

SIMULAÇÃO DA EVOLUÇÃO DE GRÃOS INDIVIDUAIS EM 3D PELO MÉTODO DOS AUTÔMATOS CELULARES: ESTUDO DO EFEITO DA HETEROGENEIDADE DE ENERGIA ARMAZENADA¹

Tatiana Caneda Salazar²
Wesley Luiz da Silva Assis³
Paulo Rangel Rios⁴

Resumo

A evolução microestrutural durante a recristalização é função da energia armazenada no trabalho a frio. Ciente deste fato desenvolveu-se um programa computacional para simular a recristalização em matrizes com heterogeneidade de deformação. O programa escrito em Fortran 90/95 e baseado no código autômato celular (A.C.) é utilizado para investigar os aspectos geométricos e o comportamento evolutivo de grãos individuais. Foi introduzida ao modelo computacional, uma variação de deformação ao longo da matriz a fim de estudar o efeito da heterogeneidade energética na matriz encruada. Os dados individuais obtidos dos volumes em função do tempo e as distribuições finais de tamanho de grão foram comparados qualitativamente com dados experimentais obtidos da literatura. Todas as análises feitas foram discutidas com auxílio de gráficos e visualizações de micrografias virtuais.

Palavras-chave: Recristalização; Autômato celular; Distribuição de tamanho de grão; Gradiente de deformação.

SIMULATION OF THE EVOLUTION OF INDIVIDUAL GRAINS IN 3D BY CELLULAR AUTOMATA METHOD: STUDY OF THE EFFECT OF THE HETEROGENEITY OF STORED ENERGY

Abstract

The microstructure evolution during the recrystallization is the function of stored energy in the cold-worked. Aware of this fact a computational program was developed to simulate the recrystallization in matrices with heterogeneity of deformation. The program writing in FORTRAN 90/95 and based in the code cellular automata (CA) is used to investigate the geometric aspects and the kinetic behavior of individual grains. It was introduced to the computational model, a variation of deformation throughout the matrix in order to study the effect of the heterogeneity of the energy in the deformed matrix. The individual data gotten of the volumes in function of the time and the final distributions of size of grain had been compared qualitatively with gotten experimental data of literature. All the done analyses had been argued with aid of graphs and virtual micrographs.

Key-words Recrystallization; Cellular automata; Distribution of grain size; Deformation gradient

¹ Contribuição técnica ao 62º Congresso Anual da ABM – Internacional, 23 a 27 de julho de 2007, Vitória – ES, Brasil.

² Engenheira Metalúrgica; aluna do curso de Mestrado em Engenharia Metalúrgica na Universidade Federal Fluminense – tatiana@metal.eeimvr.uff.br.

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

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

1 INTRODUÇÃO

O estudo da evolução dos grãos durante o processo de recristalização pode ser estudado por métodos experimentais, através de simulações computacionais e ou por modelos analíticos.

A avaliação experimental da evolução de grãos individuais requer técnicas muito sofisticadas para avaliação da evolução tridimensional do grão. Um estudo feito por D.Juul Jensen e E.M.Laurensen^[1] através de uma nova técnica do 3DXRD utiliza um aparelho com altíssima capacidade de emissão de R-X. Esse método permite acompanhar a evolução da microestrutura de cada grão desde o período de incubação até o final do crescimento. Ao final têm-se resultados que mostram a evolução da microestrutura e de cada grão individualmente. As medidas são realizadas *in situ*, possibilitando assim um estudo específico da geometria e da topologia de cada grão. Essa é uma das poucas técnicas experimentais que produz resultados confiáveis em três dimensões e, portanto de alto custo.

A cinética de recristalização em metais e ligas trabalhadas a frio é tradicionalmente analisada analiticamente pela clássica teoria de JMAK.^[2-4] Esta é representada pela equação de Avrami,

$$V_v = 1 - \exp(-V_{v_{ext}})$$

onde V_v é a fração de volume recristalizada, $V_{v_{ext}}$ é a fração de volume no espaço estendido, ou seja, como se um grão não interferisse no crescimento do outro (*impingement*).

A simulação do processo de recristalização tem sido feito pelo método do Autômato Celular introduzido por H.M. Hesselbarth e L.R. Göbel.^[5] Esse método computacional para avaliação da microestrutura final se mostra confiável quando comparados com modelos analíticos exatos, como a teoria de JMAK, mostrados por Rios et al.^[6] Essa simulação também nos permite acompanhar a evolução individual de cada grão.

Assis et al.^[7] mostraram que os resultados obtidos para evolução de grãos individuais pela simulação produzem um perfil comparável com os resultados experimentais. No entanto, foi observado que a evolução simulada de todos os grãos foram equivalentes até a ocorrência do *impingement*, interferência entre os grãos, diferentemente do que ocorre experimentalmente. Isso porque a simulação foi realizada com distribuição uniforme de energia pela malha.

A força motriz para o avanço das interfaces está relacionada com a energia armazenada na matriz deformada. Os processos de conformação produzem uma distribuição de energia heterogênea e, portanto, influência na cinética de evolução dos grãos.

Estudos recentes de Assis^[8] mostram que a heterogeneidade de energia, tem grandes influências sobre a cinética de recristalização. O mesmo realizou um estudo detalhado sobre a quantidade de energia armazenada e sobre o posicionamento dos núcleos em uma malha contendo heterogeneidade de energia. Contudo utilizou resultados gerais dos grãos, não tendo informações individuais de cada grão como: volume, raio, taxa de crescimento para cada grão e etc.

Este trabalho tem como objetivo comparar os resultados experimentais da evolução dos grãos com resultados obtidos pelo método A.C. em matrizes com heterogeneidade de energia. Desta maneira espera-se que a evolução dos grãos apresente um perfil bem mais próximo do apresentado nas curvas experimentais antes da ocorrência das interferências (*impingement*).

2 MATERIAIS E MÉTODOS

2.1 Simulação

A simulação da evolução dos grãos durante o processo de recristalização é realizada através do Método dos Autômatos Celulares, desenvolvido em Compaq Visual Fortran® 6.1. O computador utilizado possui dois processadores físicos Pentium Xeon 3.2 Ghz, memória Ram de 8Gb e HD de 160Gb em sistema operacional Windows XP x64 Edition.

A simulação é feita com os seguintes dados de entrada: matriz em 3 dimensões desenvolvida por Rios e Pereira ^[9]. Foi utilizada uma matriz de 100x100x100 células. As células são cúbicas e a vizinhança utilizada foi a de Von Newman, como mostra a Figura 1. Foi utilizada a saturação de sítios com 125 núcleos iniciais e velocidade de evolução constante.

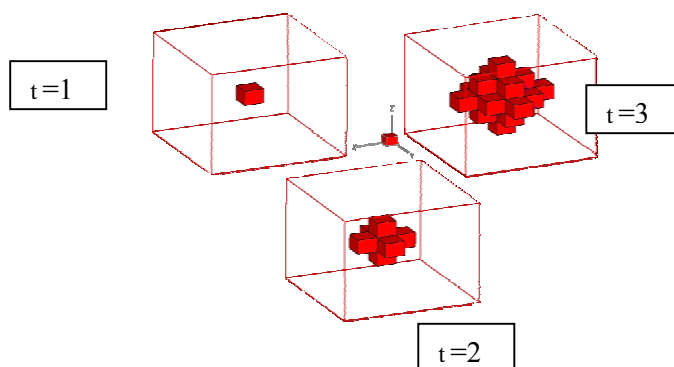


Figura 1. Crescimento de um grão individual a partir da vizinhança de Von Newman em matrizes com homogeneidade de crescimento.

Os resultados obtidos são adimensionais o tempo e o espaço são discretos e evoluem de acordo com a regra de transição adotada.. Se uma célula possui um vizinho transformado, no próximo tempo ela muda sua condição de não transformada para transformada.

Para que haja heterogeneidade de energia, a matriz foi dividida em regiões (camadas) e a cada uma delas é atribuído um nível de energia. Para esse trabalho utilizou-se nível 3, ou seja, a matriz foi dividida em três, sendo atribuído a cada parte um nível de energia (um, dois e três), como mostrado na Figura 2.^[7] A matriz utilizada possui três dimensões, todavia a energia varia apenas em uma direção, como se cada camada da matriz tivesse um nível de energia diferente da outra.

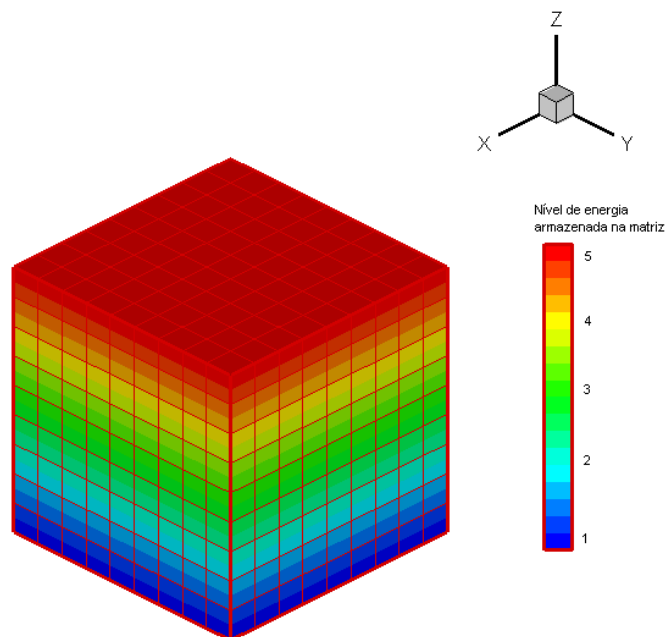


Figura 2. Variação do nível de energia dentro da matriz

A simulação nos fornece a cinética de cada um dos 125 grãos. Uma observação importante é que como não há textura não há coalescimento. Portanto como tínhamos 125 núcleos iniciais teremos 125 grãos ao final da simulação.

Para efeito do estudo da evolução dos grãos e posterior comparação com resultados experimentais foram escolhidos aleatoriamente 8 grãos.

2.2 Dados Experimentais

Os resultados experimentais citados e utilizados nesse trabalho foram adquiridos da literatura.^[1] Trata-se de um alumínio 90% deformado a frio e recozido a 270° C. e seis grãos tiveram sua evolução acompanhada. Esse trabalho foi realizado por D.Juul Jensen et al.^[1] no Laboratório de Riso, Dinamarca.

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

3.1 Simulação da Cinética de um Único Grão

O primeiro passo foi verificar essa variação de energia ao longo da matriz. Para isso, o crescimento de um único grão, cujo núcleo foi localizado no centro da matriz, foi simulado. Como o grão se encontrava isolado e não ocorreria o *impingement*, uma das sub-rotinas foi modificada para que a parede do grid fosse considerada um grão vizinho e que o crescimento parasse ao encontrar a parede. A figura 3 mostra o resultado obtido.

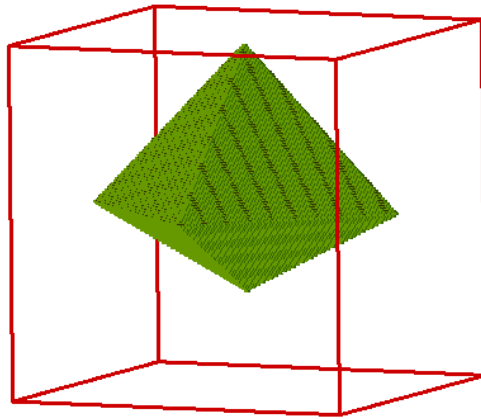


Figura 3. Crescimento de um grão isolado ao longo de uma matriz com nível 3 de energia

Podemos observar que a variação de energia ao longo da matriz provocou um crescimento alongado do grão na direção de maior energia. Se não houvesse essa variação de energia ao longo dessa matriz esse grão cresceria equiaxialmente, como mostrado por Assis et al.^[9]

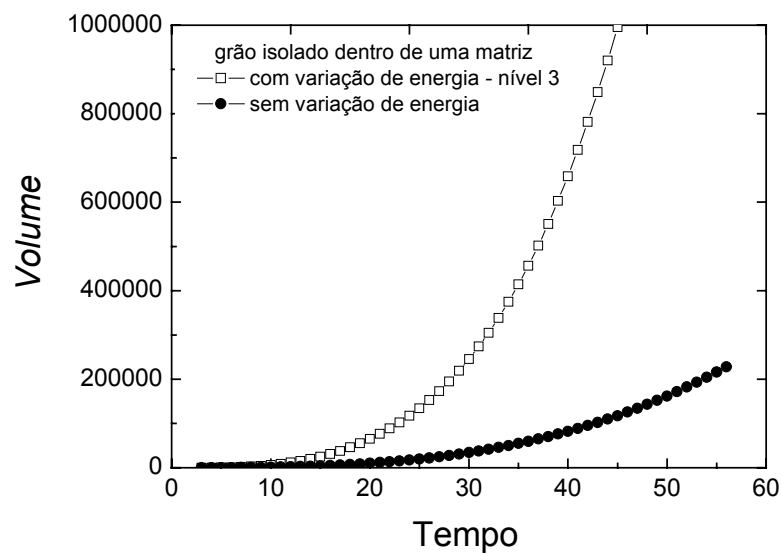


Figura 4. Volume x tempo de reação

A Figura 4 mostra a variação de volume do grão ao longo do tempo sem interferência do *impingement* e com velocidade constante de crescimento. A variação de energia faz com que o grão cresça mais em menos tempo.

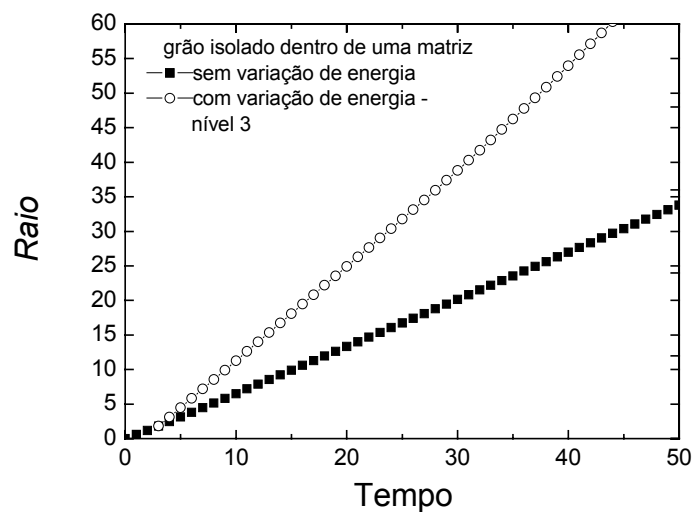


Figura 5. Raios X tempo de reação

A Figura 5 mostra a evolução do raio do grão em função do tempo em duas situações distintas: com e sem variação de energia ao longo da matriz. Como energia armazenada é força motriz para crescimento do grão, o resultado da simulação confirmou que ao impor mais energia a matriz, a velocidade de crescimento aumenta.

3.2 Simulação da Cinética de 125 Núcleos

A Figura 6 a seguir mostra a cinética dos 8 grãos escolhidos para a análise. Os outros 117 grãos possuem as mesmas características iniciais e evoluem ao mesmo tempo em que os 8 grãos estudados. Eles apenas não são mostrados.

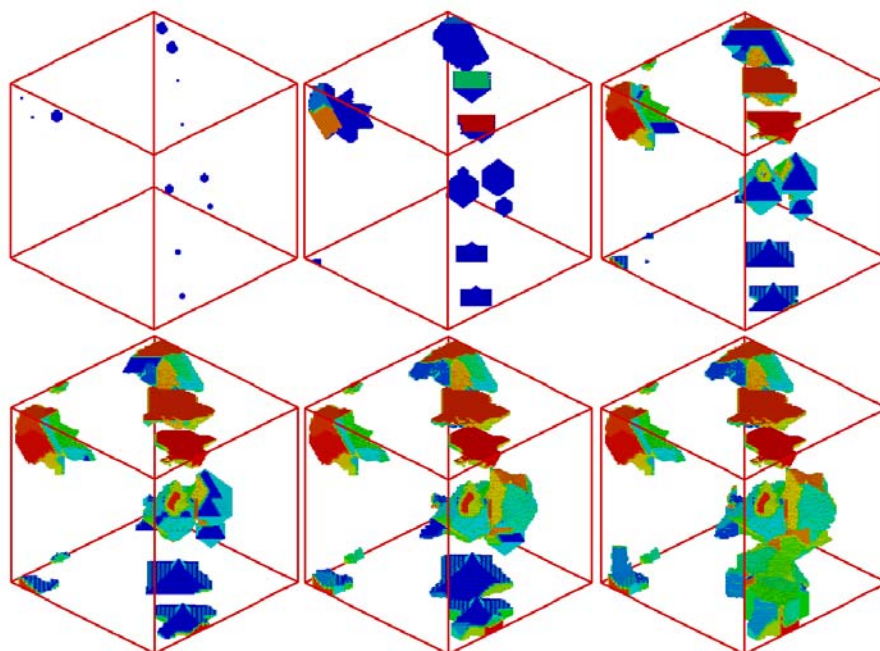


Figura 6. Evolução dos 8 grãos estudados

A sequência começa pelo $t=0$, ou seja, apenas a nucleação e continua a cada 20% recristalizado.

A cor azul significa que o grão se encontra isolado sem a ocorrência do *impingement*. O vermelho é devido ao encontro com as paredes da matriz e as demais cores demonstram a ocorrência do *impingement*.

A Figura 7 representa uma microestrutura 100% recristalizada ao fim da simulação. Essa matriz é a mesma da Figura 6.

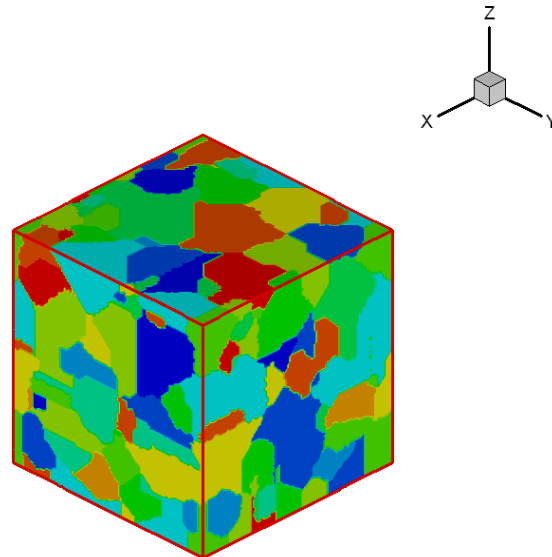


Figura 7. Representação gráfica da microestrutura simulada

A variação do volume em função do tempo desses grãos é plotada e comparada com os resultados experimentais.

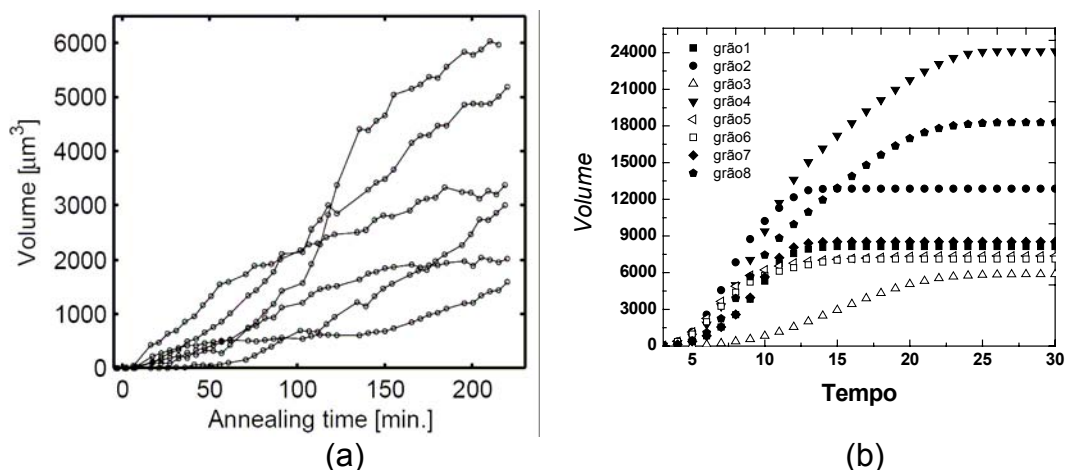


Figura 8. Volume x tempo de reação (a) experimental e (b) simulado

A Figura 8 compara a cinética dos 6 núcleos analisados experimentalmente com os 8 grãos analisados com a simulação.

Fica evidenciado que a cinética dos grãos não é igual mesmo antes da ocorrência do *impingement*, isso é devido à variação de energia ao longo da matriz.

A resposta da simulação apresenta diferenças dos dados simulados, no entanto isso é aceitável uma vez que a simulação é feita em um espaço discreto.

A distribuição dos volumes finais dos grãos é mostrada na Figura 9. Tanto os dados experimentais quanto os simulados foram coletados e normalizados para efeito de comparação.

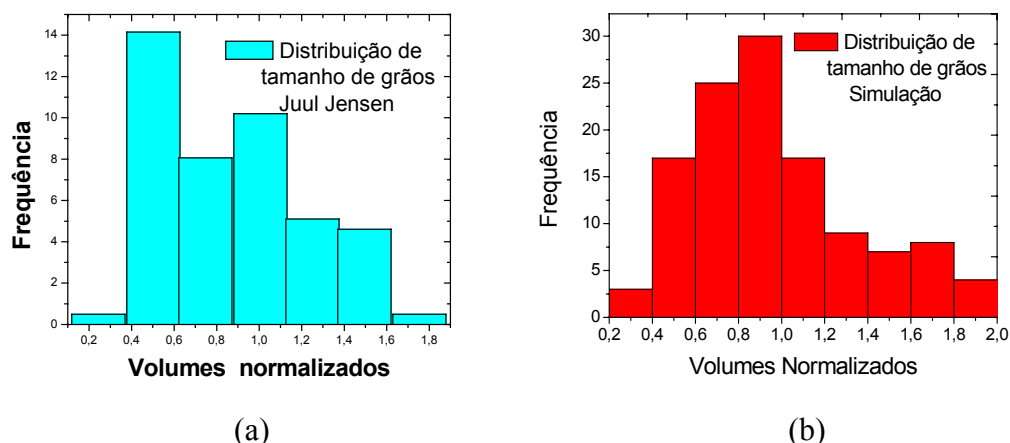


Figura 9. Distribuição dos volumes dos grãos: (a) experimental e (b) simulado

4 CONCLUSÃO

A primeira conclusão gerada pelas comparações feitas com os dados experimentais com os dados retirados da simulação foi que a variação de energia imposta dentro da matriz provoca uma aceleração na cinética de reação.

Na análise da cinética dos grãos podemos concluir que cada grão assume uma cinética de reação mesmo antes da ocorrência do *impingement*, pois existe a interferência da variação de energia.

A distribuição final dos grãos simulados é semelhante à distribuição experimental.

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 Lauridsen, E.M.; Poulsen H.F.; Nielsen, S.F.; Jensen, D.J. Recrystallization kinetics of individual bulk grains in 90% cold-rolled aluminium. *Acta Materialia*, v.51, p.4423–4435, set. 2003
- 2 Kolmogorov, N.A.; The statistics of crystal growth in metals. *Isvestiia Akademii Nauk, SSSR- Serii Matematicheskaya*, vol.1 (3), p.333-359, 1937.
- 3 Johnson, W.A; Mehl, R.F. Reaction Kinetics in processes of nucleation and growth. *Transactions Metall. Soc. A.I.M.E.*, vol. 135, p.416–441, 1939.
- 4 Avrami, M. Kinetics of phase change I general theory. *Journal of Chemical Physics*, vol. 7(12), p.1103-1112, 1939.
- 5 Hesselbarth H.W.; Gobel, I.R. Simulation of recrystallization by cellular automata. *Acta Metall. Mater* v. 39 n.º 9, p 2135-2143, 1991

- 6 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*, vol.8, no.3, p.341-345. , July/Sept. 2005
- 7 Assis, W.L.S.; Oliveira, F.F; Pereira, L.O.; F.F.; Castro J.A.; Rios, P.R. Acoplamento indireto dos elementos finitos ao autômato celular para o estudo do efeito do gradiente de deformação na recristalização. In 62° Congresso Anual da ABM – Internacional, Vitória – ES, 2007
- 8 Assis, W.L.S.; Pereira, L.O.; Oliveira, F.F.; Castro J.A.; Rios, P.R. Estudo da evolução de grãos individuais e distribuição de tamanhos finais pelo método dos autômatos celulares. Seções Técnico-Científicas, 308-002, 2006, Foz do Iguaçu, Anais 17° CBECIMAT 2006 CD1.
- 9 Rios, P.R.; Pereira, L.O.; Castro, J.A. Cellular Automata Simulation of Site-saturated and Constant Nucleation Rate Transformations in Three Dimensions, *Materials Research*, Vol. 9, No. 2, 2006