do autômato celular em três dimensões. As comparações foram feitas para dois tipos distintos de comportamento da nucleação: nucleação com saturação de sítios e para nucleação com taxa constante.

As equações a seguir descrevem a cinética para a evolução microestrutural numa simulação pelo método do autômato celular utilizando a vizinhança de von-Neumann.

Para núcleos aleatórios, a fração volumétrica estendida, V_{VE} , e a fração volumétrica real, V_v , são relacionadas pela equação de Avrami:

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

A fração volumétrica estendida, V_{VE} , é a soma do volume de todos os grãos individuais sem considerar que o crescimento de um grão irá interferir no crescimento de outro (*impingement*). A fração volumétrica estendida é:

$$V_{VE} = \frac{4}{3} N_v t^3 \quad (2)$$

Para nucleação com saturação de sítios onde N_v é o número de núcleos por unidade de volume) e velocidade constante igual a 1/3 e

$$V_{VE} = \frac{1}{3} I t^4 \quad (3)$$

Para taxa de nucleação, I , constante (I é a taxa de nucleação por unidade de volume). Então:

$$V_v = 1 - \exp\left(-\frac{4}{3} N_v t^3\right) \quad (4)$$

A área interfacial estendida por unidade de volume entre regiões transformadas e não transformadas, S_{VE} , é a soma das áreas de todos os grãos individuais supondo crescimento sem *impingement*. A expressão de DeHoff^[5] mostra a relação entre a área interfacial estendida e área interfacial real:

$$S_V = (1 - V_V) S_{VE} \quad (5)$$

e

$$S_{ve} = 12N_V t^2 \quad (6)$$

então:

$$S_V = 12N_V t^2 \exp\left(-\frac{4}{3}N_V t^3\right) \quad (7)$$

A curva no plano (V_V, S_V) descreve o caminho microestrutural em três dimensões. As expressões analíticas para essas duas grandezas são conhecidas. Substituindo uma na outra teremos a equação para o caminho microestrutural.

$$S_{VE} = 3(36N_V)^{\frac{1}{3}} (V_E)^{\frac{2}{3}} \quad (8)$$

Este trabalho utilizará da relação do caminho microestrutural para obter uma correção que anule a diferença de forma existente entre o grão do AC e um grão esférico.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

Para a simulação foi utilizado uma matriz cúbica com 300x300x300 células, a vizinhança Von Neumann, nucleação aleatória com saturação de sítios e 220 núcleos iniciais. Essa configuração inicial foi escolhida baseada no detalhamento dos resultados experimentais de interesse.

Para verificar o fator de forma encontrado, foram utilizados os resultados experimentais para a recristalização de um monocristal de ferro puro estudado Vandermeer e Rath (V&R).^[7]

3 RESULTADOS / DISCUSSÃO

A Figura 1 mostra graficamente a diferença de forma, motivo desse trabalho. Na Figura 1a temos um grão gerado pelo A.C. Na Figura 1b temos um grão esférico. Os dois grãos possuem o mesmo volume.

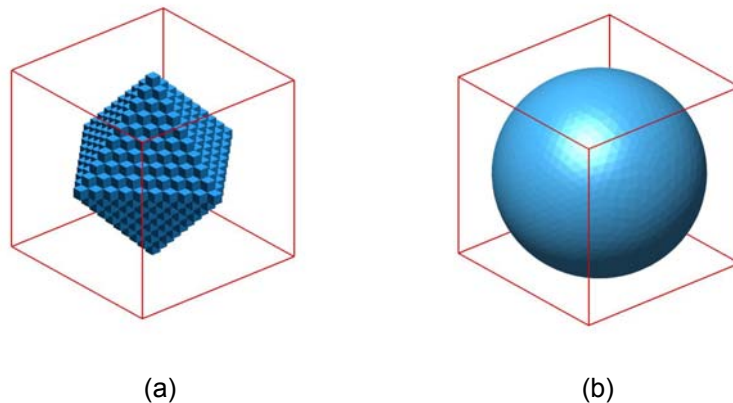


Figura 1: Representação gráfica do formato de um grão em 3D: (a) gerado pelo A.C e (b) esférico.

Para correção deste erro no valor da S_v , é proposta uma relação entre o formato dos dois grãos. A relação do caminho microestrutural estendido é dado pela equação 9:

$$S_{VE} = C(V_{VE})^q \quad (9)$$

onde $q=2/3$ para o caso de nucleação por saturação de sítios.

Para o Autômato Celular, conforme equação 8, temos:

$$C_{CA} = 3 \cdot (36N_V)^{\frac{1}{3}} \quad (10)$$

Para o grão esférico:

$$C_{sp} = (36\pi N_V)^{\frac{1}{3}} \quad (11)$$

Para obter uma relação do grão do Autômato Celular e o grão esférico dividimos o caminho microestrutural do Autômato Celular pelo caminho microestrutural do modelo esférico. Assim obtemos um fator:

$$\frac{C_{CA}}{C_{sp}} = \frac{3}{\pi^{1/3}} \approx 2,048 \quad (12)$$

Se partirmos do princípio de que o volume é o mesmo em ambos os casos, a relação entre áreas nas interfaces é:

$$\frac{S_{VE}^{CA}}{S_{VE}^{sp}} = \frac{3}{\pi^{1/3}} \approx 2,048 \quad (13)$$

Os gráficos das Figuras 2 e 3 mostram, em escala log, a área interfacial por unidade de volume em função do tempo sem a utilização e com a utilização do fator de forma, respectivamente.

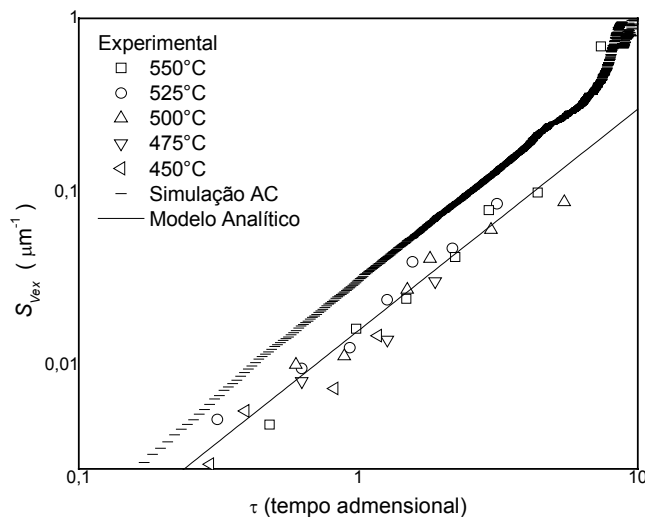


Figura 2: Área interfacial por unidade de volume estendido em função do tempo para o AC e para os dados experimentais de (V&R).

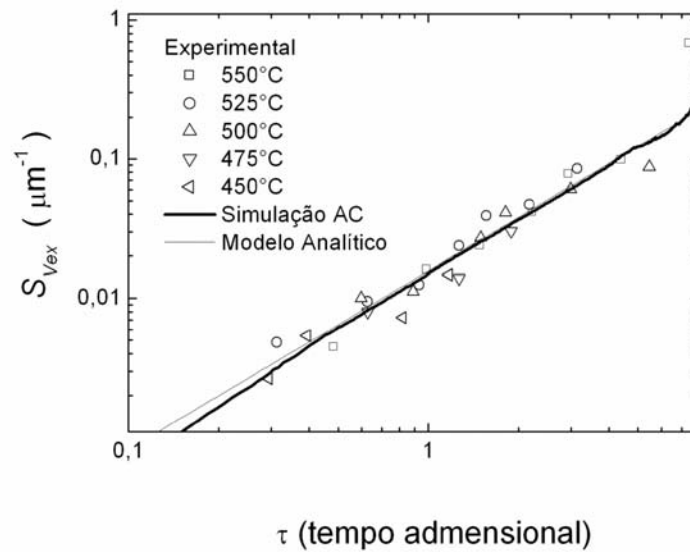


Figura 3: Área interfacial por unidade de volume estendido em função do tempo para o AC, utilizando o fator de forma, e para os dados experimentais de (V&R).

4 CONCLUSÃO

A diferença entre os resultados obtidos na simulação do Autômato Celular e os resultados experimentais pode ser explicada pela diferença de forma entre o grão real e o simulado. Neste trabalho um fator geométrico, independente do tempo, foi obtido que corrige o efeito da forma fazendo com que os resultados simulados coincidam com os experimentais. Apesar de relativamente simples, em geral este fator não é mencionado em publicações anteriores.

Agradecimentos

Este 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. Em particular a autora T. D. Nascimento agradece a bolsa de iniciação científica do CNPq.

REFERÊNCIAS

- 1 OLIVEIRA, V.T. Desenvolvimento do código computacional para a simulação da recristalização em 3D pelo método do Autômato Celular. **Dissertação de mestrado**, Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica, UFF, Volta Redonda, 2005.
- 2 JOHNSON, W.A.; MEHL, R.F. Reaction kinetics in processes of nucleation and growth. **Transactions Metallurgical Society, A.I.M.E**, volume 135, p.416-441, 1939.
- 3 KOLMOGOROV, A.N. On the statistical theory of metal crystallization. **Isvetia Akademii Nauk, SSSR-Seriia Matematicheskaiia**, volume 1(3), p. 335-359, 1937.
- 4 AVRAMI, M. Kinetics of fase change I. General theory. **The Journal of Chemical Physics**, volume 7(12), p.1103-1112, 1939.

- 5 DeHoff RT. In: Hansen N, Jensen DJ, 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; 1986. p. 35-52.
- 6 RIOS, P.R.; OLIVEIRA, V.T.; PEEIRA, L.O.; PEREIRA, M.R.; CASTRO, J.A. Cellular Automata simulation of site-saturated and constant nucleation rate transformation in three dimensions. **Materials Research**, volume 9(2), p. 223-230, 2006.
- 7 VANDERMEER, R.A.; MASUMURA, R.A.; RATH, B.B. Microstructural paths of shape-preserved nucleation and growth transformations. **Acta Metallurgica et Materialia**, volume 39(3), p. 383-389, 1991.