

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE TRANSFORMAÇÕES COM NUCLEAÇÃO E VELOCIDADE NÃO HOMOGÊNEAS*

Mariana Sizenando Lyrio¹ Harison da Silva Ventura¹ Gabriella Maria Silveira de Sá² Weslley Luiz da Silva Assis³ Paulo Rangel Rios³

Resumo

Nesse trabalho, simulações computacionais de transformações de fase são realizadas para analisar situações em que a nucleação e a velocidade de crescimento não são homogêneas no material. Os resultados foram comparados com modelos analíticos de Rios e Villa. A microestrutura e a cinética microestrutural das transformações são obtidas e analisadas para casos em que há um mesmo gradiente de velocidade e diferentes gradientes de núcleos. O principal resultado é que a cinética de transformação e a microestrutura são afetadas da mesma maneira para as diferentes quantidades de núcleos, embora o gradiente de velocidade seja o mesmo. Na microestrutura foi observado que na parte inferior os grãos são maiores enquanto que na parte superior os grãos são menores, como consequência da densidade de núcleos e da velocidade de crescimento. Todas as simulações computacionais apresentaram um bom acordo com os modelos analíticos.

Palavras-chave: Transformações de Fase; Recristalização; Evolução Microestrutural; Modelos analíticos; Cone Causal.

COMPUTATIONAL SIMULATION OF TRANSFORMATIONS WITH INHOMOGENEOUS NUCLEATION AND VELOCITY

Abstract

In this work, computational simulations of phase transformations are performed to analyze situations in which nucleation and growth velocity are not homogeneous in the material. The results were compared with analytical models of Rios and Villa. The microstructure and microstructural kinetics of the transformations are obtained and analyzed for cases in which there is a same velocity gradient and different nuclei gradients. The main result is that the transformation kinetics and the microstructure are affected in the same way for the different amounts of nuclei, although the velocity gradient is the same. In the microstructure, it was observed that in the lower part the grains are bigger whereas in the upper part the grains are smaller, as a consequence of the density of nuclei and the velocity of growth. All the computational simulations presented a good agreement with the analytical models.

Keywords: Phase Transformations; Recrystallization; Microstructural Evolution; Analytical Models; Causal Cone.

¹ Engenharia Metalúrgica, Mestrando, estudante, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Sala C87, Volta Redonda, RJ, Brasil.

² Engenharia Metalúrgica, Doutorando, estudante, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Sala C87, Volta Redonda, RJ, Brasil.

³ Engenharia Metalúrgica, Doutor, estudante, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Sala C87, Volta Redonda, RJ, Brasil..



1 INTRODUÇÃO

Há mais de 80 anos iniciou-se os trabalhos de Johnson e Mehl [1], Kolmogorov [2] e Avrami [3-5], cuja metodologia é conhecida como Cinética Formal. A teoria desenvolvida é comumente empregada para o estudo das transformações de fases por nucleação e crescimento. Pela teoria assume-se uma distribuição aleatória de núcleos e velocidade de interface constante. A maior parte das transformações de interesse dos materiais metálicos é heterogênea.

Teoria de nucleação e crescimento que modela a evolução da microestrutura levando em conta a possibilidade de que núcleos não cumprem com a suposição de serem uniformemente localizados aleatoriamente no espaço são de especial interesse. Isso porque os núcleos se formam e crescem em locais específicos, isto é, "não aleatórios". Cada sítio preferencial pode ser situado, por exemplo, em contornos de grão ou dentro de grãos altamente deformados ou bandas de deformação. Além do mais, esses sítios podem ser introduzidos no processo, por exemplo, quando uma temperatura ou gradiente de deformação está presente [6,7]. Isso pode ser evidenciado no processo de Recristalização que é um fenômeno metalúrgico comum e de grande interesse, observado em muitos materiais metálicos depois da deformação plástica e recozimento. Na indústria, a recristalização não homogênea é frequentemente encontrada, especialmente em materiais contendo partículas finas como segunda fase reforçada [8]. Apesar da recristalização não ser propriamente uma transformação de fase, pode de uma maneira generalizada ser estudada e tratada como tal, utilizando-se a mesma conceituação de nucleação e crescimento.

Aplicando a teoria da cinética formal para transformações de fase desenvolvidas em sítios aleatórios de reações na qual nucleações por saturação de sítios são distribuídas não aleatoriamente pode resultar em valores errôneos calculados por quantidades microestrutural, incluindo número de núcleos por unidade de volume como também quantidade da cinética tal como velocidade média de interface. Desta forma, é importante ampliar o alcance das teorias analíticas exatas e estender o tratamento de JMAK para permitir nucleação acontecendo de maneira diferente do trabalho original, suposto nucleação aleatoriamente uniforme.

Rios e Villa [6,7] desenvolveram um método analítico novo e matematicamente exato para modelar reações com nucleação não homogênea, velocidades não homogêneas e ambas nucleação e velocidade não homogêneas. Este método permite extrair a cinética, ou seja, valores médios de fração volumétrica transformada por plano da matriz, em função do tempo. Portanto para um estudo da evolução e visualização das microestruturas das transformações, faz-se o uso das simulações computacionais.

A variação da densidade dos núcleos e a velocidade ao longo de um eixo podem ser exemplificadas pela situação de uma placa laminada a frio em que há um gradiente de deformação em toda sua espessura, de uma alta quantidade de deformação, digamos 90%, na região laminada completamente, e uma baixa quantidade de deformação, 10%, na região de início de laminação. Nestes termos, o modelo desenvolvido pode ser utilizado para comparar a situação em que a densidade dos núcleos muda ao longo da espessura da placa e a velocidade de crescimento varia ao longo da direção normal da placa.

Neste trabalho propõe-se estudar as reações com nucleação e velocidades não homogêneas em 3D no estado sólido em materiais metálicos via simulação computacional pelo método do Cone Causal (CC). Comparam-se os resultados



gerados pela simulação computacional com a solução analítica, a fim de atestar que as simulações ocorrem da maneira esperada, além da obtenção da evolução microestrututral. O modelamento microestrutural destas transformações permite variar grandezas tais como: distribuição espacial de núcleos (podendo variar quantidade de núcleos dependendo da posição na matriz), bem como a velocidade de crescimento.

2 DESENVOLVIMENTO

Este trabalho trata-se de simulação computacional e modelamento analítico. O modelamento analítico será baseado nos modelos de Rios e Villa {Formatting Citation}. O código computacional foi escrito linguagem Fortran 2003 e compilado pelo *Microsoft Visual Studio*2012[®] e paralelização em Open MP. A visualização das microestruturas geradas foi obtida com o programa *Tecplot* 360[®] e os gráficos foram gerados com o auxílio do programa *Wolfram Mathematica* 10[®].

2.1 DESCRIÇÃO ANALÍTICA DA NUCLEAÇÃO E VELOCIDADE DEPENDENTE DA POSIÇÃO

Rios e Villa recorreram ao recente desenvolvimento dos métodos de Geometria estocástica, tornando-se possível generalizar as equações de JMAK para situações bem além das suposições originais. Rios e Villa [6,7] revistaram a teoria clássica de JMAK e generalizaram para situações em que a nucleação ocorre pelo Processo de Ponto de Poisson homogênea e não homogênea e velocidade não homogênea.

Para o caso em que a nucleação e velocidade são não homogêneas, a velocidade de crescimento de cada região é constante, mas depende da coordenada dos núcleos a partir dos quais o crescimento começa. Isso é f(y) depende da posição dos núcleos no espaço, mas permanece constante após o crescimento, de modo que a região de crescimento permanece esférica e para uma dada quantidade de núcleos no espaço, ou seja, a velocidade varia ao longo de uma gradiente, assim como os núcleos que apresenta a intensidade de núcleos variando linearmente ao longo de uma direção preferencial, x_1 . Foi modelado analiticamente, portanto, uma velocidade de crescimento posição dependente / não homogênea e a nucleação não homogênea. A expressão matemática dada por Villa e Rios {Formatting Citation} para esse caso aé mais complicada do que a de nucleação não homogênea com velocidade homogênea e nucleação homogênea com velocidade não homogênea:

$$V_E(t,x) = \int_{A(x,t)} \lambda(y) \, dy \tag{1}$$

$$V_V(t,x) = 1 - exp^{-V_E(x,t)}$$

(2)

Onde A(x, t) é o volume de um conjunto A, o cone causal{Formatting Citation}, no caso 3D dado por:

$$A = \{ (y_1, y_2, y_3) \in \mathbb{R}^3 \coloneqq f(y)t \ge \sqrt{(y_1 - x_1)^2 + (y_2 - x_2)^2 + (y_3 - x_3)^2} \}$$
(3)

Sendo que λ para nucleação não homogênea é o número médio de núcleos na qual varia linearmente com x_1 sendo igual a $\lambda(x) = mx_1 + n$ e f(y) a velocidade de crescimento de uma região nucleada em y = (y_1, y_2, y_3) para uma certa quantidade de núcleos no espaço. (x_1, x_2, x_3) são as coordenadas dos pontos no espaço que satisfazem a desigualdade acima. Detalhes podem ser encontrados em Villa e Rios



{Formatting Citation}. Desta forma, faz-se possível a comparação o efeito da nucleação não homogênea e da velocidade de crescimento.

2.2 METODOLOGIA COMPUTACIONAL

A simulação computacional em 3D de nucleação e crescimento foi realizada através do método do Cone Causal. Em todos os casos, a nucleação foi por saturação de sítios. A matriz foi dimensionada em 300x300x300 células cúbicas. As dimensões do volume de simulação, denominadas "espécime", foram consideradas iguais a um. Nomeadamente, um cubo de [0,1]x[0,1]x[0,1] correspondendo aos eixos (x_1, x_2, x_3) . O número de núcleos total estudados é igual a 600, 2300 e 4000. Na parte inferior do volume de simulação $x_1 = 0$ enquanto que na parte superior $x_1 = 1$. Condições de contorno periódico foram adotadas exceto ao longo da direção x1, visando atender as condições adotadas pelos modelos analíticos. Para nucleação não homogênea, a densidade de núcleos foi assumida variando linearmente ao longo da direção x_1 de acordo com $\lambda(x) = mx + n$ onde m e n são constantes e variam de acordo com o número de núcleos, entretanto a inclinação da reta é a mesma. Para o caso de velocidade de crescimento não homogênea foi assumida variando ao longo da direção x_1 de acordo com G(x) = ax + b onde a e b são constantes. Para este trabalho, na tabela 1 é apresentado os coeficientes m e n de acordo com o número de núcleos e os coeficientes para o gradiente de velocidade foram 0.1 e 0.2 respectivamente.

Tabela 1	I – Número	de núcleos	e seus re	espectivos	coeficientes	do gr	radiente c	le núcle	os m e n.

Número de núcleos	Gradiente de núcleos
600	$\lambda(x_1) = 1196x + 2$
2300	$\lambda(x_1) = 4596x + 2$
4000	$\lambda(x_1) = 7996x + 2$

Os gradientes de núcleos foi obtido pela integral de $\lambda(x_1)$ por toda espécime, ou seja, [0,1] ao longo do eixo x_1 . Enquanto que os coeficientes foram estimados para um gradiente de menor velocidade ao longo do eixo x_1 .

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

...

3.1 CINÉTICA

Na figura 1 é mostrada a cinética de transformação dada pela densidade média de volume versus tempo para transformações com nucleação e velocidade não homogêneas. O gradiente de velocidade é o mesmo, enquanto que o gradiente de número de número de núcleos varia de uma quantidade menor de núcleos, figura 1 a com 600 núcleos, intermediária, figura 2b com 2300 núcleos e maior, figura 1c com 4000 núcleos. Cada curva corresponde a cinética de transformação de certo plano entre $x_1 = 0$ e $x_1 = 1$. Desta forma, o plano com $x_1 = 0.1$ é mais perto da parte inferior, enquanto que o plano $x_1 = 0.9$ é mais perto da parte superior. A cinética, ou seja, a densidade média de volume versus tempo é mais lenta para o plano inferior que para o plano superior como é mostrado na figura 1. Para os gradientes de núcleo e o de velocidade analisados, a cinética de transformação foi similar. Como observado na figura 1 os resultados da simulação puderam ser comparados com o

74° Congresso Anual



modelo analítico, através da expressão analítica dada pela equação 2. A simulação pode ser validada devido à boa concordância apresentada. Através da inspeção visual da figura 1 é possível observar, portanto, que devido a menor velocidade e quantidade de núcleos, a cinética dos planos inferior é mais lenta do que dos planos superior, independentemente da quantidade de núcleos. Nos planos inferiores, os núcleos apresentam mais espaço e mais tempo, devido a menor velocidade, para a completa transformação, enquanto que no plano superior o encontro dos núcleos ocorre mais rápido devido a maior velocidade e também a grande quantidade de núcleos, consequentemente, logo o crescimento é cessado fazendo com que a cinética de transformação seja mais rápida. Pode ser observado também que como esperado o tempo de simulação é maior para o de menor quantidade de núcleos e menor para o de maior quantidade de núcleos. A microestrutura das figuras 2, 3 e 4 permitem uma melhor observação e conclusão do fenômeno estudado.



(a)





(b)



Figura 1 - Cinética de transformação para nucleação e velocidade não homogêneas. Gradiente de velocidade é o mesmo $G(x_1) = 0.1x_1 + 0.2$. O gradiente de núcleos é dado para (a) 600, (b) 2300 e (c) 4000 núcleos. Os resultados analíticos foram representados por linhas e os dados da simulação representados por pontos.

3.2 MICROESTRUTURA

* Contribuição técnica ao 74º Congresso Anual da ABM – Internacional, parte integrante da ABM Week 2019, realizada de 01 a 03 de outubro de 2019, São Paulo, SP, Brasil.

74° Congresso Anual



A microestrutura para nucleação homogênea e velocidade não homogênea é apresentada nas figuras 2, 3 e 4. Cada figura apresentada é para diferentes quantidades de núcleos, 600, 2300 e 4000 núcleos, respectivamente. Nas figuras "a" é apresentada a microestrutura em 3D totalmente transformada, enquanto que nas figuras "b" é possível observar a seção 2D do gradiente ao longo do eixo x_1 . Para as figuras "c" e "d" observa-se as seções 2D do corte feito nos planos 0.1 e 0.9, respectivamente. Nota-se que os grãos na parte superior são menores do que da parte inferior, isso é consequência da quantidade de núcleos e da velocidade. Na parte superior há mais núcleos e uma maior velocidade, enquanto que a parte inferior apresenta menor quantidade de núcleos e menor velocidade. Desta forma, na parte superior, os grãos crescem rapidamente devido a maior velocidade e maior quantidade de núcleos, durante o crescimento dos grãos ocorre o encontro das interfaces dos grãos em evolução, fenômeno conhecido como "impingement", isso impede o crescimento acentuado dos grãos. A parte inferior, por sua vez, os grãos apresentam mais espaço para crescer e uma menor velocidade, fazendo com os grãos consigam crescer mais.

Outra questão interessante é em relação a geometria das interfaces. Apesar de haver uma diferença de velocidade, os grãos apresentam em sua grande maioria interfaces retas em 2D e planos em 3D [9]. A diferença de velocidade tanto em nucleação homogênea como não homogênea por saturação de sítios faz com que a interface entre os grãos seja curva, entretanto, neste caso apesar da diferença de velocidade provocada pelo gradiente de velocidade, a velocidade testada é muito baixa e a mudança não é tão acentuada como se fosse para velocidades maiores. Logo, a curvatura das interfaces não é fortemente evidenciada.

Desta forma, para uma velocidade baixa, independentemente da quantidade de núcleos testada, ou seja, um gradiente com menor quantidade de núcleos como os 600 núcleos analisados ou uma maior quantidade de núcleos como para 4000 núcleos, observa-se o maior efeito do gradiente de núcleos que de velocidade. Isso pode ser visto na microestrutura. Além disso, se a velocidade fosse maior a tendência seria o englobamento ou o envolvimento dos grãos de maior velocidade nos grãos de menor velocidade, fazendo com o que os grãos inferiores não crescessem de maneira esférica não obedecendo, portanto, o modelo analítico. Isso pode ser observado em estudos que estão em andamento.



(a)



(b)





Figura 2 – Transformação microestrutural de nucleação e velocidade não homogêneas para 600 núcleos. (a) Final. (b) Seção 2D do gradiente de núcleos e velocidade no eixo x_1 . (c) Seção 2D do plano 0.1. (d) Seção 2D do plano 0.9.



(a)



(b)





Figura 3 - Transformação microestrutural de nucleação e velocidade não homogêneas para 2300 núcleos. (a) Final. (b) Seção 2D do gradiente de núcleos e velocidade no eixo x_1 . (c) Seção 2D do plano 0.1. (d) Seção 2D do plano 0.9.



(a)



(b)



Figura 4 – Transformação microestrutural de nucleação e velocidade não homogêneas para 4000 núcleos. (a) Final. (b) Seção 2D do gradiente de núcleos e velocidade no eixo x_1 . (c) Seção 2D do plano 0.1. (d) Seção 2D do plano 0.9.

3 CONCLUSÃO

No presente trabalho, a simulação computacional e os modelos analíticos foram utilizadas para estudar o efeito da densidade de núcleos não homogênea e velocidade não homogênea. As principais conclusões são:

- Todas as simulações computacionais apresentaram um bom acordo com os modelos analíticos de Rios e Villa [x, x].
- A cinética de transformação para o mesmo gradiente de velocidade, mas diferentes gradientes de núcleos, descrita na figura 1, são similares.
- A microestrutura para todos os casos analisados é não homogênea, ou seja, apresentaram grãos menores na parte superior e grãos maiores na parte inferior.
- Para o mesmo gradiente de velocidade analisado, independentemente da quantidade de núcleos testada, observa-se o maior efeito do gradiente de núcleos que de velocidade.
- Apesar de haver uma diferença de velocidade, os grãos apresentam em sua grande maioria interfaces retas em 2D e planos em 3D.

Agradecimentos

Este estudo foi financiado em parte pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) - Código Financeiro 001. Os autores agradecem ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPQ e Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, FAPERJ, pelo apoio financeiro.



REFERÊNCIAS

- 1 Johnson WA, Mehl RF. Reaction kinetics in processes of nucleation and growth. Trans. Metall. Soc. AIME. 1939; 135:416-442.
- 2 Kolmogorov NA. The statistics of crystal growth in metals. Isvestiia Academii Nauk SSSR Seriia Matematicheskaia. 1937; 1:333-359.
- 3 Avrami MJ. Kinetics of phase change I general theory. The Journal of Chemical Physics. 1939; 7(12):1103-1112.
- 4 Avrami MJ. Kinetics of phase change II. Transformation time relations for random distribution of nuclei. The Journal of Chemical Physics. 1940; 8:212-224.
- 5 Avrami MJ. Granulation, Phase Change, and Microstructure Kinetics of Phase Change. III. The Journal of Chemical Physics. 1941; 9(2), p. 177-184.
- 6 Rios PR, Villa E. Transformation kinetics for inhomogeneous nucleation. Acta Mater.2009;57:1199–208.
- 7 Villa E, Rios PR. On modelling recrystalizattion processes with random growth velocities of the grains in materials Science. 2012;1937:149-162.
- 8 Xiaoyan S, Rettenmayr M., Liu G. 3D Simulation study of inhomogeneous microstructure and its evolution (advantages of visual simulation technique in stereological analysis). 2003;22:163-169.
- 9 Alves ALM, Assis WS, Rios PR. Computer simulation of sequential transformations. Acta Materialia. 2017;126:451-468.