

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE  
CENTRO TECNOLÓGICO  
ESCOLA DE ENGENHARIA INDUSTRIAL METALÚRGICA DE VOLTA REDONDA  
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA METALÚRGICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

WESLEY LUIZ DA SILVA ASSIS

**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.**

Volta Redonda  
2006

# **Livros Grátis**

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

WESLEY LUIZ DA SILVA ASSIS

**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 apresentada ao curso de Mestrado em Engenharia Metalúrgica do curso de Pós-Graduação da Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Metalúrgica.

Área de Concentração: **Materiais Avançados**

**Orientador: Prof. Ph.D. PAULO RANGEL RIOS**

**Co-orientador: Prof. Ph.D. JOSÉ ADILSON DE CASTRO**

Volta Redonda

2006

WESLEY LUIZ DA SILVA ASSIS

**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.**

Aprovada em \_\_/\_\_/2006

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Paulo Rangel Rios, Ph.D. – Orientador  
Universidade Federal Fluminense

---

Prof. Flávio Ferreira D.Sc.  
Universidade Federal Fluminense

---

Prof. Jefferson Fabrício Lins, D.Sc.  
Universidade Federal Fluminense

---

Prof. Ivani de Souza Bott, Ph.D  
Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Volta Redonda

2006

## Dedicatória

Dedico este trabalho  
à minha mãe  
Joana D'arc Aparecida da Silva Assis  
ao meu pai  
Jair Luiz de Assis  
à minha noiva  
Cinthia de Oliveira Conegundes  
ao meu irmão  
Wescley Cristian da Silva Assis  
e à minha avó  
Lucília Faustino Pereira da Silva.

## **AGRADECIMENTOS**

Em primeiro lugar quero agradecer a Deus, por ter me dado força e saúde, para realizar este trabalho.

Aos meus pais, por me mostrarem que nenhum sonho é impossível, quando você acredita que é capaz de realizá-lo.

Ao Prof. Paulo Rangel Rios, pela paciência, dedicação, compreensão e por ter acreditado em meu potencial e me dado esta chance de estar trabalhando com ele.

À minha noiva por ter sido sempre minha companheira e ter me amparado nos momentos difíceis.

Aos meus amigos, Gláucio, Márcia, Marco Aurélio, Neil, Luciana, e Flávio por contribuírem de alguma forma para que esse trabalho fosse realizado.

A todos os outros amigos que não foram citados, pelo grande companheirismo.

Aos professores e colaboradores da EEIMVR-UFF, com quem convivi durante todo o curso.

À CAPES, pela bolsa de incentivo ao trabalho.

## SUMÁRIO

<b>LISTA DE FIGURAS .....</b>	<b>8</b>
<b>LISTA DE TABELA .....</b>	<b>13</b>
<b>SIMBOLOGIA .....</b>	<b>14</b>
<b>RESUMO .....</b>	<b>18</b>
<b>ABSTRACT .....</b>	<b>19</b>
<b>1.0 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>20</b>
<b>2.0 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....</b>	<b>23</b>
2.1 AUTÔMATOS CELULARES .....	23
2.1.1 Classificação de Classes .....	24
2.1.2 Funcionamento dos Autômatos Celulares .....	24
2.1.3 Especificações na Construção de um Sistema Autômato Celular .....	25
2.1.3.1 Geometria .....	25
2.1.3.2 Dimensão .....	25
2.1.3.3 Formato da célula .....	26
2.1.3.4 Tipo de Vizinhança.....	26
2.1.4 Regras de Transição.....	28
2.1.4.1 Velocidade de transição.....	30
2.1.4.2 Condições de Contorno (ou limite da malha).....	30
2.2 APLICAÇÕES DE SISTEMAS DE AUTÔMATOS CELULARES .....	32
2.3 AUTÔMATOS CELULARES APLICADOS À METALURGIA .....	35
2.3.1 A.C. Aplicado à Transformações por Nucleação e Crescimento .....	37
2.3.2 Autômato Celular Aplicado à Recristalização.....	38
2.3.3 Estrutura do Modelo Aplicado à Recristalização .....	40
2.4 MODELAMENTO MATEMÁTICO PARA VELOCIDADE CONSTANTE.....	46
2.4.1 A Teoria JMAK.....	46
2.4.2 Metodologia do Caminho Microestrutural .....	47
2.5 MODELAMENTO MATEMÁTICO PARA VELOCIDADE VARIADA .....	48
<b>3.0 METODOLOGIA .....</b>	<b>53</b>
3.1 ESTUDO DA EVOLUÇÃO DE GRÃOS INDIVIDUAIS E DISTRIBUIÇÃO DE TAMANHOS FINAIS PELO MÉTODO DO AUTÔMATO CELULAR .....	55
3.1.1 Descrição da Simulação.....	56
3.1.2 Descrição Analítica do A.C. em 3D .....	57
3.1.2.1 Geometria e Cinética da Evolução de um Único Grão.....	57
3.2 ESTUDO DO EFEITO DA TAXA DE NUCLEAÇÃO ADOTADA DURANTE A REAÇÃO DE RECRISTALIZAÇÃO. ....	60

3.2.1	Descrição Analítica da Cinética .....	60
3.2.1.1	Evolução da Fração Volumétrica .....	60
3.2.1.2	Evolução da Área Interfacial dos Grãos .....	61
3.2.2	Descrição Analítica.....	62
3.2.3	Descrição Analítica do Caminho Microestrutural para Velocidade Constante	63
3.3	ESTUDO DO EFEITO DO TIPO DE NUCLEAÇÃO E DA VELOCIDADE DE CRESCIMENTO .....	63
3.3.1	Descrição da Simulação.....	63
3.4	ESTUDO DO EFEITO DA DISTRIBUIÇÃO DOS NÚCLEOS E DA VELOCIDADE DE CRESCIMENTO .....	64
3.5	ESTUDO DO EFEITO DO GRADIENTE DE DEFORMAÇÃO DENTRO DA MATRIZ.....	65
3.5.1	Descrição da Primeira Simulação por Elementos Finitos .....	65
3.5.2	Descrição da Segunda Simulação por Elementos Finitos .....	65
3.5.3	Descrição da Terceira Simulação por Elementos Finitos .....	66
3.5.4	Descrição da Simulação por Automação Celular .....	66
3.6	ESTUDO DO EFEITO DO NÍVEL DE ENERGIA ARMAZENADA NO GRADIENTE DE DEFORMAÇÃO DENTRO DA MATRIZ.....	67
<b>4.0</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES .....</b>	<b>68</b>
4.1	ESTUDO DA EVOLUÇÃO DE GRÃOS INDIVIDUAIS E DISTRIBUIÇÃO DE TAMANHOS FINAIS PELO MÉTODO DO AUTÔMATO CELULAR .....	68
4.1.1	O Grão Isolado .....	68
4.1.2	Os Grãos Individuais e Seus Vizinhos .....	73
4.2	ESTUDO DO EFEITO DA TAXA DE NUCLEAÇÃO ADOTADA DURANTE A REAÇÃO DE RECRISTALIZAÇÃO. ....	81
4.3	ESTUDO DO EFEITO DO TIPO DE NUCLEAÇÃO E DA VELOCIDADE DE CRESCIMENTO .....	86
4.4	ESTUDO DO EFEITO DA DISTRIBUIÇÃO DOS NÚCLEOS E DA VELOCIDADE DE CRESCIMENTO .....	90
4.5	ESTUDO DO EFEITO DO GRADIENTE DE DEFORMAÇÃO DENTRO DA MATRIZ.....	102
4.5.1	Resultados das simulações por elementos finitos.....	102
4.5.2	Resultados das simulações por automação celular .....	105
4.6	ESTUDO DO EFEITO DO NÍVEL DE ENERGIA ARMAZENADA NO GRADIENTE DE DEFORMAÇÃO DENTRO DA MATRIZ.....	111
<b>5.0</b>	<b>CONCLUSÕES.....</b>	<b>117</b>
5.1	ESTUDO DA EVOLUÇÃO DE GRÃOS INDIVIDUAIS E DISTRIBUIÇÃO DE TAMANHOS FINAIS PELO MÉTODO DO AUTÔMATO CELULAR .....	117
5.2	ESTUDO DO EFEITO DA TAXA DE NUCLEAÇÃO ADOTADA DURANTE A REAÇÃO DE RECRISTALIZAÇÃO. ....	118
5.3	ESTUDO DO EFEITO DO TIPO DE NUCLEAÇÃO E DA VELOCIDADE DE CRESCIMENTO .....	118
5.4	ESTUDO DO EFEITO DA DISTRIBUIÇÃO DOS NÚCLEOS E DA VELOCIDADE DE CRESCIMENTO .....	118
5.5	ESTUDO DO EFEITO DO GRADIENTE DE DEFORMAÇÃO DENTRO DA MATRIZ.....	119
5.6	ESTUDO DO EFEITO DO NÍVEL DE ENERGIA ARMAZENADA NO GRADIENTE DE DEFORMAÇÃO DENTRO DA MATRIZ.....	120
<b>6.0</b>	<b>RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS .....</b>	<b>121</b>
<b>7.0</b>	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....</b>	<b>122</b>

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 - Esquemas de autômatos em diferentes dimensões, linear 1D, em duas dimensões 2D e em três dimensões 3D. ....	25
Figura 2.2 - Três tipos de vizinhanças distintas para a malha do autômato celular: vizinhanças triangulares, vizinhanças quadradas e vizinhanças hexagonais respectivamente para as três ilustrações acima.....	26
Figura 2.3 - Representa a evolução das células do autômato em função do tempo, sendo tempo igual a $t+1$ e $t+2$ respectivamente para as ilustrações, e ambas para vizinhanças de von Neumann.....	27
Figura 2.4 - representa a evolução das células do autômato em função do tempo, sendo tempo igual a $t+1$ e $t+2$ respectivamente para as ilustrações, e ambas para vizinhanças de Moore. ..	27
Figura 2.5 - representa a evolução das células do autômato em função do tempo, sendo tempo igual a $t+2$ para vizinhanças arbitrárias. ....	28
Figura 2.6 - Esquema da regra de transição para um sistema dinâmico de automação celular em 3D com 6 vizinhos.....	29
Figura 2.7 - Esquema de um autômato unidimensional com raio de vizinhança 1 e condição de contorno periódica. ....	31
Figura 2.8 - Esquema de um autômato unidimensional com raio de vizinhança 1 e condição de contorno de limite reflexivo .....	31
Figura 2.9 - Esquema de um autômato unidimensional com raio de vizinhança 1 e condição de contorno de limite de valores fixos. ....	32
Figura 2.10 - Representação do espaço geográfico pelo método dos SIGs (Sistemas de Informação Geográfica), espaço real discreto em duas formas diferentes: Vetorial e Raster <sup>[20]</sup> . ....	33
Figura 2.11 - O padrão gerado por um autômato de Classe III é similar a pigmentação de certas conchas marinhas encontradas na natureza <sup>[22]</sup> , a primeira imagem representa a simulação computacional e a segunda é encontrada na natureza. ....	34
Figura 2.12 - As figuras representam dois tipos diferentes de crescimento: a1) e b1) crescem com formato tradicional de células com vizinhança de von Neumann; a2) e b3) crescem com formato dendrítico para vizinhança de von Neumann <sup>[23]</sup> .....	36
Figura 2.13 - As imagens representam a formação e a evolução dos poros respectivamente durante um processo de solidificação <sup>[25]</sup> . ....	37
Figura 2.14 - Representação gráfica do espaço discreto (malha) aonde ocorrem as evoluções durante a simulação da recristalização em três dimensões.....	40
Figura 2.15. - Representação gráfica da geometria de uma célula isolada antes da ocorrência da primeira evolução (menor unidade de volume discreto). ....	41

Figura 2.16 - Representação gráfica da geometria da célula inicial com os seu seis vizinhos após ocorrer a primeira evolução para vizinhança de von Neumann .....	41
Figura 2.17 - Condição de contorno periódica representada com células coloridas (a continuidade da malha é sempre o seu lado oposto). .....	42
Figura 2.18 - Representação gráfica de uma matriz discreta com nucleação posicionados aleatória no início da simulação. ....	43
Figura 2.19 - Representação gráfica de uma matriz discreta com nucleação posicionados periódica no início da simulação. ....	44
Figura 2.20 - Representação gráfica de uma matriz com nucleação periódica que atingiu 100% de recristalização no final da simulação. ....	44
Figura 2.21 Representação gráfica de uma matriz discreta com nucleação em grupos no início da simulação. ....	45
Figura 2.22 - Representação esquemática da etapa intermediária da recristalização. ....	47
Figura 3.1 - Evolução do volume, $V$ , em função do tempo, $t$ , para um único grão sem que haja nenhuma interferência no crescimento. ....	58
Figura 3.2 - Evolução da área interfacial entre a região transformada e a matriz deformada, em função do tempo, $t$ , para um único grão sem que haja nenhuma interferência no crescimento. ....	59
Figura 4.1 - Evolução equiaxial de um grão isolado dentro da matriz é demonstrada em função da fração recristalizada. ....	68
Figura 4.2 - Evolução do volume, $V$ , em função do tempo, $t$ , para um único grão sem que haja nenhuma interferência no crescimento. ....	69
Figura 4.3 - Evolução do raio, em função do tempo, $t$ , para um único grão sem que haja nenhuma interferência no crescimento. ....	70
Figura 4.4 - Evolução do volume, $V$ , em função do raio para um único grão sem que haja nenhuma interferência no crescimento. ....	71
Figura 4.5 - Volume em função do tempo de reação do grão isolado e Volume em função do Tempo de reação da média dos grãos existentes na matriz contendo 125 núcleos. ....	72
Figura 4.6 - Raio em função do tempo de reação do grão isolado e Raio vs. Tempo de reação da média dos grãos existentes na matriz contendo 125 núcleos. ....	73
Figura 4.7 - Acompanhamento da evolução dos 10 grãos estudados em uma matriz discreta contendo 125 grãos. ....	74
Figura 4.8 - Volume de cada grão em função do tempo de recristalização, cada grão possui sua própria cinética desde o início, resultado obtidos experimentalmente. ....	75
Figura 4.9 - Volume de cada grão em função do tempo de recristalização, cada grão possui sua própria cinética após a interferência, resultados obtidos por simulação. ....	75
Figura 4.10 - Evolução do raio, em função do tempo, $t$ , para cada grão analisado dentro da matriz real, resultados obtidos experimentalmente. ....	76
Figura 4.11 - Evolução do raio, em função do tempo, $t$ , para cada grão analisado dentro da matriz real, resultados por simulação computacional. ....	76

Figura 4.12 - Média da taxa de crescimento em função do tempo de reação, para cada grão analisado, resultados obtidos experimentalmente. ....	77
Figura 4.13 - Média da taxa de crescimento em função do tempo de reação, resultados obtidos por simulação computacional. ....	77
Figura 4.14 - Visão externa da microestrutura simulada pelo Autômato Celular, sem omitir nenhum grão da matriz discreta. ....	78
Figura 4.15 - Visão interna da microestrutura simulada pelo Autômato Celular, com omissão dos grãos mais externos (próximo das faces). ....	79
Figura 4.16 - Distribuição de tamanhos de grãos finais medidos por métodos experimentais com medidas <i>in situ</i> . ....	80
Figura 4.17 - Distribuição de tamanhos de grãos finais calculados por métodos computacionais. ....	80
Figura 4.18 - Fração volumétrica recristalizada, $V_V$ , em função do tempo de reação para taxa de crescimento constante $I_0 = 2$ . ....	81
Figura 4.19 - Fração volumétrica recristalizada, $V_V$ , em função do tempo de reação para taxa de crescimento constante $I_0 = 5$ . ....	82
Figura 4.20 - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade de volume, $S_V$ , em função do tempo com taxa de nucleação constante $I_0 = 2$ . ....	82
Figura 4.21 - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade de volume, $S_V$ , em função do tempo com taxa de nucleação constante $I_0 = 5$ . ....	83
Figura 4.22 - Caminho microestrutural - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade do volume, $S_V$ , em função da fração volumétrica $V_V$ para $I_0 = 2$ . ....	83
Figura 4.23 - Caminho microestrutural - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade do volume, $S_V$ , em função da fração volumétrica, $V_V$ , para $I_0 = 5$ . ....	84
Figura 4.24 - Evolução dos grãos dentro de uma matriz com nucleação constante e aleatória, com taxa de nucleação igual a 5 [núcleos por unidade de tempo] e tempos 3, 10, 15 e 20 [unidade de tempo]. ....	85
Figura 4.25 - Velocidade de avanço em função do tempo de reação para os dois tipos de nucleação estudados com probabilidade de transformação. ....	86
Figura 4.26 - Caminho microestrutural - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade do volume, $S_V$ , em função da fração volumétrica $V_V$ para os dois tipos de nucleação estudados. ....	87
Figura 4.27 - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade de volume, $S_V$ , em função do tempo, para os dois tipos de nucleação estudados. ....	88
Figura 4.28 - Fração volumétrica recristalizada, $V_V$ , em função do tempo de reação para os dois tipos de nucleação estudados. ....	88
Figura 4.29 - Evolução da microestrutura durante a simulação com probabilidade de transformação. ....	89
Figura 4.30 - Simulação da evolução de um único grão nucleado no centro da matriz, e livre de interferências com probabilidade de transformação. ....	90

Figura 4.31 - Velocidade de avanço em função do tempo de reação para o grão isolado com probabilidade de transformação.....	91
Figura 4.32 - Velocidade de avanço em função do tempo de reação para o grão isolado com probabilidade de transformação para os três tipos de distribuição dos núcleos. ....	92
Figura 4.33 - Fração volumétrica recristalizada, $V_V$ , em função do tempo de reação para os três tipos de distribuição dos núcleos estudados. ....	93
Figura 4.34 - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade de volume, $S_V$ , em função do tempo, para os três tipos distribuição dos núcleos estudados. ....	94
Figura 4.35 - Caminho microestrutural - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade do volume, $S_V$ , em função da fração volumétrica, $V_V$ , para os três tipos de distribuição dos núcleos estudados. ....	95
Figura 4.36 - Gráfico de contigüidade em fração volumétrica recristalizada para os três tipos de distribuição dos núcleos estudados. ....	96
Figura 4.37 - Esquema de representação do desaparecimento de duas áreas de interfaces recristalizadas com não recristalizadas, e o surgimento de duas recristalizadas com recristalizadas. (região em azul escuro na primeira imagem representa regiões não recristalizadas).....	97
Figura 4.38 - Contato entre os grãos durante a evolução microestrutural por simulação com probabilidade de transformação em uma matriz contendo 27 núcleos periodicamente alojados dentro da matriz. ....	98
Figura 4.39 - Contato entre os grãos durante a evolução microestrutural por simulação determinística em uma matriz contendo 27 núcleos periodicamente alojados dentro da matriz. ....	98
Figura 4.40 - Evolução de cada grupo até se tornar um único grão em uma matriz contendo sete grupos e 100 núcleos cada grupo. ....	100
Figura 4.41 - Matriz com núcleos periódicos em 2D e em 3D (Espaçamento perfeito entre os núcleos).....	101
Figura 4.42 - Distribuição da deformação plástica na direção X durante o processo de carregamento de cargas <sup>[47]</sup> .....	102
Figura 4.43 - Distribuição da deformação plástica na direção X durante o processo ECAP. ....	103
Figura 4.44 - Distribuição da deformação plástica na direção X e Y durante o processo de extrusão rotativa de tubos. ....	104
Figura 4.45 - Matriz com os níveis de energia armazenada utilizada no autômato celular. ....	105
Figura 4.46 - Velocidade de avanço em função do tempo de reação para o grão isolado com gradiente de deformação para os três tipos de distribuição dos núcleos. ....	105
Figura 4.47 - Fração volumétrica recristalizada, $V_V$ , em função do tempo de reação com gradiente de deformação para os três tipos de distribuição dos núcleos estudados. ....	106
Figura 4.48 - Caminho microestrutural - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade do volume, $S_V$ , em função da fração volumétrica com gradiente de deformação para os três tipos de distribuição dos núcleos estudados. ....	107

Figura 4.49 - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade de volume, $S_V$ , em função do tempo, com gradiente de deformação para os três tipos distribuição dos núcleos estudados.....	108
Figura 4.50 - Gráfico de contigüidade em fração volumétrica recristalizada com gradiente de deformação para os três tipos de distribuição dos núcleos estudados. ....	108
Figura 4.51 - Evolução de um grão individual em uma matriz contendo dois níveis diferentes de energia armazenada, e evolução de um grão individual em uma matriz contendo homogeneidade de energia armazenada, respectivamente. ....	109
Figura 4.52 - Representação da microestrutura em função da fração recristalizada em função do tempo de reação. ....	110
Figura 4.53 - Curvas de velocidade em função do tempo de reação em matrizes com diferentes níveis de energia armazenadas dentro da matriz. ....	111
Figura 4.54 - Curvas de frações recristalizadas em função do tempo de reação em matrizes com diferentes níveis de energia armazenadas dentro da matriz.....	112
Figura 4.55 - 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. ....	113
Figura 4.56 - 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. ....	113
Figura 4.57 - Micrografia óptica de granulação grosseira parcialmente recristalizada de alumínio comprimido em 40% <sup>[50]</sup> .....	114
Figura 4.58 - Microestrutura em 2D simulada pelo método do autômato celular, utilizando-se a técnica de gradiente de deformação dentro da matriz.....	115
Figura 4.59 - Microestrutura em 2D simulada pelo método do autômato celular, utilizando-se homogeneidade de dentro da matriz.....	115

## LISTA DE TABELA

Tabela 4.1 - Comparação da constante forma para volumes calculada por simulação e analiticamente. ....	71
Tabela 4.2 – Tabela dos parâmetros P e r ajustados, obtidos por simulação computacional. ..	86
Tabela 4.3 – Tabela do parâmetro C ajustado, obtidos por simulação computacional. ....	87
Tabela 4.4 – Parâmetros P e r ajustados. ....	91

## SIMBOLOGIA

<b>2D</b>	Duas dimensões
<b>3D</b>	Três dimensões
$N_V$	Número de núcleos por unidade de volume
$N_{V0}$	Número de núcleos por unidade de volume inicial
<b>G</b>	Velocidade de avanço da interface
<b>R</b>	raio do grão
<b>V</b>	Volume
<b>S</b>	Área superficial do grão
<b>t</b>	Tempo
$\tau$	Tempo de incubação
<b>JMAK</b>	Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov

<b>K</b>	Constante da equação de Avrami
<b>N</b>	Expoente de Avrami
$dV_V$	Diferença entre fração recristalizada entre tempo anterior e tempo seguinte
$V_V$	Fração volumétrica
$V_{Vex}$	Fração de volume estendido
$dt$	Intervalo de tempo
$S_V$	Quantidade de área interfacial entre material recristalizado e não recristalizado por unidade de volume
$S_{Vex}$	Quantidade de área interfacial estendida entre material recristalizado e não recristalizado por unidade de volume
$I_0$	Taxa de nucleação constante
$\dot{N}$	Taxa de nucleação variada
<b>C e q</b>	constante da equação do caminho microestrutural
<b>C<sub>R</sub></b>	Contigüidade
<b>r</b>	Constante que determina o perfil da velocidade decrescente em função do tempo
<b>P</b>	Parâmetro que varia de acordo com a mobilidade do contorno
<b>R<sup>2</sup></b>	Coefficiente de correlação

## RESUMO

A cinética de recristalização tem sido analisada freqüentemente com auxílio da teoria de Johnson, Mehl, Avrami e Kolmogorov (teoria JMAK). O modelo analítico de JMAK utiliza algumas suposições para a descrição do fenômeno de recristalização, tais como: velocidade constante e uniforme de avanços das interfaces, distribuição aleatória dos núcleos dentro da matriz e núcleos com formatos esféricos. Na prática essas considerações nem sempre são verdadeiras. Ciente disto Vandermeer e Rath desenvolveram uma metodologia para estudar a cinética de recristalização, em reações com interfaces com velocidade variadas. Todavia, o modelo analítico de Vandermeer e Rath ainda utilizava as suposições de que a velocidade era uniforme, os núcleos estavam distribuídos aleatoriamente dentro da matriz e com formatos esféricos. Neste trabalho foram avaliadas situações consideradas pelas teorias de JMAK e Vandermeer. Outras situações nas quais as teorias analíticas são escassas também foram estudadas, tais como: estudo do efeito não aleatório, e da heterogeneidade de energia armazenada na matriz. Além dos dois estudos citados acima também foram feitos estudos do aspecto geométrico e do comportamento evolutivo de grãos individuais, e do efeito da taxa de nucleação utilizada durante a recristalização. Todos os estudos foram realizados a partir de resultados de simulações computacionais, utilizando-se o método do autômato celular e/ou resultados experimentais obtidos da literatura. O código do autômato celular foi desenvolvido para simular a recristalização, entretanto, pode ser adaptada para qualquer reação de nucleação e crescimento.

## ABSTRACT

The recrystallization kinetics has frequently been analyzed with aid of the theory of Johnson, Mehl, Avrami and Kolmogorov (theory JMAK). The analytic model of JMAK uses some suppositions for the description of the recrystallization phenomenon, such as: constant and uniform velocity of progresses of the interfaces, random distribution of the nuclei inside of the matrix and nuclei with spherical shapes. In practice those considerations not always they are true. Aware of this Vandermeer and Rath developed a methodology to study the recrystallization kinetics, in reactions with interfaces with varied speed. Though, the analytic model of Vandermeer and Rath still used the supposition that the velocity was uniform, the nuclei were distributed randomly inside of the matrix and with spherical shapes. In this work they were appraised situations considered by the theories of JMAK and Vandermeer. Other situations in which the analytic theories are scarce were also studied such as: I study from the effect to the random, and of the heterogeneity of energy stored at the matrix. Besides the two studies mentioned above they were also made studies of the geometric aspect and of the evolutionary behavior of individual grains, and of the effect of the rate of nucleation of the constant nucleation. All the studies were accomplished starting from results of the computational simulations, being used the cellular automata's method and experimental results obtained in the literature. The cellular automata's code was developed to simulate the recrystallization, however it can be adapted for any nucleation reaction and growth.

## **1.0 INTRODUÇÃO**

No ano de 2003 foi financiado pela FAPERJ, um projeto para criação do Núcleo de Modelamento Microestrutural (NMM). Teve como uma das principais finalidades, a utilização do método do Autômato Celular (A.C.) para simular evoluções microestruturais. O coordenador do projeto foi o Prof. Paulo Rangel Rios Ph.D e os colaboradores, Alexandre José da Silva, Dr.Ing, André Luiz V.C. Silva, Ph.D, Jayme Gouvêa, D.C. e João Luiz Lopes Rezende, Dr.Ing. Além dos integrantes citados acima atualmente o grupo é composto pelos seguintes participantes: Flávio Ferreira D.C., José Adilson de Castro Ph.D, Jeferson Fabrício Linz D.Sc, Augusto César Lacerda M.Sc, Gláucio Soares da Fonseca M.Sc, Márcia Regina Baldissera M.Sc.e Wesley Luiz da Silva Assis. O método do A.C. é de grande generalidade e encontra várias aplicações na física, química, biologia, computação e processamento de imagens, dentre outras. Uma caracterização detalhada do A.C. foi dada por Wolfram <sup>[1,2]</sup> Na revisão bibliográfica será apresentada uma breve introdução a este assunto. A opção pela técnica do autômato celular foi oportuna, pois contou com o auxílio do Dr. João Luiz Lopes Resende da Vallourec Mannesman, que utilizou o método do autômato celular em sua tese de Doutorado desenvolvida na Alemanha.

A implementação do código A.C. pelo grupo NMM teve como objetivo específico, estudar a evolução da microestrutura durante a recristalização utilizando-se a técnica do autômato celular. O objetivo geral do projeto foi iniciar as atividades do Núcleo de Modelamento Microestrutural. O objetivo final é a utilização desta técnica para modelar a evolução microestrutural que ocorrem em diversas situações da metalurgia física e transformação de fase. Algumas dessas situações são: recristalização, crescimento de grão, reações no estado sólido, solidificação dentre outras.

Em 2004 a técnica foi implementada e validada para estudar a cinética de recristalização em duas dimensões. Daí em diante iniciou-se uma série de trabalhos utilizando-se o método do A.C. O primeiro trabalho foi a dissertação de mestrado escrita por Janaina de Torres Oliveira <sup>[3]</sup>, trabalho este que deu origem a alguns artigos <sup>[4,5]</sup> em revista e congressos anais de evento.

Em 2005, Valmir Torres de Oliveira estendeu o código computacional para três dimensões. Com os dados extraídos do novo código de simulação da recristalização, foram escritos uma dissertação de mestrado <sup>[6]</sup>, três trabalhos internacionais <sup>[7,8,9]</sup> e uma publicação em congresso nacional <sup>[10]</sup>. Tanto o código em duas como em três dimensões apresentam grande confiabilidade nos resultados, pois, foram validados utilizando-se a clássica teoria de cinética formal de JMAK <sup>[11,12,13,14]</sup>. A teoria JMAK se baseia nos modelos matematicamente exatos que corrigem os cálculos de evolução dos grãos quando eles se chocam dentro da matriz. Esta teoria tem sido utilizada como uma forma de apresentar o perfil da cinética de recristalização. Sua fundamentação física se baseia em algumas suposições, como:

- Formato dos núcleos aproximadamente esféricos;
- Velocidade de crescimento constante e uniforme;
- Núcleos localizados aleatoriamente dentro da matriz;

Quando comparado aos resultados simulados o modelo JMAK apresenta uma ótima concordância. Tais concordâncias puderam ser obtidas porque, a evolução que ocorre durante a simulação pelo método do A.C. modelada por Oliveira <sup>[10]</sup>, tem as mesmas características fenomenológicas do modelo JMAK.

Este trabalho utiliza um código do A.C. desenvolvido para simular reações de nucleação e crescimento. O mesmo foi adaptado para simular a evolução microestrutural durante a recristalização primária. O trabalho atual que será apresentado ao decorrer desta dissertação, trata-se da inserção de novas considerações ao código de Oliveira <sup>[10]</sup>, para aproximar as características do fenômeno simulado ao fenômeno real. Estas foram inclusas para simular alguns efeitos reais que ocorrem durante o processo de recristalização, tais como: nucleação constante durante a reação, velocidade decrescente de avanço das interfaces e heterogeneidade de energia dentro da matriz deformada. Este trabalho visa a recristalização, mas pode ser adaptado para qualquer outro tipo de reação de nucleação e crescimento. Novas validações serão feitas para aumentar a confiabilidade do modelo computacional. Aspectos

geométricos e evoluções de grãos individuais não são levados em consideração, quando se estuda a recristalização com auxílio da teoria JMAK.

Neste trabalho, além de estudar os aspectos geométricos dos grãos individuais, será apresentada uma nova maneira de estudar a recristalização simulada pelo método do autômato celular. Alguns resultados obtidos por meio de simulação computacional serão comparados com os resultados experimentais encontrados na literatura. O estudo atual em questão leva em consideração alguns efeitos que acontecem no fenômeno real, tais como: nucleação constante velocidade decrescente de avanço das interfaces e gradiente de deformação dentro da matriz encruada. Com a implementação da nova técnica para estudar a recristalização, o trabalho tem como objetivo principal aproximar ainda mais os resultados do fenômeno simulado ao fenômeno real. Um segundo objetivo é assemelhar também a física do problema real ao simulado, e assim seguir as novas tendências de trabalhos científicos que utilizam simulação computacional para descrever fenômenos físicos..

## 2.0 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1 AUTÔMATOS CELULARES

No final da década de 40, o mundo vivenciou uma explosão no desenvolvimento de novas tecnologias, dentre as quais a computação teve um grande destaque. A partir deste momento, surgiram novas técnicas e a esperança de ser possível a modelagem matemática de fenômenos complexos. No início dos anos 50, John von Neumann <sup>[15]</sup> criou uma série de instruções de auto-reprodução, os Autômatos Celulares.

Os autômatos celulares são simulações computacionais que tentam emular a suposta maneira pelas quais as leis da natureza funcionam. Eles retratam a natureza de uma maneira grosseira, porém podem dar uma idéia razoável de como é um mundo governado por regras mais simples <sup>[16, 17, 18]</sup>. A utilização dos Autômatos Celulares como conjunto de regras locais, gera um comportamento emergente surpreendentemente organizado.

Uma automação celular computacional é um sistema dinâmico, onde o tempo e o espaço são discretos. O sistema é dividido em células com geometria idêntica para toda vizinhança. Tais células possuem um conjunto finito de estados predefinidos e um conjunto de condições necessárias para a mudança de estados. Os estados das células são alterados conforme as regras de transição utilizadas, que são específicas para cada caso. Estas regras determinam o estado de uma célula em função de seu estado anterior e do estado de suas células vizinhas. O número de vizinhos considerado pela regra de transição quando ligado aos estados determina a evolução local do autômato.

Por exemplo, na recristalização se um dos vizinhos da célula analisada está recristalizado, então, a célula se torna recristalizada também no próximo tempo. O autômato celular trabalha em passos de tempo e volume discretos.

### 2.1.1 Classificação de Classes

Os A.Cs. foram classificados por Wolfram <sup>[2]</sup> em quatro classes com base nos padrões espaço-temporal gerados por sua evolução:

**Classe I** – Estado homogêneo nos quais todas as células atingem um mesmo valor.

**Classe II** – Estado estável e periódico no tempo e espacialmente não homogêneo, ou seja, no qual nem todas as células possuem o mesmo valor.

**Classe III** – Estado desordenado, não possuindo um padrão reconhecível.

**Classe IV** – A evolução no tempo leva o A.C. a gerar estruturas complexas com evolução imprevisível, que podem se propagar, criar e/ou destruir outras estruturas. Esta evolução pode terminar após tempos relativamente longos.

### 2.1.2 Funcionamento dos Autômatos Celulares

Segundo Chávez <sup>[19]</sup>, os Autômatos Celulares apresentam três características fundamentais:

- 1) Paralelismo (os estados dos elementos são atualizados simultaneamente);
- 2) Localidade (o novo estado de uma célula é determinado pelo seu estado anterior e pelo estado dos vizinhos);
- 3) Homogeneidade (todas as células aplicam as mesmas regras de evolução em relação aos vizinhos).

### 2.1.3 Especificações na Construção de um Sistema Autômato Celular

Ao se aplicar um sistema de autômatos celulares a um dado problema, é preciso especificar o sistema em relação a alguns pontos básicos, como, por exemplo, a geometria do sistema, quais serão os vizinhos de uma dada célula, etc.

A seguir, é apresentada uma breve explicação dos principais pontos na implementação de um sistema autômato celular.

#### 2.1.3.1 Geometria

Para um sistema de autômatos celulares, é necessário que se tenha uma geometria regular. A geometria do sistema pode ser classificada quanto a dois pontos: a dimensão e o formato da célula. A seguir, encontram-se os tipos mais frequentes de cada aspecto.

#### 2.1.3.2 Dimensão

Existem autômatos celulares de uma, duas ou três dimensões. No autômato unidimensional, as células estão distribuídas linearmente. No bidimensional, a forma apresentada é de uma distribuição no plano e no tridimensional, uma distribuição com altura, profundidade e largura.

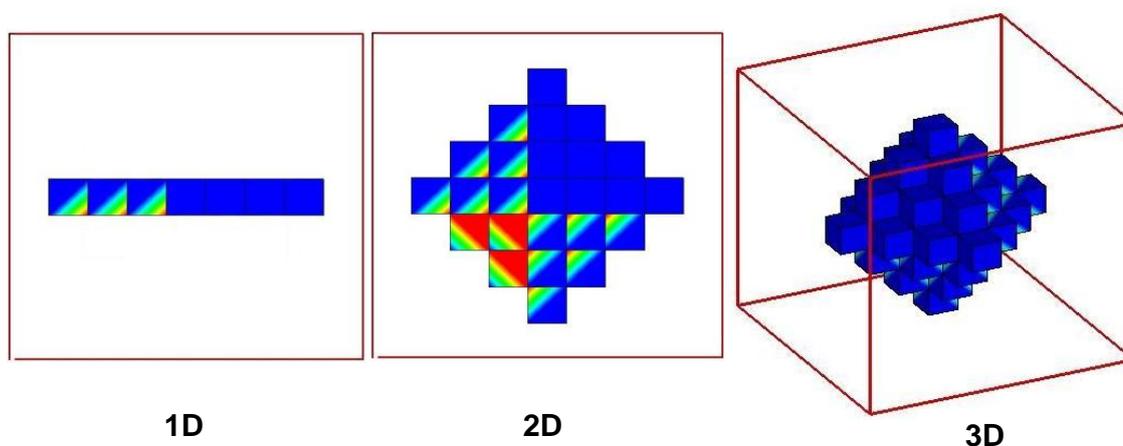


Figura 2.1 - Esquemas de autômatos em diferentes dimensões, linear 1D, em duas dimensões 2D e em três dimensões 3D.

### 2.1.3.3 *Formato da célula*

As células podem ser de várias formas (triangular, quadrangular, hexagonal e etc.), desde que num mesmo autômato todas as células sejam de uma mesma forma.

Demonstração ilustrativa de malhas com alguns formatos de células distintos em duas dimensões:

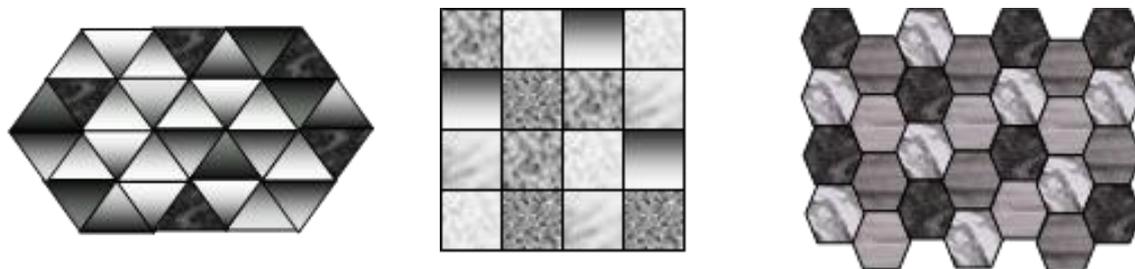


Figura 2.2 - Três tipos de vizinhanças distintas para a malha do autômato celular: vizinhanças triangulares, vizinhanças quadradas e vizinhanças hexagonais respectivamente para as três ilustrações acima.

### 2.1.3.4 *Tipo de Vizinhança*

É necessário também especificar quais serão os vizinhos de uma célula, pois as regras de transição serão aplicadas baseadas nos estados deles e da própria célula. Há algumas formas de vizinhança que seguem uma lógica ou regra (von Neumann e Moore) e existem formas que são arbitrárias. Na figura abaixo, as células de cinza escuro estão representando as vizinhas da célula preta. ( $r$  é o raio máximo da vizinhança)

### von Neumann

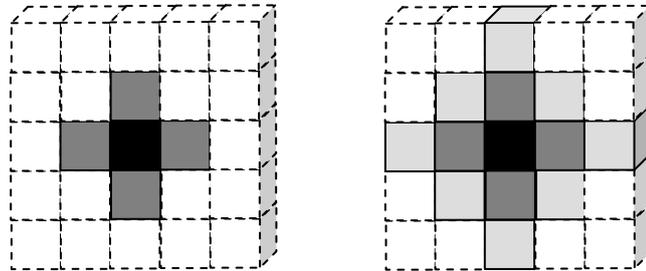


Figura 2.3 - Representa a evolução das células do autômato em função do tempo, sendo tempo igual a  $t+1$  e  $t+2$  respectivamente para as ilustrações, e ambas para vizinhanças de von Neumann

### Moore

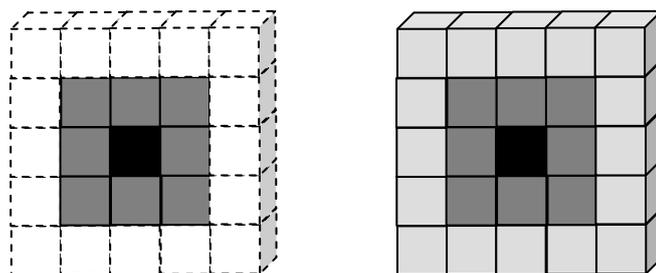


Figura 2.4 - representa a evolução das células do autômato em função do tempo, sendo tempo igual a  $t+1$  e  $t+2$  respectivamente para as ilustrações, e ambas para vizinhanças de Moore.

### Arbitrária

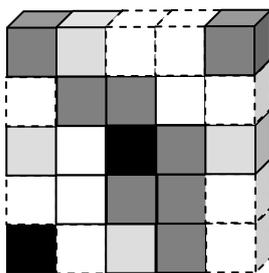


Figura 2.5 - representa a evolução das células do autômato em função do tempo, sendo tempo igual a  $t+2$  para vizinhanças arbitrárias.

#### 2.1.4 Regras de Transição

Para implementação de um sistema autômato celular, a mais importante especificação do sistema é a regra de transição, pois, é como foi especificada a tabela de transição que fará com que o sistema evolua de um modo ou de outro. De acordo com a finalidade, as regras de transição devem estar o mais próximo possível da realidade. Para definir a regra de transição dos A.C. deve-se levar em consideração: a geometria da célula, dimensão da malha, tipo de vizinhança e taxa de transição.

Tais regras de transição são baseadas no estado atual da célula e de suas vizinhas. É válido ressaltar que os estados são alterados ao mesmo tempo para todas as células. Por exemplo, o estado da célula  $c_i$  no tempo  $t$ , depende apenas do seu estado e dos estados das células vizinhas no tempo  $t-1$ . As vizinhanças das células são definidas local e uniformemente (se uma célula tem  $n$  vizinhos, todas as células terão).

Um exemplo simples seria a propagação de um pulso numa corda. Dividimos a corda em segmentos, que chamaremos de células. Para uma célula sofrer alteração no seu estado, ou seja, para um pulso ser propagado, é preciso que algum de seus vizinhos seja alterado (ou excitado) no tempo anterior. Defini-se assim que, os vizinhos de cada célula como, as mais imediatamente à direita e à esquerda, então, se definem um conjunto de duas regras básicas de transição:

- Se uma célula está excitada no tempo  $t$ , ela continuará excitada no tempo  $t+1$ .

- Se uma célula não está excitada no tempo  $t$ , ela ficará no tempo  $t+1$  se pelo menos um vizinho seu está excitado no tempo  $t$ .

O conjunto destas regras consiste no que se chama de função de transição ( $f$ ). Portanto a função de transição depende dos estados da própria célula e de suas vizinhas.

Abaixo há um esquemático deste exemplo, onde é demonstrado como funciona a transição de estados das células.

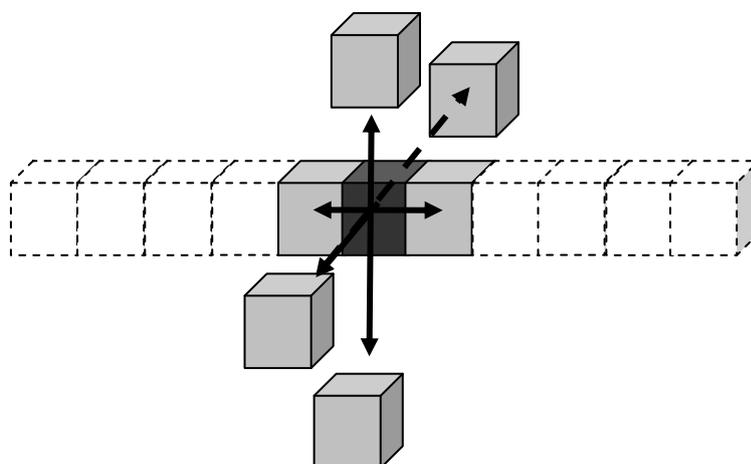


Figura 2.6 - Esquema da regra de transição para um sistema dinâmico de automação celular em 3D com 6 vizinhos

**Legenda:**



Célula no estado excitado no instante inicial (Tempo=1)



Células excitadas por um de seus vizinhos excitado (Tempo=2)



Células que serão excitadas nos próximos instantes (Tempo=t+n)



Representa a função de transição para vizinhanças

#### **2.1.4.1      *Velocidade de transição***

Um fator muito importante durante a simulação é a velocidade de transição. A velocidade de transição de um estado para outro depende do fenômeno físico simulado. Existem fenômenos simulados com velocidade constante de evolução das células, e outros com velocidade variada de transição. A simulação desses dois casos é feita utilizando-se o conceito de determinismo e ou probabilismo de transição celular. Autômatos celulares determinísticos seguem apenas os fatores citados acima para a definição da regra de transição. Todos os núcleos evoluem da mesma forma. Em algumas situações pode-se associar a cada configuração de vizinhança diferentes saídas da função de transição, atribuindo probabilidades a essas funções de transição. Ou seja, para uma dada configuração dos vizinhos, uma célula pode partir para um ou outro estado com uma probabilidade definida. AC probabilísticos possuem um fator probabilidade de transição para atingir o novo estado da célula no tempo seguinte.

#### **2.1.4.2      *Condições de Contorno (ou limite da malha)***

Geralmente há necessidade que o autômato seja infinito em todas as dimensões, contudo é impossível que isso seja implementado em um computador (por limitação de espaço e de memória), então precisamos determinar condições de limite para que possamos simular um autômato infinito. Estas condições de limite indicam como o autômato se encontra além do seu limite. Estas condições são também necessárias para completar o conjunto de vizinhos das células que se encontram nas bordas da malha do autômato.

Por exemplo: as células que se encontram na extremidade esquerda não terão vizinhos à sua esquerda. A condição de limite irá justamente simular o comportamento daquelas células que na verdade não existem.

Há vários tipos de condições de limite, das quais serão citadas três delas:

### a) Limite periódico

São obtidos periodicamente estendendo-se o autômato. É como se autômato fosse copiado nas bordas, da maneira como ele se encontra num dado instante. Para um ganho de tempo e memória, não se precisa colocar a malha inteira, basta colocar um pedaço dela (que são as  $r$  colunas ou  $r$  linhas mais próximas, e  $r$  é o raio da vizinhança).



Figura 2.7 - Esquema de um autômato unidimensional com raio de vizinhança 1 e condição de contorno periódica.

### b) Limite reflexivo

Esta condição de contorno é obtida refletindo-se o autômato em cada limite.

Esquema de um autômato unidimensional com raio de vizinhança 2 e condição de contorno reflexiva:

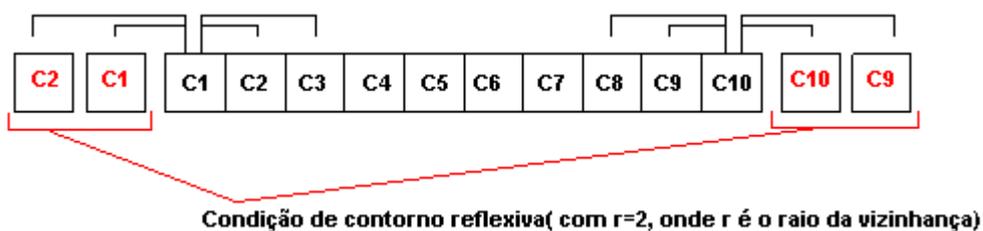


Figura 2.8 - Esquema de um autômato unidimensional com raio de vizinhança 1 e condição de contorno de limite reflexivo

### c) Limites de valores fixos

Esta condição de limite é obtida simplesmente descrevendo como serão os estados das células no contorno do autômato, e estes estados serão os mesmos em qualquer instante da simulação. Por exemplo, se um autômato tem dois estados possíveis para uma célula, CINZA e BRANCO, é possível determinar uma condição de limite onde todas as células no contorno são BRANCAS, como se vê na figura abaixo.



Figura 2.9 - Esquema de um autômato unidimensional com raio de vizinhança 1 e condição de contorno de limite de valores fixos.

### d) Condições Iniciais

Um outro ponto importante na implementação de um sistema de autômatos celulares é a condição em que o sistema se encontra no tempo inicial ( $t_0$ ). Dependendo de como o sistema seja iniciado, diferentes evoluções são obtidas. Dependendo do caso, podem ser obtidos padrões que permanecem constantes indeterminadamente, que se anulam, ou que permanecem num estado aparentemente aleatório.

## 2.2 APLICAÇÕES DE SISTEMAS DE AUTÔMATOS CELULARES

Sistemas de autômatos celulares têm aplicações muito interessantes na simulação de situações reais. Ex.: A simulação do sistema de tráfego dentro de cidades ou ainda a propagação de incêndio em florestas. No setor militar foi apresentada recentemente uma nova utilização para o código computacional A.C. Desenvolveram uma modelagem de comportamentos de manobra para agentes autônomos simularem a movimentação de soldados

em um terreno. Esta simulação é baseada em algumas regras simplificadas de combate, e de pedestres em uma região urbana, fundamentado em alguns resultados empíricos referidos na literatura [20].

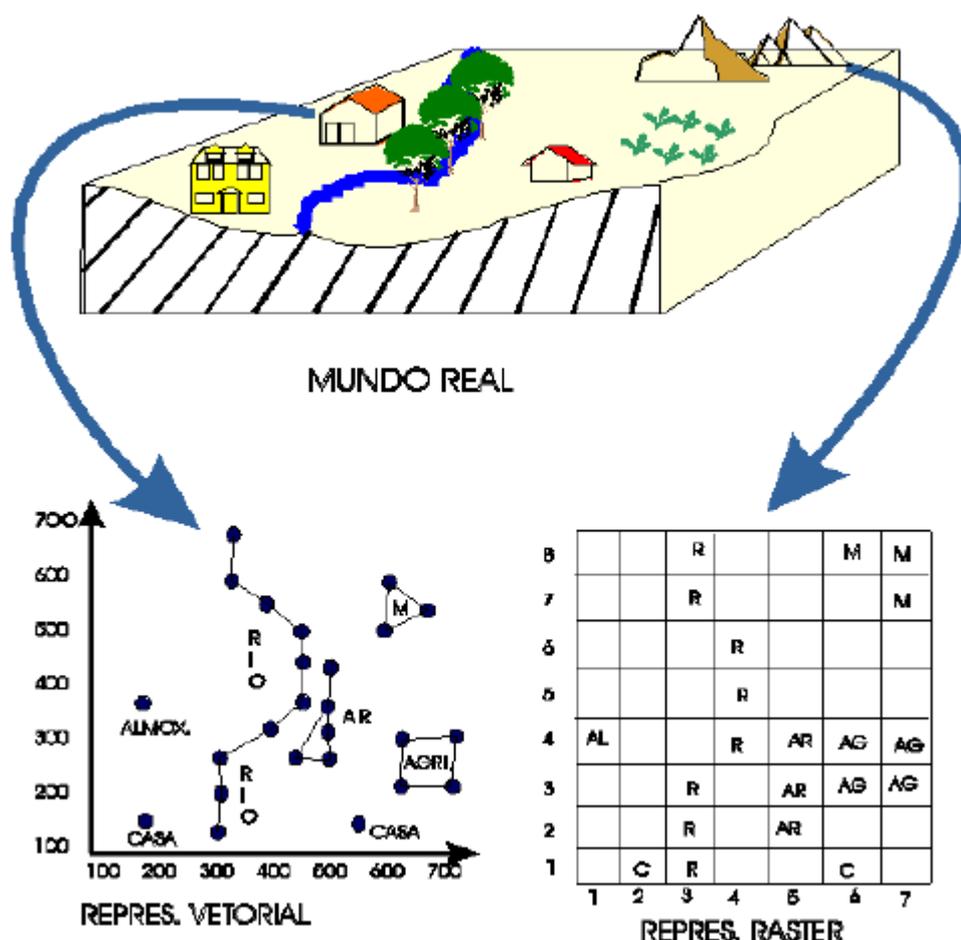


Figura 2.10 - Representação do espaço geográfico pelo método dos SIGs (Sistemas de Informação Geográfica), espaço real discreto em duas formas diferentes: Vetorial e Raster [20].

Assim como nos outros exemplos citados, a propagação de uma onda sobre uma superfície líquida evolui com o passar do tempo. A propagação de ondas através da utilização do método da Matriz de Transmissão (Transmission Line Matrix – T.L.M.) é uma forma de Automação Celular.

Outra utilidade dos autômatos celulares consiste na simulação de vida em sistemas artificiais uma população de determinada espécie vivendo dentro de um mundo real pode ser reproduzida no mundo virtual dos A.C. como exemplo, pode-se pensar na simulação do

desenvolvimento de um conglomerado de bactérias num tecido humano ou ainda o desenvolvimento de uma espécie numa determinada área. Outro exemplo de simulação em que o A.C. pode ser empregado é, em sociedades extremamente desenvolvidas como de formigas

Uma formiga individualmente é uma criatura simples que pode desempenhar em média 40 funções específicas, (como cavar, bloquear o sol, criar caminhos, entre outros) que quando executadas no tempo correto, em grupo, operam maravilhas, demonstrando como um conjunto de regras simples pode resolver problemas complexos (como encontrar o menor caminho entre um conjunto de pontos). Outras formigas a vêem trabalhar e se juntam a ela, imitando-a, onde o mesmo padrão de comportamento é transmitido através do grupo e podem ser observados em simulações de vida artificial. [21]

Um ramo muito importante também da utilização dos autômatos celulares, diz respeito à geração e ao processamento de imagens por computador. Há quem acredite que em cinco anos, não será possível assistir televisão por mais de uma hora sem se ver uma imagem gerada por um sistema autômato celular.



Figura 2.11 - O padrão gerado por um autômato de Classe III é similar a pigmentação de certas conchas marinhas encontradas na natureza [22], a primeira imagem representa a simulação computacional e a segunda é encontrada na natureza.

## 2.3 AUTÔMATOS CELULARES APLICADOS À METALURGIA

Com o advento da informatização, a simulação computacional de processos macro e microestruturais tem sido um ótimo recurso para prever resultados importantes para metalurgia. A simulação tem ajudado na contenção de desperdícios, agilidade de execução de tarefas, exatidão de resultados e etc. Programas de computador por si só não são auto-suficientes em termos de dados e confiabilidade de resultados. Sempre é amparada por equações matemáticas ou resultados experimentais. A comparação com os casos reais ou com equações analiticamente exatas, são formas de validação dos códigos implementados para emular os fenômenos estudados.

Na metalurgia os A.Cs. são geralmente utilizados para simular fenômenos microestruturais que evoluem em função do tempo. E em alguns casos, como em nano materiais, não existem equipamentos com precisão suficiente para a medição ou visualização de quantidades que são muito pequenas. As precisões instrumentais ainda não alcançaram uma resolução a ponto de distinguir ruídos de dados significativos em algumas escalas de nano matérias. Este é um exemplo em que a simulação computacional tem um papel fundamental nos progressos da metalurgia e da ciência dos materiais. A seguir serão exemplificadas algumas outras utilizações dos A.Cs. na engenharia metalúrgica e na engenharia de materiais.

Autômatos em três dimensões são propostos para modelar o crescimento de grãos dendríticos em metais na fase líquida. Estes algoritmos de crescimento com A.Cs. são validados para situações térmicas simples comparando as formas previstas de grão com as deduzidas em modelos analíticos. Os resultados obtidos pela aproximação em três dimensões são demonstrados estudando a extensão de um único grão dendrítico sob várias circunstâncias. Em detalhes os efeitos da orientação cristalográfica, o gradiente térmico, a velocidade das isoterms e as cinéticas de crescimento são fornecidas na saída de dados do programa. Este algoritmo de crescimento em três dimensões do A.C., acoplado aos cálculos de elemento finitos do fluxo de calor, transformar-se-á em uma ferramenta fundamental para a predição de estruturas de grãos dendríticos em processos de solidificação. <sup>[23]</sup>

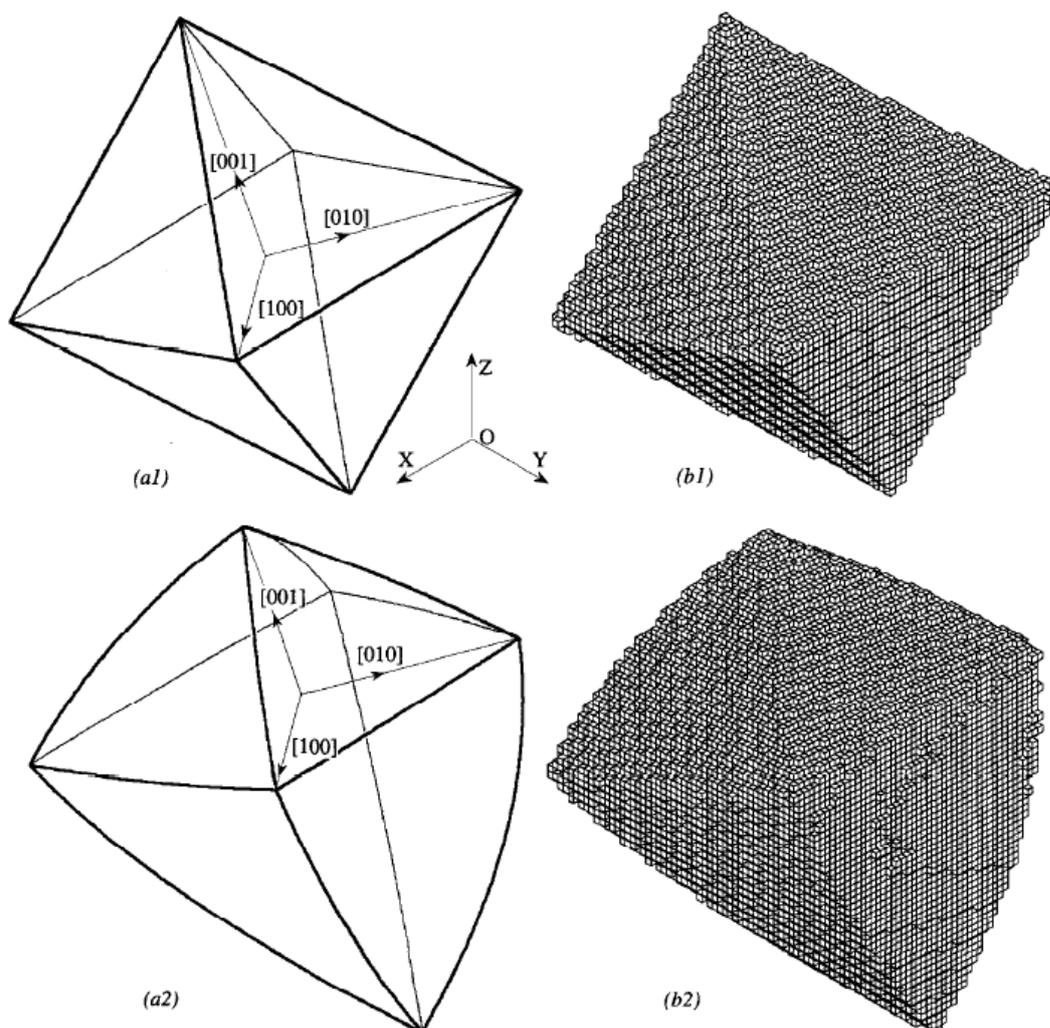


Figura 2.12 - As figuras representam dois tipos diferentes de crescimento: a1) e b1) crescem com formato tradicional de células com vizinhança de von Neumann; a2) e b3) crescem com formato dendrítico para vizinhança de von Neumann <sup>[23]</sup>

Autômatos celulares, elementos finitos e as experiências de Bridgman foram utilizados para estudar o refinamento de grão do magnésio direcional solidificado de Al-4.15 wt%. As simulações podem com sucesso traçar as condições (gradiente da velocidade e da temperatura) colunar ou equiaxial. As simulações mostram o crescimento e variações no tamanho dos grãos equiaxiais dentro das estruturas. As simulações mostram também que o calor latente liberado pela solidificação de grãos dendríticos apresentam uma zona quase isotérmica que interrompe o gradiente da temperatura. Esta zona é importante para limitar o grau de refinamento de grão que pode ser conseguido. De colunar para equiaxial a transição é gradual, e sua dependência do nível da adição do refino pode ser caracterizada. <sup>[24]</sup>

Uma extensão da técnica dos autômatos celulares para modelar evolução microestrutural pode ser apresentada, permitindo a simulação da evolução da morfologia tridimensional complexa da porosidade durante a solidificação de uma liga de alumínio-silício. A complexidade da morfologia é devido a limitação do crescimento dos poros pela fase contínua. O modelo prediz as propriedades médias da porosidade dependendo da forma, junto com a distribuição no tamanho e da morfologia. O modelo é usado para determinar a influência de uma variedade de circunstâncias aplicadas (por exemplo: pressão, índice térmico do hidrogênio) e de propriedades materiais (comportamento da nucleação, composição da liga) em cima da morfologia do poro, caracterizada pelas dimensões médias e extremas. O valor relativo do efeito de cada parâmetro e as interações entre parâmetros em cima da porosidade é analisado estatisticamente. O tamanho simulado do poro mostra maior sensibilidade à pressão, a altos índices de hidrogênio e a grandes tempos aplicados da solidificação, junto com interações entre o tempo de solidificação e pressão. Estes resultados encontram bons acordos com comportamento experimental relatado na literatura <sup>[25]</sup>

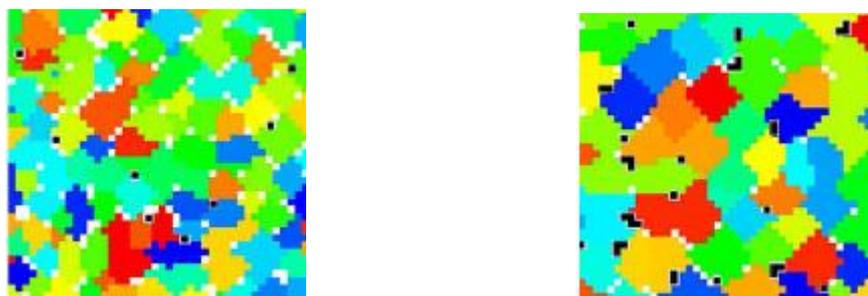


Figura 2.13 - As imagens representam a formação e a evolução dos poros respectivamente durante um processo de solidificação <sup>[25]</sup>.

### 2.3.1 A.C. Aplicado à Transformações por Nucleação e Crescimento

Um modelo autômato celular em três dimensões foi desenvolvido para ilustrar a evolução e o crescimento radial acoplado para uma malha bifásica. O crescimento acoplado ocorre em vários tipos de transformação de fase em materiais. As microestruturas resultantes podem significativamente influenciar nas propriedades finais. O modelo simula a redistribuição das fases e a difusão que ocorre durante uma transformação e o estabelecimento do crescimento acoplado de uma fase na outra.

As simulações computacionais bidimensionais baseadas no algoritmo do autômato celular foram realizadas para estudar um tipo de recristalização em uma matriz que contém partículas inertes, imóveis. Uma escala de frações das áreas das partículas, dos tamanhos e as relações de forma foram investigadas sob circunstâncias contínuas de nucleação e crescimento do grão. Supõe-se que o efeito das partículas está limitado apenas ao contato entre os grãos recristalizados. As partículas influenciam na cinética total da recristalização e as características geométricas da estrutura recristalizada do grão.

Os desvios sistemáticos das previsões da teoria de Kolmogorov, Johnson, Mehl e Avrami, (JMAK) para a recristalização de uma matriz livre de partículas são observados com fração crescente da relação de aspecto da partícula. Estes desvios não são preditos por supor que o efeito do choque de partículas inertes é equivalente àqueles de grãos não crescentes. As partículas inertes influenciam também no tamanho médio e na cinética dos grãos recristalizados <sup>[26,27]</sup>.

Uma aproximação dos resultados de textura de recristalização pode ser predita por simulação com A.C. Uma revisão de modelos da textura de recristalização demonstra que aproximações clássicas, assim como nos modelos atuais podem somente explicar texturas medidas, mas falha para predizê-las confiantemente. Com estudos de alguns casos, é demonstrado que há interdependência de uma lei correta do crescimento e núcleos não aleatórios. Entretanto, sem investigações mais profundas nestes processos microestruturais fundamentais, uma predição quantitativa da textura é limitada para apenas aproximar, não importa o quanto sofisticado seja o método usado <sup>[28]</sup>.

### **2.3.2 Autômato Celular Aplicado à Recristalização**

Os pioneiros na utilização da técnica dos autômatos celulares aplicados à recristalização/transformação de fase por nucleação e crescimento foram Hesselbarth e Göbel <sup>[29]</sup>, e Goetz e Seetharaman <sup>[30]</sup>. Foram consideradas duas suposições para o processo de nucleação, que são:

**Saturação de sítios:** Todo evento de nucleação ocorre no primeiro instante ( $t=0$ ) do processo e a seguir somente o crescimento dos grãos é admitido.

**Nucleação constante:** Em cada passo de tempo, um número finito de núcleos, é distribuído sobre a matriz (malha). Essa nucleação permanece com uma taxa constante até o final da simulação. Nos dois processos de nucleação ocorrem crescimentos com velocidade constante. A velocidade é constante e igual para todos os núcleos até que os grãos começam a interferir uns com os outros. Esse fenômeno é metalurgicamente conhecido como interferência ou “*impingement*” e faz parte do modelo discreto.

A simulação da recristalização ou de uma transformação de fase por nucleação e crescimento é realizada seguindo a base do código implementado por Hesselbarth e Göbel <sup>[29]</sup>. Todos os dados fornecidos ao fim da simulação computacional são adimensionais. Entretanto a comparação quantitativa da simulação com expressões analíticas é possível. Os dados são fornecidos em termos de fração em função do tempo de transição de estado da célula. As grandezas obtidas ao fim da simulação são: fração volumétrica, fração de área interfacial entre grãos transformados por unidade de volume, fração de área interfacial entre grãos transformados e não transformados por unidade de volume, quantidade de núcleos iniciais por unidade de volume, quantidade de núcleos que surgem por unidade de tempo. O tempo é contado em cada atualização da matriz, iniciando-se no tempo igual a zero. A matriz é atualizada após a checagem de todas as células que possuem condições de crescimento. Assim são determinados os novos estados da matriz sucessivamente até o final da simulação.

Apresentada como uma vantagem a aproximação de JMAK, o modelo do autômato celular dá a descrição dependente do tempo e do espaço do processo de recristalização. Ele não é restrito a suposições de valores estatísticos médios e a processos homogêneos. Além da taxa de energia liberada dependente do tempo, um modelo de grãos recristalizados dependente do espaço é produzido, tal que o processo pode ser descrito completamente.

Os modelos dos autômatos celulares só se tornaram ferramentas mais simples e fácil para a descrição de processos físicos, à medida que forem aumentando a utilização dos computadores e seus recursos.

### 2.3.3 Estrutura do Modelo Aplicado à Recristalização

A programação foi escrita em linguagem FORTRAN 90/95 no ambiente Compaq Visual Fortran<sup>®</sup> para Windows<sup>®</sup>. O método computacional A.C. do trabalho em questão, utiliza os seguintes critérios como função da regra de transição: malha em três dimensões, células cúbicas, vizinhança de von Neumann, condições de contorno periódicas.

**Malha em três dimensões:** As matrizes (grid ou malha) utilizadas durante as simulações em três dimensões são orientadas nos eixos x, y, e z.

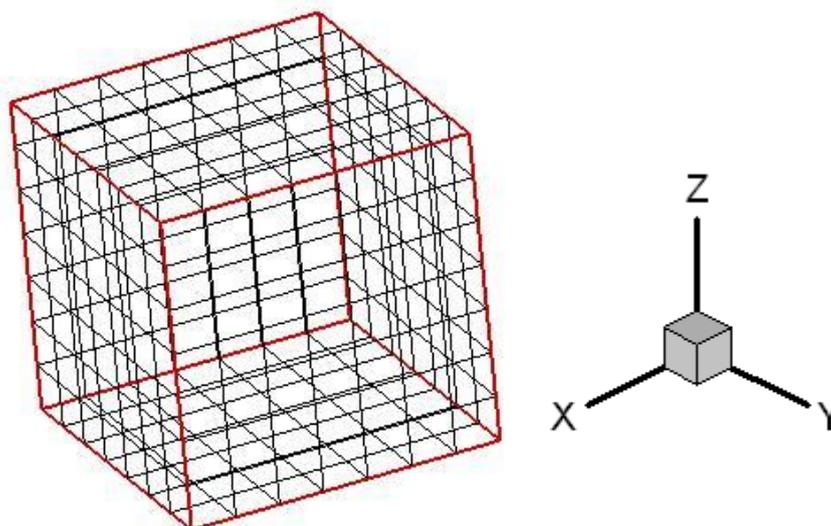


Figura 2.14 - Representação gráfica do espaço discreto (malha) aonde ocorrem as evoluções durante a simulação da recristalização em três dimensões.

**Células cúbicas:** A menor unidade da malha é a célula, e tem sua forma geométrica igual a de um cubo quando representada graficamente. Cada cubo representa uma unidade de volume para a simulação. Todos os cubos juntos e devidamente ordenados formam a matriz com espaços discretos.



Figura 2.15. - Representação gráfica da geometria de uma célula isolada antes da ocorrência da primeira evolução (menor unidade de volume discreto).

**Vizinhança de von Neumann:** Em três dimensões é utilizado von Neumann como critério de vizinhança. Os seis vizinhos para cada face representam a evolução aproximada de um grão em função do tempo.

A definição da vizinhança e da regra de transição são consideradas como variáveis adaptáveis ao programa de acordo com o fenômeno estudado. Elas são usadas para a adaptação do modelo a diferentes tipos de comportamentos da recristalização ou de outras transformações por nucleação e crescimento. Antes dos grãos começarem a tocar uns aos outros, a forma do grão depende apenas do tipo de vizinhança adotado.

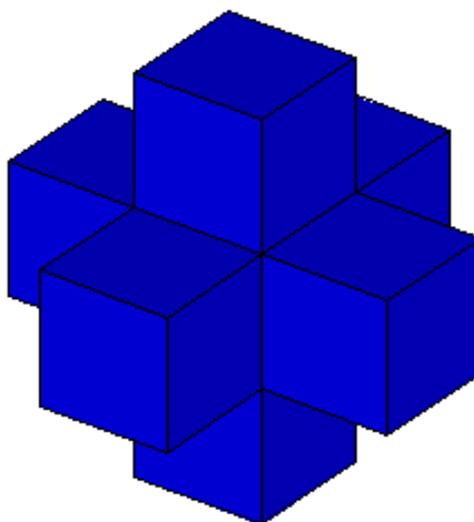


Figura 2.16 - Representação gráfica da geometria da célula inicial com os seus seis vizinhos após ocorrer a primeira evolução para vizinhança de von Neumann

**Condições de contorno periódicas:** A face não é limite de crescimento dos grãos, eles podem continuar crescendo na face oposta até encontrarem outro grão. Na figura 2.17 observa-se claramente o funcionamento da condição de contorno periódica explicada em uma seção anterior. Com uma breve observação na figura abaixo, serão esclarecidas as dúvidas sobre o comentário feito no início deste parágrafo. Repare que a continuidade de uma das faces é a face do lado oposto.

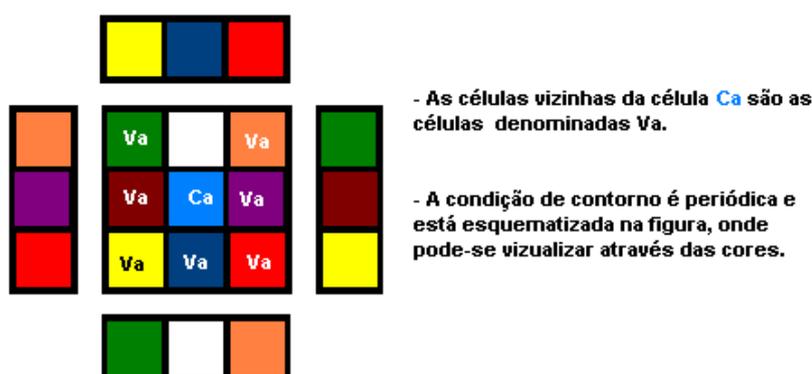


Figura 2.17 - Condição de contorno periódica representada com células coloridas (a continuidade da malha é sempre o seu lado oposto).

**Velocidade de crescimento:** A velocidade de transformação depende em grande parte das regras de transição. No modelo da recristalização, a transição de uma célula do estado não recristalizado para o estado recristalizado pode ser iniciada pelo surgimento de um grão embrião. Uma célula não recristalizada é escolhida aleatoriamente ou não, e é transformada em uma célula recristalizada. Após a nucleação (surgimento do grão embrião), o crescimento do mesmo é simulado pela regra de transição adotada até completar a recristalização.

Crescimentos com velocidade constante acontecem quando são utilizados A.Cs. determinísticos durante a simulação. Todos os núcleos têm velocidade de crescimento, volumes e formas geométricas idênticas até que ocorra interferência dos grãos vizinhos.

Velocidades variadas de avanço das interfaces transformadas, geralmente são simuladas introduzindo-se uma probabilidade de transformação junto à regra de transição. Além de seguir ao fator vizinhança transformada para ocorrer novas transformações, tem-se também uma probabilidade sobre esse fator. Sendo assim, se existir uma célula não

transformada próximo a um vizinho transformado, no próximo tempo ela não se transformará impreterivelmente como antes, e sim provavelmente. Essa mudança de estado dependerá de uma probabilidade, que pode aumentar ou diminuir em função de alguma das variáveis da simulação.

A disposição espacial dos núcleos é feita de acordo com o caso estudado. Os núcleos podem ser alocados na matriz de três formas diferentes: aleatoriamente, periodicamente, ou em grupos. Na nucleação aleatória, é feito um sorteio utilizando-se um código de gerador de números aleatórios para FORTRAN 90/95. Este gerador escolhe aleatoriamente números que correspondem a posições dentro da matriz. O posicionamento aleatório permite a comparação da simulação computacional com fórmulas analíticas exatas do modelo JMAK. O exemplo da disposição aleatória dos núcleos dentro da matriz está demonstrado na figura abaixo.

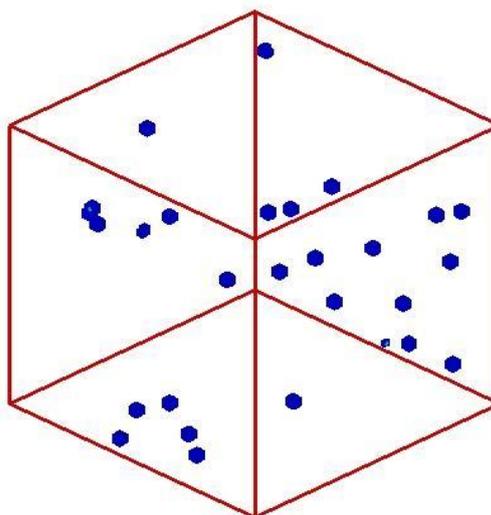


Figura 2.18 - Representação gráfica de uma matriz discreta com nucleação posicionados aleatória no início da simulação.

Quando o caso simulado é de nucleação periódica, os núcleos ficam alocados periodicamente dentro da matriz e equidistantes uns dos outros. Essa disposição dá um espaçamento perfeito para o crescimento dos núcleos.

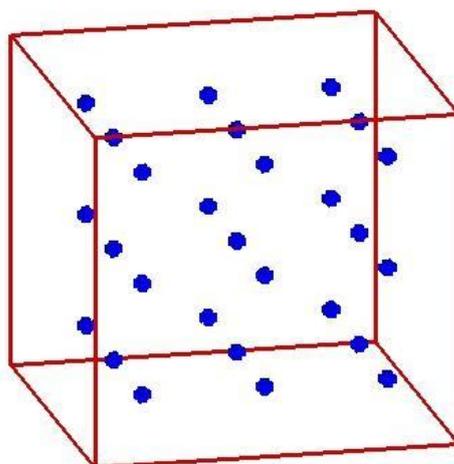


Figura 2.19 - Representação gráfica de uma matriz discreta com nucleação posicionados periódica no início da simulação.

Em uma matriz com nucleação periódica, se todas as interfaces tiverem a mesma velocidade de avanço, todos os grãos se encontrarão simultaneamente. Sendo assim, os grãos no final da simulação têm tamanhos idênticos, como mostra a figura abaixo.

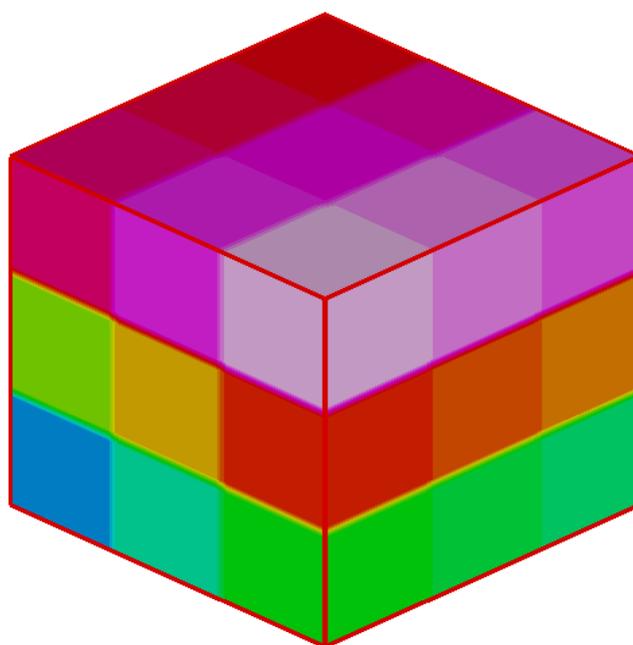


Figura 2.20 - Representação gráfica de uma matriz com nucleação periódica que atingiu 100% de recristalização no final da simulação.

Por último apresenta-se a nucleação em grupos ou “*clusters*”. Os núcleos ficam dispostos uns próximos aos outros formando grupos ou aglomerado de núcleos. A quantidade de núcleos por grupo é fixada e predefinida na entrada de dados do programa. Sendo assim todos os *clusters* tem a mesma quantidade de núcleos e ficam dispostos aleatoriamente na matriz como mostra a figura a seguir.

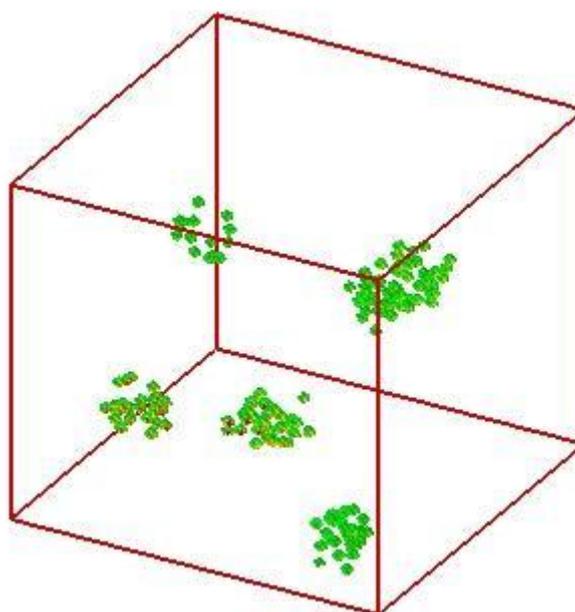


Figura 2.21 Representação gráfica de uma matriz discreta com nucleação em grupos no início da simulação.

Atualmente alguns autores como Rios, Hesselbarth e Göbel têm utilizado o autômato celular em recristalização para estudar efeitos cinéticos e geométricos durante reações que possuem comportamentos ideais. Transformações ideais, ou seja, isentas de fatores que interfiram ou impeçam a nucleação e ou o avanço das interfaces, geralmente possuem modelos matematicamente exatos para descrevê-las. Este é um fator que serve como grande atrativo para simulação computacional. Descrições analiticamente exatas tem sido de grande utilidade nas validações de códigos computacionais. Na maioria das vezes são idealizados para emular as leis da natureza de uma maneira mais simplificada assim como os modelos matemáticos.

Nas próximas seções desse trabalho serão apresentados o desenvolvimento e a utilização de códigos computacionais que tem por objetivo se aproximarem um pouco mais da fenomenologia física real. Foram desenvolvidas sub-rotinas para: comparar a evolução individual de cada grão simulado com a evolução real; simular o efeito de nucleação constante até o fim da reação; simular o fator velocidade decrescente das interfaces transformadas e por fim simular a decorrência da distribuição de energia dentro da matriz.

## 2.4 MODELAMENTO MATEMÁTICO PARA VELOCIDADE CONSTANTE

### 2.4.1 A Teoria JMAK

O primeiro passo da teoria de JMAK é modelar a nucleação e o crescimento dos grãos recristalizados individualmente como se eles crescessem independentemente um do outro. O volume total recristalizado obtido neste caminho é muito maior do que o volume real recristalizado e, é conhecido como volume estendido,  $V_{VE}$ . Esta quantidade é geralmente dividida pelo volume total resultando numa fração volumétrica estendida,  $V_{VE}$ , que é a soma dos volumes de todos os grãos individuais supondo que os mesmos cresçam sem interferência.

Para calcular  $V_{VE}$  é necessário definir a taxa de nucleação, a forma e a taxa de crescimento dos grãos estendidos.

O segundo passo da teoria consiste em relacionar a fração volumétrica estendida,  $V_{VE}$ , à fração volumétrica real,  $V_V$ . Isto pode ser feito com uma relação geométrica matematicamente exata, para uma distribuição espacial aleatória dos núcleos, visto a seguir:

$$V_V = 1 - \exp(-V_{VE}) \quad (2.0)$$

ou

$$V_V = 1 - \exp(-kt^n) \quad (2.1)$$

Onde  $k$  e  $n$  são constantes. Esta equação é freqüentemente denominada de equação de JMAK.

### 2.4.2 Metodologia do Caminho Microestrutural

Analisando a Figura 2.22 que mostra esquematicamente a fração recristalizada em etapa intermediária de recristalização, pode-se ver que existem dois tipos de interfaces: entre regiões recristalizadas e deformadas (colorido/azul), e entre duas regiões recristalizadas (colorido/colorido). 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 unidade de volume são representadas por  $S_{VR}$ .

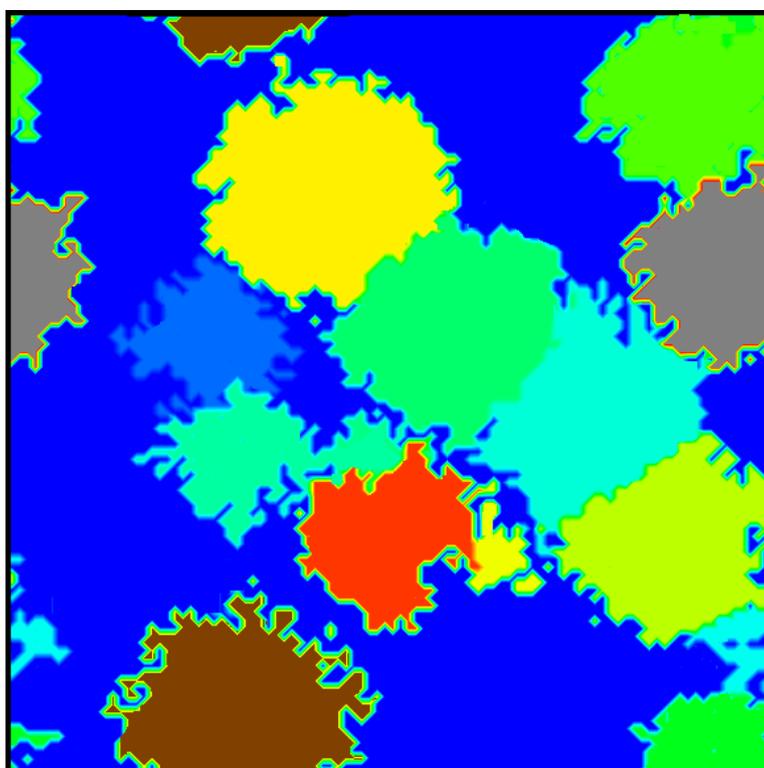


Figura 2.22 - Representação esquemática da etapa intermediária da recristalização. As áreas coloridas representam regiões recristalizadas e as áreas azuis representam regiões não recristalizadas.

A microestrutura é caracterizada pela área interfacial por unidade de volume entre o material recristalizado e não recristalizado,  $S_V$ , que é relacionada com a área interfacial estendida,  $S_{VE}$ , pela expressão de DeHoff<sup>[31]</sup> a seguir:

$$S_{VE} = \frac{S_V}{1 - V_V} \quad (2.2)$$

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

## 2.5 MODELAMENTO MATEMÁTICO PARA VELOCIDADE VARIADA

Segundo Vandermeer e Massumura <sup>[32]</sup> núcleos surgem durante o período da nucleação da matriz deformada, predominantemente nas regiões de maior instabilidade energética. A nucleação constante tem sido assiduamente descrita em termos analíticos pela seguinte equação:

$$\dot{N} = N_1 \cdot t^{\delta-1} \quad (2.3)$$

A diminuição da velocidade de crescimento em função do tempo ou da fração volumétrica recristalizada tem sido detectada experimentalmente com grande frequência. Gráficos de velocidades contra tempo de transformação de materiais que amolecem significativamente por recuperação tais como: alumínio <sup>[33]</sup>, ferro <sup>[34]</sup>, níquel <sup>[35]</sup>, possuem o perfil da equação abaixo.

$$G = r \cdot P \cdot t^{r-1} \quad (2.4)$$

Segundo Rios e Padilha <sup>[36]</sup> decréscimo da velocidade de avanço das interfaces das regiões transformadas durante a recristalização, se dá basicamente em função de dois fatores: da concorrência entre a recuperação e a própria recristalização que acontecem simultaneamente, e da diferença entre os gradientes de energia armazenada entre regiões deformadas.

Onde  $t$  é o tempo total da reação de transformação e  $N_1$ ,  $P$  e  $q$  são constantes,  $\dot{N}$  é a taxa de nucleação e  $G$  é velocidade de crescimento ou velocidade de avanço das interfaces.

O volume e a área interfacial para formas esferoidais e que mantêm a forma durante o crescimento pode ser calculado por:

$$V_{(t-\tau)} = K_r \cdot a^3_{(t-\tau)} \quad (2.5)$$

$$S_{(t-\tau)} = K_s \cdot a^2_{(t-\tau)} \quad (2.6)$$

$K_V$  e  $K_S$  são fatores de forma e dependem da excentricidade de  $a_{(t-\tau)}$  que podem ser calculado com seguinte integral.

$$a_{(t-\tau)} = \int_{\tau_0}^t G \cdot dt \quad (2.7)$$

Para uma nucleação constante o volume estendido pode ser dado por:

$$V_{vex} = \int_0^t \dot{N}(\tau) \cdot V_{(t-\tau)} d\tau \quad (2.8)$$

Por analogia calcula-se a área das interfaces estendidas por unidade de volume da região estendida:

$$S_{vex} = \int_0^t \dot{N}(\tau) \cdot S_{(t-\tau)} d\tau \quad (2.9)$$

Onde  $\dot{N}(\tau)$  é o número de grãos por unidade de tempo por unidade de volume no intervalo de tempo entre  $\tau$  e  $\tau + d\tau$ .

A partir do espaço estendido calcula-se a fração transformada real por unidade de volume e a área interfacial real por unidade de volume da seguinte forma.

$$V_V = -\exp(-V_{VEX}) \quad (2.10)$$

$$S_V = (1 - V_V) \cdot S_{VEX} \quad (2.11)$$

Vale lembrar que a utilização dessas equações é válida apenas quando existir nucleação com disposição aleatória dos núcleos dentro da matriz.

Com a substituição da equação (2.4) na equação (2.7), obtêm-se uma nova expressão, após a substituição, resolve-se a equação obtida por integração e introduz-se a resposta da integração nas equações (2.5) e (2.6) para encontrar os valores de  $V_{(t-\tau)}$ ,  $S_{(t-\tau)}$  respectivamente, posteriormente essas quantidades devem ser inseridas nas equações (2.8) e (2.9).

Finalmente por Transformada de Laplace obtêm-se o resultado abaixo:

$$V_{VEX} = K_V N_1 P^3 \Gamma(x) t^{3r+\delta} \quad (2.12)$$

$$S_{VEX} = K_S N_1 P^2 \Gamma(s) t^{2r+\delta} \quad (2.13)$$

Onde

$$\Gamma(x) = \Gamma(3r+1) \cdot \frac{\Gamma(\delta)}{\Gamma(3r+\delta+1)} \quad (2.14)$$

e

$$\Gamma(s) = \Gamma(2r+1) \cdot \frac{\Gamma(\delta)}{\Gamma(3r+\delta+1)} \quad (2.15)$$

e  $\delta$  podendo assumir valores  $\geq 0$

A taxa de nucleação aumenta quando  $\delta > 1$ , enquanto, a mesma decresce quando os valores de  $\delta$  estão entre zero e um.

Quando  $\delta$  assume o valor zero ( $\delta=0$ ), tem-se uma situação especial chamada saturação de sítios. Nesse caso todos os núcleos aparecem simultaneamente no início da transformação  $t=0$ .

No caso citado acima quando  $\delta = 0$ ,  $\Gamma(x)$  e  $\Gamma(s)$  são iguais a 1 e  $N_1$  é renomeado para  $N_0$  ou número total de núcleos por unidade de volume. O parâmetro  $r$  está associado com o módulo de crescimento, valores negativos de “ $r$ ” representam uma redução ou recuo de uma fase em relação a uma outra. Para crescimentos com velocidade constante de avanço de interfaces observa-se que  $r=1$  enquanto que para um crescimento parabólico o valor de  $r$  é  $\frac{1}{2}$  ( $r=0,5$ ). Crescimentos com velocidade acelerada têm valores de  $r$  arbitrário, por esse motivo o estudo de  $r$  está limitado para valores entre 0 e 1.

Segundo Vandermeer e Rath <sup>[37]</sup> o caminho microestrutural pode ser dado através de variáveis de espaço estendido, que são obtidas pelas equações (2.12) e (2.13) por eliminação do tempo. Sendo assim, reescrevendo a equação (2.12) em termos de  $t$  e inserindo na equação (2.13) obtêm-se a equação abaixo:

$$S_{VEX} = C \cdot (V_{VEX})^q \quad (2.16)$$

$$q = \frac{2r + \delta}{3r + \delta} \quad (2.17)$$

A partir das equações acima é possível deduzir equações literais para prever a constante  $C$  para cada caso de nucleação. Essas equações podem se referir á nucleação constante ou por saturação de sítios, e até para um caso genérico onde o tipo de nucleação é desconhecido.

Equação que determina a constante  $C$  para nucleação constante.

$$C = K_s K_v^{-q} P^{2-3q} N_1^{-1-q} \Gamma(s) \Gamma(x)^{-q} \quad (2.18)$$

Equação que determina a constante  $C$  para nucleação por saturação de sítios.

$$C = \left( \frac{K_s^3}{K_v^2} N_1 \right)^{1/3} \quad (2.19)$$

Equação geral para determinação do parâmetro C quando os parâmetros  $\delta$  e  $r$  são desconhecidos.

$$C = \frac{K_S P^2 N_1 \Gamma(s)}{\left(K_V P^3 N_1 \Gamma(x)\right)^{\frac{2r+\delta}{3r+\delta}}} \quad (2.20)$$

O caminho microestrutural é calculado sob algumas considerações onde  $K_V$ ,  $K_S$ ,  $P$ ,  $N_1$ ,  $r$ ,  $\delta$  e  $C$  são constantes.

Convertendo o espaço estendido em espaço real utilizando as equações (11) e (12) temos:

$$S_V = C(1 - V_V) \cdot \left( \ln \frac{1}{1 - V_V} \right)^q \quad (2.21)$$

A equação 2.21 sugere uma maneira diferente de apresentar dados experimentais. Assim sendo, se  $S/(1 - V)$  é traçado contra  $\ln[1/(1 - V_V)]$  em um gráfico de escala logarítmica, a inclinação da reta representa o parâmetro  $q$ .

### **3.0 METODOLOGIA**

Para o desenvolvimento deste trabalho, foram adotados os seguintes procedimentos:

Foram inseridas 4 rotinas novas no programa base, cada uma com funções distintas e específicas. A primeira foi elaborada para calcular o volume de cada grão durante o evento reacional. O volume de cada grão é recalculado em cada tempo, desde sua nucleação até a reação alcançar 100% de fração volumétrica transformada. O método de calcular o volume dos grãos individualmente foi utilizado no estudo da evolução de grãos individuais e distribuição de tamanhos finais pelo método do autômato celular.

A segunda rotina inserida é utilizada para simular a evolução microestrutural durante uma reação em uma matriz com nucleação constante. A nucleação acontece simultaneamente com o crescimento, ou seja, alguns núcleos possuem tempos de incubação maiores e outros menores. Esta sub-rotina foi inclusa para auxiliar no estudo do efeito da taxa de nucleação adotada durante a reação de recristalização. A terceira rotina simula o decréscimo de velocidade das interfaces recristalizadas durante a transformação. É como se acontecesse uma queda global e homogênea do potencial energético durante transformação. A terceira sub-rotina foi utilizada no estudo do efeito do tipo de nucleação e da velocidade de crescimento dos grãos. A quarta e última foi elaborada para simular o efeito da energia armazenada na matriz de maneira não homogênea. Especificamente esta rotina foi elaborada para criar uma matriz onde ocorreu uma deformação forma de gradiente. Conseqüentemente essa deformação gera níveis crescentes energia armazenada dentro da matriz. Esta energia fica dividida em camadas. A ultima sub-rotina foi utilizada como auxílio nos estudos do efeito do gradiente de deformação dentro da matriz e efeito do nível de energia armazenada no gradiente de deformação dentro da matriz. Todas essas rotinas foram acopladas ao programa principal, sendo assim, serão tratadas como sub-rotina 1, sub-rotina 2, sub-rotina 3 e sub-rotina 4, respectivamente, ao decorrer deste trabalho. As sub-rotinas 2 e 3 serão validadas por meio de

modelos analíticos matematicamente exatos. A validação dos resultados das sub-rotinas 1 e 4 serão realizadas por meio de comparação qualitativa com resultados experimentais. A comparação qualitativa é necessária, pois, as grandezas fornecidas pela simulação computacional são todas adimensionais.

Exemplo: o tempo de reação é contado a cada atualização da matriz para um novo estado (crescimento discreto) da célula transformada. Iniciando-se do tempo zero, no qual ainda não ocorreu nenhum crescimento até o final da simulação. Cada célula somada ao núcleo inicial tem uma unidade de volume.

Para a realização das simulações computacionais foram utilizados os seguintes recursos: computador com dois processadores físicos Xeon<sup>®</sup> 3.20 GHz 64 bits, memória Ram de 8Gb e HD de 160Gb em sistema operacional Windows XP x64 Edition<sup>®</sup>. A utilização deste equipamento proporcionou um ganho de aproximadamente 30% em velocidade de processamento em relação a um Pentium<sup>®</sup> 4 2.6 GHz 32 bits. O desenvolvimento do código foi realizado em ambiente de programação do software comercial Compaq Visual Fortran<sup>®</sup> versão 6.1. O método empregado foi o dos Autômatos Celulares determinísticos com vizinhança de von Neumann, seguindo a implementação base Hesselbarth H.W. e Göbel e as alterações posteriores de Rios e Oliveira <sup>[6]</sup>.

O código foi escrito em linguagem FORTRAN 90/95, utilizando a teoria básica do autômato celular. O programa foi escrito estruturadamente, o mesmo foi dividido em rotinas como é demonstrado a seguir:

- ◆ *Módulo*: contém a definição de todas variáveis globais utilizadas pelo código.
- ◆ *Principal*: essa sub-rotina é dividida em três sub-rotinas: pré-processamento, processamento e pós-processamento.
- ◆ *Pré-processamento*: nessa sub-rotina as condições iniciais (entrada de dados) são introduzidas no sistema. A partir da leitura dos dados iniciais a malha é gerada e são definidos todos os vizinhos de cada célula.
- ◆ *Processamento*: essa sub-rotina é responsável pela nucleação e crescimento da recristalização ou evolução microestrutural, na qual todos os dados são gerados.
- ◆ *Pós-processamento*: a partir dos dados gerados na sub-rotina de processamento, todos os arquivos gráficos de saída de dados são gerados para posterior interpretação.

As três sub-rotinas abaixo fazem parte da rotina *processamento*:

- ◆ Volume de Grão: Esta sub-rotina conta o volume de cada grão individualmente desde o início até o final da reação.
- ◆ Nucleação Constante à Taxa Constante: Esta sub-rotina simula o efeito da contínua nucleação durante o crescimento dos grãos até se completar 100% de fração recristalizada.
- ◆ Velocidade Variada: Simula a redução de velocidade de crescimento das interfaces em função do tempo de reação.
- ◆ Energia: Aloca níveis de energia para cada região da matriz e simula o efeito de evolução com seus diferentes níveis.

A seguir serão apresentadas descrições detalhadas sobre os procedimentos adotados durante as simulações e os estudos dos 6 casos distintos. Nos dois primeiros caso foram utilizados A.C. de classe I. Os sítios evoluem de maneira idêntica, de modo que todas as células assumem o mesmo valor em todos os tempos, até que eles comecem a se encontra dentro da matriz. No estudo 3.3 e 3.4 foram utilizados A.C. de classe III, porque a probabilidade faz com que o próximo estado da célula seja desconhecido, porque a célula pode transformar ou não nos tempos seguintes. E por fim, nos dois últimos estudos foram utilizados A.C. classe II, já que o tempo é uma variável periódica e o volume é uma variável que depende tanto do tempo quanto da quantidade de energia armazenada na matriz. Resumindo, nem todas as células têm o mesmo valor em relação aos seus volumes.

### **3.1 ESTUDO DA EVOLUÇÃO DE GRÃOS INDIVIDUAIS E DISTRIBUIÇÃO DE TAMANHOS FINAIS PELO MÉTODO DO AUTÔMATO CELULAR**

Primeiramente, foi simulada a evolução de apenas um grão isolado dentro da matriz. Para estudar o crescimento sem interferências “*impingement*”, foi realizada uma alteração no código para identificar as paredes da malha como se fossem grãos vizinhos. Foi programado para cessar o avanço da interface do grão quando a mesma encontrasse com seus pseudo-grãos vizinhos (paredes da malha). Para que houvesse um maior tempo de reação, e evitar o encontro precoce do grão com seus pseudo-vizinhos, o núcleo foi posicionado no centro da matriz. Após saber como se comporta um grão evoluindo isoladamente dentro da matriz,

realizou-se uma segunda simulação da evolução microestrutural dos grãos em uma recristalização. Esta segunda simulação será descrita a seguir.

### 3.1.1 Descrição da Simulação

Durante a simulação computacional foram utilizados os seguintes parâmetros como dados de entrada: matriz em três dimensões implementada por Rios et al <sup>[10]</sup> com dimensões de  $150^3$ ; quantidade de núcleos total igual a 125; nucleação por saturação de sítios; disposição aleatória dos núcleos dentro da matriz e velocidade constante de avanço das interfaces.

- ◆ Algumas suposições foram adotadas para o desenvolvimento do código computacional A.C.:
- ◆ Potencial termodinâmico da estrutura é constante durante a reação (inexistência de recuperação);
- ◆ Homogeneidade de deformação dentro da matriz (material isento de maclas e bandas de deformação);
- ◆ Material isotrópico e isento de impurezas e partículas;
- ◆ Não existe textura
- ◆ Inexistência de coalescimento dos grãos.

Além dessas considerações, foram adotadas também as suposições da teoria JMAK que consiste em:

- ◆ Avanço constante das superfícies transformadas;
- ◆ Núcleos aproximadamente esféricos;
- ◆ Disposição aleatória dos núcleos dentro da matriz deformada.

A simulação computacional fornece dados individuais de volume de cada núcleo dentro da matriz, porém, nem todos os dados foram utilizados nesse trabalho. Esta análise baseia-se em trabalhos experimentais, na qual apenas alguns núcleos de uma matriz são observados durante a evolução microestrutural.

Para uma reprodução de resultados mais aceitáveis, foram seguidos passos semelhantes aos experimentais durante a simulação e elaboração gráfica. Sortearam-se 10

núcleos aleatoriamente dentro da malha e acompanhou-se a evolução de cada grão em função do tempo. Ao fim da simulação, foram extraídos os volumes de cada grão individualmente em cada tempo de atualização da matriz. Com os volumes obtidos, calculou-se o raio equivalente ao raio da esfera para cada grão. O crescimento dos núcleos e a cinética para o processo inteiro são traçados com  $R_{(t)}$  e com a taxa  $dR/dt$ . Para maior confiabilidade dos resultados, após o término da simulação, foram feitos cálculos de distribuição de tamanho final de todos os grãos da matriz. Outros gráficos foram feitos para descrever a evolução de cada grão.

Os dados experimentais foram obtidos por meio da literatura <sup>[38]</sup> e as medidas foram realizadas no Laboratório Nacional Risø, localizado na Dinamarca. O material analisado foi um alumínio 90% deformado a frio. Durante o experimento, a amostra foi recozida à 270°C e teve seis grãos escolhidos aleatoriamente para investigação do aspecto evolutivo.

### 3.1.2 Descrição Analítica do A.C. em 3D

#### 3.1.2.1 Geometria e Cinética da Evolução de um Único Grão

Simulando a evolução de um único grão numa matriz deformada, é possível encontrar uma expressão analítica para a evolução geométrica e cinética da transformação. A expressão analítica é obtida em função da geometria do autômato celular utilizado neste trabalho, para distribuição aleatória por saturação de sítios e vizinhança de von Neumann. Quando  $t = 0$ , a fração transformada,  $V_v$ , também será igual a zero, ou seja,  $V_v = 0$ . Portanto o volume,  $V$ , e a área interfacial,  $S$ , em  $t = 0$ , serão iguais a:

$$V(0)=0 \quad (3.1)$$

$$S(0)=0 \quad (3.2)$$

Da simulação temos que o volume de um único grão em função do tempo é obtido pelo número total de células transformadas em cada passo de tempo, pois cada célula tem uma unidade de volume. Assim sendo, é construído um gráfico da evolução do volume em função do tempo e para  $t \geq 1$ , um polinômio de 3º grau é perfeitamente ajustado, conforme é visto na figura 3.1.

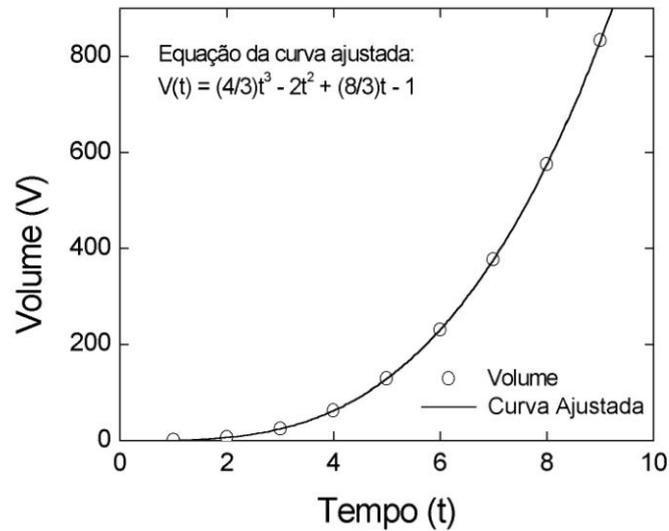


Figura 3.1 - Evolução do volume,  $V$ , em função do tempo,  $t$ , para um único grão sem que haja nenhuma interferência no crescimento.

Esse polinômio ajustado é a expressão que descreve a evolução do volume em função do tempo para  $t \geq 1$  de um único grão:

$$V(t) = \frac{4}{3}t^3 - 2t^2 + \frac{8}{3}t - 1 \quad (3.3)$$

A equação 3.3 não é válida para  $t = 0$ , e negligenciando os termos de potência do tempo menor do que três, tem-se:

$$V(t) \cong \frac{4}{3}t^3 \text{ (unidades de volume)} \quad (3.4)$$

Esta consideração pode ser feita porque, a medida que o tempo tende a infinito, os termos com grau menor que dois passam a ter significâncias desprezíveis quando comparados ao de grau três.

Sabendo-se que cada célula equivale a um cubo regular de aresta igual a uma unidade de comprimento, deduz-se que a área da face de cada célula do autômato celular equivalerá a uma unidade de área. Dessa forma, é possível obter da simulação pelo método do A.C. em três dimensões, a evolução da área interfacial entre o grão transformado e a matriz deformada de um único grão em função do tempo. Na figura 3.2 os dados da evolução da área em função

do tempo são graficados, e um polinômio de 2º grau é perfeitamente ajustado. Esse polinômio é a expressão que descreve a evolução da área em função do tempo, para  $t \geq 1$ .

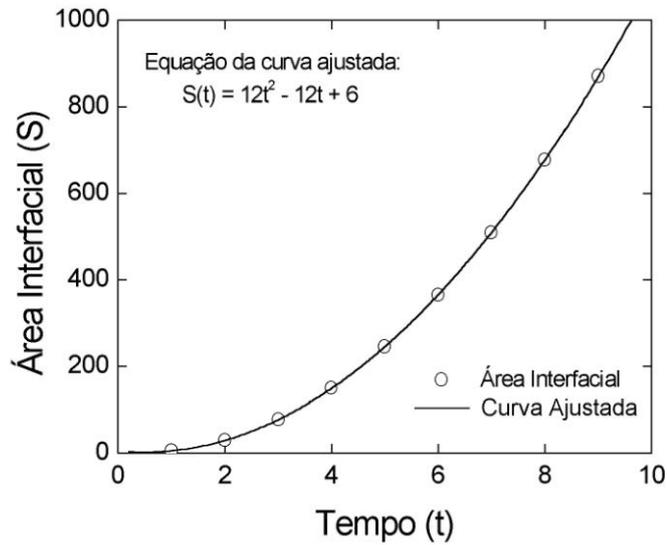


Figura 3.2 - Evolução da área interfacial entre a região transformada e a matriz deformada, em função do tempo,  $t$ , para um único grão sem que haja nenhuma interferência no crescimento.

Portanto, a área interfacial de um único grão será:

$$S(t) = 12t^2 - 12t + 6 \quad (3.5)$$

Novamente, negligenciando os termos de menor potência do tempo, tem-se:

$$S(t) \cong 12t^2 \text{ (unidades de área)} \quad (3.6)$$

A velocidade da interface,  $G$ , pode ser calculada utilizando a equação proposta por Cahn e Hagel<sup>[39]</sup> para três dimensões, que é:

$$G = \frac{1}{S} \frac{dV}{dt} \quad (3.7)$$

Utilizando a equação 3.4 e 3.6, a velocidade da interface de um único grão para o autômato celular em três dimensões, é calculada a seguir:

$$G = \frac{1}{3} = 0,333 \quad (3.8)$$

A velocidade da interface é uma constante, portanto, para um único grão a simulação foi capaz de produzir uma taxa de crescimento constante exatamente igual ao calculado.

### **3.2 ESTUDO DO EFEITO DA TAXA DE NUCLEAÇÃO ADOTADA DURANTE A REAÇÃO DE RECRISTALIZAÇÃO.**

O código foi elaborado para simular o efeito da nucleação constante durante a evolução microestrutural. Dessa forma, os núcleos se formam e crescem constantemente dentro da matriz deformada. A forma de aparecimento dos núcleos ocasiona a taxa de nucleação, que permanece constante até o fim da simulação. Abaixo segue uma explicação formal sobre taxa de nucleação constante.

Taxa de Nucleação Constante: número de núcleos formados por unidade de tempo por unidade de volume total da matriz e é denominado por  $I_0$ .

Foram adotadas duas taxas diferentes de nucleação  $I_0 = 2$  na primeira simulação e  $I_0 = 5$  na segunda simulação.

#### **3.2.1 Descrição Analítica da Cinética**

##### **3.2.1.1 Evolução da Fração Volumétrica**

Para que a equação de JMAK seja utilizada neste trabalho, é necessário conhecer a fração volumétrica estendida,  $V_{VE}$ , para o tipo de nucleação considerada.

Para a nucleação com taxa constante é necessário analisar o número de núcleos durante certo intervalo de tempo. Multiplica-se o número de núcleos por unidade de tempo por unidade de volume,  $I_0$ , pela equação 3.4, a partir da qual se obtém a fração volumétrica estendida para taxa constante de nucleação:

$$V_{VE} = I_0 v^3$$

$$V_{VE} = \frac{4}{3} I_0 t$$

$$dV_{VE} = \frac{4}{3} I_0 (t - \tau)^3 d\tau$$

$$\int_0^{V_{VE}} dV_{VE} = \int_0^t \frac{4}{3} I_0 (t - \tau)^3 d\tau$$

$$V_{VE} = \frac{1}{3} I_0 t^4 \quad (3.9)$$

Para nucleação aleatória, obtém-se uma relação entre a fração volumétrica estendida,  $V_{VE}$ , com a fração volumétrica real,  $V_V$ , conforme a expressão de JMAK:

$$V_V = 1 - \exp\left(-\frac{1}{3} I_0 t^3\right) \quad (3.10)$$

A Equação 3.10 corresponde à nucleação à taxa constante.

### 3.2.1.2 *Evolução da Área Interfacial dos Grãos*

Utilizando o mesmo raciocínio da fração transformada, pode-se dizer que área interfacial estendida entre regiões transformadas e não transformadas,  $S_{VE}$ , é a soma da área interfacial de todos os grãos individuais supondo que os mesmos cresçam sem interferência.

De maneira análoga a obtenção do  $V_{VE}$ , a área interfacial estendida por unidade de volume,  $S_{VE}$ , para taxa constante de nucleação pode ser extraída da integração à seguir:

$$S_{VE} = 12I_0 t^2$$

$$dS_{VE} = 12I_0 (t - \tau)^2 d\tau$$

$$\int_0^{S_{VE}} dS_{VE} = \int_0^t 12I_0 (t - \tau)^2 d\tau$$

$$S_{VE} = 4I_0 t^3 \quad (3.11)$$

A área interfacial estendida,  $S_{VE}$ , e a área interfacial real,  $S_V$ , se relacionam de acordo com a expressão de DeHoff. Utilizando as Equações 3.10 e 3.11, as expressões para saturação de sítios e taxa constante de nucleação, respectivamente, são:

$$S_V = S_{VE} (1 - V_V) = 4I_0 t^3 \exp\left(-\frac{1}{3} I_0 t^4\right) \quad (3.12)$$

A equação acima é utilizada para realizar uma comparação entre a área interfacial real,  $S_V$ , calculada analiticamente e a obtida da simulação do autômato celular em função do tempo.

Após a realização das simulações foram utilizados editores gráficos para a análise dos dados simulados comparando-os com a teoria de JMAK.

### 3.2.2 Descrição Analítica

Seguindo as considerações da teoria de JMAK, foram desenvolvidas as descrições analíticas para o tipo de nucleação considerada neste trabalho. Essas descrições analíticas da cinética têm como objetivo comparar a simulação com a teoria de JMAK. Também foram realizadas as descrições analíticas para o caminho microestrutural para este tipo de nucleação.

Para as descrições analíticas desenvolvidas neste trabalho utilizou-se a geometria do autômato celular, ou seja, cada célula tem o formato de um cubo regular.

Todo o desenvolvimento das descrições analíticas será detalhado na etapa de resultados deste trabalho.

### 3.2.3 Descrição Analítica do Caminho Microestrutural para Velocidade Constante

O Caminho Microestrutural é definido como a área interfacial entre regiões recristalizadas e não recristalizadas,  $S_V$ , em função da fração recristalizada,  $V_V$ .

Para se obter a expressão da área interfacial estendida,  $S_{VE}$ , em função fração transformada estendida,  $V_{VE}$ , será utilizada a equação 3.9 e 3.11, que será a equação a seguir:

$$S_{VE} = 4I_0 \left( \frac{3V_{VE}}{I_0} \right)^{3/4} \quad (3.13)$$

Fazendo uso das equações acima e utilizando a equação de DeHoff, será encontrada a expressões analíticas do caminho microestrutural para taxa constante de nucleação.

$$S_V = 4.(27I_0)^{1/4} . (1 - V_V) \left[ \ln \left( \frac{1}{1 - V_V} \right) \right]^{3/4} \quad (3.14)$$

Através da expressão teórica para o caminho microestrutural é feita uma comparação entre os valores calculados analiticamente e os valores obtidos da simulação do autômato celular.

## 3.3 ESTUDO DO EFEITO DO TIPO DE NUCLEAÇÃO E DA VELOCIDADE DE CRESCIMENTO

### 3.3.1 Descrição da Simulação

Para a implementação da rotina “velocidade variada”, utilizou-se a regra de transição para autômatos probabilísticos. Além de obedecer ao fator vizinhança transformada (estado excitado para os autômatos celulares), para ocorrer novas transformações nos tempos seguintes, existe também uma probabilidade em cima desse fator. A transformação não acontece de maneira determinística durante a simulação. Esta transformação agora depende de

uma probabilidade, que no caso do código em questão foi utilizado  $\frac{1}{\sqrt{t}}$  onde t é o tempo de reação. Sendo assim quanto maior for o tempo de reação menor será a probabilidade de transformação. Neste caso, foram utilizados como dados de entrada da simulação: matrizes com volume de  $304^3$  células e 4096 núcleos iniciais quando a nucleação é do tipo saturação de sítios. Para nucleação constante foi utilizada uma taxa de 5 núcleos por unidade de volume por unidade de tempo. Os núcleos foram distribuídos aleatoriamente na matriz, para que a teoria JMAK fosse utilizada. Utilizou-se também, durante a simulação, velocidade decrescente de avanço das interfaces. A implementação deste novo método teve como propósito simular apenas o efeito do decréscimo da velocidade de avanço das interfaces durante o processo de recristalização.

### 3.4 ESTUDO DO EFEITO DA DISTRIBUIÇÃO DOS NÚCLEOS E DA VELOCIDADE DE CRESCIMENTO

Nesta etapa o método utilizado para simular a cinética de recristalização foi muito semelhante ao da seção anterior. No presente estudo, foi alterada a maneira de distribuição espacial dos núcleos, e foi utilizada apenas saturação de sítios como tipo de nucleação. Além das grandezas utilizadas na seção anterior, utilizou-se também a contigüidade  $C_R$ . A contigüidade é muito eficaz para detectar desvios da aleatoriedade, pois além da nucleação aleatória, serão utilizados também, núcleos periodicamente alocados dentro da matriz e nucleação em grupos (*clusters*). O parâmetro da contigüidade é bastante sensível aos desvios da aleatoriedade de localização dos núcleos <sup>[40]</sup>, como foi demonstrado por Vandermeer e Juul Jensen <sup>[41]</sup>. A contigüidade considera a evolução de superfícies por unidade de volume de regiões recristalizadas em contato com outras regiões recristalizadas e também de regiões não recristalizadas em contato com regiões recristalizadas.

A contigüidade pode ser definida como <sup>[41]</sup>:

$$C_R = \frac{2.S_{RR}}{S_V + 2.S_{RR}} \quad (3.15)$$

### **3.5 ESTUDO DO EFEITO DO GRADIENTE DE DEFORMAÇÃO DENTRO DA MATRIZ**

A técnica de distribuir níveis de energia em forma de gradiente foi criada a partir dos dados extraídos da simulação por elementos finitos. A metodologia utilizada será descrita a seguir passo a passo.

Com o auxílio das ferramentas de elementos finitos (programa comercial ANSYS e ABAQUS), foram construídas macroestruturas discretas em duas e em três dimensões. Foi simulada uma situação de carregamento de forças e em uma placa fina. Primeiramente observou-se o fenômeno do gradiente de deformação em uma simulação de deformação em duas dimensões. Posteriormente a realização da simulação em 2D, foi encontrado na literatura um segundo caso, no qual o tipo de carregamento era diferente, contudo o gradiente de deformação ainda estava presente. Para validar a aplicação do caso gradiente de deformação em 3D, observou-se em uma outra simulação encontrada na literatura que o fenômeno persiste também em 3 dimensões. A apresenta-se a descrição da simulação realizada e das outras duas obtidas na literatura nas três seguintes subseções.

#### **3.5.1 Descrição da Primeira Simulação por Elementos Finitos**

A simulação por elementos finitos foi realizada no estado plano de deformação bidimensional em temperatura ambiente, usando o programa ANSYS (versão 8.1). Material: tarugo de aço IF 18 de seção quadrada de 40 mm,  $E = 207$  GPa e coeficiente de Poisson = 0,28.

#### **3.5.2 Descrição da Segunda Simulação por Elementos Finitos**

A simulação por elementos finitos foi realizada no estado plano de deformação bidimensional em temperatura ambiente, usando o programa ANSYS (versão 8.1). A matriz foi considerada como um corpo rígido com os seguintes parâmetros geométricos: Material: tarugo de aço VMB300 de seção retangular de 150 mm de comprimento e 50 mm de largura  $E = 210$  GPa e coeficiente de Poisson = 0,2. É mostrado na figura 4.36 o resultado das deformações equivalentes de von Mises após o fim da análise <sup>[42]</sup>.

### 3.5.3 Descrição da Terceira Simulação por Elementos Finitos

O modelo do processo de extrusão rotativa de tubos foi realizado com as propriedades relativas a um aço AISI 41B30H no estado normalizado com  $E = 200$  GPa e coeficiente de Poisson = 0,3, conforme fornecido pela Mannesmann Tubes. A espessura nominal é de 9,53 mm e, no processo, é reduzida para 6,05 mm (redução de aprox. 32,5%). Os rolos que realizam a conformação têm velocidade de rotação de 200 rpm e avanço igual a 4 mm/volta. A simulação do processo foi realizada a partir de um modelo em três dimensões onde os ferramentais (rolos e mandril) foram considerados corpos rígidos. Para a análise, foi utilizado um tubo de comprimento 80 mm para fins de simulação, deformável com malha composta por 8400 elementos sólidos. É mostrado na figura abaixo o resultado das deformações equivalentes de von Mises após o fim da análise. A simulação detalhada acima, foi realizada utilizando-se o software comercial de elementos finitos ABAQUS.

Nos três casos acima foram apresentados gradientes de deformação dentro da matriz discreta. Esse é um detalhe muito relevante para a cinética de recristalização, pois o comportamento da evolução das interfaces é influenciado pela forma de armazenamento de energia dentro da matriz.

### 3.5.4 Descrição da Simulação por Automação Celular

Os dados gerados por elementos finitos foram utilizados para reconstruir parte da estrutura em uma segunda matriz discreta. Observou-se que independentemente do tipo de carregamento, e da distribuição das forças, na maioria dos casos de compressão é gerado um gradiente de deformação. Reconstruíram-se em 3D os elementos onde foram apresentados gradientes de deformação. A estrutura reconstruída foi introduzida como entrada de dados do autômato celular para simular a evolução microestrutural.

O código computacional do A.C., com níveis distintos de energia, foi desenvolvido para simular o elaborado do gradiente de deformação dentro de uma matriz. A cinética evolutiva da microestrutura foi estudada com suporte aos resultados gerados por simulação computacional <sup>[43]</sup>.

Durante a simulação computacional foram utilizados os seguintes parâmetros como dados de entrada: matriz em três dimensões implementada por Rios et al <sup>[10]</sup> com dimensões de  $304^3$ ; quantidade de núcleos inicial igual a 4096; nucleação por saturação de sítios; disposições dos núcleos: aleatórias, periódica e com grupos de núcleos dentro da matriz e divisão de energia em cinco níveis distribuída na forma de gradiente dentro da matriz.

Segundo Lücke and Stüwe <sup>[44]</sup> a energia armazenada é a força motriz para o avanço das interfaces. Com a afirmação anterior e o tipo de distribuição de energia utilizado, foi estudada a influência do gradiente de deformação sobre a velocidade de avanço das interfaces recristalizadas. Vale lembrar que no modelo proposto, o potencial energético não decresce durante a reação.

### **3.6 ESTUDO DO EFEITO DO NÍVEL DE ENERGIA ARMazenADA NO GRADIENTE DE DEFORMAÇÃO DENTRO DA MATRIZ**

O estudo em questão tem por finalidade estudar o efeito do nível de energia armazenada na forma de gradiente dentro da matriz. Foram utilizados seis níveis diferentes para cada matriz. Sendo o maior nível seis e o menor 1 (homogeneidade de distribuição de energia), comparou-se o efeito dos gradientes com o efeito de distribuição homogênea. Durante as simulações realizadas, foram utilizados como dados de entrada para efetuar o estudo em questão: matriz em três dimensões implementada por Rios et al <sup>[10]</sup> com dimensões de  $304^3$ ; quantidade de núcleos inicial igual a 4096; nucleação por saturação de sítios. Para cada simulação foi acrescentado um nível de energia, totalizando seis simulações para este estudo.

## 4.0 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Nesta seção serão apresentados e discutidos os resultados obtidos com as simulações utilizando o código em três dimensões e os resultados obtidos da literatura. Cada estudo será apresentado e discutido separadamente para diferenciar o tipo de análise feita em cada etapa dos estudos.

### 4.1 ESTUDO DA EVOLUÇÃO DE GRÃOS INDIVIDUAIS E DISTRIBUIÇÃO DE TAMANHOS FINAIS PELO MÉTODO DO AUTÔMATO CELULAR

#### 4.1.1 O Grão Isolado

A evolução individual pode ser acompanhada observando-se a figura abaixo.

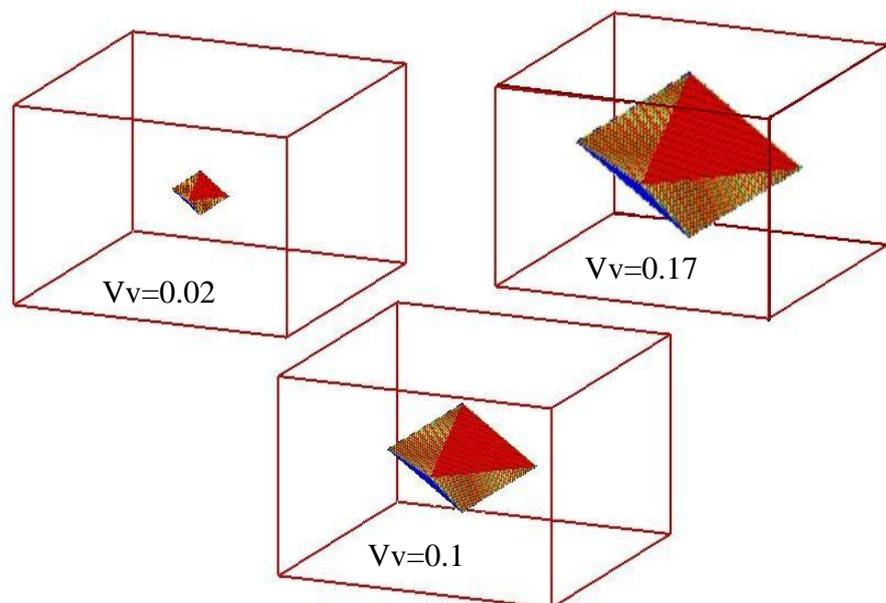


Figura 4.1 - Evolução equiaxial de um grão isolado dentro da matriz é demonstrada em função da fração recristalizada.

Percebe-se na figura 4.1, que o grão isolado apresenta formato equiaxial (bi-piramidal tetragonal ou octaedral) durante o crescimento. Este formato é modificado à medida que aumenta a interferência de outros grãos. Como no caso acima não houve nenhum impedimento, o grão mantém sua forma preservada.

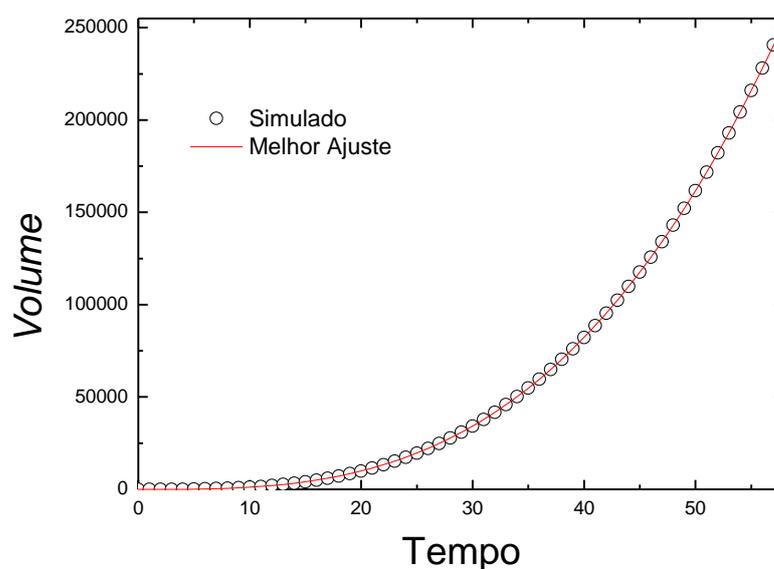


Figura 4.2 - Evolução do volume,  $V$ , em função do tempo,  $t$ , para um único grão sem que haja nenhuma interferência no crescimento.

A equação abaixo foi ajustada para indicar a evolução do volume em função do tempo e foi utilizada segundo a seção 3.1.2.1:

$$v(t) = \frac{4}{3}t^3 - 2t^2 + \frac{8}{3}t - 1 \quad (4.1)$$

A figura 4.2 mostra a evolução do núcleo até que ele encontre as paredes da malha. A reação em questão não sofre influência do *impingement*, e tem o grão evoluindo com velocidade constante.

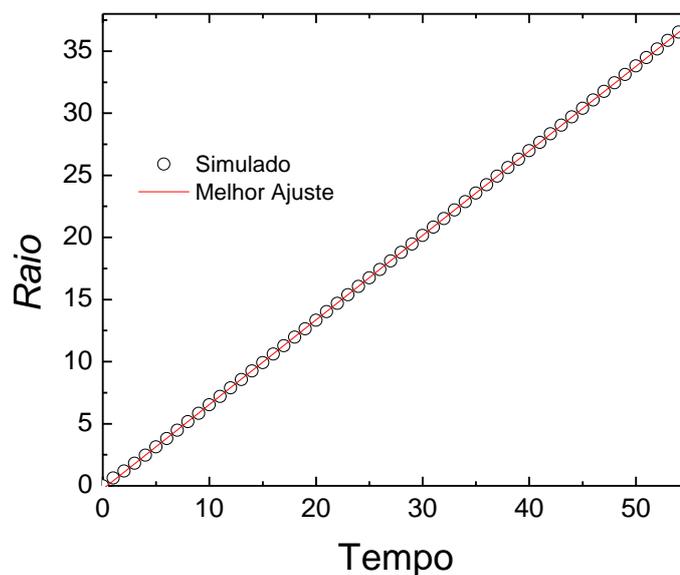


Figura 4.3 - Evolução do raio, em função do tempo,  $t$ , para um único grão sem que haja nenhuma interferência no crescimento.

A equação abaixo foi ajustada para indicar a evolução do raio em função do tempo:

$$r = \frac{1}{4}t + \frac{7}{10} \quad (4.2)$$

Na figura 4.3 está representada a evolução do raio equivalente ao raio da esfera (tamanho de grão) em função do tempo. Observa-se durante a evolução uma linearidade de crescimento quando se relaciona o raio com o tempo de reação.

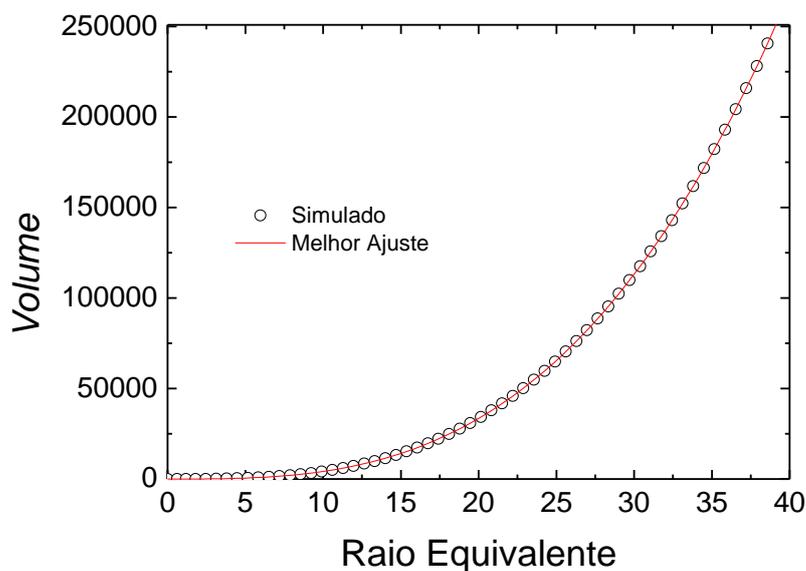


Figura 4.4 - Evolução do volume,  $V$ , em função do raio para um único grão sem que haja nenhuma interferência no crescimento.

Com o auxílio dos gráficos de evolução do volume do grão isolado em função do raio equivalente na figura 4.4 observa-se uma curva de perfil parabólico para a evolução do volume em função do tempo de reação.

Abaixo se encontra a fórmula tradicional de volume de uma esfera.

$$V = K_v * r^3$$

A constante  $K_v$  foi ajustada para o autômato celular e calculada para a esfera, os valores estão indicados na tabela abaixo:

	Velocidade Constante	$K_v$	$R^2$
Ajustado	Autômato	$4.18879 \pm 7.208E-17$	1
Calculado	Esfera	4.1879020	-

Tabela 4.1 - Comparação da constante forma para volumes calculada por simulação e analiticamente.

Os dados acima foram apresentados com intuito de validar a aproximação feita ao utilizar grãos com formatos octaedrais regulares, supondo que sejam esféricos.

Depois de obter informações de um único grão pelo método do A.C., foi simulada a evolução de vários grãos. Posteriormente à simulação da recristalização, foi feita uma análise qualitativa e comparativa com os dados experimentais. Foram utilizadas como base de comparação medidas experimentais realizados por Lauridsen et al <sup>[45]</sup> com a finalidade de avaliar o comportamento dos núcleos simulados.

Na figura 4.3 é apresentada uma reta que mostra a proporcionalidade do raio do grão em função do tempo de reação. As duas figuras citadas acima, demonstram graficamente o avanço de interfaces que não possuem interferências. Com a superposição do gráfico de grãos isolados e grãos com vizinhos dentro da matriz, observa-se claramente o momento exato da ocorrência do “*impingement*” como mostram as figuras abaixo.

A intercessão entre as curvas abaixo representam o momento exato da ocorrência da interferência do crescimento de um núcleo no crescimento outro.

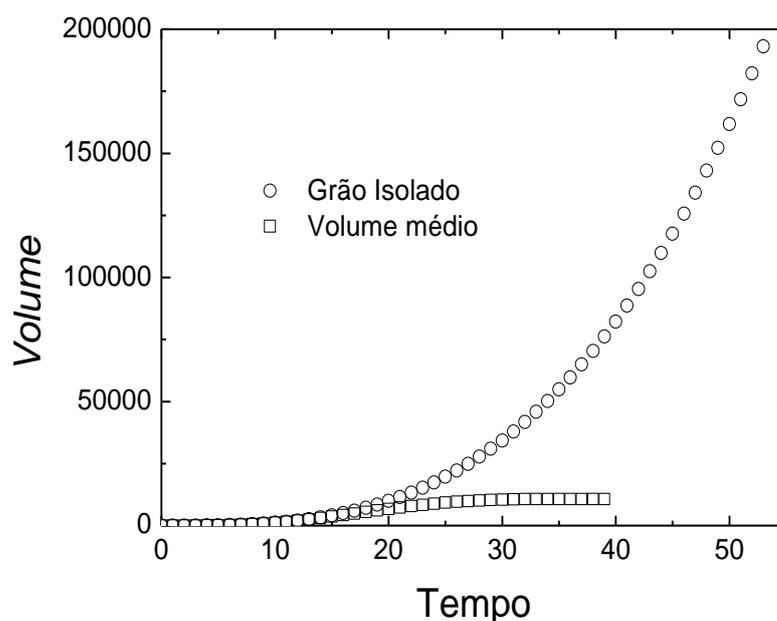


Figura 4.5 - Volume em função do tempo de reação do grão isolado e Volume em função do Tempo de reação da média dos grãos existentes na matriz contendo 125 núcleos.

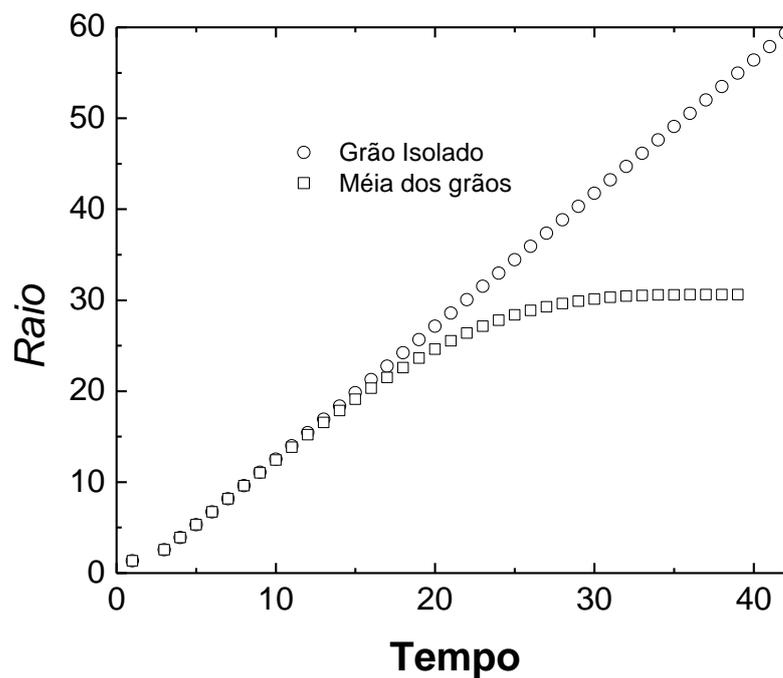


Figura 4.6 - Raio em função do tempo de reação do grão isolado e Raio vs. Tempo de reação da média dos grãos existentes na matriz contendo 125 núcleos.

#### 4.1.2 Os Grãos Individuais e Seus Vizinhos

Na primeira matriz representada na figura 4.5, são apresentados 10 núcleos com distribuição espacial aleatória e gerados por saturação de sítios. As seguintes matrizes são as representações gráficas contendo a evolução de cada grão individualmente

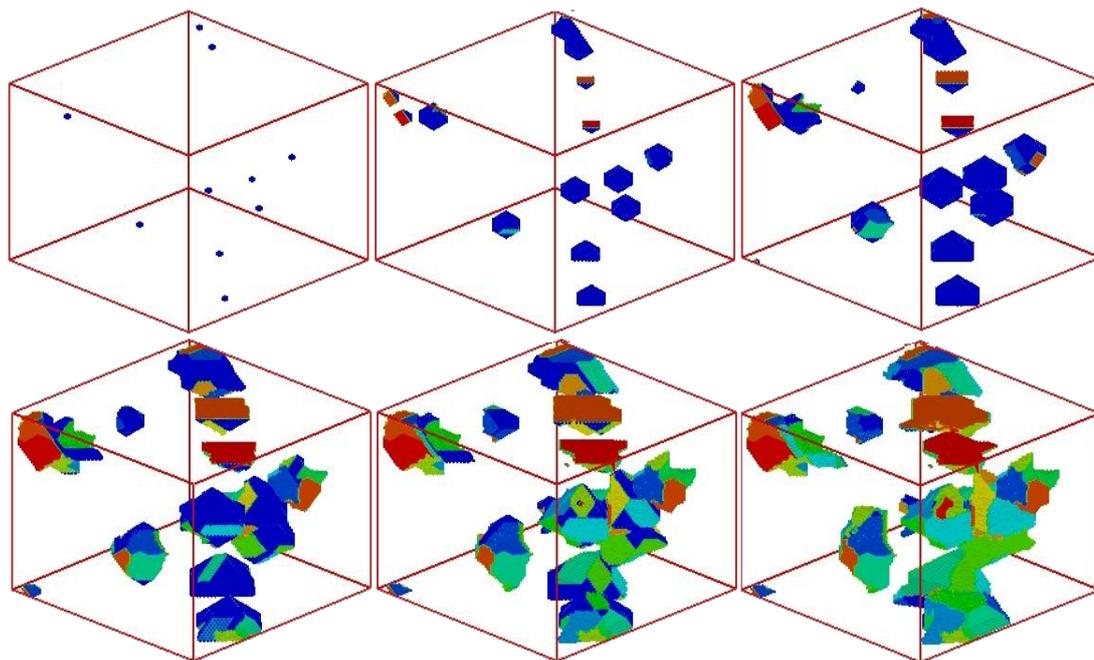


Figura 4.7 - Acompanhamento da evolução dos 10 grãos estudados em uma matriz discreta contendo 125 grãos.

Os outros 115 grãos pertencem à mesma matriz e contêm as mesmas características iniciais dos 10 grãos estudados. Durante a evolução foram omitidas as representações microestruturais dos grãos não estudados, entretanto, os mesmos participaram da evolução juntamente com os grãos representados na figura 4.7. Os grãos representados na figura acima tiveram sua cinética de crescimento e seus aspectos geométricos acompanhados. Vale lembrar que os dados extraídos da simulação computacional são adimensionais, e as comparações feitas foram possíveis por causa da realização uma normalização de ambos os resultados (simulação experimental).

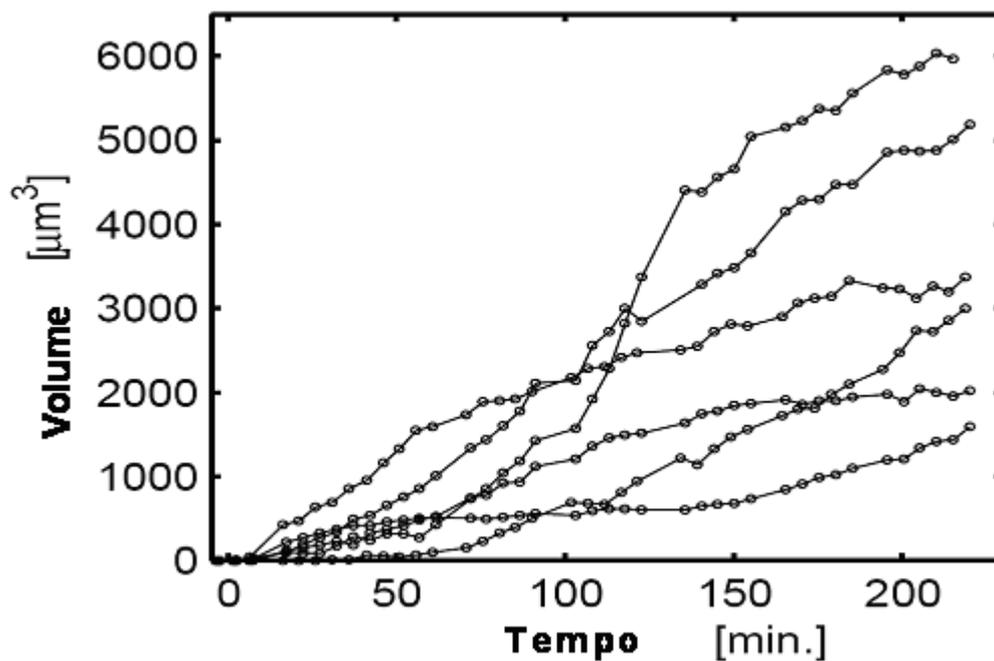


Figura 4.8 - Volume de cada grão em função do tempo de recristalização, cada grão possui sua própria cinética desde o início, resultado obtidos experimentalmente.

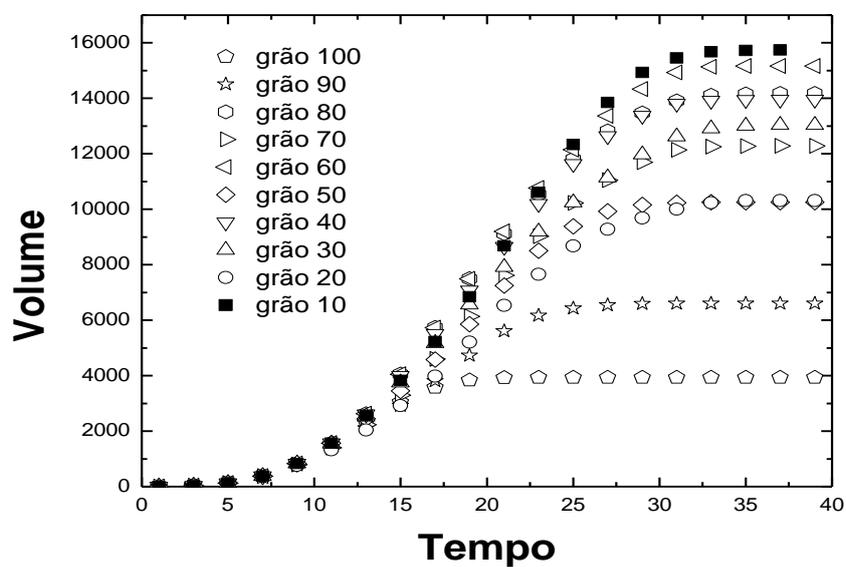


Figura 4.9 - Volume de cada grão em função do tempo de recristalização, cada grão possui sua própria cinética após a interferência, resultados obtidos por simulação.

Nas figuras 4.8 e 4.9 são demonstrados os gráficos de evolução do volume de grãos individuais em função do tempo de reação. Nos dois casos os dados extraídos foram de até

96% da recristalização total. São apresentadas as evoluções de 6 núcleos medidos experimentalmente e 10 núcleos medidos computacionalmente

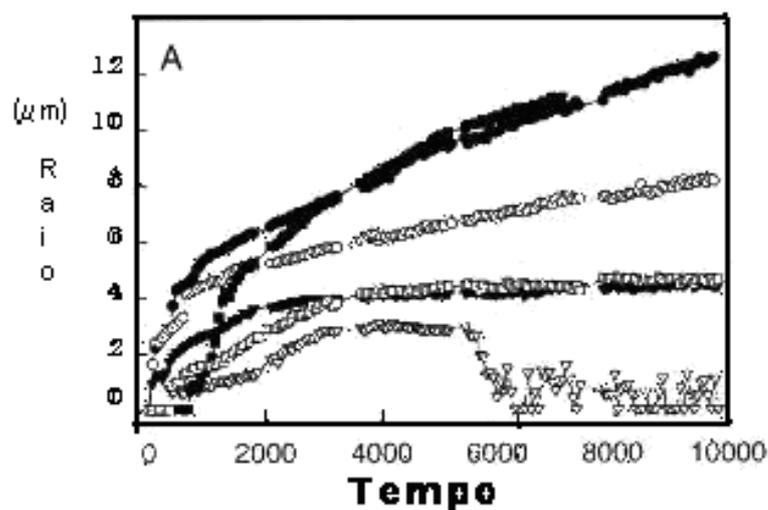


Figura 4.10 - Evolução do raio, em função do tempo,  $t$ , para cada grão analisado dentro da matriz real, resultados obtidos experimentalmente.

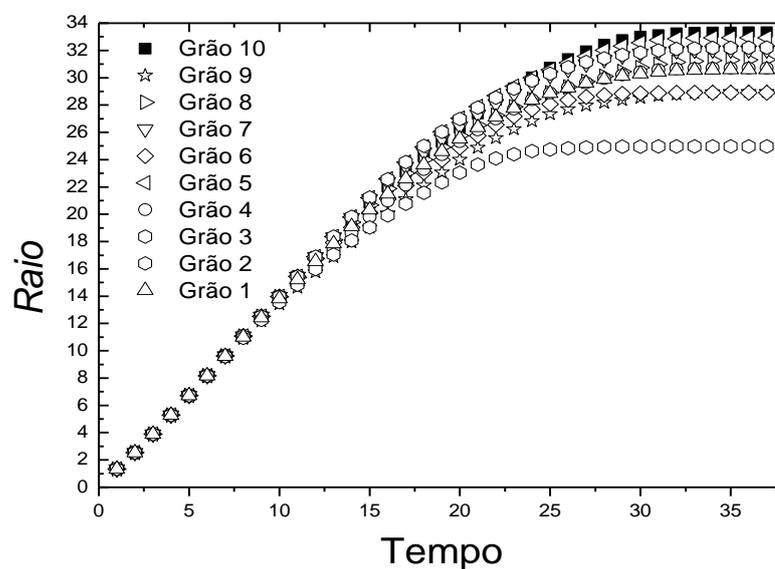


Figura 4.11 - Evolução do raio, em função do tempo,  $t$ , para cada grão analisado dentro da matriz real, resultados por simulação computacional.

A figura 4.10 foi feita por Jensen et al <sup>[46]</sup> a partir de dados de resultados experimentais, enquanto, a figura 4.11 foi feita utilizando dados gerados por simulação computacional.

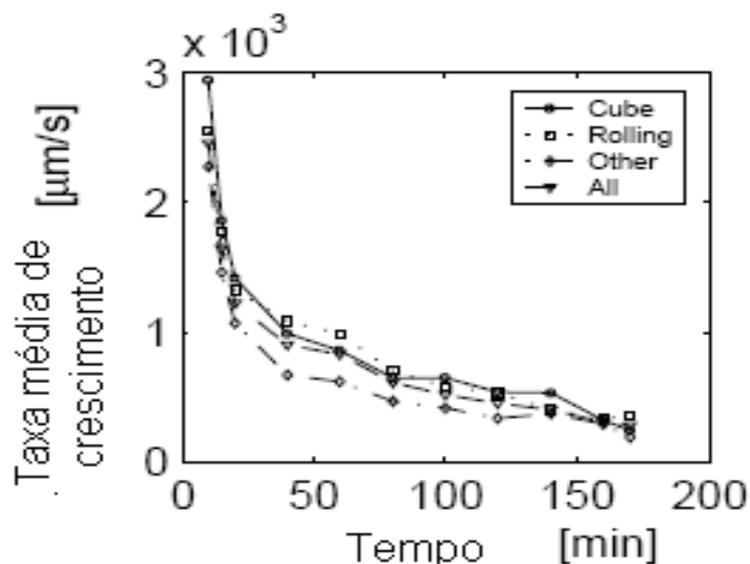


Figura 4.12 - Média da taxa de crescimento em função do tempo de reação, para cada grão analisado, resultados obtidos experimentalmente.

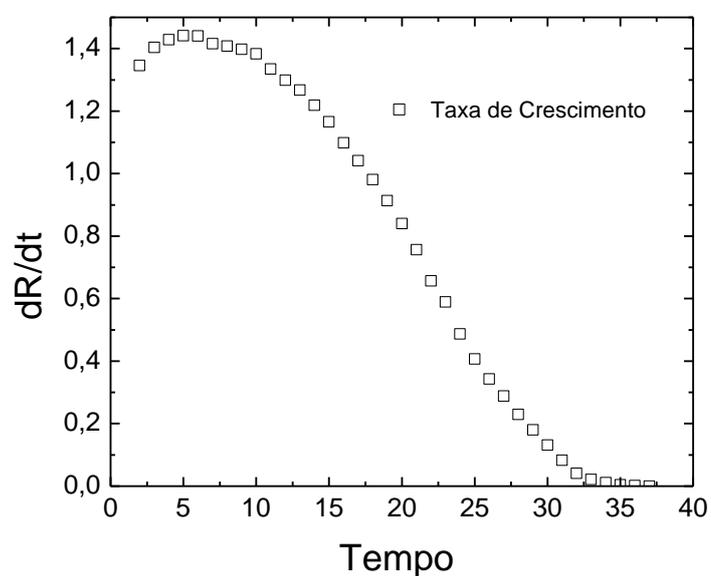


Figura 4.13 - Média da taxa de crescimento em função do tempo de reação, resultados obtidos por simulação computacional.

As considerações adotadas ao implementar o método dos autômatos celulares direcionam a resposta da simulação para uma pequena divergência em relação aos resultados

experimentais. As divergências encontradas são todas aceitáveis, pois, o método é uma aproximação do fenômeno, porém, regido por um universo mais simples e discreto.

A interferência na mobilidade das interfaces referente a partículas, maclas, bandas de deformação e etc., não existem para todos os grãos durante a simulação. Sendo assim, todas as interfaces transformadas se movem com a mesma velocidade e de forma constante, não tendo retardo de crescimento enquanto não ocorre o *impingement*. Conforme Rios e Padilha <sup>[36]</sup>, a velocidade de avanço das interfaces transformadas diminui em função do tempo durante a recristalização de alguns materiais em situação real.

A força motriz para o avanço das interfaces recristalizadas é a energia armazenada na matriz deformada. Segundo Lauridsen E.M. et al <sup>[46]</sup>, a heterogeneidade de energia armazenada influencia na distinção da cinética de evolução dos grãos. O método computacional utilizado neste estudo considera que a transformação de cada núcleo é constante, pelo fato de todos os pontos da malha ter o mesmo nível de energia armazenada. Como todos os pontos da malha têm o mesmo nível de energia (homogeneidade de energia armazenada) cada núcleo se desenvolve com as mesmas características, tais como: velocidade de avanço das interfaces, volume em função do tempo, forma geométrica e etc.

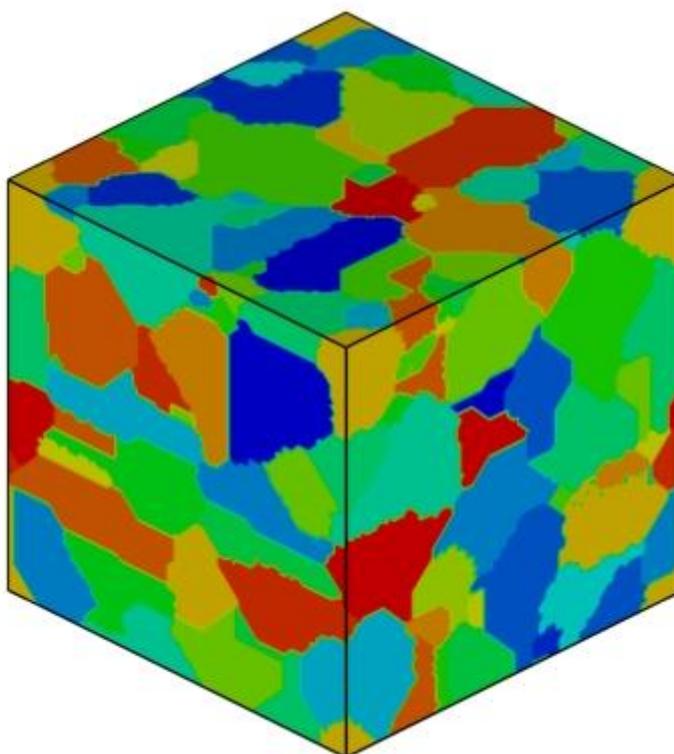


Figura 4.14 - Visão externa da microestrutura simulada pelo Autômato Celular, sem omitir nenhum grão da matriz discreta.

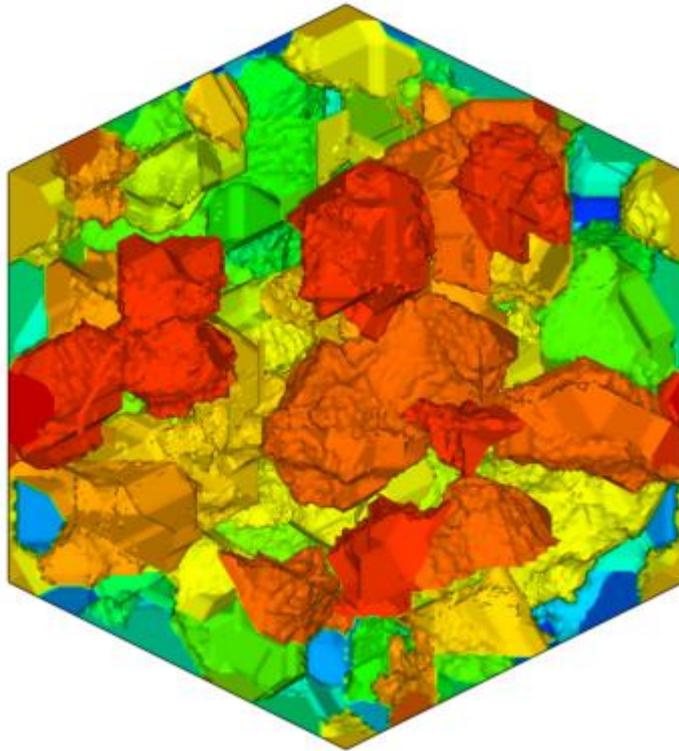


Figura 4.15 - Visão interna da microestrutura simulada pelo Autômato Celular, com omissão dos grãos mais externos (próximo das faces).

A figura 4.15 representa uma microestrutura 100% recristalizada ao fim da simulação. A matriz da figura 4.15 é a mesma matriz das figuras 4.7 e 4.14

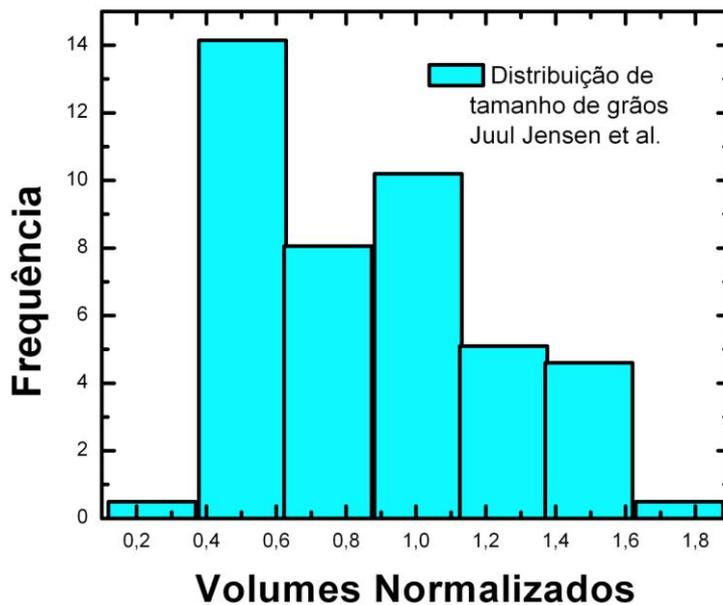


Figura 4.16 - Distribuição de tamanhos de grãos finais medidos por métodos experimentais com medidas *in situ*.

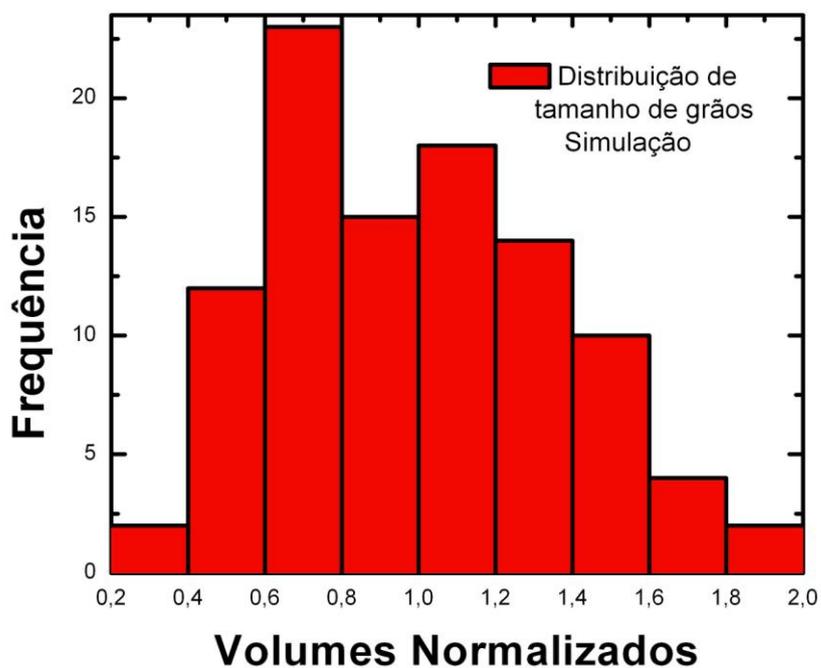


Figura 4.17 - Distribuição de tamanhos de grãos finais calculados por métodos computacionais.

No final da reação foram coletados dados de volumes finais de todos os grãos pertencentes a matriz. Com os volumes extraídos da simulação e dos experimentos (encontrados na literatura) <sup>[46]</sup> foram montados histogramas de frequências dos volumes. Os dados experimentais <sup>[46]</sup> e simulados foram normalizados para a realização de comparações entre os estudos. As figuras 4.14 e 4.15 apresentam a distribuição estatística dos volumes finais dos grãos experimental e computacional respectivamente.

A distribuição estatística de tamanhos finais de grão apresenta uma boa concordância com a distribuição encontrada pelo método experimental.

## 4.2 ESTUDO DO EFEITO DA TAXA DE NUCLEAÇÃO ADOTADA DURANTE A REAÇÃO DE RECRISTALIZAÇÃO.

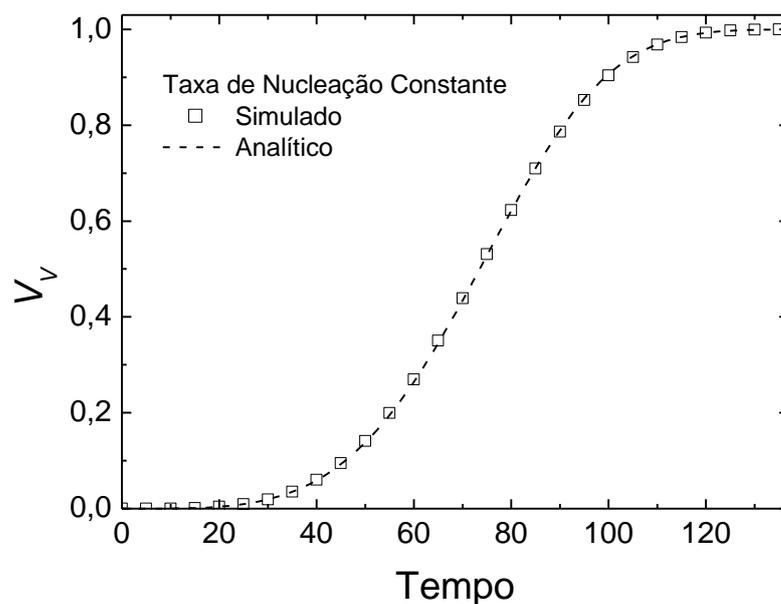


Figura 4.18 - Fração volumétrica recristalizada,  $V_V$ , em função do tempo de reação para taxa de crescimento constante  $I_0 = 2$ .

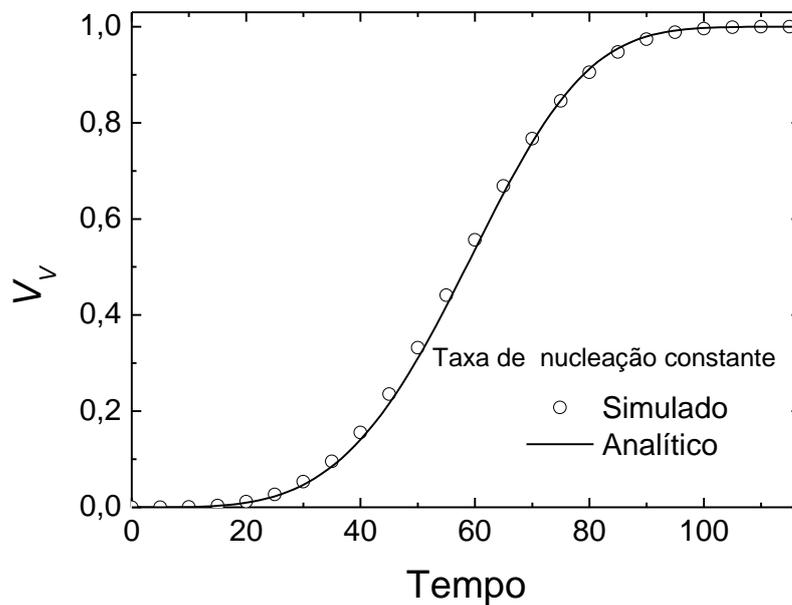


Figura 4.19 - Fração volumétrica recristalizada,  $V_V$ , em função do tempo de reação para taxa de crescimento constante  $I_0 = 5$ .

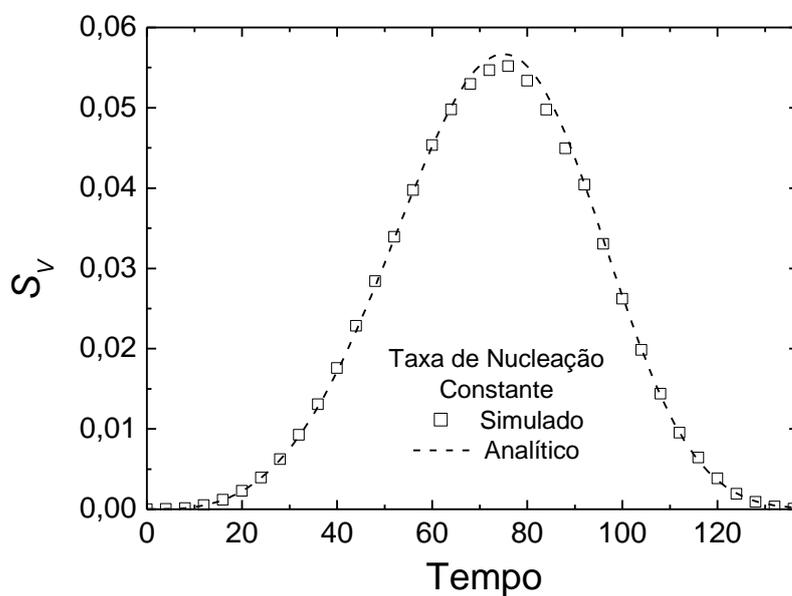


Figura 4.20 - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade de volume,  $S_V$ , em função do tempo com taxa de nucleação constante  $I_0 = 2$ .

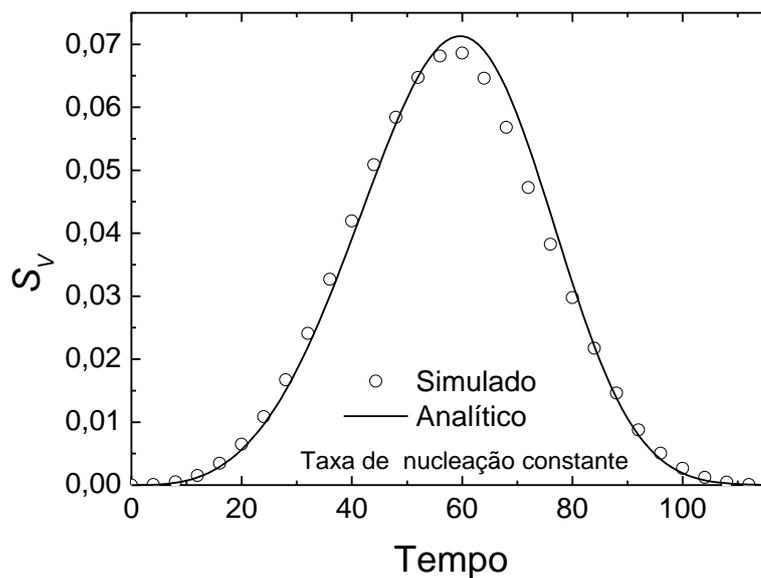


Figura 4.21 - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade de volume,  $S_V$ , em função do tempo com taxa de nucleação constante  $I_0 = 5$ .

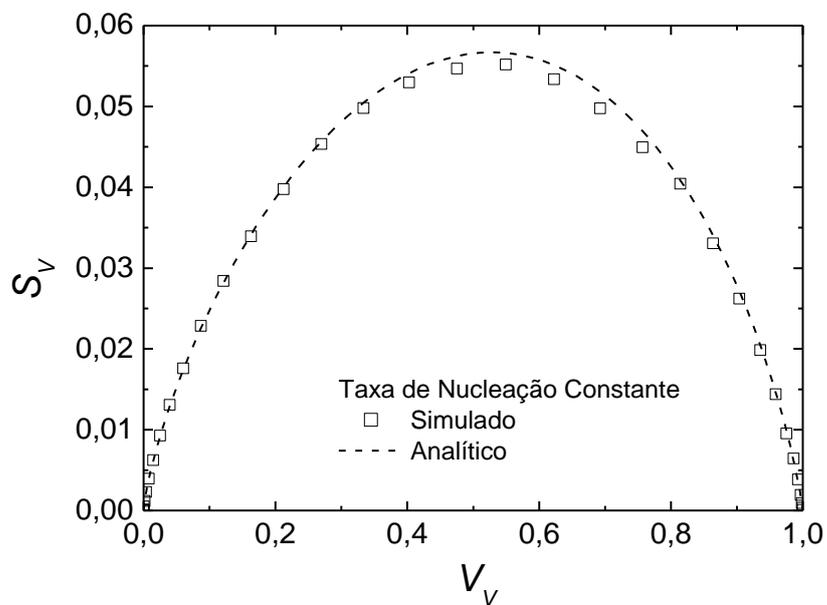


Figura 4.22 - Caminho microestrutural - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade do volume,  $S_V$ , em função da fração volumétrica  $V_V$  para  $I_0 = 2$ .

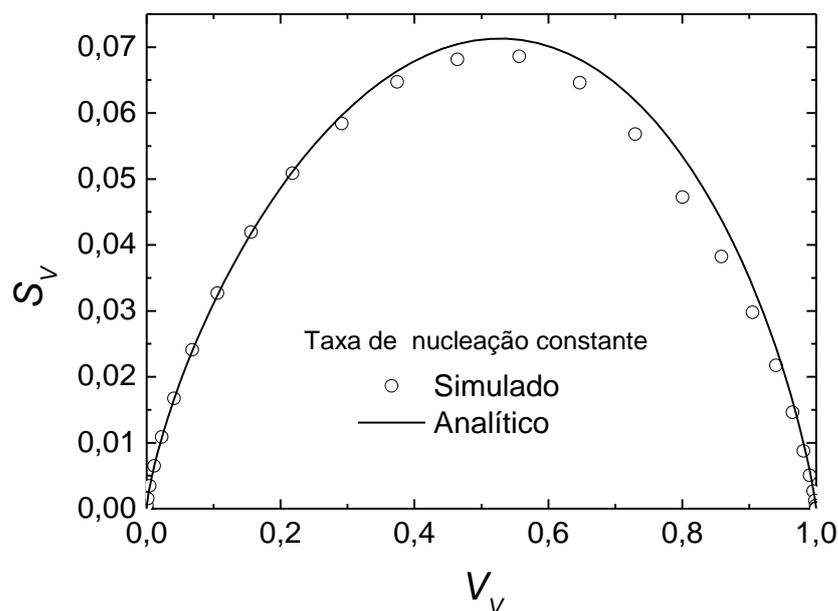


Figura 4.23 - Caminho microestrutural - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade do volume,  $S_V$ , em função da fração volumétrica,  $V_V$ , para  $I_0 = 5$ .

Quando utilizadas hipóteses da teoria JMAK o modelo reproduz resultados semelhantes aos previstos analiticamente. Tanto na simulação com  $I_0 = 2$  quanto na simulação com  $I_0 = 5$  foram obtidas boas concordâncias sem ajuste de nenhum parâmetro. A reação com taxa de nucleação igual a 2 ocorreu mais lentamente em relação à reação com taxa igual a 5. Um aumento na taxa de nucleação, conseqüentemente, afeta na velocidade de reação, mas, não na velocidade de evolução das interfaces. As interfaces crescem a uma velocidade aproximadamente constante até encontrarem outras interfaces recristalizadas. Uma boa concordância foi apresentada entre resultados simulados e analíticos. Tal concordância pode ser observada em todos os gráficos feitos com os resultados da parte do programa que utiliza nucleação constante.

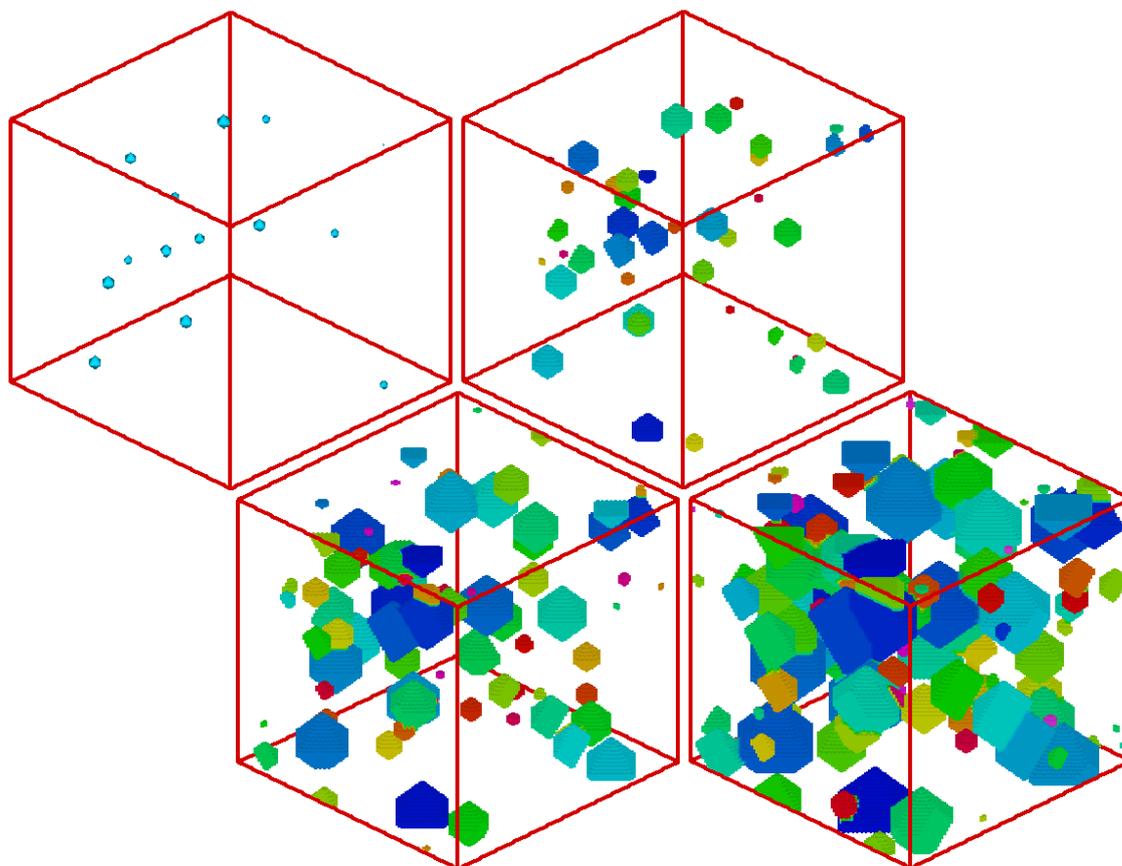


Figura 4.24 - Evolução dos grãos dentro de uma matriz com nucleação constante e aleatória, com taxa de nucleação igual a 5 [núcleos por unidade de tempo] e tempos 3, 10, 15 e 20 [unidade de tempo].

Acima na figura 4.24, está sendo apresentado o surgimento dos núcleos em função do tempo de reação. Enquanto alguns grãos novos surgem na matriz os antigos dão prosseguimento em seus crescimentos. Esta ocorrência se dá até a reação atingir 100% de matriz recristalizada. Vale ressaltar que nos dois casos simulados na seção 4.1 e 4.2, tem-se que a velocidade de crescimento dos núcleos é constante e a energia está armazenada de forma homogênea dentro da matriz deformada.

### 4.3 ESTUDO DO EFEITO DO TIPO DE NUCLEAÇÃO E DA VELOCIDADE DE CRESCIMENTO

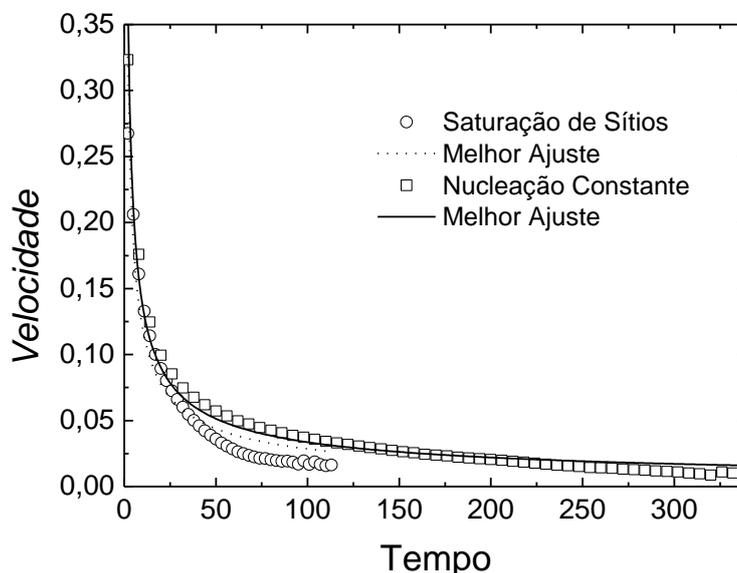


Figura 4.25 - Velocidade de avanço em função do tempo de reação para os dois tipos de nucleação estudados com probabilidade de transformação.

Na figura 4.23 é demonstrado o comportamento microestrutural em relação à velocidade de reação. Nesta figura, é apresentado que a velocidade média de reação é maior no caso de nucleação constante, do que, para nucleação por saturação de sítios. Entretanto, o término da reação de transformação de matrizes nucleadas por saturação de sítios é antecipado em relação ao fim da reação em matrizes que são nucleadas constantemente.

Por meio da equação (2.4) foi possível ajustar os parâmetros  $r$  e  $P$ . Foram encontrados os seguintes valores para saturação de sítios e nucleação constante.

Tipo de Nucleação	$P$	$r$	$R^2$
Saturação de Sítios	$1,32905 \pm 0,09243$	$0,37718 \pm 0,01$	0,93772
Constante	$1.42562 \pm 0,03028$	$0,38902 \pm 0,00$	0,99874

Tabela 4.2 – Tabela dos parâmetros  $P$  e  $r$  ajustados, obtidos por simulação computacional.

O gráfico abaixo demonstra o clássico perfil da curva do caminho microestrutural, onde  $S_V$  fica em função de  $V_V$ .

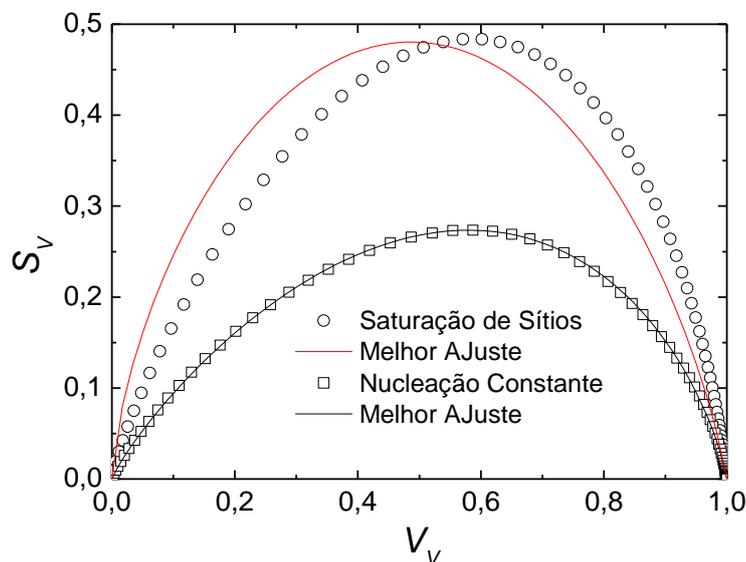


Figura 4.26 - Caminho microestrutural - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade do volume,  $S_V$ , em função da fração volumétrica  $V_V$  para os dois tipos de nucleação estudados.

Com o auxílio da equação (2.21) ajustou-se o parâmetro  $C$  e encontraram-se os seguintes valores para nucleação por saturação de sítios e nucleação constante respectivamente:

Tipo de Nucleação	$C$	$R^2$
Saturação de Sítios	$1,21875 \pm 0,01694$	0,95883
Constante	$0,725 \pm 0,00143$	0,99983

Tabela 4.3 – Tabela do parâmetro  $C$  ajustado, obtidos por simulação computacional.

Observa-se pela figura 4.26 e pelo coeficiente de correlação que, o ajuste na nucleação por saturação de sítios não foi tão boa quanto a da nucleação constante. Este fato deve-se a utilização de uma probabilidade de transformação, na qual os grãos com poucas faces têm poucas probabilidades de crescimento. Com a ocorrência citada anteriormente alguns grãos demoram mais para crescer, como acontecem em reações com tempo de incubação dos núcleos (nucleação constante).

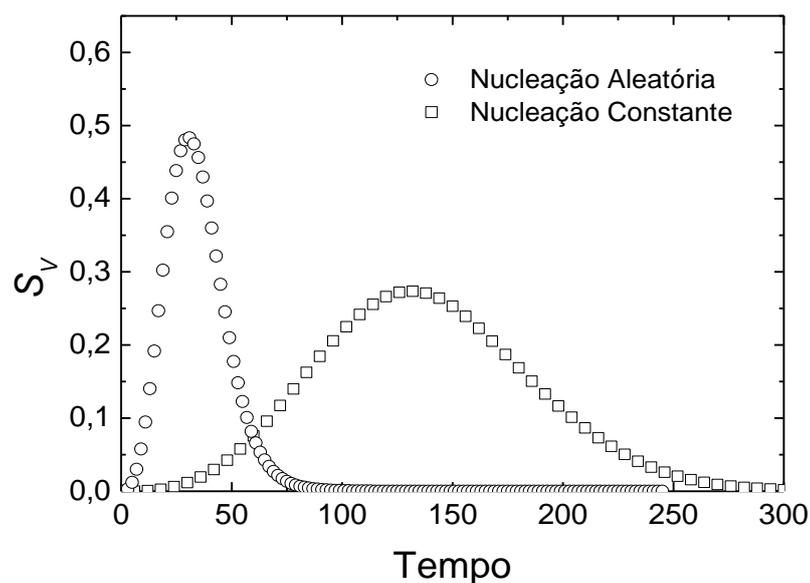


Figura 4.27 - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade de volume,  $S_V$ , em função do tempo, para os dois tipos de nucleação estudados.

A figura 4.27 apresenta o comportamento da evolução da área interfacial por unidade de volume em função do tempo de reação e ainda exibe o comportamento de uma matriz com núcleos eqüidistantes.

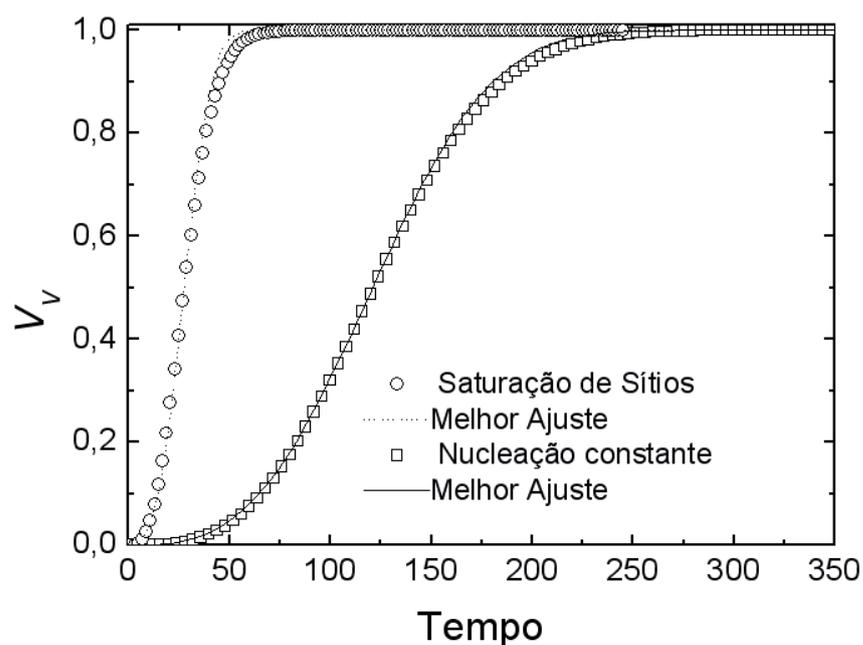


Figura 4.28 - Fração volumétrica recristalizada,  $V_V$ , em função do tempo de reação para os dois tipos de nucleação estudados.

Observou-se que as curvas analíticas ajustadas apresentaram uma boa concordância com o novo método, quando se leva em conta a variação de velocidade durante a reação em função do Tempo.

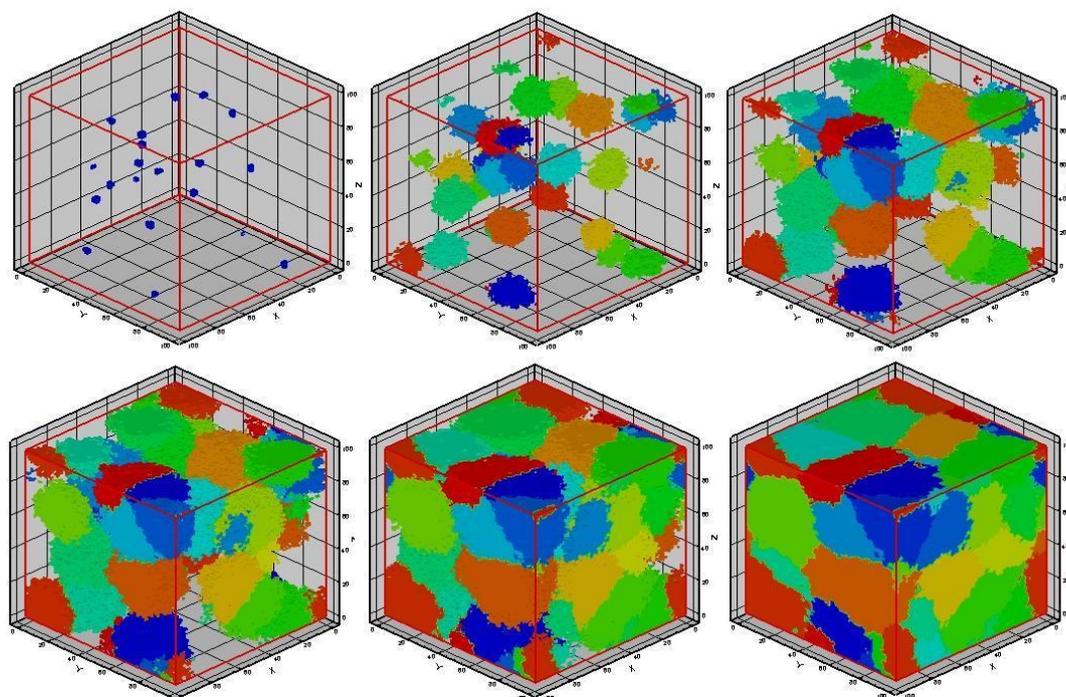


Figura 4.29 - Evolução da microestrutura durante a simulação com probabilidade de transformação.

A figura 4.29 representa uma microestrutura gerada por um programa de visualização gráfica utilizando os resultados da simulação. Demonstra a evolução microestrutural durante da transformação em uma matriz em três dimensões, com volume de  $100^3$  células com 20 núcleos. A primeira matriz representada contém os núcleos com seus tamanhos iniciais (nucleação) e logo a seguir, proporciona-se a idéia de evolução microestrutural de 20 em 20% de fração transformada até atingir a recristalização total na última imagem.

A concordância da curva de caminho microestrutural também foi muito boa para a matriz de  $304^3$  e 4096 núcleos iniciais, pois nota-se que o coeficiente de correlação indica um bom ajuste para as curvas apresentadas.

O surgimento de novos núcleos em função do tempo simula as reações nas quais os núcleos possuem tempos distintos de incubação. Esse efeito causa um retardo na velocidade de reação como foi observado na seção anterior. Reações por saturação de sítios não admitem

tempos de incubação, sendo assim, após a etapa de nucleação só ocorrerá o crescimento. Em contra partida o programa simula a queda da velocidade de avanço das interfaces com uma probabilidade de crescimento. Esta probabilidade diminui em função do tempo, porem depende da quantidade de superfícies recristalizadas. No início da reação a quantidade de superfícies recristalizadas é bem pequena em relação ao tamanho da matriz. Por esse motivo alguns grãos demoram a começar a se desenvolver, ocasionando um efeito semelhante ao da nucleação constante no início da reação. Tal semelhança evolutiva que ocorre na simulação acarreta também uma semelhança no perfil da curva de caminho microestrutural. A curva de caminho microestrutural da nucleação por saturação de sítios se desloca para direita assim com a curva de caminho microestrutural da nucleação constante.

#### 4.4 ESTUDO DO EFEITO DA DISTRIBUIÇÃO DOS NÚCLEOS E DA VELOCIDADE DE CRESCIMENTO

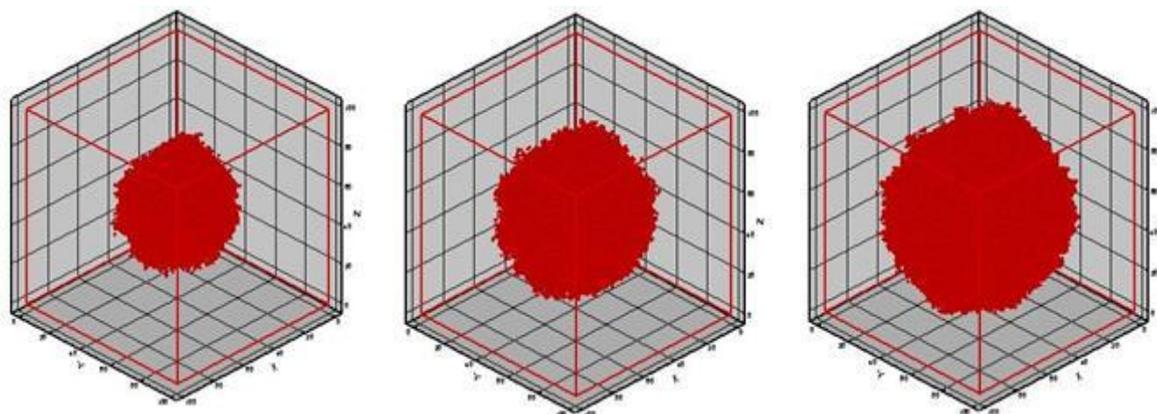


Figura 4.30 - Simulação da evolução de um único grão nucleado no centro da matriz, e livre de interferências com probabilidade de transformação.

Foi apresentado acima um grão isolado com um crescimento de aproximadamente 10, 20 e 30% da matriz deformada respectivamente. Esse crescimento foi interrompido antes de se atingir a recristalização completa porque a simulação foi programada para identificar as paredes da matriz como um outro grão vizinho. Dessa forma pode ser simulado o crescimento de um grão isolado para extrair alguns parâmetros por ajuste.

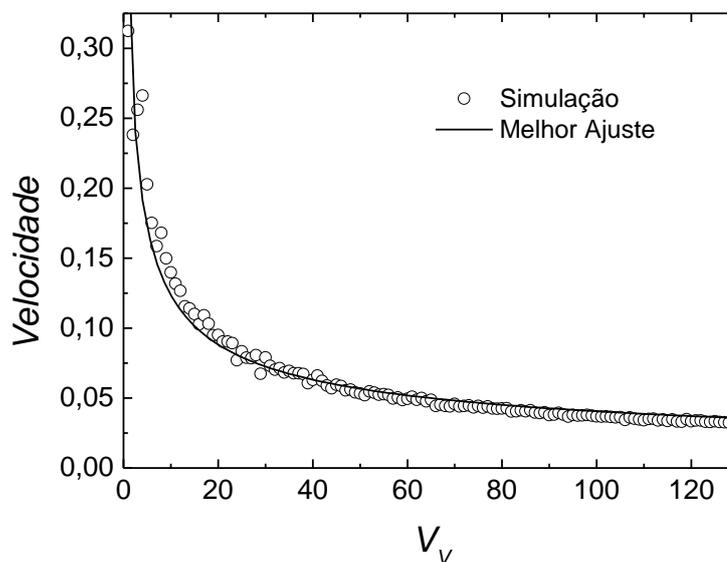


Figura 4.31 - Velocidade de avanço em função do tempo de reação para o grão isolado com probabilidade de transformação.

Por ajuste da equação (2.4), utilizando-se o método dos mínimos quadrados, obtiveram-se os valores.

	<b>P</b>	<b>r</b>	<b>R<sup>2</sup></b>
Saturação de Sítios	$0.94241 \pm 0.00719$	$0.42023 \pm 0.023$	0.94833

Tabela 4.4 – Parâmetros P e r ajustados.

Os valores acima são extraídos da simulação de apenas um núcleo crescendo no centro da matriz como está demonstrado na figura 4.30.

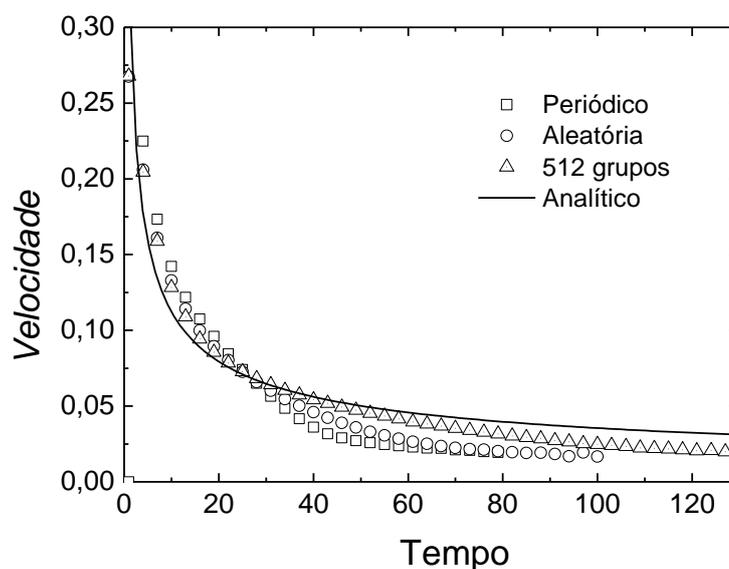


Figura 4.32 - Velocidade de avanço em função do tempo de reação para o grão isolado com probabilidade de transformação para os três tipos de distribuição dos núcleos.

Comparando-se as três curvas geradas por simulação apresentadas na figura 4.32 fica clara a diferença entre as velocidades de avanço das interfaces quando se altera o posicionamento dos núcleos dentro de uma matriz. Todavia, estas velocidades não indicam qual a ordem de finalização das reações. Mesmo quando se compara reações que acontecem em matrizes com a mesma dimensão e com a mesma quantidade de núcleos, o posicionamento dos núcleos é um fator muito relevante.

Novamente com auxílio da figura 4.32 observa-se que, mesmo tendo uma velocidade média de avanço das interfaces não recristalizadas menor que nos clusters, a reação com nucleação periódica termina mais cedo. Sendo a ordem de conclusão de reação total de matriz de mesmo tamanho e contendo o mesmo número de núcleos iniciais é: periódico, aleatório e clusters. Vale lembrar que quanto menor a quantidade de grupos mais lenta será a reação.

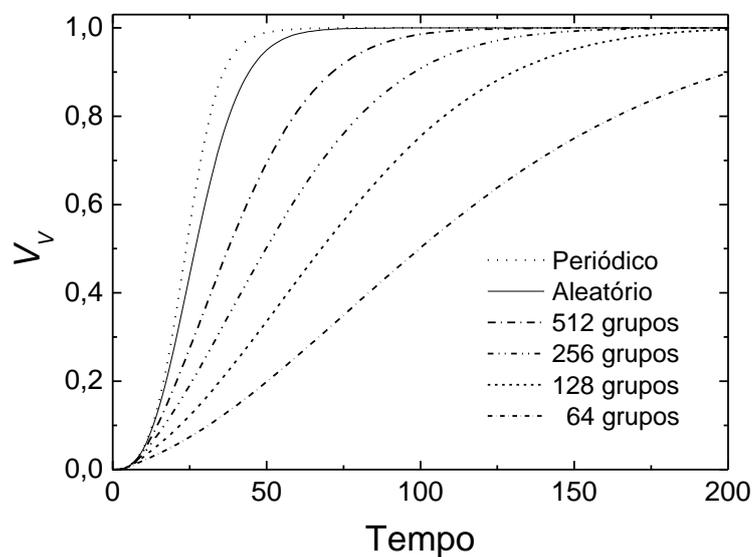


Figura 4.33 - Fração volumétrica recristalizada,  $V_v$ , em função do tempo de reação para os três tipos de distribuição dos núcleos estudados.

A figura 4.33 proporciona a visualização da evolução da fração transformada por unidade de volume. A figura acima também exibe a cinética uma matriz contendo núcleos equidistantes e quatro matrizes com grupos de núcleos para meio de comparação. Observa-se novamente um acontecimento do término precoce da reação com núcleos periódicos, quando comparada com a relação contendo grupos.

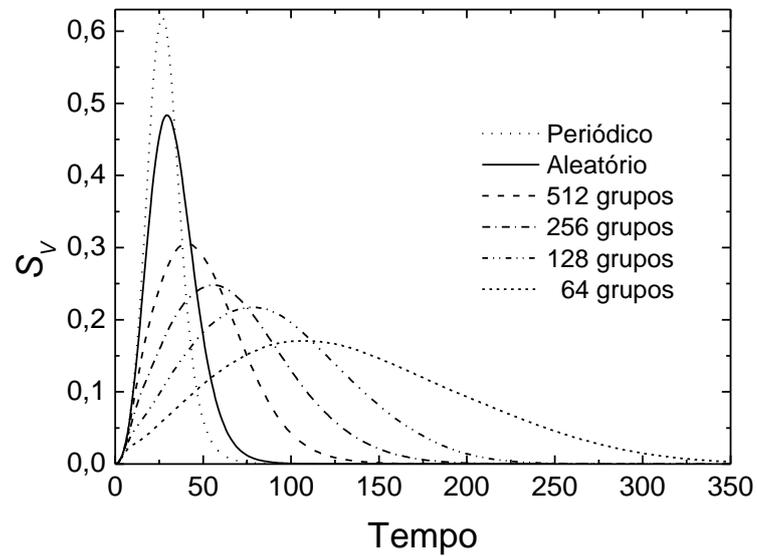


Figura 4.34 - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade de volume,  $S_V$ , em função do tempo, para os três tipos distribuição dos núcleos estudados.

O gráfico da figura 4.34 é a representação da área interfacial entre grãos recristalizados e não recristalizados contra o tempo de reação.

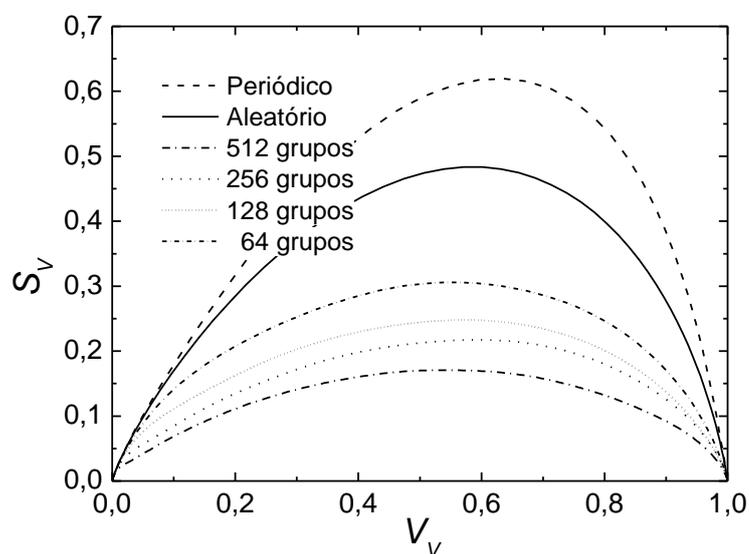


Figura 4.35 - Caminho microestrutural - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade do volume,  $S_v$ , em função da fração volumétrica,  $V_v$ , para os três tipos de distribuição dos núcleos estudados.

Visualiza-se na fig. 4.35 a representação gráfica do caminho traçado pelas áreas interfaciais por unidade de volume em função da fração volumétrica. Esta representação é mais conhecida como caminho microestrutural, e foi proposto por DeHoff.

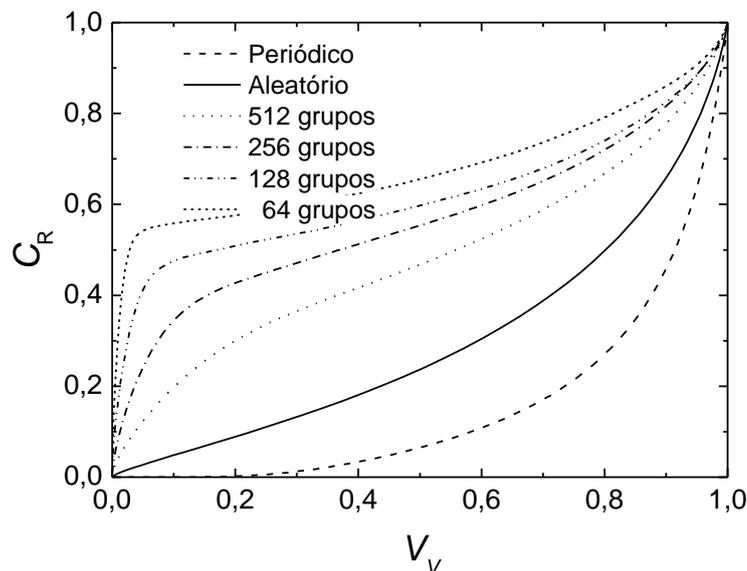


Figura 4.36 - Gráfico de contigüidade em fração volumétrica recristalizada para os três tipos de distribuição dos núcleos estudados.

A contigüidade mostra os desvios da aleatoriedade, sendo que, acima da curva da nucleação aleatória aparece a curva dos clusters e abaixo está a curva da nucleação periódica.

O *impingement* entre grãos ocasiona a redução de duas interfaces de regiões recristalizadas e não recristalizadas, conforme o esquema representado na figura 4.37. A proximidade dos núcleos indica uma antecipação ou um retardo da interferência durante a etapa de crescimento. A contigüidade é a grandeza que quantifica essa união entre interfaces recristalizadas (*impingement*). A partir dessa quantificação, obtêm-se uma forma de avaliar os desvios da aleatoriedade dos núcleos dentro da matriz.

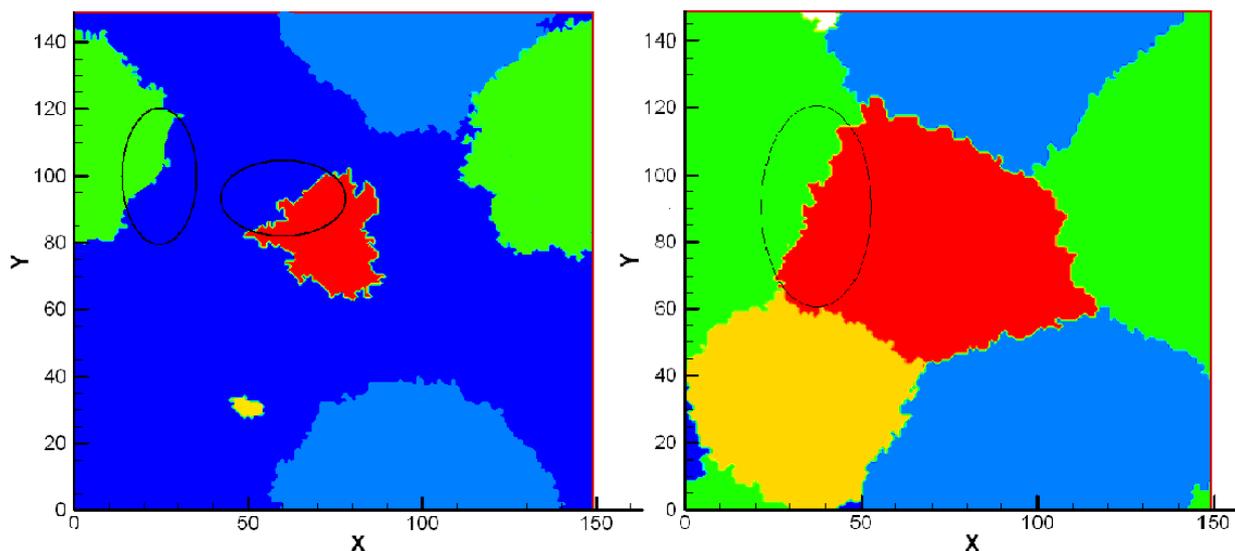


Figura 4.37 - Esquema de representação do desaparecimento de duas áreas de interfaces recrystalizadas com não recrystalizadas, e o surgimento de duas recrystalizadas com recrystalizadas. (região em azul escuro na primeira imagem representa regiões não recrystalizadas)

A partir das afirmações feitas acima deduz-se que, quanto maior a proximidade entre os núcleos, mais rápido acontece os contatos entre os grãos e, conseqüentemente, uma redução de interfaces.

Para o caso das nucleações periódicas e em grupos não existem equações exatas para descrever o fenômeno cinético. Contudo, observam-se curvas com perfis muito semelhantes ao da nucleação aleatória. Essa semelhança pode ser observada na figura 4.33. A diferença principal está no tempo necessário para se completar a reação. A simulação com nucleação periódica termina num tempo bem menor em relação à reação de matrizes contendo grupos. A área interfacial máxima por unidade de volume alcançada para matrizes com nucleação periódica é maior do que a área interfacial por unidade de volume em matrizes com nucleação aleatória e em grupos.

A conseqüência deste fato se deve à distância ideal para o crescimento entre os núcleos. O crescimento probabilístico de grãos em matrizes contendo grãos distribuídos periodicamente é muito semelhante, como mostram as figuras 4.38 e 4.39. O choque entre as interfaces recrystalizadas acontece aproximadamente em um mesmo momento para todos os núcleos. Ou seja, todos os grãos podem crescer livremente até a coerência da interferência coletiva.

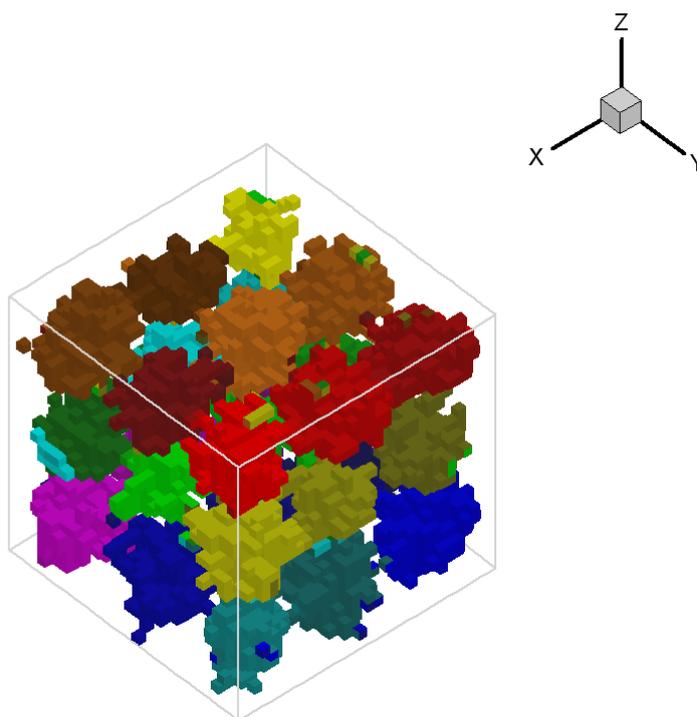


Figura 4.38 -. Contato entre os grãos durante a evolução microestrutural por simulação com probabilidade de transformação em uma matriz contendo 27 núcleos periodicamente alojados dentro da matriz.

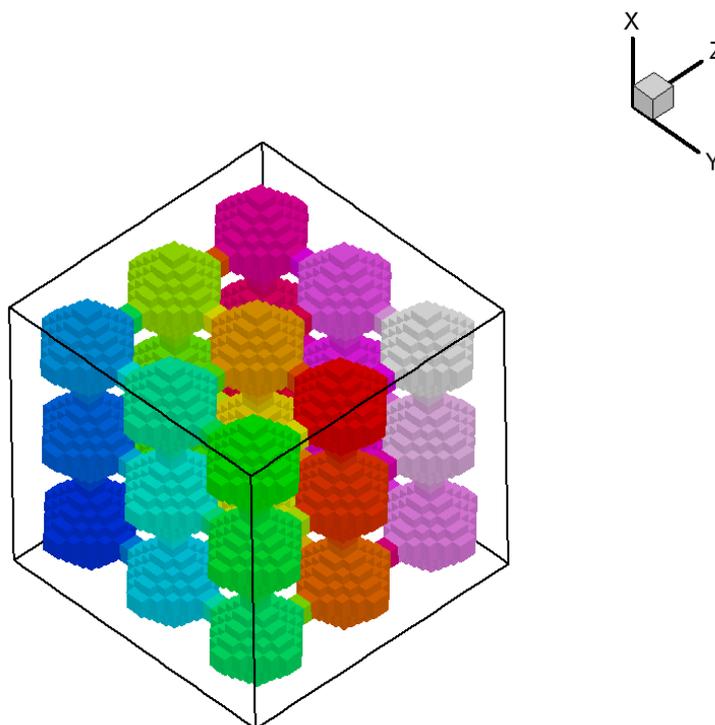


Figura 4.39 – Contato entre os grãos durante a evolução microestrutural por simulação determinística em uma matriz contendo 27 núcleos periodicamente alojados dentro da matriz.

A comparação entre as figuras 4.38 e 4.39 mostra a pouca diferença existente no impedimento para reações probabilísticas e determinísticas. A grande diferença vai estar apenas na velocidade de avanço das interfaces e no tempo até a ocorrência do *impingement*. Reações de recristalização simuladas pelo método do autômato celular com regra de transição probabilística atrasam o início do *impingement* e o final na reação (quando se compara matrizes idênticas).

Em reações contendo grupos com alta concentração de grãos, acontece uma brusca queda da quantidade de grãos que têm capacidade de crescer livre de interferências, denominou-se o fenômeno como *impingement* intra-cluster figura 4.40. Dentro de cada grupo vai ocorrer um impedimento de crescimento. Depois desse impedimento, os grãos dos clusters se unem e cada grupo comporta-se como um novo grão. A partir desse momento da evolução microestrutural, deve-se considerar cada grupo como um único grão. Dessa forma, a matriz inicialmente nucleada com “X” grupos aleatórios, terá então, “X” grãos dispostos aleatoriamente. Esse fenômeno pode acarretar uma queda aparente na velocidade de reação. Este fato se justifica, pois, os grãos localizados no centro do cluster não terão mais condição de crescimento. Essa teoria pode ser melhor entendida analisando-se os gráficos de evolução da figura 4.40.

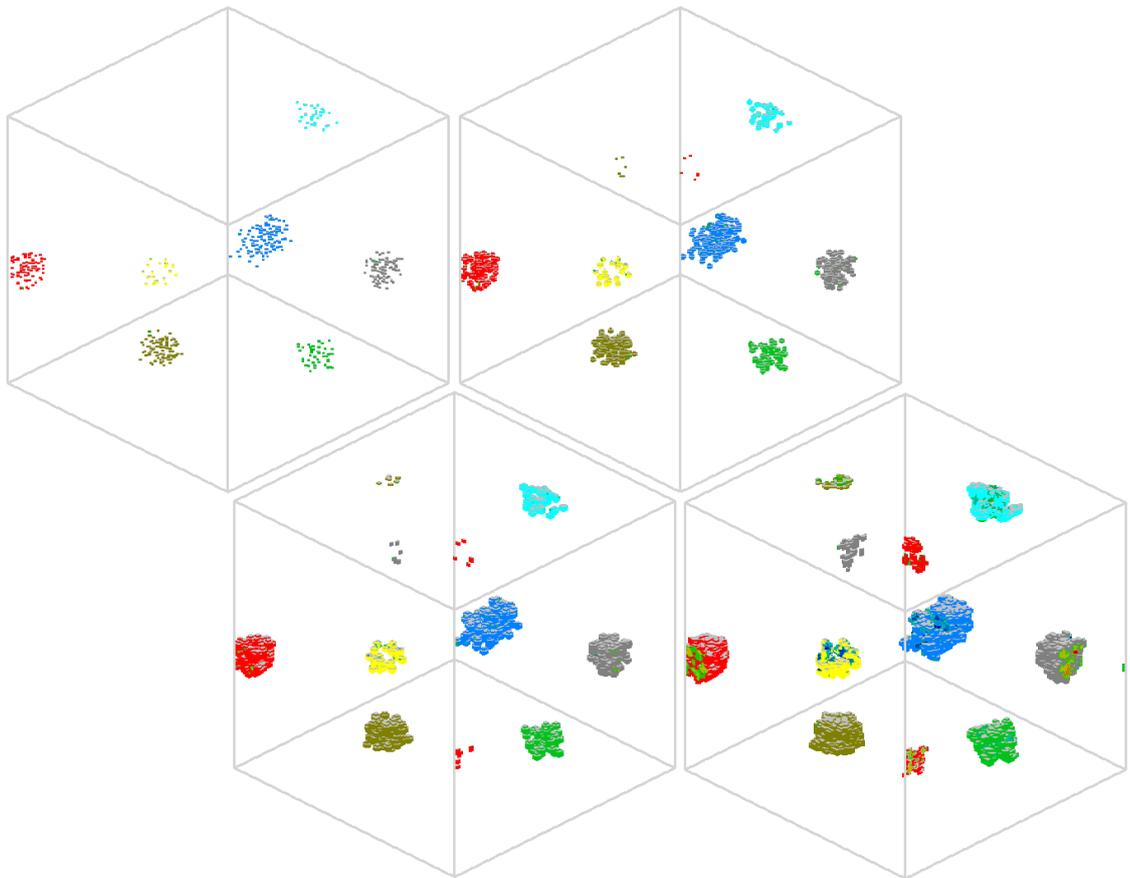


Figura 4.40 - Evolução de cada grupo até se tornar um único grão em uma matriz contendo sete grupos e 100 núcleos cada grupo.

A velocidade média de avanço das interfaces possui valores distintos para cada tipo de nucleação quando se trata de posicionamento dos núcleos dentro da matriz. Matrizes com núcleos periodicamente distribuídos possuem baixas velocidades de avanço de interface, no entanto, terminam mais rápido. Reações que possuem grupos de núcleos dentro da matriz geralmente têm alta velocidade de avanço das interfaces em relação às reações em grupos e aleatórias. Reações com núcleos alocados aleatoriamente dentro da matriz, tendem a ter velocidade de avanço das interfaces intermediária entre a reação dos clusters e da periódica.

A equidistância demonstrada na figura 4.41 entre os núcleos gera uma mínima distância entre os núcleos, este fator favorece a cinética de recristalização em termos de  $Vv$  vs. Tempo de reação.

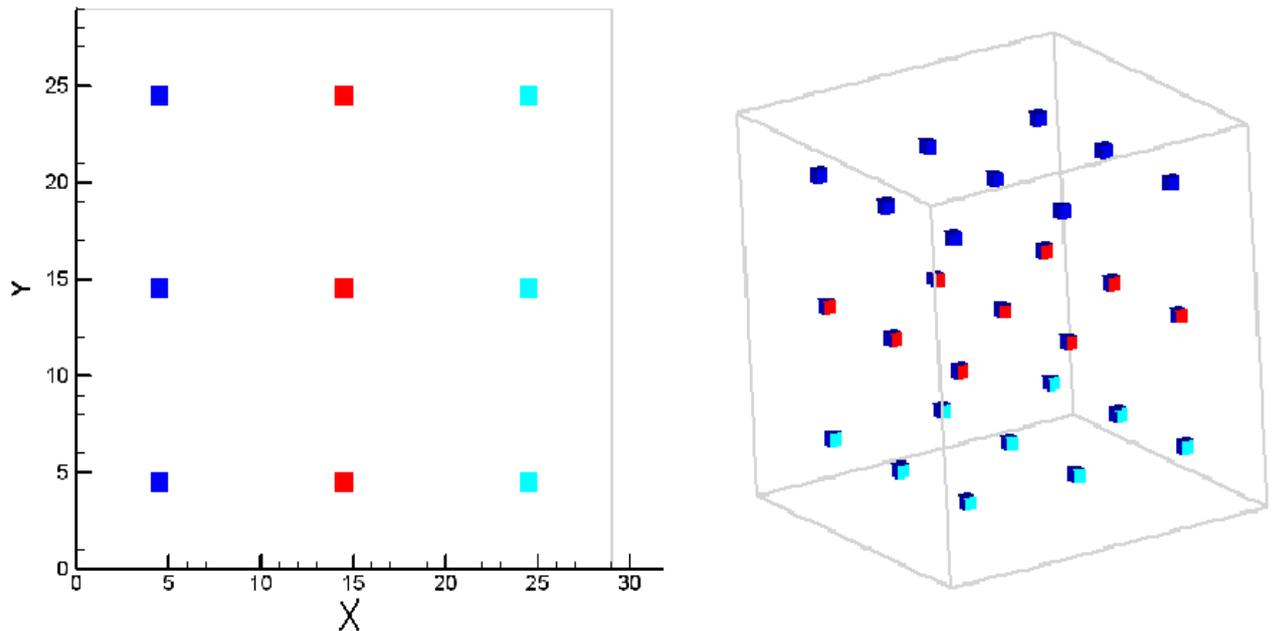


Figura 4.41 - Matriz com núcleos periódicos em 2D e em 3D (Espaçamento perfeito entre os núcleos).

## 4.5 ESTUDO DO EFEITO DO GRADIENTE DE DEFORMAÇÃO DENTRO DA MATRIZ

### 4.5.1 Resultados das simulações por elementos finitos

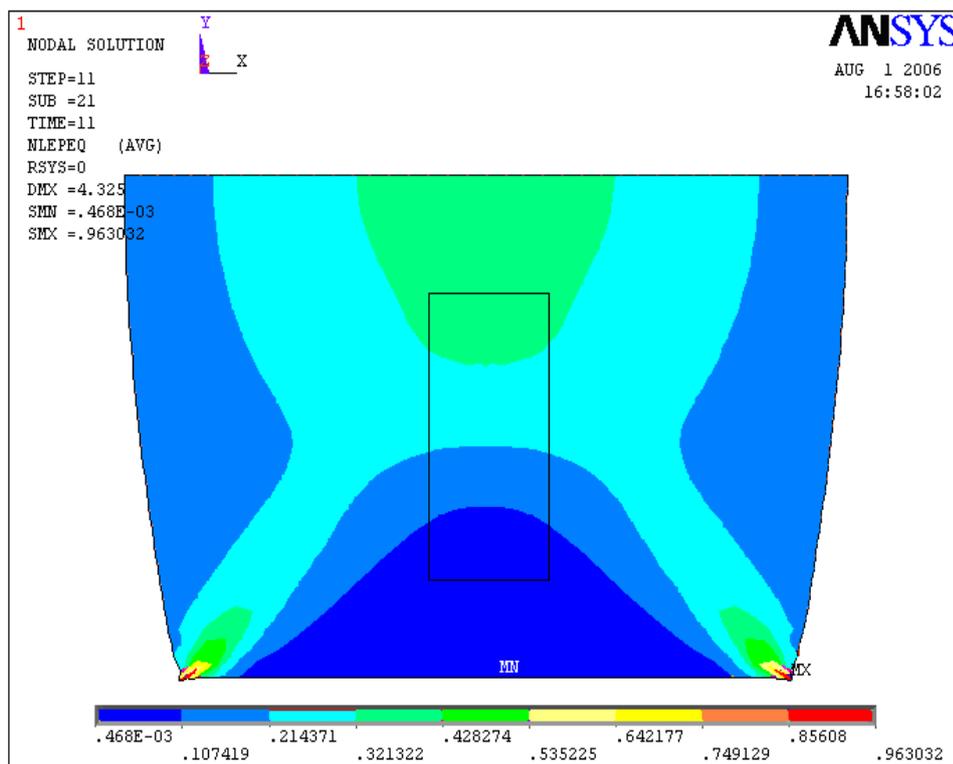


Figura 4.42 - Distribuição da deformação plástica na direção X durante o processo de carregamento de cargas <sup>[47]</sup>

A figura 4.42 é resultado da deformação plástica do metal, simulada pelo programa comercial ANSYS. É mostrado na figura acima o resultado das deformações equivalentes de von Mises após o fim da análise. O grau de deformação é demonstrado de acordo com a coloração da legenda.

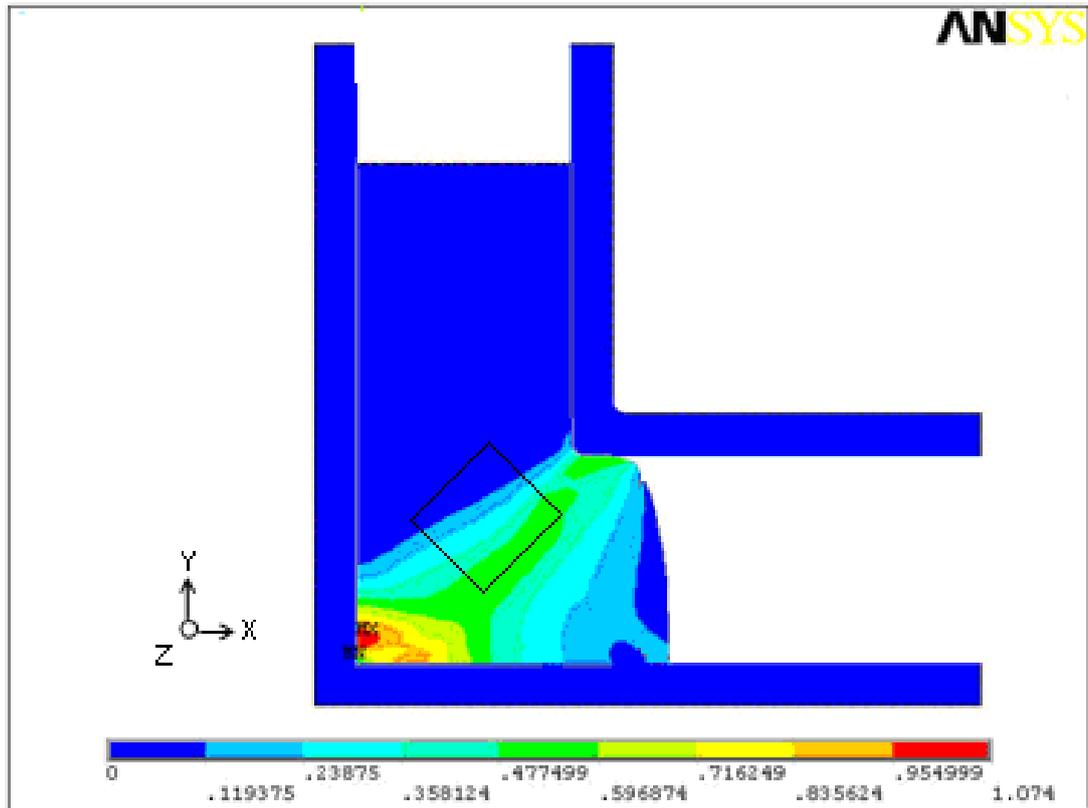


Figura 4.43 - Distribuição da deformação plástica na direção X durante o processo ECAP.

A figura acima assim como a anterior representa a deformação plástica do metal, simulada pelo programa comercial ANSYS. É mostrado na figura acima o resultado das deformações equivalentes de von Mises encontradas na literatura <sup>[43]</sup>. O grau de deformação é demonstrado de acordo com a coloração da legenda. Na parte destacada é apresentado também um gradiente de deformação.

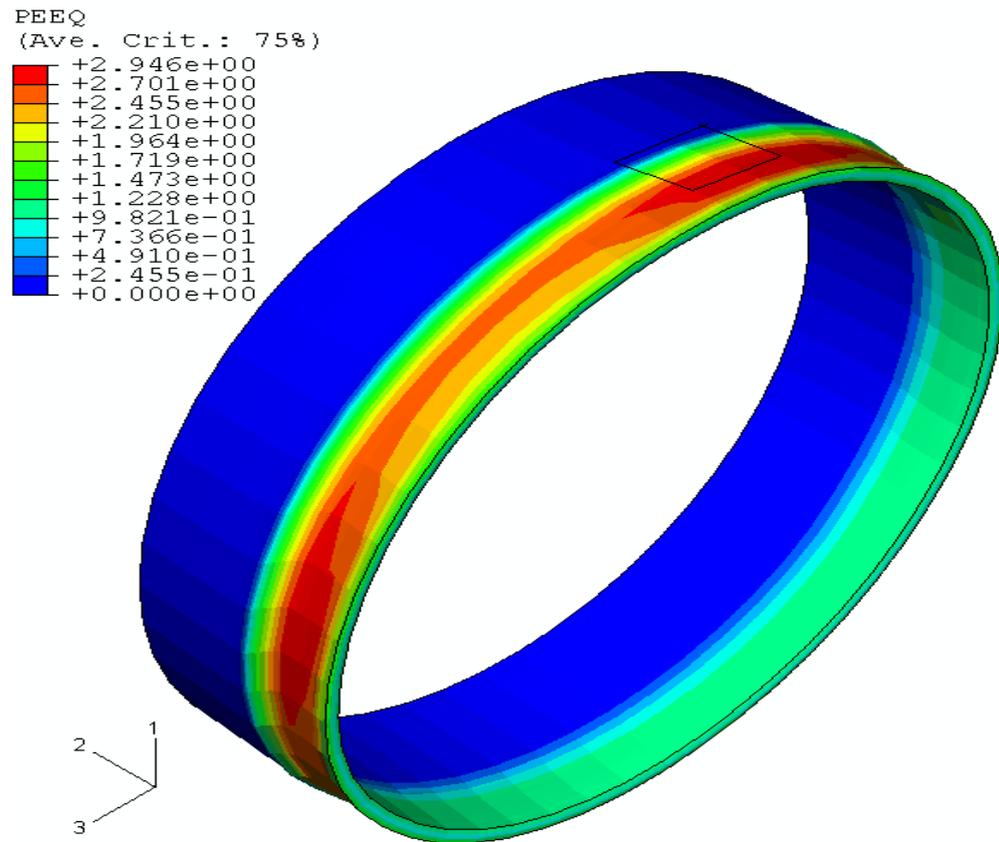


Figura 4.44 - Distribuição da deformação plástica na direção X e Y durante o processo de extrusão rotativa de tubos.

A simulação acima foi realizada Ledig <sup>[42]</sup> utilizando-se o software comercial de elementos finitos ABAQUS. A figura 4.44 também apresenta o resultado das deformações equivalentes de von Mises após o fim da análise e o gradiente de deformação na parte assinalada.

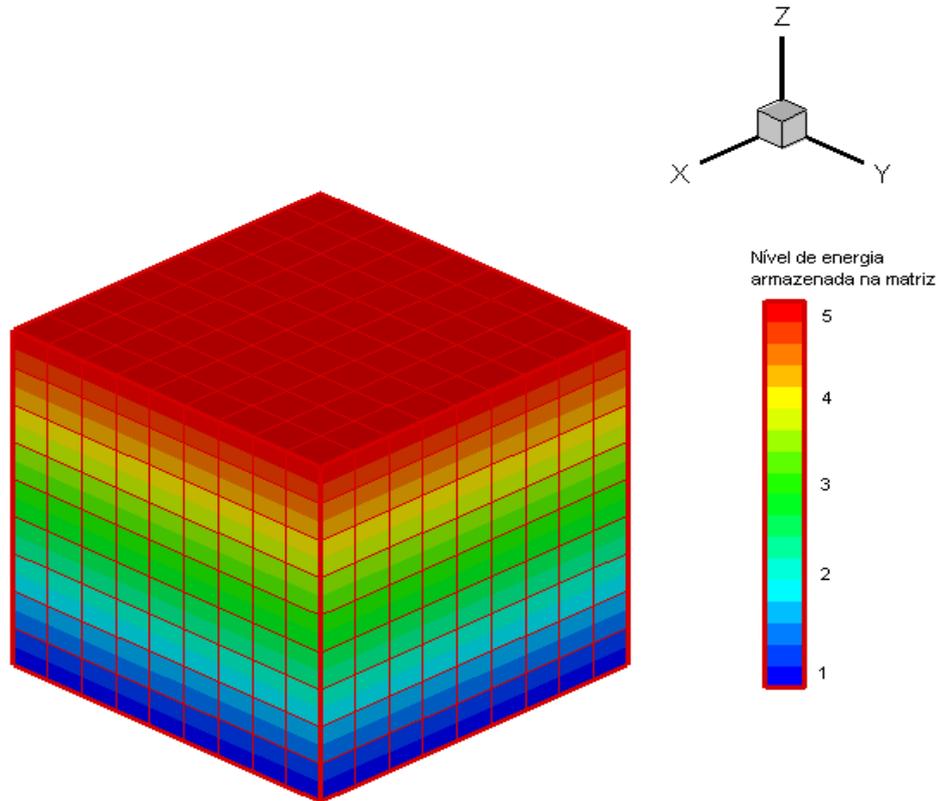


Figura 4.45 – Matriz com os níveis de energia armazenada utilizada no autômato celular.

#### 4.5.2 Resultados das simulações por automação celular

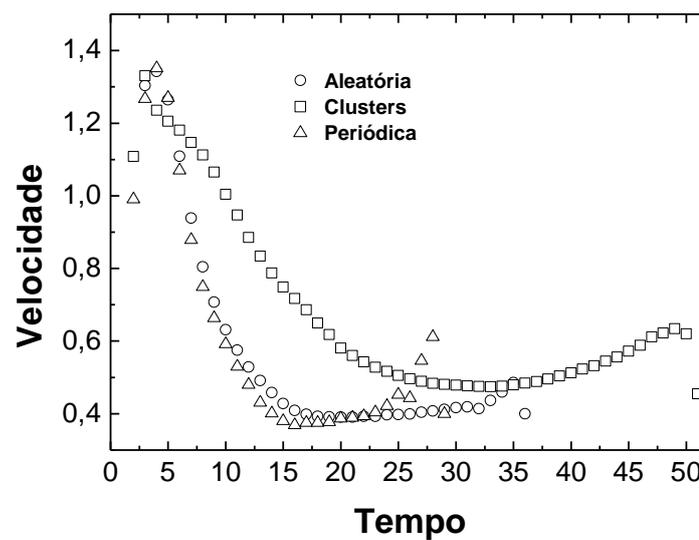


Figura 4.46 – Velocidade de avanço em função do tempo de reação para o grão isolado com gradiente de deformação para os três tipos de distribuição dos núcleos.

Analisando-se a figura 4.46 nota-se um decréscimo na velocidade de crescimento dos grãos em função do tempo de reação. Utilizando-se uma matriz contendo gradiente de deformação observa-se que, este fato ocorre mesmo sendo um autômato celular determinístico.

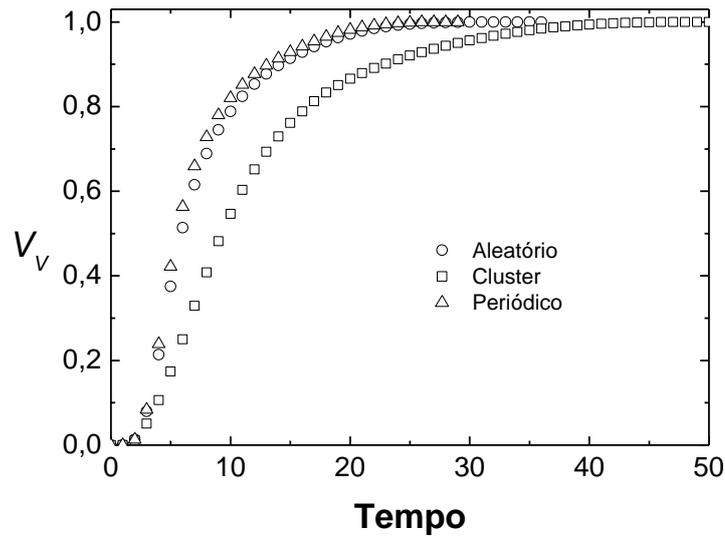


Figura 4.47 - Fração volumétrica recristalizada,  $V_v$ , em função do tempo de reação com gradiente de deformação para os três tipos de distribuição dos núcleos estudados.

A curva acima apresenta o formato sigmoidal característico da evolução da fração volumétrica em função do tempo. O perfil evolutivo da fração recristalizada continua sendo o mesmo do programa validado anteriormente <sup>[10]</sup> e da equação JMAK.

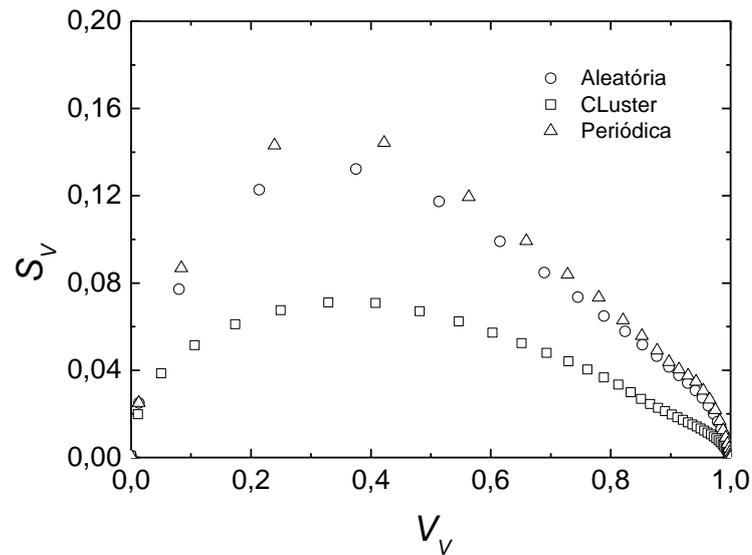


Figura 4.48 - Caminho microestrutural - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade do volume,  $S_V$ , em função da fração volumétrica com gradiente de deformação para os três tipos de distribuição dos núcleos estudados.

A maior área interfacial alcançada é da reação que aconteceu com disposição periódica dos núcleos. Reação com núcleos distribuídos aleatoriamente tem área interfacial máxima muito próxima do caso da nucleação periódica. Por último, como já era de se esperar, fica a matriz que contém grupos de núcleos. Muitos núcleos que estão bem no centro do grupo, não contribuem como interface entre a região transformada e a não transformada.

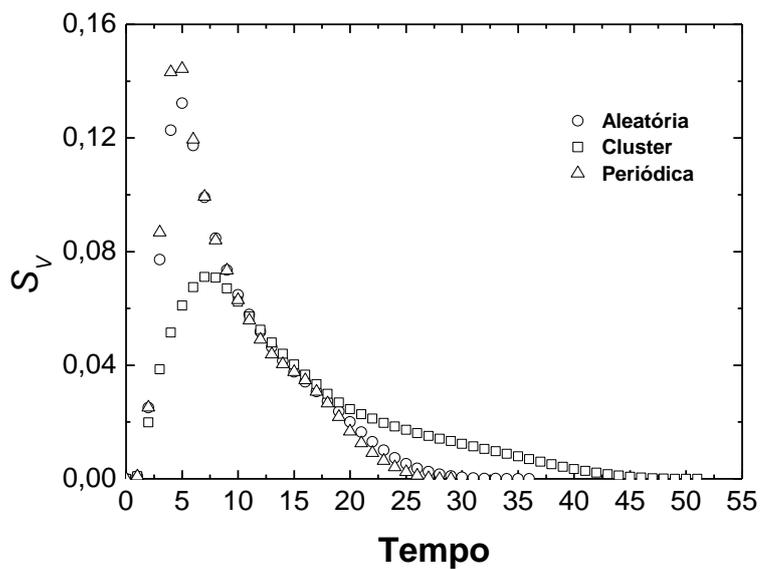


Figura 4.49 - Área interfacial entre a região transformada e não-transformada por unidade de volume,  $S_V$ , em função do tempo, com gradiente de deformação para os três tipos distribuição dos núcleos estudados.

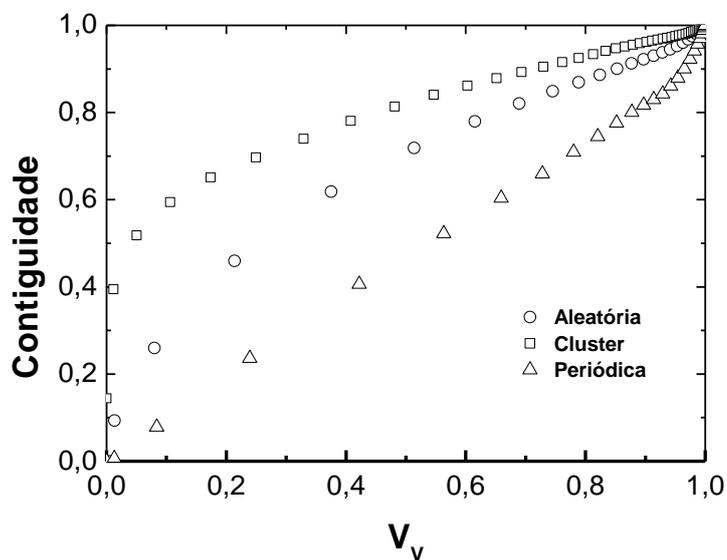


Figura 4.50 - Gráfico de contigüidade em fração volumétrica recristalizada com gradiente de deformação para os três tipos de distribuição dos núcleos estudados.

O método de simulação em questão não pode ser validado pelo método analítico, pois, este faz com que a evolução seja diferente das suposições da teoria JMAK e Vandermeer.

Nesta etapa da simulação, foram utilizadas matrizes com gradientes de deformação. A energia armazenada de forma crescente (gradiente de deformação) em uma determinada matriz pode gerar grãos alongados conforme indicado na figura 4.51. A comparação entre um grão que cresce em matrizes com gradiente de deformação e um grão que cresce em matrizes com homogeneidade de energia é apresentada na figura 4.51. Essa forma de armazenamento de energia pode acontecer em algumas regiões do material trabalhado a frio como foi observado nas figuras 4.42, 4.43 e 4.44.

Com auxílio do gráfico exibido na figura 4.46 nota-se que existe um decréscimo de velocidade de avanço das interfaces ao longo do tempo de reação. As regiões de maior energia crescem com velocidade maior do que regiões com menor energia.

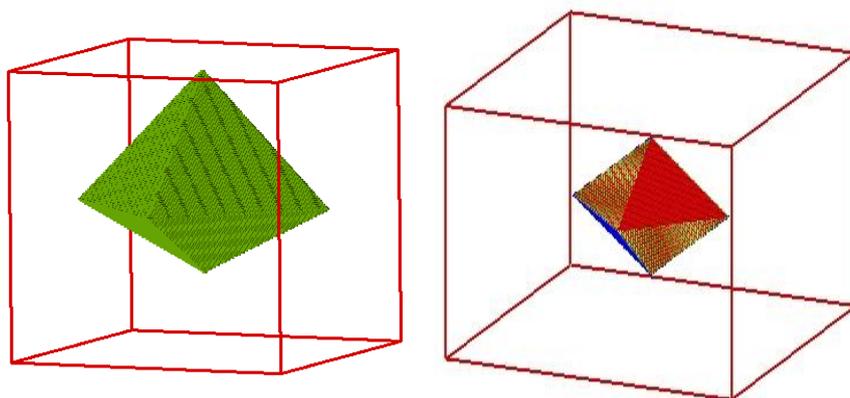


Figura 4.51 - Evolução de um grão individual em uma matriz contendo dois níveis diferentes de energia armazenada, e evolução de um grão individual em uma matriz contendo homogeneidade de energia armazenada, respectivamente.

Na figura abaixo é demonstrada detalhadamente, a evolução da microestrutura recristalizada. De acordo com o gráfico de  $V_V$  em função do tempo, a evolução obtida pela simulação é apresentada abaixo:

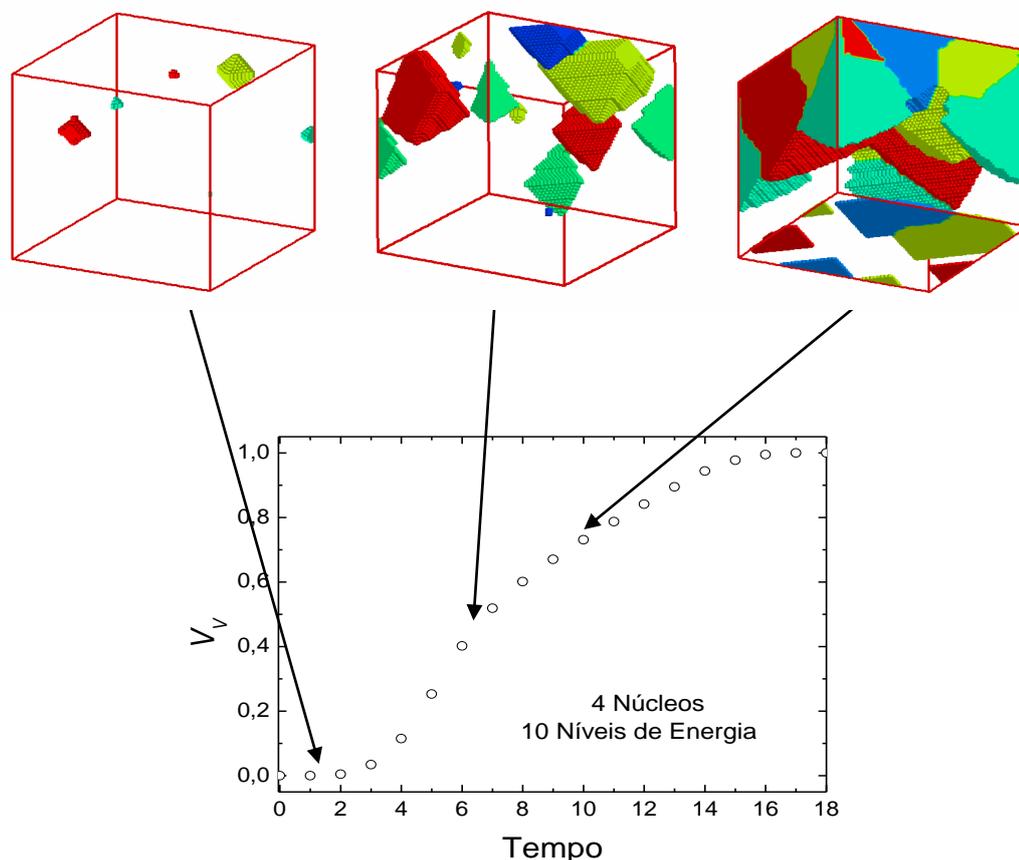


Figura 4.52 - Representação da microestrutura em função da fração recristalizada em função do tempo de reação.

A figura 4.52 acima representa o crescimento de quatro grãos dentro da matriz deformada, em aproximadamente 1, 30 e 70% de recristalização completa. Isso gera uma diferença de evolução para cada região da matriz deformada. 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, afirma-se que as regiões que determinam a velocidade final da transformação são as regiões de menor energia armazenada. Essa teoria pode ser melhor observada por meio da análise da figura 4.52.

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>[48]</sup> apresentaram um modelo em que, é levada em

consideração a recuperação como grande causadora da queda de velocidade das interfaces durante a recristalização. O caso de Stüwe, Padilha e Siciliano <sup>[48]</sup> é um caso específico em que o material estudado possui alta energia de falha de empilhamento. Rios <sup>[49]</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. O modelo de Rios <sup>[49]</sup> é um caso mais geral no qual a maioria dos materiais metálicos se encaixa. Oliveira <sup>[6]</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, pois a teoria JMAK foi desenvolvida para ser utilizada somente quando os núcleos estão localizados aleatoriamente.

#### 4.6 ESTUDO DO EFEITO DO NÍVEL DE ENERGIA ARMazenADA NO GRADIENTE DE DEFORMAÇÃO DENTRO DA MATRIZ

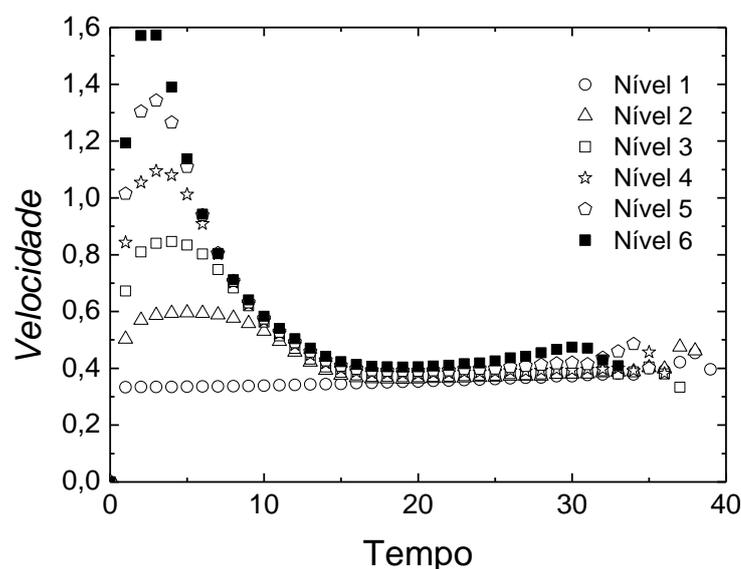


Figura 4.53 - Curvas de velocidade em função do tempo de reação em matrizes com diferentes níveis de energia armazenadas dentro da matriz.

Na figura 4.53 foram apresentadas seis curvas com perfis muito semelhantes, na qual cada reação acontece em matrizes com níveis de energia de um até seis. Dessa vez foi

utilizado um nível de energia a mais do que na simulação anterior porque agora tem-se interesse em saber o efeito do nível de energia e não apenas o efeito da energia em si. 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 de 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”.

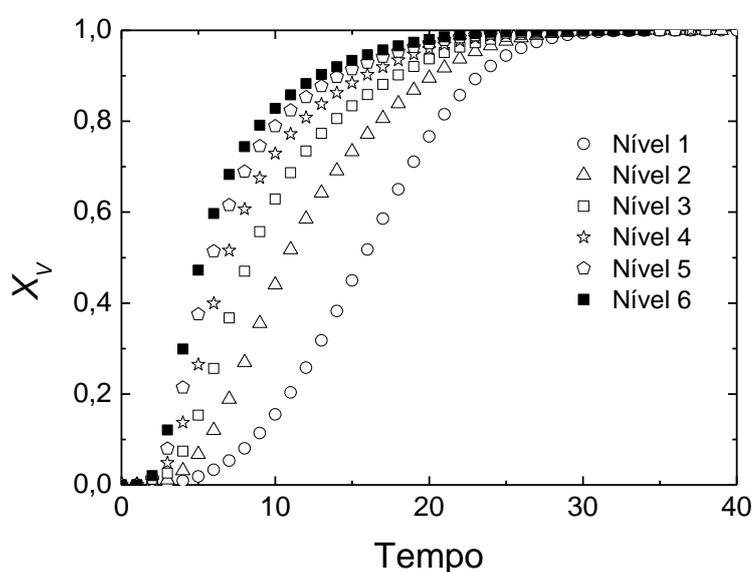


Figura 4.54 - Curvas de frações recristalizadas em função do tempo de reação em matrizes com diferentes níveis de energia armazenadas dentro da matriz.

A figura 4.54 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.

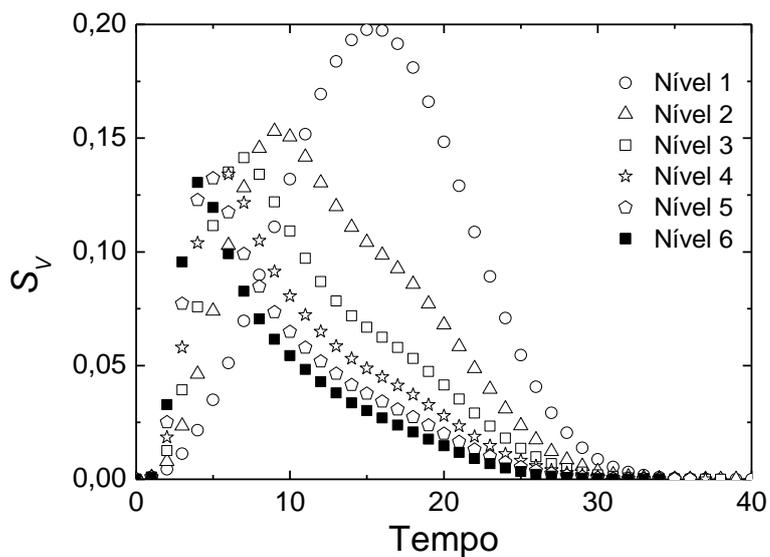


Figura 4.55 - Curvas de frações de áreas superficiais por unidade de volume em função do tempo de reação em matrizes com diferentes níveis de energia armazenadas dentro da matriz.

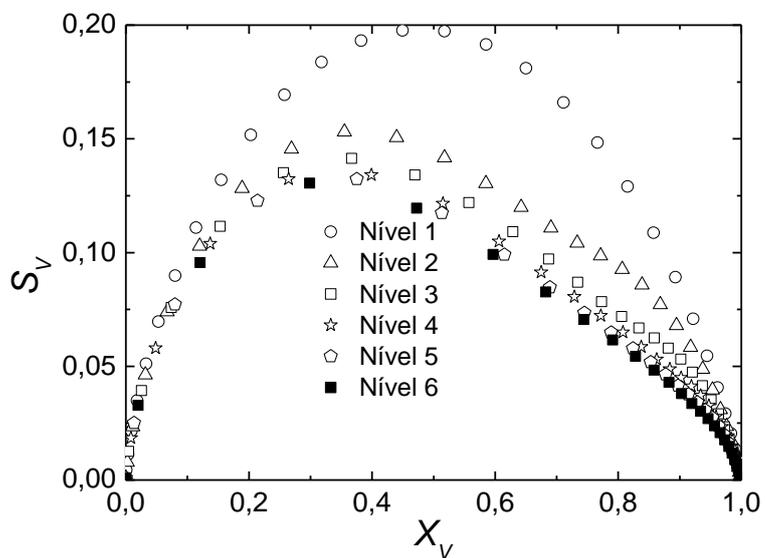


Figura 4.56 - Curvas de frações de áreas superficiais por unidade de volume em função da fração recristalizada em matrizes com diferentes níveis de energia armazenadas dentro da matriz.

Nas figuras 4.55 e 4.56 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.

Nas duas figuras seguintes são apresentados os efeitos da heterogeneidade de deformação na morfologia do grão recristalizado experimentalmente e por simulação computacional.

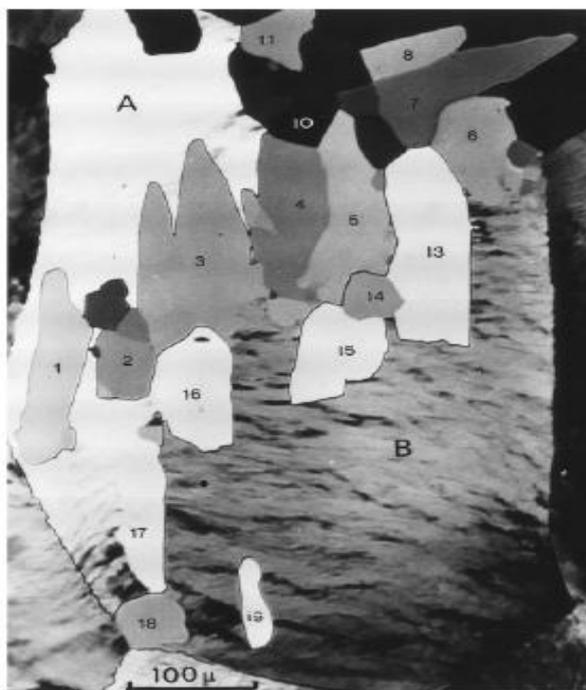


Figura 4.57 - Micrografia óptica de granulação grosseira parcialmente recristalizada de alumínio comprimido em 40% <sup>[50]</sup>.

O grão grande fragmentou-se em duas regiões de desorientação, A e B, desorientado em aproximadamente 40°. Novos grãos, 13–17, e 19 têm uma orientação A e estão crescendo para dentro de B; 1–8, 11, e 18 têm uma orientação B e estão crescendo para dentro de A. Como em todo exemplo de recristalização, a natureza não homogênea do processo é claro. Belier e Doherty <sup>[50]</sup>. A figura 4.57 tem por objetivo mostrar a morfologia bidimensional dos grãos recristalizados em uma matriz contendo heterogeneidade de energia armazenada.

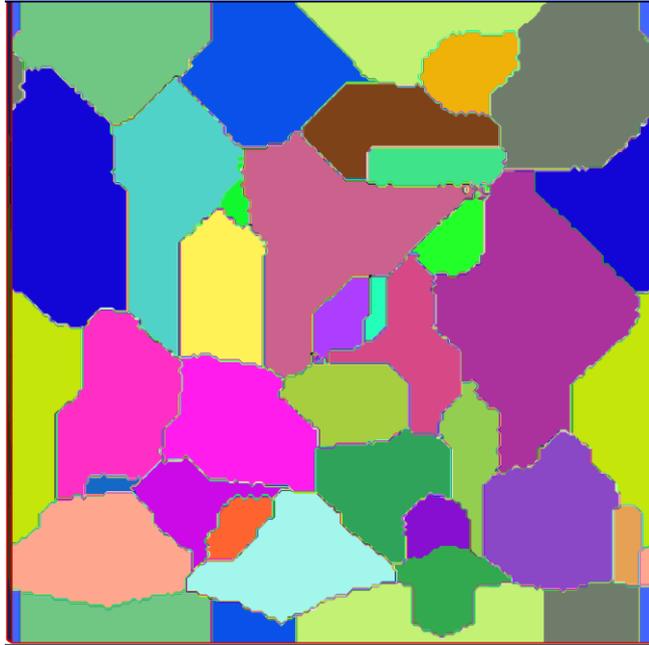


Figura 4.58 - Microestrutura em 2D simulada pelo método do autômato celular, utilizando-se a técnica de gradiente de deformação dentro da matriz.

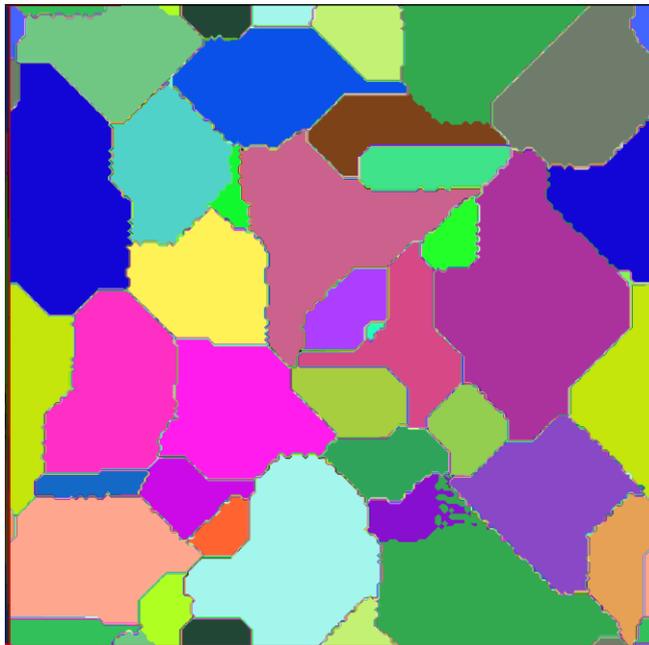


Figura 4.59 - Microestrutura em 2D simulada pelo método do autômato celular, utilizando-se homogeneidade de dentro da matriz.

A micrografia virtual construída utilizando-se homogeneidade de energia armazenada figura 4.58 apresentou pequena diferença da micrografia virtual contendo gradiente de energia figura 4.59. As figuras 4.58 e 4.59 foram feitas a partir da simulação de duas matrizes com dimensões,  $N_v$  e posicionamento dos grãos idênticos, a única diferença foi a distribuição da

energia armazenada. Mesmo tendo sido feitas com matrizes idênticas observa-se que a matriz contendo energia armazenada apresenta um leve alongamento dos grãos na direção vertical.

## 5.0 CONCLUSÕES

Nesta seção serão apresentadas todas as conclusões do autor sobre este trabalho.

### 5.1 ESTUDO DA EVOLUÇÃO DE GRÃOS INDIVIDUAIS E DISTRIBUIÇÃO DE TAMANHOS FINAIS PELO MÉTODO DO AUTÔMATO CELULAR

Após ser feita uma detalhada comparação com a parte experimental, concluiu-se que:

No início da reação, o crescimento em relação ao raio é diretamente proporcional ao tempo.

Esta linearidade no crescimento em função do tempo (formas equiaxiais) é afetada pelo *impingement*.

A distribuição de tamanhos finais de grão da simulação se assemelha à distribuição encontrada utilizando-se o método experimental.

O crescimento acontece desde o início da reação, pois não é admitido tempo de incubação para a simulação por saturação de sítios.

Todos os núcleos seguem o mesmo perfil de crescimento até o início do *impingement*, pois a energia armazenada está homogeneamente distribuída na matriz.

Não existem interferências para o avanço das interfaces, por esse motivo a velocidade tem valor aproximadamente de 0.33 [unidade de aresta/unidade de tempo].

Após o *impingement* cada núcleo adquire seu próprio perfil de evolução considerando-se raio ou volume em função do tempo.

## **5.2 ESTUDO DO EFEITO DA TAXA DE NUCLEAÇÃO ADOTADA DURANTE A REAÇÃO DE RECRISTALIZAÇÃO.**

O código desenvolvido para simular a recristalização em 3D pelo método do autômato celular, mostrou-se consistente com as teorias analíticas quando é utilizada localização aleatória dos núcleos.

Foi sempre possível encontrar boas concordâncias entre simulada e calculado com as curvas do tipo  $V_v$  vs. Tempo  $S_v$  e vs. Tempo para taxa constante de nucleação.

O caminho microestrutural também apresentou uma boa concordância da curvada teoria analiticamente exata com a simulação computacional;

A taxa de nucleação tem grande influência na cinética de reação, quanto maior a taxa, mais rápido termina a reação.

## **5.3 ESTUDO DO EFEITO DO TIPO DE NUCLEAÇÃO E DA VELOCIDADE DE CRESCIMENTO**

Com a concordância obtida entre simulado e calculado, conclui-se que o método é viável para simulações de transformações de nucleação e crescimento (recristalização).

Com o auxílio da figura 4.25 pode-se concluir também que a evolução microestrutural por meio de simulação computacional se assemelha muito a uma evolução real.

A nucleação constante tende a apresentar uma cinética de recristalização mais lenta em relação à saturação de sítios como era previsto analiticamente.

## **5.4 ESTUDO DO EFEITO DA DISTRIBUIÇÃO DOS NÚCLEOS E DA VELOCIDADE DE CRESCIMENTO**

O posicionamento dos núcleos dentro da matriz ocasiona alterações tanto na velocidade de avanço das interfaces quanto na velocidade de reação (cinética de reação).

A contigüidade é uma grandeza que é muito sensível a não aleatoriedade da distribuição dos núcleos. Visualizando as curvas apresentadas na figura 4.29, fica evidente a diferença entre os três casos de distribuição espacial de núcleos estudados.

O método de probabilidade de transformação pode ser uma ótima ferramenta para o estudo de casos que ainda não existem equações analiticamente exatas para descrever fenômenos de transformações com nucleação e crescimento. Como no caso de reações com disposição de núcleos não aleatórias: matrizes contendo *clusters* ou com núcleos dispostos periodicamente (equidistantes).

## **5.5 ESTUDO DO EFEITO DO GRADIENTE DE DEFORMAÇÃO DENTRO DA MATRIZ**

A forma de armazenamento da energia na matriz encruada tem grande significância na velocidade de avanços das interfaces.

Para que ocorra um decréscimo na velocidade de crescimento não é necessário que o gradiente de deformação esteja ao redor do núcleo.

O espaçamento entre um grão e outro, pode acelerar ou retardar o início do *impingement*, afetando assim a mobilidade de cada grão.

Os gradientes de deformação somados ao tipo de disposição espacial dos núcleos têm grande influência na velocidade de reação dentro de uma matriz encruada.

Além da queda da velocidade das interfaces recristalizadas, a morfologia dos grãos também se assemelharam mais com os dados experimentais <sup>[50]</sup> utilizando-se a implementação do novo método.

O método dos elementos finitos foi uma ótima ferramenta para auxiliar na distribuição de energia armazenada na microestrutural.

## **5.6 ESTUDO DO EFEITO DO NÍVEL DE ENERGIA ARMAZENADA NO GRADIENTE DE DEFORMAÇÃO DENTRO DA MATRIZ**

Quanto maior o nível de energia dentro de um gradiente de deformação, mais acentuada será a queda da velocidade das interfaces (maior será a velocidade inicial).

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.

## **6.0      RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS**

- a) Dimensionalização do código em duas e em três dimensões para vários materiais
- b) Comparação mais detalhada com resultados experimentais
- c) Inserir sub-rotina para calcular a curvatura
- d) Introduzir efeito de textura
- e) Introduzir efeito da difusão
- f) Introduzir efeito da recuperação
- g) Testar outras formas de armazenamento de energia na matriz deformada
- h) Acoplar o código de recristalização ao de crescimento de grão
- i) Acoplar diretamente a técnica dos elementos finitos a técnica do autômato celular para simular a recristalização
- j) Acoplar as três técnicas citadas nos itens “h” e “i”, formando uma seqüência de simulação (deformação, recristalização e crescimento de grão).
- k) Utilizar a microestrutura simulada para calcular  $N_v$ ,  $V_v$ ,  $S_v$  e curvatura pelo método experimental.
- l) Utilizar o código do autômato celular para simular outras reações de nucleação crescimento.

## 7.0 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Wolfram, S. *Statistical Mechanics of Cellular Automata*, Reviews of Modern Physics, Vol. 55, No. 3, p. 601-644, 1986.
- [2] Wolfram, S. *Theory and Applications of Cellular Automata*, World Scientific Publications: 1986.
- [3] Oliveira, J.C.P.T *Simulação Do Efeito Da Distribuição Dos Núcleos Na Cinética E Caminho Microestrutural Da Recristalização Pelo Método Do Autômato Celular – Dissertação de Mestrado - PG Engenharia Metalúrgica, UFF, Volta Redonda, 2004.*
- [4] 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.
- [5] Lacerda, A. C. Carvalho, J. S. Miranda, R. R. Castro, J. A. de e Rios, P. R. *Simulação da Recristalização em duas Dimensões Utilizando o Método do Autômato Celular*, Anais de eventos ABM, 2003.
- [6] 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, Brasil, 2005.*

- [7] Rios, P. R. ; Carvalho, J. J. S ; Caneda S, T; Paula, F. V. L.; Castro, J A. *Cellular automata simulation of the effect of nuclei distribution on the recrystallization kinetics*. Materials Science Forum, v. 467, p. 659-664, 2004.
- [8] Rios, P. R. Oliveira, J C P T. Oliveira, V. T. et al. *Microstructural descriptors and cellular automata simulation of the effects of non-random nuclei location on recrystallization in two dimensions*. Materials Research, Apr./June 2006, vol.9, no.2, p.165-170. ISSN 1516-1439.
- [9] 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 vol.9 no.2 São Carlos, Apr./June 2006.
- [10] Salazar, T. C. Lopes, F. V. Carvalho, J. S Castro,. J. A e Rios,. P. R. *Simulação em Autômato Celular do Efeito da Distribuição dos Núcleos na Cinética de Recristalização*, Anais de evento ABM, 2004.
- [11] Johnson, W. A. and Mehl, R. F, Metallurgical Transactions Soc. A.I.M.E., vol. 135, p.416–441, 1939.
- [12] Kolmogorov, A. N. *Izv. Akad. Nauk. USSR-Ser-Matemat*, vol.1(3), p.355, 1937.
- [13] Avrami, M. *Journal of Chemical Physics*, vol. 7, p.1103-1112, 1939.

- [14] Avrami, M. *Journal of Chemical Physics*, vol. 8, p. 212, 1940.
- [15] Von Neumann, J. *Theory of self-reproducing automata*, in: A.W. Burks (Ed.), *University of Illinois Lectures on the Theory and Organisation of Complicated Automata*, Urbane, 1949.
- [16] Loeve, M. *Probability Theory*, 3rd ed. Van Nostrand, New York, 1963.
- [17] Oliveira, G.M.B. *Autômatos Celulares: Aspectos Dinâmicos e Computacionais*. Anais do XXIII Congresso da Sociedade Brasileira de Computação, Ago. 2003.
- [18] Waterman, M. S. *Some Applications Of Information Theory To Cellular Automata*, North-Holland, Amsterdam Physical 10D, 45-51, 1984.
- [19] Chávez G.C e Liang Z.. *Sistema Celular Evolutivo para Reconhecimento de Padrão Invariante*. Anais do IV Workshop em Tratamento de Imagens, UFMG, 70, Jul. 2003.
- [20] Silva A.C., *Modelagem Comportamental Para Agentes Autônomos Em Ambiente Reai*, Dissertação de mestrado, Sc. Universidade Estadual do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil, 2003.
- [21] Rodrigues, L.C.R *Vida Artificial em Ambientes Virtuais* - Dissertação de Mestrado Sc. PG Engenharia da Computação USP São Paulo, Brasil, 2005.

- [22] Hallan, S. S. *Um Modelo de Autômatos Celulares para Diferenciação Celular* Dissertação de Mestrado em Física Aplicada da Universidade Federal de Viçosa, Minas Gerais, 2003. Disponível em: <[http://www.ufv.br/dpf/mestrado/mestrado\\_teses.html](http://www.ufv.br/dpf/mestrado/mestrado_teses.html)>. Acessado em: 06 abr. 2006.
- [23] Gandin, Ch.-A. and Rappaz, M. A. *3d Cellular Automaton Algorithm For The Prediction of Endritic Grain Growth*. *Acta Materialia*, Vol. 45, No. 5, pp. 2187-2195, 1997
- [24] Vandyoussefi, and M. Greer, A. L. *Application of cellular automaton-finite element model to the grain refinement of directionally solidified Al-4.15 wt% Mg alloys* *Acta Materialia*, 50, 1693-1705, 2002.
- [25] Atwood, R. C. and Lee, P. D. *Simulation of the three-dimensional morphology of solidification porosity in an aluminum – silicon alloy* *Acta Materialia* 51, 5447-5466, 2003.
- [26] Pezzee, C. F. and Dunand, D. C. *The impingement effect of an inert, immobile second phase on the recrystallization of a matrix* *Acta Metallurgica et Materialia*, Volume 42, Issue 5, May 1994, Pages 1509-1524.
- [27] Davies, C. H. J. *The Effect of Neighbourhood on the Kinetics of a Cellular Automaton Recrystallisation Model*, *Scripta Metallurgica et Materialia*, Vol. 33, N° 7, p. 1139-1143, 1995.
- [28] Marx, V. Reher, and F. R. and Gottstein, G. *Simulation of primary recrystallization using a modified three-dimensional cellular automaton* *Acta Materialia*, Volume 47, Issue 4, 10 March 1999, Pages 1219-1230.

- [29] Hesselbarth, H.W. and Göbel, I.R. *Simulation of Recrystallization by Cellular Automata*, Acta Metallurgica. Mater, vol. 39, n°. 9, p.2135–2143, 1991.
- [30] Goetz, R. L. and Seetharaman, V. *Static Recrystallization Kinetics with Homogeneous and Heterogeneous Nucleation using a Cellular Automata Model*, Metallurgical and Materials Transactions, Vol 29A, p. 2306-2321, 1998.
- [31] DeHoff, R. T. *Annealing Processes Recovery, Recrystallization and Grain Growth* (edited by N. Hansen, D. Juul-Jensen, T. Leffers e B. Ralph), p. 35–52. Risø National Laboratory, Roskilde, Dinmark, 1986.
- [32] Vandermeer, R. A. Masumura, R. A. and Rath, B. B. *Microstructural Paths of Shape-Preserved Nucleation and Growth Transformations*, Acta Metallurgica et Materialia. Vol. 39, No. 3, pp. 383-389, 1991.
- [33] Bay, B. and Hansen, N. *Recrystallization in Commercial Pure Aluminum* , Metallurgical Transaction A V.15A, pp.287-296, 1984.
- [34] Rosen, A. Burton, M. S. and G. V. Smith *Recrystallization of high purity iron*. Transactions of the Metallurgical Society of AIME, vol. 230, pp205-215, 1964.
- [35] Liao, G. J. Gall, R. Le and Saindreman, G. *Experimental investigation into kinetics of recrystallization of cold rolled nickel*. Materials Science and Technology (London), vol 14, pp. 411-416, 1998.

- [36] Vandermeer, R. A. and Rath, B. B. *Microstructural Modeling of Recrystallization in Deformed Iron Single Crystals* Metallurgical Transaction. A 20A, 391 1989.
- [37] 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.
- [38] Lauridsen, E. Juul Jensen, M. D. and Poulsen, H. F. *Kinetics of Individual Grains During Recrystallization*, Scripta Matereritalia, 43 561–566, 2000.
- [39] Cahn, J. W. e Hagel, W. *Decomposition of Austenite by Diffusional Processes*, Z. D. Zackay e H. I. Aaronson (Eds), Interscience Pub, New york, NY, p. 131–196, 1960.
- [40] Vandermeer, R. A. *Microstructural descriptors and the effects of nuclei clustering on recrystallization path kinetics*. Acta Materialia, vol. 53, nº 5, p. 1449–1457, 2005.
- [41] R. A. Vandermeer e D. Juul-Jensen, Materials Science Fórum, v. 467– 470, p. 193–196, 2004.
- [42] LEDIG, M. A. *Análise do Processo de Extrusão Rotativa de Tubos* Dissertação de Mestrado – PG Engenharia Metalúrgica, UFF Volta Redonda, 2006.
- [43] BALDISSERA, M. B. *análise por elementos finitos do aço VMB 300 processado via ECAP (Prensagem em canais angulares)* Exame de qualificação numérica, PG, UFF Volta Redonda, 2006.

- [44] K. Lücke and H. P. Stüwe, *Recovery and Recrystallization of Metals*, p. 131, Interscience, New York (1963).
- [45] Lauridsen, E. M. Poulsen, H. F. Nielsen, S. F. and Juul Jensen, D. *Recrystallization kinetics of individual bulk grains in 90% cold-rolled aluminium* Acta Materialia 51, 4423–4435, May 2003.
- [46] Juul Jensen, D. *Recrystallization kinetics: from statics to dynamics and from 2D to 3D*. Materials Science and Technology v. 21 n° 12 2005
- [47] Assis, W. L. S, Medeiros, N. e Rios, P.R. *Study Of The Kinetic One Of Primary Recrystallization In Matrices Having Deformation Gradients Using It The Coupling Of The Methods Of Computational Simulation: Finite Elements And Cellular Automaton* 19<sup>th</sup> International Congress of Mechanical Engineering, November, Brasília, DF, 2007,
- [48] 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
- [49] 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
- [50] S. P. Bellier, R. D. Doherty, Acta Metallurgica., vol. 25, p. 521–538, 19770.

# Livros Grátis

( <http://www.livrosgratis.com.br> )

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)  
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)  
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)  
[Baixar livros de Matemática](#)  
[Baixar livros de Medicina](#)  
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)  
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)  
[Baixar livros de Meteorologia](#)  
[Baixar Monografias e TCC](#)  
[Baixar livros Multidisciplinar](#)  
[Baixar livros de Música](#)  
[Baixar livros de Psicologia](#)  
[Baixar livros de Química](#)  
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)  
[Baixar livros de Serviço Social](#)  
[Baixar livros de Sociologia](#)  
[Baixar livros de Teologia](#)  
[Baixar livros de Trabalho](#)  
[Baixar livros de Turismo](#)