

ESTUDO DO EFEITO DO CRESCIMENTO NÃO HOMOGÊNEO NA RECRISTALIZAÇÃO

Marcos Felipe Braga da Costa, marcos.braga@outlook.com.br¹
Guilherme Dias da Fonseca, guilhermejfdias@hotmail.com¹
Guilherme Costa de Oliveira, guilherme.ori@gmail.com¹
André Luiz Moraes Alves, andreluizmalves@yahoo.com¹
Wesley Luiz da Silva Assis, wesleyassis@id.uff.br¹
Paulo Rangel Rios, prrios@gmail.com¹
Joelma Cristina Souza Santana, joelma_santana2008@hotmail.com²

¹Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Sala C87, Av. dos Trabalhadores, 420, CEP 27255-125, Vila Santa Cecília, Volta Redonda, RJ, Brasil. Telefone: +55 24 2107-3590.

²Faculdade Santa Rita, FASAR, Estrada Real km 2, CEP 36400-000, Zona Rural, Conselheiro Lafaiete, MG, Brasil.

Resumo: Em diversas situações de transformações de fase, a etapa do crescimento é estudada como se ocorresse de maneira homogênea no espaço amostral. Todavia, na prática este crescimento pode não ser uniforme. Sendo assim, o objetivo desse trabalho é realizar uma simulação computacional da transformação de fase quando o crescimento é caracterizado pela não homogeneidade unidirecional de crescimento. Para ver somente o efeito da não homogeneidade de crescimento dos grãos, os núcleos iniciais foram dispostos por processo de ponto de Poisson homogêneo, porém, a velocidade de crescimento varia de maneira linear na direção z. A regra de transição para o crescimento dos grãos foi desenvolvida com base na metodologia do Cone Causal (método estocástico). Os dados de saída, ou resposta da simulação computacional estudados neste trabalho são: fração volumétrica, área superficial por unidade de volume e microestrutura simulada. Após analisar os resultados da simulação, observou-se que a microestrutura final tem um perfil muito semelhante às micrografias de materiais laminados a frio e subsequentemente recristalizados. Os gráficos de cinética de evolução simulados corroboraram com a teoria analítica específica para este caso em particular desenvolvida por Villa e Rios. Também se comparou os resultados de simulação com a teoria de JMAK. Através do presente trabalho pode-se concluir que o modelo de simulação computacional é qualitativamente eficiente no modelamento das transformações de fase com velocidade de crescimento não homogêneo.

Palavras-chave: Recristalização, transformação de fase, cone casual, crescimento não homogêneo, evolução microestrutural.

1. INTRODUÇÃO

Em diversas situações reais de transformações de fase, há a possibilidade do crescimento da nova fase não ser uniforme. Um exemplo foi descrito no trabalho de Song et.al.(2003), onde foi estudado um complexo caso de recristalização em uma liga de alumínio contendo partículas Al_3Zr . Em seu trabalho foi observado através da microestrutura final que existe uma falta de homogeneidade após a recristalização.

Como já é conhecido, as transformações de fase ocorrem mediante a nucleação da nova fase e o seu posterior crescimento ao longo do tempo. Uma das dificuldades no modelamento destas transformações é naturalmente o modelamento da nucleação. Um dos modelos mais consolidados, conhecido como Cinética Formal ou Cinética Global foi apresentado por Johnson e Mehl (1939), Avrami (1939 e 1940), e Kolmogorov (1937) (JMAK). A teoria de JMAK tem larga aplicação em transformações no estado sólido tanto em materiais metálicos quanto não metálicos e é comumente aplicado aos casos em que a nucleação ocorre de maneira uniformemente aleatória no espaço amostral.

A equação clássica, desenvolvida por JMAK levou em conta uma distribuição aleatória dos sítios de nucleação, e considerou inicialmente o crescimento de apenas uma fase, empregando o conceito de volume estendido, V_E , que é a soma do volume de todas as regiões da nova fase supondo que elas cresçam sem interferência umas das outras. Porém na prática, sabe-se que a interferência ocorre. JMAK solucionou esta questão através da Eq. 1, que relaciona $V_V(t)$ com o $V_E(t)$.

$$V_V = 1 - \exp(-V_E) \quad (1)$$

Muitos casos encontrados na prática, divergem da teoria de JMAK, uma vez que as condições da transformação podem ser totalmente diferentes daquelas consideradas por JMAK. Um exemplo comum onde ocorre essa divergência é o caso em que a velocidade de crescimento dos grãos não é uniforme. Villa e Rios (2012) propuseram um estudo no

qual a matriz possua um gradiente direcional para o crescimento. Neste gradiente existe variação de velocidade somente em uma direção. Sendo assim, todos os núcleos que surgirem em um mesmo plano perpendicular à direção do gradiente, terão a mesma velocidade de crescimento. Outra suposição importante para o desenvolvimento do modelo analítico foi que cada grão tenha velocidade constante de crescimento, ou seja, cada grão cresce com sua velocidade constante até encontrar com um grão vizinho e ter seu crescimento afetado. O que vai determinar a velocidade do grão é a posição onde ele surgiu com relação ao plano do gradiente.

Villa e Rios (2012) supuseram que cada grão tem velocidade constante de crescimento, mas essa velocidade depende da localização do núcleo, que originou esse grão, no espaço amostral correspondente, isto é, a velocidade, G é associada ao núcleo, X_i que pertence a um determinado plano no espaço amostral. Baseando-se nisso eles propuseram que para a nucleação uniformemente aleatória a região transformada, Θ^t no tempo t é a união de esferas (grãos), assim:

$$\Theta^t = \bigcup_{X_i \in N} B_{f(X_i)t}(X_i) \quad (2)$$

Onde B é a esfera, $f(X_i)$ é uma função dada pela localização do núcleo e N é o número de núcleos por processo de Poisson em uma região específica $\mathbb{R}^d$ com intensidade λ .

Este modelo pode ser visto como um caso especial de “velocidade constante”, onde:

$$Q(y, d\xi) := \delta_{f(y)}(\xi) d\xi \quad (3)$$

Onde $Q(y, d\xi)$ representa a probabilidade distribuição de G dado que o núcleo é associado a nucleação em y , $\delta_{f(y)}$ é a função delta de Dirac em $f(y)$. Assim:

$$A(x, t) = \{y \in \mathbb{R}^d: f(y)t \geq \text{dist}(y, x)\} \quad (4)$$

$$V_E(t, x) = \int_{A(x, t)} \lambda(y) dy \quad (5)$$

Uma vez que o processo de nucleação é por processo de Poisson ainda temos.

$$V_V(t, x) = 1 - \exp\{-V_E(t, x)\} \quad (6)$$

Onde o V_E é :

$$V_E(t, x) = \lambda \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\sqrt{a^2 t^2 - 1}|y_1|}^{\sqrt{a^2 t^2 - 1}|y_1|} 2\sqrt{(a^2 t^2 - 1)y_1^2 - y_2^2} dy_2 \right) dy_1 \quad (7)$$

Os resultados analíticos obtidos por Rios e Villa (2012) para o processo de nucleação homogênea para o caso no qual a velocidade de crescimento varia ao longo da direção espacial preferencial, z por plano. Para uma melhor visualização adotou-se uma coordenada adimensional, assim variou-se eixo z de 0 a 1.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

Neste trabalho simulou-se o processo de nucleação homogênea com a velocidade de crescimento dos grãos, dependente da localização de seu núcleo inicial. Considerou-se um gradiente linear com relação ao eixo z , assim, G será diferente para cada plano da matriz, seguindo a seguinte relação matemática: $G(z) = az + b$. A representação desse gradiente assim como de um plano da matriz pode ser vista na Figura 1. Observa-se claramente que os grãos pertencentes ao mesmo plano tem a mesma velocidade, e que os grãos pertencentes a valores mais altos de z , tem maior velocidade.

Foi utilizado um programa computacional escrito em linguagem Fortran 2003, e compilado pelo Microsoft Visual Studio 2012[®]. Utilizou-se paralelização em Open MP. A visualização das microestruturas transformadas foi realizada com o programa Tecplot 360[®], os gráficos foram construídos com o auxílio do programa Wolfram Mathematica 10[®]. Empregou-se a metodologia do Cone Causal (Alves, 2015; Oliveira, 2013).

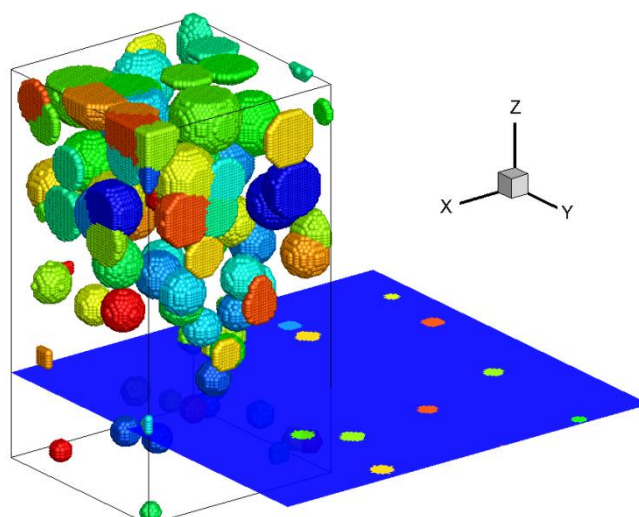


Figura 1 - Representação gráfica de um plano da matriz, orientada nos eixos x, y e z.

Nas simulações computacionais realizadas neste trabalho, considerou-se uma matriz cúbica de 300x300x300 células, a nucleação se deu por saturação de sítios e através do processo de ponto de Poisson homogêneo Rios e Villa, (2011). Quando se trata da geração de números aleatórios por Poisson, há uma média de (λ) , que no caso estudado corresponde ao valor médio do número de núcleos. A Figura 2 ilustra uma nucleação com 300 núcleos iniciais, e demonstra o eixo z variando 0 a 1, ou seja, em coordenada adimensional.

Foi gerado para essa simulação de 300 núcleos iniciais, 50 números aleatórios por Poisson de núcleos para reação, logo realizou-se 50 simulações distintas para este caso, assim trabalhou-se com as médias dos dados gerados pelas 50 simulações. Com essas médias e os dados previstos pelos modelos matemáticos gerou-se gráficos para a comparação dos métodos.

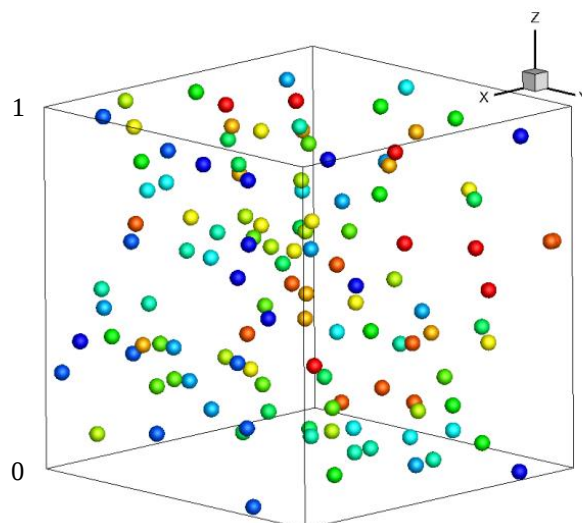


Figura 2- Distribuição homogênea de núcleos.

Para a total transformação da matriz cúbica de simulação, foram utilizadas condições de contorno periódicas para as direções x e y. Não se adotou condições de contorno na direção z, uma vez que os grãos do plano superior têm velocidades diferentes dos grãos do plano inferior. A Figura 3, ilustra as condições de contorno utilizadas, nota-se que os grãos continuam crescendo nas faces opostas quando crescem nas direções x e y, mas o mesmo não ocorre quando crescem na direção z.

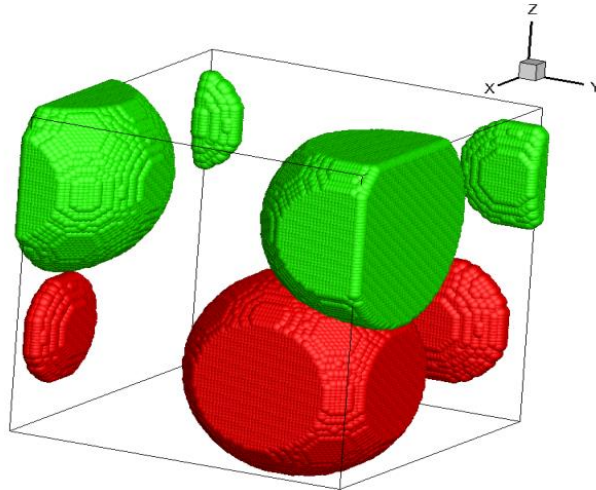


Figura 3 - Ilustração das condições de contorno adotadas na simulação.

2.1. Cone causal

Como mencionado anteriormente, para o processo de crescimento na simulação computacional optou-se pelo método do Cone Causal. As Figuras 4 e 5, apresentam a teoria do Cone Causal em 2D e 3D, respectivamente. O método do Cone Causal diz que para ocorrer a transformação de um ponto qualquer na matriz é necessário haver pelo menos um núcleo dentro da esfera de raio R que é centrada neste ponto qualquer. O raio R dessa esfera aumenta com o tempo e à medida que isto acontece em cada interação de tempo, maior a possibilidade da existência de núcleos dentro da esfera.

A evolução da simulação se dá através das interações ao longo do tempo. Para cada interação o programa analisa todos os pontos da matriz para a verificação de quais serão transformados. A maneira com que essa verificação ocorre é através do cálculo da distância da esfera em relação ao núcleo, se a distância entre núcleo e esfera for menor que zero, significa que o núcleo está dentro da esfera.

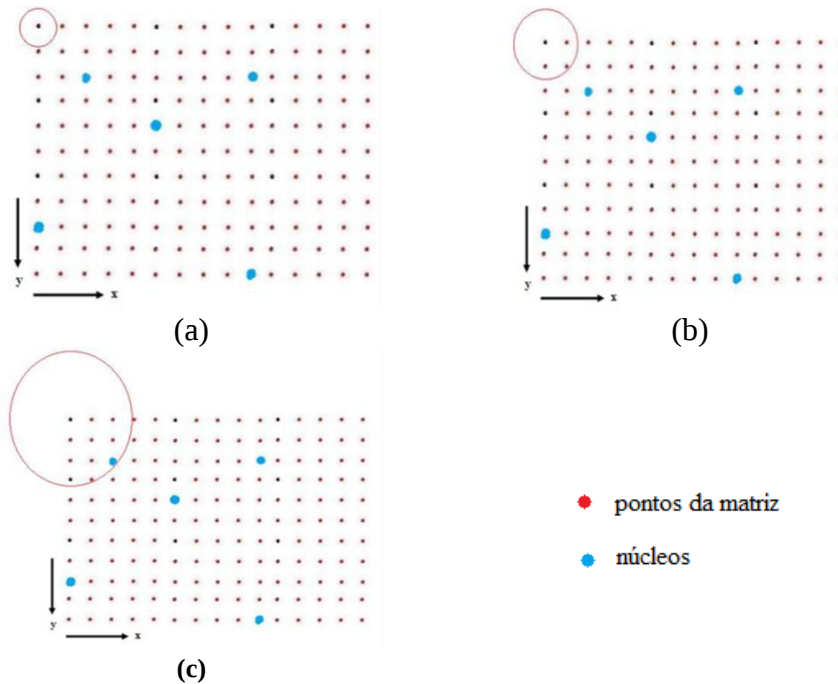


Figura 4 - Representação bidimensional da teoria do cone causal. (a) Tempo t_1 (b) Tempo t_2 (c) Tempo t_3 . Onde $t_3 > t_2 > t_1$, Ribeiro(2011).

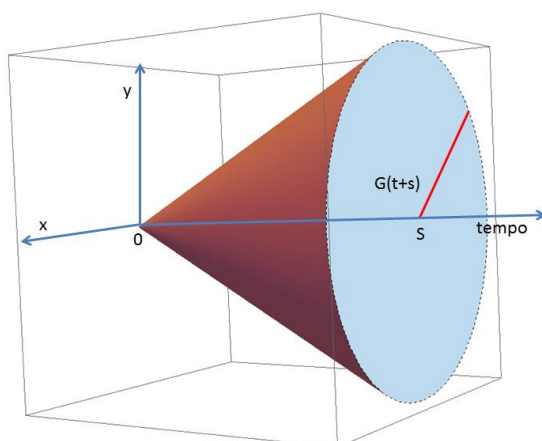


Figura 5 - Representação em três dimensões do cone causal.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na atual seção são apresentados e discutidos os resultados extraídos da simulação computacionais realizada em três dimensões.

A simulação realizada teve um crescimento variando a velocidade máxima e mínima entre 0,6 mm/s no plano igual 1 e 0,2 mm/s no plano 0 da matriz. A equação linear com as constantes para essa determinada variação de velocidade é $G(z) = 0.4z + 0.2$.

Na Figura 6 tem-se os gráficos com resultados da simulação computacional, comparado com o método analítico de Villa e Rios (2012) e com o método de JMAK.

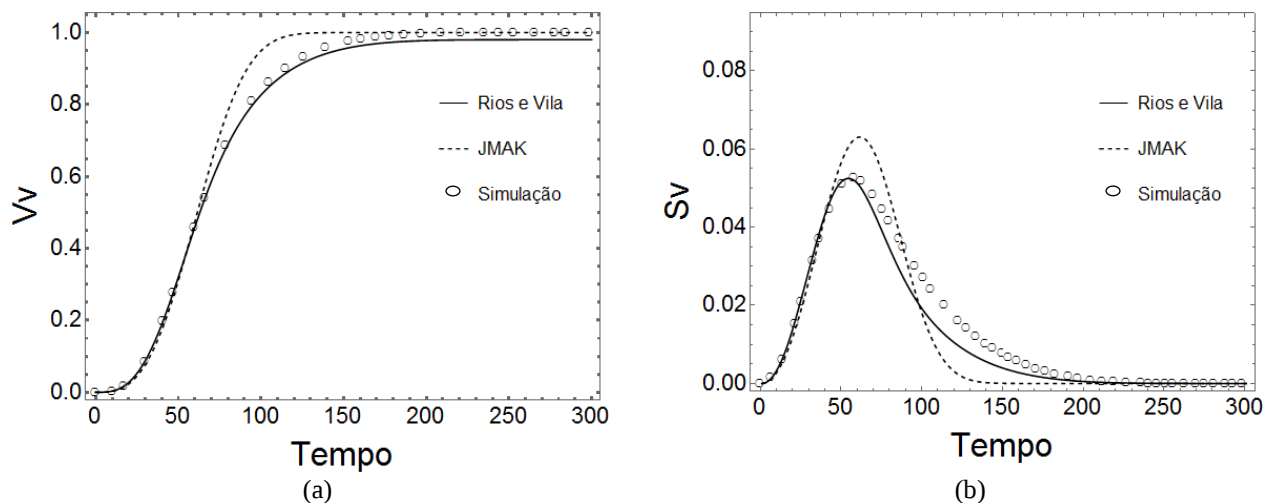


Figura 6 - Resultados da nucleação homogênea com velocidade de crescimento variando por plano com numero $\lambda = 300$ (a) V_v total versus Tempo. (b) S_v total versus Tempo.

Podemos observar nos gráficos uma boa concordância da simulação computacional com teoria de Villa e Rios (2012). Já na comparação com a teoria de JMAK, observa-se uma boa concordância até o momento onde ocorre a interferência, “impingement” a partir desse ponto ela não é boa referência.

Na figura 7, a seguir, observa-se a comparação da simulação computacional com método analítico de Villa e Rios (2012) e a evolução da fração volumétrica e da área superficial por unidade por volume por plano da matriz.

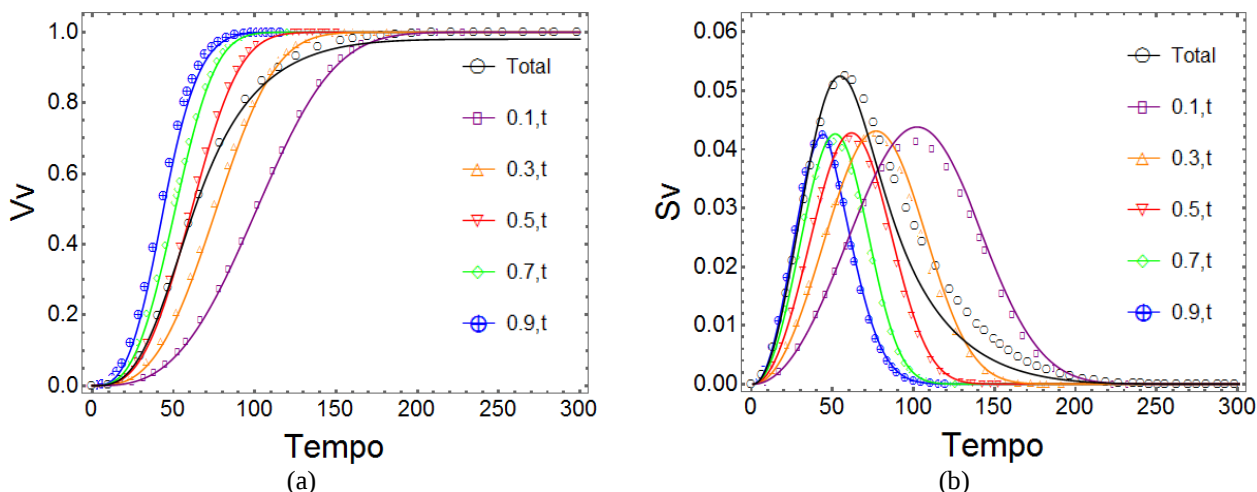


Figura 7 - Resultados da simulação computacional representada por pontos e o modelo analítico representado por linhas. (a) V_v por plano versus tempo (b) S_v por plano versus tempo.

Na Figura 7-a, pode-se observar que a fração volumétrica do plano $z = 0,9$ foi totalmente transformada em tempo menor que a do plano $z = 0,1$ esta diferença é mediante a variação da velocidade de crescimento em cada plano. Outra mudança provocada pela variação da velocidade pode ser vista na Figura 7-b. O gráfico do S_v demonstra a área interfacial entre material recristalizado e não recristalizado por unidade de volume, o ponto máximo do S_v de cada plano demonstra o início do decaimento da área não recristalizada em cada plano.

A Figura 8 demonstra a evolução microestrutural da simulação em questão. Pode-se visualizar que na parte superior da matriz a velocidade de crescimento é maior do que na parte inferior da matriz. A Figura 9 mostra quatro cortes perpendiculares à direção z , seções (2D), da microestrutura final simulada, Figura 8-Final.

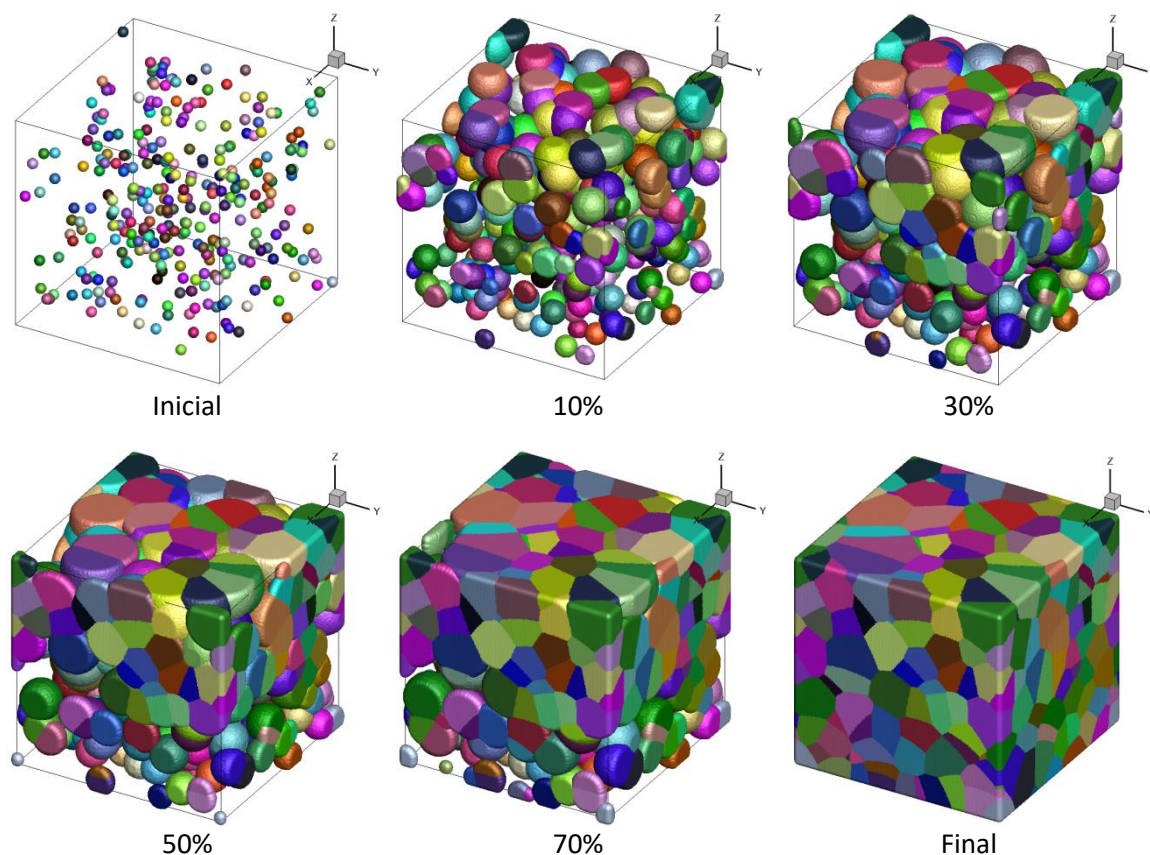


Figura 8 - Representação da microestrutura simulada de nucleação homogêneas com 300 núcleos e a velocidade de crescimento variando por plano no eixo z .

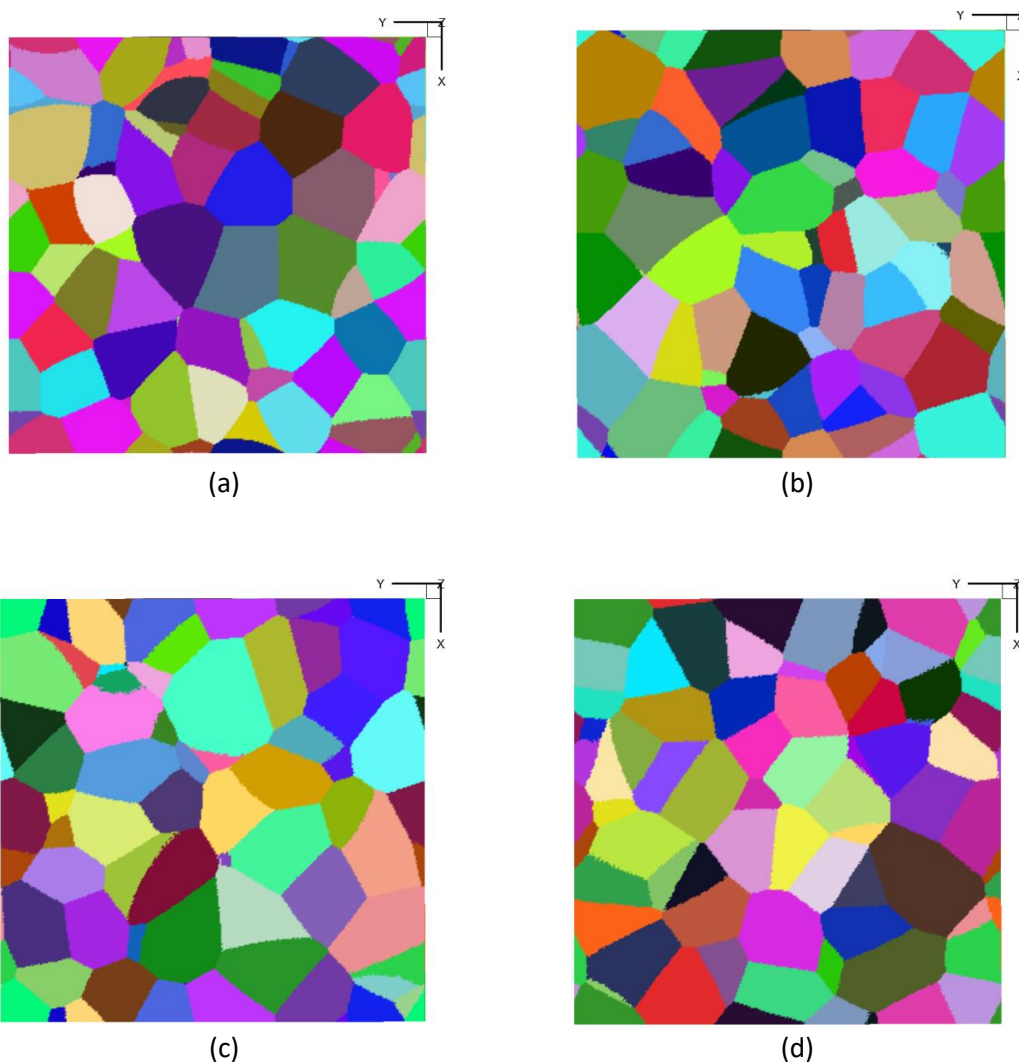


Figura 9 - Seções 2D da microestrutura final simulada: (a) $z=0,1$; (b) $z=0,3$; (c) $z=0,7$; (d) $z=0,9$.

Pode-se observar que mesmo variando a velocidade de crescimento por plano na matriz o tamanho dos grãos finais é homogêneo, isso se dá devido a variação de velocidade de crescimento entre a coordenadas adimensionais de 0 a 1 no eixo z na matriz ser pequena.

Na Figura 10 é demonstrado cortes, seções (2D), perpendiculares ao eixo x , de duas microestruturas finais simuladas. Na Figura 10-a tem-se nucleação homogênea utilizando a teoria de JMAK com a velocidade de crescimento constante em toda matriz. Na Figura 10-b tem-se a nucleação homogênea utilizando teoria de Villa e Rios (2012) com a velocidade de crescimento variando no eixo z . É possível visualizar claramente o efeito da variação da velocidade de crescimento na direção z . Pode-se observar ainda que na Figura 10-a os contornos dos grãos são retos devido a não existência de variação na velocidade de crescimento, na Figura 10-b existe uma curvatura entre os grãos, esse fato ocorre pela diferença de velocidade de crescimento entre os grãos dos diferentes planos.

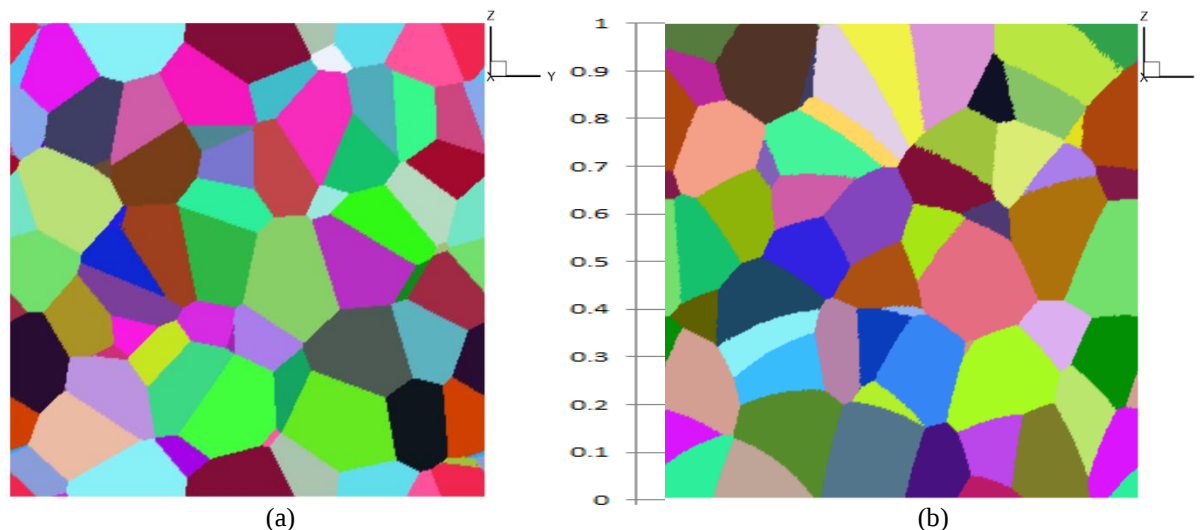


Figura 10 - Seções (2D), perpendiculares ao eixo x, de duas microestruturas finais simuladas. (a) JMAK com a velocidade de crescimento constante em todos os planos; (b) Villa e Rios (2012) com a velocidade de crescimento variando por planos ao longo do eixo z.

4. CONCLUSÃO

Conclui-se que o método das simulações é eficiente para análises de evoluções microestruturais do caso de nucleação homogênea com velocidade de crescimento variável, devido a concordância da simulação com método analítico de Rios e Villa (2012) para esse caso.

A comparação da simulação com a teoria de JMAK demonstrou uma boa concordância até o momento onde ocorre a interferência, “impingement”, a partir desse ponto JMAK não é boa referência para esse caso particular aqui estudado.

As microestruturas feitas pela simulação computacional nesse trabalho são de grande valor científico uma vez que elas podem auxiliar o experimentalista revelando algumas consequências das variações de velocidade de crescimento em diferentes partes de um determinado material.

5. REFERÊNCIAS

- Alves, A.L.M., 2015, Simulação Computacional de Reações com Nucleação e Crescimento de Fases Simultâneas e Sequenciais pelo Método do Cone Causal, Dissertação de mestrado, UFF – Volta Redonda, 2015.
- Assis, W. L. S., 2006, Investigação do efeito da nucleação, da velocidade de crescimento e da distribuição da energia armazenada na recristalização pelo método do autômato celular em três dimensões. Dissertação de mestrado, UFF – Volta Redonda.
- Avrami, M., 1940, Kinetics of phase change II. Transformation – time relations for random distribution of nuclei. Journal of Chemical Physics, vol. 8, p. 212-224.
- Avrami, M., 1939, Kinetics of phase change I. General Theory. Journal of Chemical Physics, vol. 7, p. 1103-1112.
- Johnson, W. A. e Mehl, R. F., 1939, Reaction kinetics in processes of nucleation and growth. Transactions Metallurgical Society, A.I.M.E., vol. 135, p. 416-441.
- Kolmogorov, A. N. ,1937, On the statistical theory of metal crystallization. Isvetiia Akademii Nauk, SSSR-Seriia Matematicheskaja, vol. 1, p. 335-359.
- Oliveira, S.C., Assis, W.L.S., Villa, E. e Rios P.R., 2013, Computer simulation of simultaneous evolution of individual texture components during recrystallization of an IF steel, Mater. Res. 16 ,1195–1202.
- Ribeiro, T.C.S., 2011, Simulação computacional da microestrutura das transformações por nucleação e crescimento. Tese de doutorado, UFF – Volta Redonda.
- Rios, P.R. and Villa, E., 2011, An analytical approach to the effect of a distribution of growth velocities on recrystallization kinetics. Scripta Materialia, vol. 65, nº 11, p. 938-941.
- Rios, P.R. e Villa, E., 2013, On the generalisation of JMAK's theory. Materials Science Forum Vol. 753, p. 137-142.
- Song, X., Rettenmayr, M. e Liu, G., 2003, 3D Simulation study of inhomogeneous microstructure and its evolution (advantages of visual simulation technique instereological analysis). Image Analysis Stereology, vol. 22, p. 163-169
- Villa, E. e Rios, P.R., 2012, On modelling recrystallization processes with random growth velocities of the grains in materials science. Image Anal Stereol, vol. 31, p. 149-162.

6. DIREITOS AUTORAIS

Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo do material impresso incluído no seu trabalho.

STUDY OF THE EFFECT OF INHOMOGENEOUS GROWTH ON RECRYSTALLIZATION

Abstract: *In most real situations of phase transformations, there is the possibility of the growth of the new phase not being uniform. The objective of this work is to perform a computational simulation of the phase transformation. When the initial nuclei are evenly randomly allocated and each grain grows at constant speed, depending on the spatial location of the corresponding nuclei. The velocity G , dependent on the strain gradient in a preferred direction with random intensity of nuclei. The computational simulation was developed based on the Causal Cone methodology (stochastic method). In the analysis of the simulation results, it was observed that the final microstructure has a very similar profile to the micrographs of cold rolled materials and subsequently recrystallized. The simulated evolution kinetics graphs corroborate with the analytical theory specific to this particular case. It was also possible to verify the divergence from the classical model of formal kinetics. In the present work it can be concluded that the computational simulation model is efficient in the modeling of phase transformation with inhomogeneous growth velocity.*

Keywords: *Recrystallization, Phase transformation, Casual cone, inhomogeneous growth.*