

# UTILIZAÇÃO DO MÉTODO DO AUTÔMATO CELULAR EM 3D PARA O ESTUDO DO EFEITO DO GRADIENTE DE ENERGIA ARMazenADA NA RECRISTALIZAÇÃO <sup>1</sup>

Fabiano Vicente Figueira <sup>2</sup>  
Paulo Rangel Rios <sup>3</sup>  
Wesley Luiz da Silva Assis <sup>4</sup>

## Resumo

Este trabalho utiliza como base o método do autômato celular para simular o processo de recristalização primária. Neste trabalho a simulação considerou o efeito do gradiente de deformação presente na matriz. Este gradiente de deformação implica em um gradiente de energia armazenada na matriz encruada. A velocidade de migração da interface dos grãos recristalizados é proporcional à energia armazenada e portanto depende da posição da interface na matriz deformada.. Neste trabalho o efeito desta não homogeneidade na distribuição da energia armazenada sobre a evolução da recristalização foi investigado em detalhe por meio de simulação computacional pelo método do autômato celular.

**Palavras-chave:** Autômato celular; Recristalização.

## CELLULAR AUTOMATA SIMULATION IN 3D OF THE EFFECT OF A GRADIENT OF STORED ENERGY IN RECRYSTALLIZATION

## Abstract

This work uses cellular automata methodology to simulate the primary recrystallization. In this work the effect of the presence of a deformation gradient was included in the simulation. This deformation gradient implies in a gradient of stored energy of cold work. The interface migration velocity is proportional to this stored energy and therefore it depends on the interface position within the deformed matrix. In this work, the effect of this heterogeneity in the distribution of stored energy was investigated in detail by cellular automata computer simulation.

**Key words:** Cellular Automata, Recrystallization .

<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> *Graduando em Engenharia de Agronegócios / Alunos de Iniciação Científica da Universidade Federal Fluminense – UFF Volta Redonda RJ*

<sup>3</sup> *Prof. PhD em Engenharia Metalúrgica, Prof. Titular do curso de pós-graduação em Engenharia Metalúrgica da Universidade Federal Fluminense – UFF*

<sup>4</sup> *Engenheiro Químico, Doutorando em Engenharia Metalúrgica na Universidade Federal Fluminense – UFF, Volta Redonda RJ*

# 1 INTRODUÇÃO

O processo de recristalização primária tem sido frequentemente estudado com auxílio das teorias clássicas de transformações de fase que ocorrem por nucleação e crescimento. Este tipo de processo torna-se extremamente complexo quando analisado de maneira detalhada. Entretanto, pode ser analisado de maneira geral e simplificada. Um clássico exemplo é quando se estudando apenas os aspectos geométricos sem levar em consideração perturbações externas ao sistema evolutivo. Este tipo de estudo tem sido realizado por meio de modelos matematicamente exatos como a teoria JMAK<sup>[1,2,3]</sup> e pelos modelos computacionais. Os modelos computacionais são formas mais recentes de estudar o processo de recristalização. Quando a física do modelo computacional se assemelha às suposições impostas ao modelo, matemático, os resultados da simulação podem ser validados pelos modelos analíticos como foi feito por Hesselbësth e Göbell<sup>[4]</sup> e Rios *et al.*<sup>[5]</sup> Os modelos utilizados, geralmente supõem reações mais simplificadas em relação ao sistema evolutivo microestrutural real. São desconsideradas em alguns casos importantes características da microestrutura, tais como: impurezas, maclas, recuperação, heterogeneidade de energia armazenada na matriz e etc. Todavia a necessidade de assumir suposições para simplificar o fenômeno podem induzir a desvios dos resultados reais. Com intuito de minimizar estes tipos de desvios, Mukhopadhyay, Loeck e Gottstein<sup>[6]</sup> implementaram recentemente parte da física real ao modelo computacional. A introdução de parte do fenômeno físico real na simulação computacional tem se tornado uma tendência para as novas messes de trabalhos científicos.

Este trabalho utiliza como base o programa autômato celular desenvolvido por Rios<sup>[7]</sup> e as correções feitas por Assis<sup>[8]</sup> para simular o processo de recristalização primária.

Após o núcleo ter sido ativado termicamente (nucleação), é observado apenas o crescimento do mesmo. Durante o crescimento, interfaces recristalizadas avançam sobre a matriz encruada varrendo discordâncias e defeitos puntiformes. A velocidade de avanço das interfaces livres de defeitos varia de acordo com energia armazenada na matriz deformada. Regiões com maior nível de energia (maior grau de deformação) têm maior velocidade de avanço, e regiões que possuem menor nível de energia terão, conseqüentemente, menores velocidades. A velocidade de avanço pode ser calculada por:

$$\langle G \rangle = \frac{\iint G ds}{\iint ds} = \frac{1}{s} \cdot \frac{dv}{dt} \quad (1)$$

Onde:

$v$  = volume do grão,  $s$  = área interfacial entre região recristalizada e não recristalizada e  $t$  = tempo de reação em cada etapa.

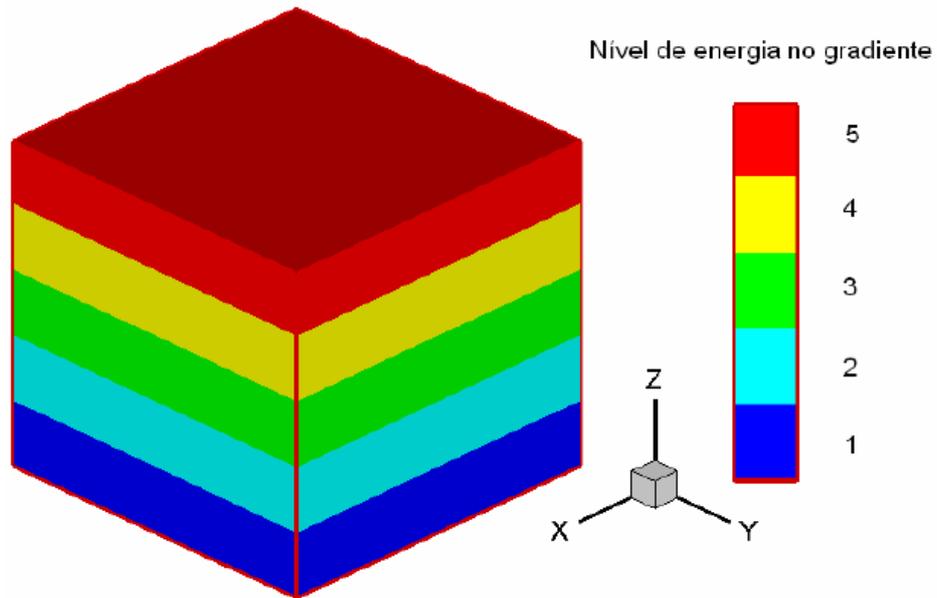
Durante o processo de deformação plástica dos materiais metálicos, a energia é armazenada heterogeneamente dentro da matriz. Em determinadas regiões do material geralmente são encontrados gradientes de deformação. Os gradientes de deformação geram, conseqüentemente, gradientes com distintos níveis de energia, já que, a energia é armazenada na forma de defeitos durante a deformação. A energia contida por deformação é utilizada como força motriz para o avanço das

interfaces recristalizadas. Segundo Rios e Padilha<sup>[9]</sup> a queda da velocidade de avanço das interfaces recristalizadas é devido aos gradientes de deformação.

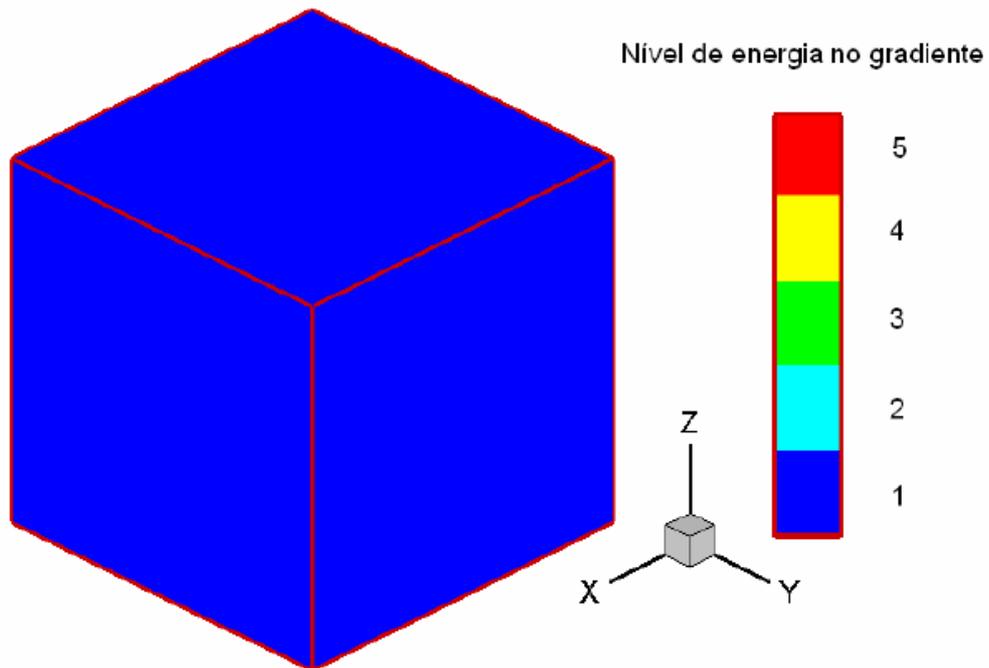
## 2 MATERIAL E MÉTODOS

A matriz discreta contendo gradientes de deformação foi construída a partir de resultados obtidos do trabalho recente de Assis. A reconstrução foi realizada de acordo com as características geométricas dos gradientes de deformação apresentados como resposta de simulação de deformação. Maiores detalhes sobre a parte de simulação da deformação do material, estão descritos nos trabalhos prévios de Assis.

Os autômatos celulares (AC) foram empregados como uma ferramenta computacional para simular a recristalização conforme a metodologia de Hesselbarth e de Göbel.<sup>[4]</sup> Utilizou-se o critério da vizinhança de von Neumann em três dimensões. O espaço discreto foi representado por uma matriz cúbica com células 304x304x304 que contêm junto 4096 núcleos. Os dados foram usados assim como nos prévios trabalhos de Rios et al.<sup>[5,8,10]</sup> Uma célula foi considerada como um comprimento unitário, e conseqüentemente cada célula teve um volume unitário. As unidades de todas as quantidades calculadas relatadas aqui seguem a partir desta escolha do parâmetro unitário da matriz. O número de núcleos por a unidade do volume,  $N_v$ , foi mantido constante e igual a 1/6859. O número de células da matriz e dos núcleos foi escolhido por razões descritas na nucleação de saturação de sítios<sup>[10]</sup>, assim que todos os núcleos apareceram simultaneamente em  $t=0$  foram posicionados aleatoriamente dentro da matriz cúbica. O tempo é uma variável discreta no AC, porque supõe que os valores são inteiros e que partem de  $t=0$ . Uma unidade do tempo corresponde ao intervalo entre duas atualizações consecutivos da matriz. Todas as quantidades desejadas podem ser extraídas das matrizes simuladas. Detalhes adicionais para a simulação tridimensional do AC podem ser encontrados.<sup>[5]</sup> Os resultados da simulação de FEM foram introduzidos nesta matriz somente qualitativamente. Observou-se que a deformação que resulta da compressão variou aproximadamente 0 a 5. Desta observação atribuímos cinco níveis de energia à matriz do AC, variando também de 1 a 5. A matriz do AC foi dividida então em cinco “fatias” paralelas e a cada “fatia” um nível de energia correspondente que varia de 1 a 5 foi atribuído de modo que a matriz possuísse um gradiente de energia. A fim de ser usado como uma referência, a simulação do AC foi realizada também em matrizes homogêneas com os níveis de energia uniformes iguais a 1 e a 3. O nível de energia igual a 1 (menor nível possível) e nível de energia igual a 3 (nível médio de energia) foram simulados. Os resultados destas simulações são usados como uma referência para o gradiente. A velocidade era proporcional ao nível de energia de uma célula particular.

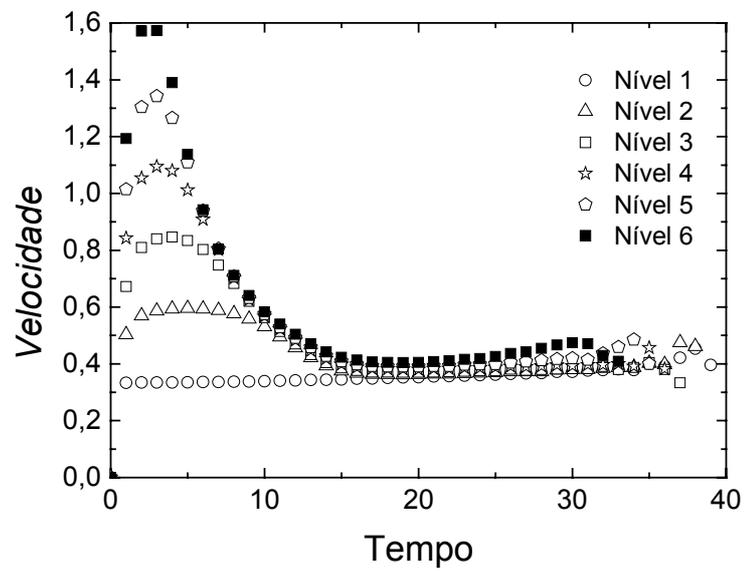


**Figura 1.** Representação da matriz deformada com o gradiente de deformação e nível máximo de energia igual a 5.

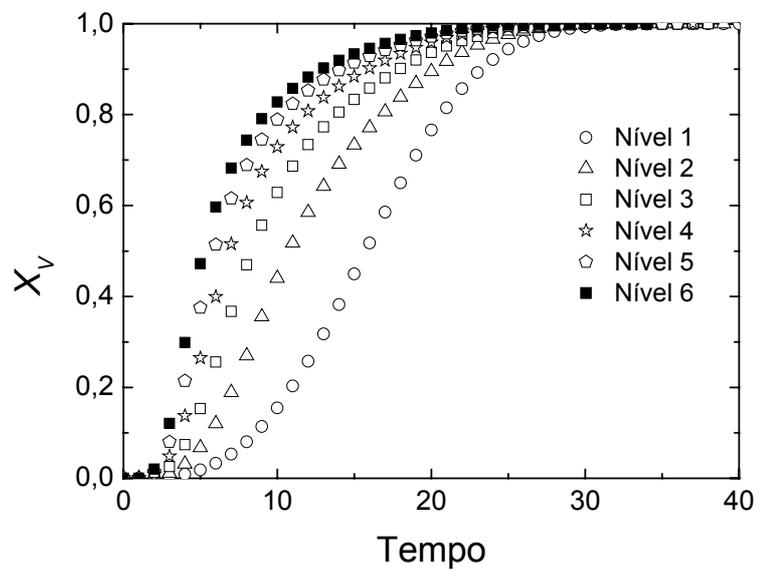


**Figura 2 .** Representação da matriz deformada sem o gradiente de deformação, com nível mínimo de energia armazenado.

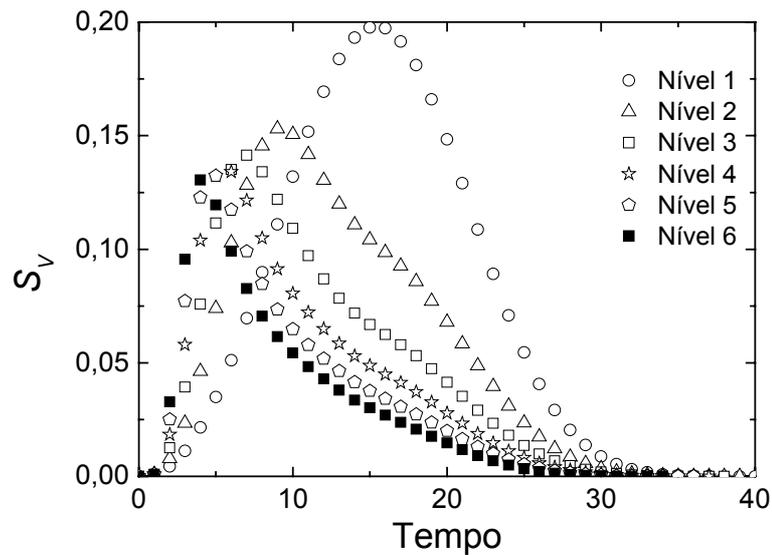
### 3 RESULTADOS



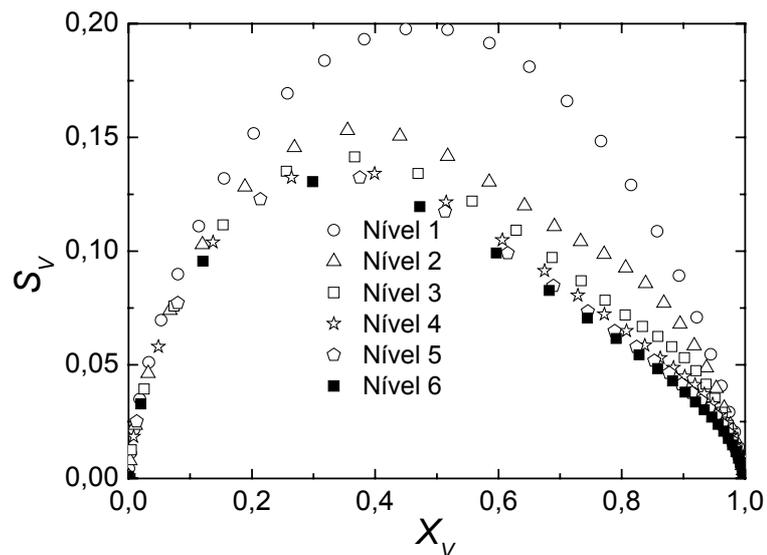
**Figura 3** - Curvas de velocidade em função do tempo de reação em matrizes com diferentes níveis de energia armazenadas dentro da matriz.



**Figura 4** - Curvas de frações recristalizadas em função do tempo de reação em matrizes com diferentes níveis de energia armazenadas dentro da matriz.



**Figura 5** - Curvas de frações de áreas superficiais por unidade de volume em função do tempo de reação em matrizes com diferentes níveis de energia armazenadas dentro da matriz.



**Figura 6** - Curvas de frações de áreas superficiais por unidade de volume em função da fração recristalizada em matrizes com diferentes níveis de energia armazenadas dentro da matriz.

#### 4 DISCUSSÃO

Reações com diferentes velocidades de evolução dentro uma mesma matriz tendem a ser controladas pelas etapas mais lentas. Fazendo-se uma analogia com a recristalização, pode-se afirmar que as regiões que determinam a velocidade final da transformação são as regiões de menor energia armazenada.

Durante o processo de recristalização simulado em malhas discretas contendo gradiente de deformação observou-se uma queda na velocidade de avanço das superfícies recristalizadas. Stüwe, Padilha e Siciliano<sup>[11]</sup> apresentaram

um modelo em que, é levada em consideração a recuperação como grande causadora da queda de velocidade das interfaces durante a recristalização. Rios<sup>[12]</sup> mostra um exemplo de um modelo no qual é apontado o gradiente de deformação como o responsável principal pela queda de velocidade das interfaces recristalizadas. Oliveira<sup>[13]</sup> expõe um terceiro exemplo em que são utilizadas as equações da teoria de JMAK para cinética formal em casos que existem grupos de núcleos dentro da matriz. Os resultados de  $S_V$  e de  $V_V$  obtidos a partir do método de suposição da aleatoriedade dos núcleos, podem gerar uma queda na velocidade de avanço das interfaces. Todavia neste trabalho não foi levado em consideração o efeito da recuperação, entretanto os resultados obtidos tiveram concordância com a teoria de Rios e Padilha.<sup>[9]</sup>

Na Figura 3 foram apresentadas seis curvas com perfis muito semelhantes, na qual cada reação acontece em matrizes com níveis de energia de um até seis. Observa-se que a velocidade inicial de avanço das interfaces aumenta à medida que aumenta o nível de energia dentro do gradiente de deformação. A velocidade de crescimento dos núcleos diminui à medida que aumenta o tempo reação. Confirma-se assim, a afirmação feita na seção anterior, “velocidades de evolução dentro uma mesma matriz tendem a serem controladas pelas etapas mais lentas”.

A Figura 4 mostra as cinéticas de recristalização para as matrizes com os diferentes níveis de energia armazenada. Nesta comparação o resultado obtido já era esperado, sabendo que um aumento nos níveis de energia armazenada, ocasiona aumento na cinética de reação para uma mesma temperatura.

Nas Figuras 5 e 6 observa-se uma nítida queda na área interfacial em função do tempo de reação e da fração recristalizada respectivamente. Quanto maior o nível de energia armazenada na forma de gradiente menor é a fração de área interfacial por unidade de volume.

## 5 CONCLUSÃO

Quanto maior o nível de energia dentro de um gradiente de deformação, mais acentuada será a queda da velocidade das interfaces. O aumento do nível de energia armazenada dentro do gradiente de deformação matriz, acarreta aumento na cinética de reação de recristalização. Maior velocidade em uma determinada direção pode provocar um alongamento do grão, na direção mais favorecida de energia. Os resultados atuais mostram um efeito significativo do gradiente de energia armazenada na cinética de transformação e na evolução microestrutural. O efeito observado aqui é puramente um efeito do crescimento desde que a nucleação for mantida aleatória. A Velocidade da interface realmente decresce quando existe gradiente de deformação na matriz.

Os dois métodos são boas ferramentas para estudar qualitativamente a deformação e recozimento dos materiais metálicos.

## Agradecimentos

Este trabalho teve o suporte da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, FAPERJ.

## REFERÊNCIAS

- 1 JOHNSON, W. A. and MEHL, R. F, Transactions Metall. Soc. A.I.M.E., vol. 135, p.416–441, 1939.
- 2 KOLMOGOROV, A. N. Izv. Akad. Nauk. USSR-Ser-Matemat, vol.1(3), p.355, 1937.
- 3 AVRAMI, M. Journal of Chemical Physics, vol. 7, p.1103-1112, 1939.
- 4 H.W, HESSELBARTH and I.R GÖBEL, *Simulation of Recrystallization by Cellular Automata*, Acta Metall. Mater., vol. 39, n° 9, p.2135–2143, 1991.
- 5 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, 341-345, 2005.
- 6 MUKHOPADHYAY, P. LOECK, M. GOTTSTEIN, G. *A cellular operator model for the simulation of static recrystallization*. Acta Materialia, vol 55, 551–564, 2007.
- 7 RIOS, P.R. *Modeling Time Dependence of the Average Interface Migration Rate in Site Saturated Recrystallization*. Metallurgical and Materials Transactions A, vol 28 n° pp. 939-946, 1997.
- 8 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.
- 9 RIOS, P.R. and PADILHA, A.F. *Microstructural path of recrystallization in a commercial AlMn-Fe-Si (AA3003) alloy*. Materials Research (Brazil), vol.6pp605-613, 2003.
- 10 RIOS, P. R. OLIVEIRA V T; PEREIRA. L O. PEREIRA M. R. CASTRO, J. A. *Cellular automata simulation of site-saturated and constant nucleation rate transformations*. Materials Research Mat. Res. vol.9 no.2 São Carlos Apr./June 2006
- 11 STÜWE, H.P. PADILHA, Â. F. Siciliano, F. *Competition Between Recovery and Recrystallization* . Materials Science and Engineering A-Structural Materials Properties Microstructure and Processing, A33 (1-2), pp.361-367, 2002.
- 12 RIOS, P.R. *Modeling Time Dependence of the Average Interface Migration Rate in Site Saturated Recrystallization*. Metallurgical and Matreials Transactions A, vol 28 n° pp. 939-946, 1997.
- 13 OLIVEIRA, V.T. *Desenvolvimento Do Código Computacional Para A Simulação Da Recristalização Em 3d Pelo Método Do Autômato Celular* – Dissertação de Mestrado - PG Engenharia Metalúrgica, UFF, Volta Redonda, 2005