

DESENVOLVIMENTO DE UM CÓDIGO EM 3D PARA SIMULAR A RECRISTALIZAÇÃO PELO MÉTODO DO AUTÔMATO CELULAR

Valmir Torres de Oliveira ¹
 Luciana Pereira de oliveira ¹
 Paulo Rangel Rios ¹
 José Adilson de Castro ¹

Resumo

Modelos analíticos como o modelo clássico de Johnson-Mehl, Avrami e Kolmogorov (JMAK) tem sido usados para modelar o fenômeno da recristalização. Recentemente, a evolução microestrutural tem sido estudada por simulação computacional. Neste trabalho, a simulação computacional é feita pelo método do autômato celular em 3D. As teorias cinéticas e do caminho microestrutural são comparadas com a simulação do autômato celular, e é observado um bom acordo. Também é avaliado o efeito da distribuição dos núcleos na cinética e no caminho microestrutural. Neste trabalho, a metodologia foi aplicada tendo em mente a recristalização. Contudo o código desenvolvido em 3D, baseado no método do autômato celular, é geral e pode ser adaptado para simular transformações de fase por nucleação e crescimento.

Palavras-chave: Cinética; Recristalização; Simulação computacional; Autômato celular

DEVELOPMENT OF A 3D COMPUTER PROGRAM BASED ON CELLULAR AUTOMATA TO SIMULATE THE RECRYSTALLIZATION PHENOMENA

Abstract

Analytical Models based on the classic development of Johnson-Mehl, Avrami and Kolmogorov (JMAK) has been used to model the recrystallization phenomenon for many years. More recently, computer simulation has been used to simulate microstructural evolution. In this work, the cellular automata method in 3D is used to develop a computer code to simulate recrystallization kinetics. Analytical theories are compared with cellular automata simulations and a good agreement is observed. Additionally, the effect of the distribution of the nuclei on the kinetics and on the microstructural path is evaluated. In this work, the methodology was applied having in mind the recrystallization phenomena. However, the computer program developed in 3D, based in the method of the cellular automata, is general and can be adapted to simulate nucleation and growth phase transformations.

Key words: Kinetics; Recrystallization; Computer simulation; Cellular automata.

1 INTRODUÇÃO

Os materiais metálicos têm suas propriedades mecânicas alteradas quando são deformados a frio. O tratamento térmico de recristalização é uma das ferramentas capazes de recuperar a microestrutura e as propriedades dos metais deformados. Durante a recristalização, grãos "novos", livres de deformação, se formam. Após a recristalização, o metal apresenta microestrutura similar à que existia antes da deformação. A recristalização ocorre através da nucleação e do crescimento desses novos grãos.^(1,2)

A teoria fenomenológica de Johnson e

Mehl,⁽³⁾ Avrami⁽⁴⁾ e Kolmogorov,⁽⁵⁾ teoria de JMAK, é muito empregada no modelamento analítico da recristalização. A teoria de JMAK e o conceito de caminho microestrutural de DeHoff,⁽⁶⁾ utilizada por Vandermeer⁽⁷⁾ são ferramentas matemáticas utilizadas para descrever analiticamente a recristalização.

Neste trabalho, um código computacional que simula a recristalização utilizando o método do autômato celular (AC)^(8,9) em 3D é apresentado. Quando as mesmas considerações utilizadas nas teorias analíticas são empregadas na simulação do autômato celular em 3D, os resultados têm uma boa concordância com as soluções analíticas matematicamente exatas. Além da comparação da simulação com a teoria, é feita uma avaliação do efeito da distribuição dos núcleos na cinética e no caminho microestrutural.

¹ Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica-EEIMVR-UFF, Av. dos Trabalhadores 420 – Vila Sta. Cecília – 27255-125 – Volta Redonda – RJ
 adilson@metal.eeimvr.uff.br www.eeimvr.uff.br

2 DESENVOLVIMENTO DOS MODELOS ANALÍTICOS EM 3D

2.1 A Teoria de JMAK

O processo de recristalização tem seu início na nucleação de novos grãos na matriz deformada e na próxima etapa, estes novos grãos crescem consumindo a matriz deformada. Portanto, a recristalização pode ser tratada como um processo de nucleação e crescimento. Neste trabalho será considerada apenas a nucleação por saturação de sítios, ou seja, todos os núcleos são formados no instante inicial ($t = 0$). Sendo assim, as grandezas fundamentais são: número de núcleos por unidade de volume, N_V , e velocidade de crescimento do núcleo recristalizado, G .

Supõe-se que os núcleos sejam todos formados em $t = 0$ e que os grãos cresçam dentro do material deformado com uma taxa linear G . Além disto, considera-se que os núcleos sejam esferas de raio R . Logo, o volume de cada grão varia com o cubo do raio e a fração do material recristalizado (X_V) aumenta rapidamente com o tempo. Entretanto, os novos grãos colidirão um com outro e a taxa de recristalização então diminuirá, tendendo a zero quando X_V tende a 1.

Supondo-se que os núcleos crescem sem nenhuma interferência "impingement", é obtida a fração recristalizada no espaço estendido, X_{VEX} . Durante um intervalo de tempo dt , há um aumento na parcela do volume estendido, dX_{VEX} ($dX_V + dX_{Vfantasma}$). Considerando que $dX_{Vfantasma} = X_V \cdot dX_{VEX}$, têm-se as seguintes equações:

$$dX_{VEX} = dX_V + X_V \cdot dX_{VEX} \quad (1)$$

$$dX_V = dX_{VEX} - X_V \cdot dX_{VEX} \quad (2)$$

$$dX_V = (1 - X_V) \cdot dX_{VEX} \quad (3)$$

sendo que $(1 - X_V)$ é a fração do material não recristalizado. Aplicando o seguinte desenvolvimento à Eq.3, é obtido a Eq.9 para fração recristalizada em função do volume estendido:

$$dX_{VEX} = \frac{dX_V}{1 - X_V} \quad (4)$$

$$\int_0^{X_{VEX}} dX_{VEX} = \int_0^{X_V} \frac{dX_V}{1 - X_V} \quad (5)$$

$$X_{VEX} = \ln \frac{1}{1 - X_V} \quad (6)$$

$$\exp(X_{VEX}) = \frac{1}{1 - X_V} \quad (7)$$

$$1 - X_V = \frac{1}{\exp(X_{VEX})} \quad (8)$$

$$X_V = 1 - \exp(-X_{VEX}) \quad (9)$$

O raio do grão será dado pelo produto entre a velocidade de crescimento, G , e o tempo, t :

$$R = G \cdot t \quad (10)$$

Se o volume de um grão recristalizado é V , no tempo t , então a fração do material, a qual teria recristalizado se os núcleos fantasma fossem reais (X_{VEX}), é conhecida como volume estendido, e é dada pela Eq.11:

$$X_{VEX} = V \cdot N_V \quad (11)$$

Logo, o volume do grão recristalizado (suposto esférico), V , será dado pela Eq.12:

$$V = \frac{4\pi}{3} R^3 \quad (12)$$

Assim, se a velocidade de crescimento G é constante, e combinando as Eqs. 10 a 12, obtêm-se a Eq.13:

$$X_{VEX} = \frac{4\pi}{3} N_V G^3 t^3 \quad (13)$$

Aplicando-se a Eq.13 à Eq. 9, é obtida a fração recristalizada, Eq.14:

$$X_V = 1 - \exp\left(-\frac{4\pi \cdot N_V \cdot G^3 t^3}{3}\right) \quad (14)$$

Escrevendo-se a Eq.14 de uma forma mais geral é obtida a Eq.15:

$$X_V = 1 - \exp(-kt^n) \quad (15)$$

onde k e n são constantes. Esta equação é frequentemente chamada de equação de JMAK.

2.2 Caminho Microestrutural

Da mesma forma que no modelo JMAK, é conveniente usar o conceito de volume estendido (X_{VEX}), cuja relação com a fração recristalizada (X_V) é dada pela Eq.9. Existem dois tipos de interfaces: entre regiões recristalizadas e deformadas (não recristalizadas), e entre duas regiões recristalizadas. 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_{VRR} .

A microestrutura é caracterizada pela área interfacial por unidade de volume entre material recristalizado e não recristalizado (S_V), que é relacionada com a área interfacial estendida (S_{VEX}), pela fórmula a seguir. Como no modelo JMAK, esta relação só é válida para grãos recristalizados distribuídos aleatoriamente.

Considerando que a nucleação é por saturação de sítios e os grãos são esféricos, é possível construir a equação do caminho microestrutural analítico para recristalização em três dimensões, como mostrado a seguir:

$$S_{VEX} = \frac{S_V}{1 - X_V} \quad (16)$$

A Eq.16 mostra a área interfacial estendida (S_{VEX}) relacionada com S_V e X_V . A equação é matematicamente exata quando a distribuição dos núcleos é aleatória. Esta equação só é válida para frações transformadas, menores que uma unidade. Visto que, à medida que as transformações vão acontecendo, um grão impede o crescimento do grão vizinho. Neste momento ocorre a interferência.

Para o cálculo do S_{VEX} é necessário que seja calculado o produto da área superficial dos núcleos pelo número de núcleos por unidade de volume, conforme Eq.17:

$$S_{VEX} = 4\pi.R^2.N_V \quad (17)$$

Utilizando-se as Eqs. 16 e 17, podemos obter a área interfacial entre as regiões transformadas e não transformadas por unidade de volume, S_V , e o número de núcleos por unidade de volume, N_V .

$$S_V = 4\pi.R^2.N_V(1 - X_V) \quad (18)$$

$$N_V = \frac{S_{VEX}}{4\pi.R^2} \quad (19)$$

Com a Eq.19 aplicada às Eqs. 11 e 12, obtém-se a expressão para o raio do núcleo, conforme a Eq. 20:

$$R = \frac{3X_{VEX}}{S_{VEX}} \quad (20)$$

Com esta nova relação, é possível construir a Eq.21 para o caminho microestrutural considerando-se que os núcleos tem a forma esférica e, aplicando-a juntamente com as Eqs. 6 e 16 na Eq.18, resulta que:

$$S_V = 3\left(\frac{4\pi.N_V}{3}\right)^{2/3} (1 - X_V) \left[\ln\left(\frac{1}{1 - X_V}\right)\right]^{2/3} \quad (21)$$

A Eq. 21 representa o caminho microestrutural considerando a nucleação por saturação de sítios e distribuição aleatória dos núcleos.

2.3 Descrição da Simulação

A recristalização foi simulada através de um programa computacional utilizando o método do autômato celular em 3D.^(10,11) Foi considerado dois estados: transformado e não

transformado para cada célula. O tipo de vizinhança adotada foi a vizinhança de von Neumann com seis vizinhos, conforme mostra a Figura 1.

A matriz consistiu de uma malha cúbica com um total de 272 x 272 x 272 células. O número total de núcleos escolhido para as simulações foi 4096 núcleos. Foi considerado que cada célula tem uma unidade de volume. O número de núcleos por unidade de volume, N_V , é igual à 1/4913.

As unidades de tempo e comprimento descritas são "unidades arbitrárias". A simulação produziu uma seqüência de matrizes em função do tempo. O tempo é discreto no AC, partindo de $t=0$ até a completa transformação. A unidade de tempo corresponde ao intervalo entre o estado anterior (não transformado) e o estado seguinte (transformado) da matriz. A unidade de comprimento corresponde a aresta de uma célula cúbica, a unidade de área corresponde a área de uma face deste cubo e a unidade de volume corresponde ao volume de uma célula. As unidades serão omitidas no que se segue.

Foi assumido que a nucleação ocorre por saturação de sítios, que normalmente é uma suposição razoável para recristalização. Os núcleos são distribuídos aleatoriamente na matriz conforme a teoria, dessa forma foi validado o código. Além da distribuição aleatória, outro tipo de distribuição dos núcleos na matriz foi considerado, forçando-os a percorrerem um caminho a partir do arranjo periódico até a aleatoriedade. O arranjo periódico consistiu em dividir a matriz em 4096 grupos de 17 x 17 x 17 células e no centro de cada grupo foi posicionado um núcleo. Para variar a localização dos núcleos de periódica para aleatória, o arranjo periódico original foi transformado como segue. Cada núcleo foi forçado a fazer um caminho aleatório a partir de sua posição inicial no periódico. Este caminho foi construído por saltos. Cada salto consistiu de uma mudança de posição aleatória de cada núcleo para um de seus seis vizinhos mais próximos. Quanto maior o número de saltos utilizados na simulação, mais a distribuição se aproximou da aleatória. Foram executadas simulações para um número crescente de saltos, no qual três situações foram escolhidas para o presente trabalho: 100, 300 e 1000 saltos.

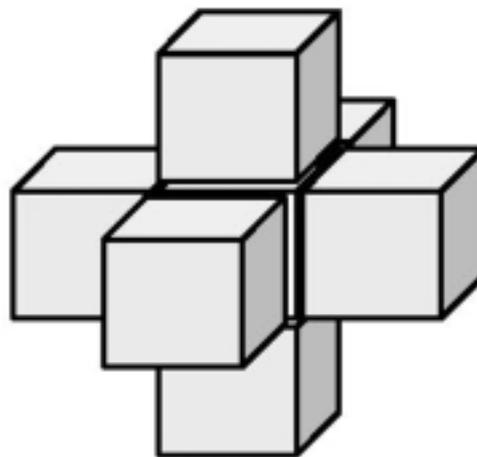


Figura 1. Configuração de von Neumann em 3D considerando os vizinhos mais próximos; a célula central é o núcleo e as células cinzas são os seis vizinhos.

2.4 Geometria e Cinética da Evolução de um Único Grão no AC em 3D

Quando um único grão cresce isoladamente na matriz, é possível encontrar uma expressão analítica para sua evolução geométrica e cinética. As expressões desenvolvidas nesta seção são específicas para a vizinhança de von Neumann. Todas as equações aqui encontradas, somente são válidas para distribuição aleatória dos núcleos por saturação de sítios. É considerado neste trabalho que quando $t = 0$, a fração volumétrica, X_V , será igual a zero ($X_V = 0$). Como foi adotado que todo evento de nucleação ocorre no instante $t = 0$, será considerado que o tamanho de todos os núcleos, nesse instante, será igual a zero. Portanto, o volume, v , e a área interfacial, a , em $t = 0$, serão, respectivamente, iguais a: $v(0) = 0$ e $a(0) = 0$. Dessa forma, o volume de um único grão, v , em função do tempo, para $t \geq 1$, será:

$$v(t) = \frac{4}{3}t^3 - 2t^2 + \frac{8}{3}t - 1 \quad (22)$$

Para satisfazer às condições descritas anteriormente, isto é, o volume de todos os núcleos será igual a zero quando $t = 0$ utiliza-se apenas o termo de terceira ordem, negligenciando os demais:

$$v(t) \cong \frac{4}{3}t^3 \quad (23)$$

Ao utilizar a Eq.23 é necessário que a matriz tenha grandes dimensões com uma pequena quantidade de núcleos para que, nos primeiros instantes, a mesma obtenha frações transformadas pequenas, amenizando o erro criado quando foram desconsiderados os outros termos.

Utilizando a Eq.23 para transformação global teremos um novo valor de X_{VEX} , Eq.24:

$$X_{VEX} = N_V v = \frac{4}{3} N_V t^3 \quad (24)$$

Com a Eq.24 é possível calcular a fração transformada real, X_V , que é:

$$X_V = 1 - \exp\left(-\frac{4}{3} N_V t^3\right) \\ X_V = 1 - \exp(-0,00027t^3) \quad (25)$$

A área interfacial de um único grão, a , em função do tempo, para $t \geq 1$, é:

$$a(t) = 12t^2 - 12t + 6 \quad (26)$$

Considerando apenas o termo de maior ordem, tem-se: o que leva à Eq. 27:

$$S_{VEX} = a(t)N_V = 12N_V t^2 \quad (27)$$

Aplicando as Eqs. 25 e 27 na Eq.16, tem-se a Eq.28 para a área interfacial entre regiões recristalizadas e não recristalizadas por unidade de volume:

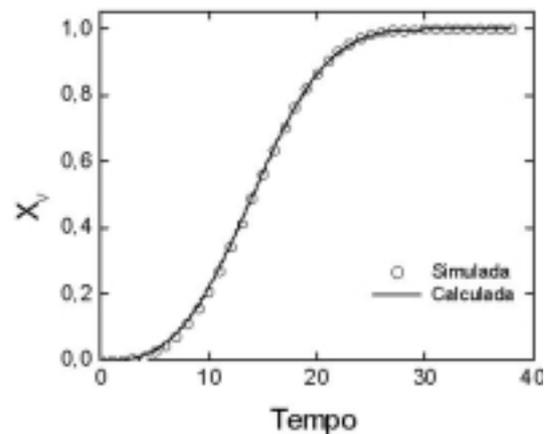
$$S_V = 12N_V t^2 \exp\left(-\frac{4}{3} N_V t^3\right) \quad (28)$$

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

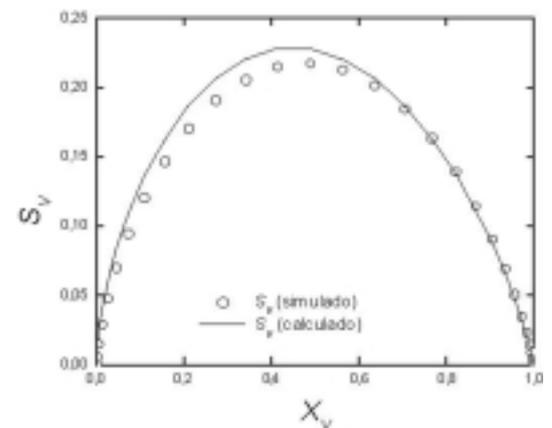
3.1 Comparação da Simulação do Autômato com as Teorias Analíticas

As equações obtidas anteriormente são utilizadas nesta seção. Dessa forma, têm-se as Figuras 2a e 2b que comparam os resultados das simulações com as expressões calculadas.

Para a fração transformada em função do tempo a concordância é muito boa, porém, para o caminho microestrutural a concordância não é total. Isto é devido a maior sensibilidade do caminho microestrutural às aproximações feitas para volume e área de um único grão, descritas na seção anterior.



a) Fração transformada em função do tempo. Vide seção 2.3 para uma explicação sobre as unidades da simulação.



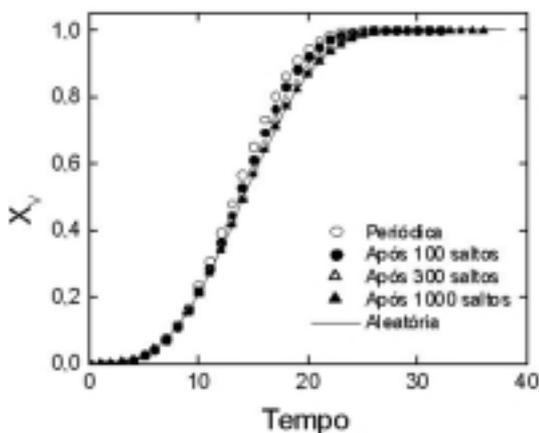
b) Caminho microestrutural em função da fração transformada. Vide seção 2.3 para uma explicação sobre as unidades da simulação

Figura 2. Comparações das simulações efetuadas com as teorias analíticas

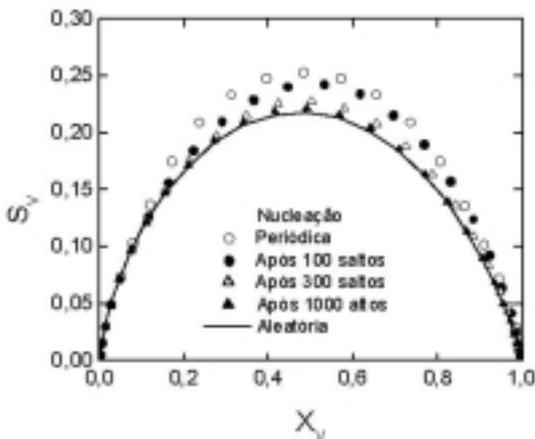
3.2 Influência da Distribuição dos Núcleos na Cinética e no Caminho Microestrutural

A Figura 3a mostra a evolução da fração transformada em função do tempo, para os diferentes tipos de distribuições dos núcleos utilizados na simulação, variando desde o arranjo periódico até o aleatório.

Todos os resultados são oriundos da simulação. Para os diferentes tipos de distribuições dos núcleos utilizados neste trabalho, as curvas referentes à Figura 2a e 3a tiveram a mesma forma, ou seja, sigmoidal.⁽¹¹⁾



a) Fração transformada em função do tempo



b) Caminho microestrutural em função da fração volumétrica

Figura 3. Influência da distribuição dos núcleos na cinética de recristalização

Pode ser visto na Figura 3a, que o tempo para completa recristalização é menor para o arranjo periódico quando comparado com o aleatório, devido à interferência entre os grãos. Quando a nucleação é periódica os núcleos ficam equidistantes, permitindo que as interfaces dos grãos avancem na matriz deformada sem impedimento, resultando numa completa recristalização em menor tempo.⁽¹¹⁾ Para os outros casos, os grãos se interferem mais rapidamente devido à distribuição aleatória dos núcleos. A interferência entre os grãos recristalizados provoca um retardamento no crescimento dos grãos resultando num tempo maior de recristalização. Quanto mais aleatória é a distribuição dos núcleos na matriz deformada, mais rapidamente ocorre a interação entre os grãos.

O caminho microestrutural ($S_v \times X_v$) mostra o mesmo efeito da distribuição dos núcleos observado na fração transformada em função do tempo, que pode ser visto na Figura 3b. Observa-se nesta figura, que a nucleação aleatória é representada pelo caminho microestrutural de menor área sob a curva. Este fato ocorre devido à interferência entre os grãos no início da transformação, diminuindo a quantidade de área interfacial entre regiões recristalizadas e não recristalizadas (S_v) no decorrer da transformação. Isto revela que, qualitativamente, o caminho microestrutural é mais sensível à distribuição dos núcleos no espaço do que a fração transformada em função do tempo.

4 CONCLUSÕES

A concordância entre as curvas simuladas e as expressões teóricas revela que o código desenvolvido em 3D para simular recristalização pelo método do autômato celular é válido, considerando nucleação por saturação de sítios e distribuição aleatória dos núcleos na matriz deformada.

A forma como os núcleos são distribuídos na matriz deformada afeta consideravelmente a cinética da recristalização e o caminho microestrutural, devido à interferência entre os grãos recristalizados.

Neste trabalho, nenhum tipo de parâmetro de ajuste foi utilizado. Cumpre ressaltar que, historicamente, a recristalização tem sido modelada como uma transformação de nucleação e crescimento. Portanto, embora a metodologia tenha sido aplicada tendo em mente a recristalização, o código desenvolvido em 3D, baseado no método do autômato celular, é geral e pode ser adaptado para simular transformações de fase por nucleação e crescimento.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao **CNPq**, **FAPERJ** e a **CAPES**

REFERÊNCIAS

- 1 PADILHA, A.F.; SICILIANO JUNIOR, F. **Encruamento, recristalização, crescimento de grão e textura**. 2.ed. rev. São Paulo : ABM, 1996.
- 2 HUMPHREYS, F.J.; HATHERLY, M. **Recrystallization and related annealing phenomena**. New York : Pergamon Press, 1966.

- 3 JOHNSON, W.A.; MEHL, R.F. **Transactions AIME (American Institute of Mining, Metallurgical and Petroleum Engineers)**, v. 135, p. 416-441, 1939.
- 4 AVRAMI, M.J. Kinetics of phase change/general theory. **Journal of Chemical Physics**, v. 7, p.1103-1112, 1939.
- 5 KOLMOGOROV, A.N. The statistics of crystal growth in metals. **Izvestiia Akademii Nauk SSSR - Seriya Matematicheskaya**, v. 1. p. 355-359, 1937.
- 6 DEHOFF, R.T. Annealing processes: recovery, recrystallization and grain growth. In: HANSEN, N.; JUUL, J. D.; LEFFERS, T.; RALPH, B. (Eds). **Annealing processes: recovery, recrystallization and grain growth**, Roskilde, Denmark : Risø National Laboratory, 1986. p.35-52.
- 7 VANDERMEER, R.A. Microstructural and crystallographic aspects of recrystallization. Roskilde, Denmark : Risø National Laboratory, 1995. p.193-213.
- 8 HESSELBARTH, H.W.; GÖBEL, I.R. Simulation of recrystallization by cellular automata. **Acta Metallurgica et Materialia**, v. 39, n.9, p. 2135-2143, 1991.
- 9 MARX, V.; REHER, F. R.; GOTTSTEIN, G. Simulation of primary recrystallization using a modified three-dimensional cellular automaton. **Acta Materialia**, v. 47, n.4, p. 1219-1230. 1999.
- 10 OLIVEIRA, V.T. **Desenvolvimento do código computacional para simulação da recristalização em 3D pelo método do automato celular**. 2005. 107 p. Tese (Mestrado em Engenharia Metalúrgica) – Engenharia Metalúrgica, Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2005.
- 11 OLIVEIRA, J.C.P.T. **Simulação do efeito da distribuição dos núcleos na cinética e no caminho microestrutural da recristalização pelo método do autômato celular**. 2004. 104 p. Tese (Mestrado em Engenharia Metalúrgica) – Engenharia Metalúrgica, Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2004.

Recebido em: 16/02/06

Aceito em: 16/05/06

Proveniente de: CONGRESSO ANUAL DA ABM, 60., 2005, Belo Horizonte, MG. São Paulo : ABM, 2005.