

## ESTUDO DO EFEITO DA NUCLEAÇÃO NÃO HOMOGÊNEA NA RECRISTALIZAÇÃO

M.F.B. da Costa; G.D da Fonseca.; W.L.S Assis; A.L.M. Alves; P.R Rios.

marcos.braga@outlook.com.br – 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.

### RESUMO

*O objetivo desse trabalho foi realizar uma simulação computacional da transformação de fase quando os núcleos iniciais estão alocados em forma de gradiente de nucleação unidirecional. A simulação computacional foi desenvolvida com base na metodologia do Cone Causal (método estocástico). 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. Também foi possível verificar a divergência com relação ao clássico modelo da cinética formal neste caso que descreve a cinética de transformação de fase para estes casos. Conclui-se que o modelo de simulação computacional é eficiente no modelamento computacional da transformação de fase com nucleação não homogênea.*

Palavras chaves: Recristalização, Transformação de fase, Cone casual, Nucleação não homogênea.

### INTRODUÇÃO

A grande maioria dos estudos sobre reações por nucleação e crescimento é direcionada para transformações que ocorrem de forma uniforme ou homogênea no espaço. Quer dizer a nucleação ocorre em sítios uniformemente aleatórios. Mais precisamente ocorre em sítios localizados no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Entretanto, em diversas situações há a possibilidade desta nucleação não ser uniforme. Por exemplo, nucleação da recristalização numa chapa deformada de tal forma que existe um gradiente de

deformação entre a superfície superior e inferior. Neste caso, a nucleação é mais abundante na região mais deformada e menos abundante na região menos deformada. Rios e Villa <sup>(1)</sup> desenvolveram um método analítico através de conceitos de geometria estocástica, para descrever casos nos quais existe gradiente de nucleação unidirecional.

Têm-se as equações para nucleação por saturação de sítios:

$$V_V(t, x) = 1 - \exp\left(-\frac{4\pi\lambda(x)G^3t^3}{3}\right) \quad (A)$$

$$S_V(t, x) = 4\pi\lambda(x)G^2t^2 \exp\left(-\frac{4\pi\lambda(x)G^3t^3}{3}\right) \quad (B)$$

Para o caminho microestrutural tem-se:

$$S_V(t, x) = (36\pi\lambda(x))^{1/3} \left(\ln\left(\frac{1}{1-V_V(t, x)}\right)\right)^{2/3} (1 - V_V(t, x)) \quad (C)$$

Os resultados analíticos obtidos por Rios e Villa <sup>(2)</sup> para o processo de Poisson não homogêneo para o caso simples no qual a intensidade de núcleos  $\lambda$  varia ao longo de uma única direção espacial preferencial,  $z$ , uma coordenada adimensional tendo valores de  $z = 0$  a  $z = 1$ . A velocidade de crescimento,  $G$  deve permanecer constante durante a transformação. Além disso,  $\lambda$  a intensidade processo ponto de Poisson não homogênea, ou o número médio de núcleos, é suposto que variam linearmente com a  $z$ . Naturalmente, a intensidade deve ser sempre um número positivo.

Este é um caso específico, porém muito comum em certas transformações, tais como: recristalização em material laminado, precipitação em folhas metálicas cementadas e etc.

## MATERIAIS E MÉTODOS

Neste trabalho utilizou-se a metodologia do Cone Causal para a simulação das reações com nucleação e crescimento, que ocorrem de forma não homogênea.

Foi utilizado um programa computacional escrito em linguagem Fortran 2003, e compilado pelo Microsoft Visual Studio 2012<sup>®</sup>. Utilizou-se paralelização em Open MP. A visualização das microestruturas transformadas foi realizada com o programa Tecplot 360<sup>®</sup>, os gráficos foram construídos com o auxílio do programa Wolfram Mathematica 10<sup>®</sup>.

Em todos os casos simulou-se em uma matriz cúbica de 300<sup>3</sup>. Considerou-se uma quantidade de núcleos em relação ao,  $\lambda$  e velocidades de crescimento, G velocidade constante em toda transformação.

A nucleação se deu por saturação de sítios em todos os casos. Para simular uma amostra infinita foram utilizadas condições de contorno periódicas para as direções x e y da matriz cúbica sendo na direção z limitada para que os grãos não ultrapassem as condições.

Nas simulações computacionais realizadas neste trabalho, o número de núcleos de cada fase foi definido por variáveis aleatórias de Poisson. Quando se trata da geração de números aleatórios por Poisson, há uma média ( $\lambda$ ), que no caso estudado corresponde ao valor médio do número de núcleos.

Gerou-se em cada simulação, 300 números de núcleos, logo realizou-se 50 simulações distintas para cada caso, assim trabalhou-se com as médias dos dados gerados pelas 50 simulações. Com essas médias e os dados previstos pelos modelos matemáticos geram-se gráficos, assim compara-se os métodos.

### **Modelo computacional**

O código desenvolvido, neste trabalho, é o modelamento de processos que ocorrem por nucleação de núcleos que variam a quantidade dependente do seu posicionamento na matriz e taxa crescimento também vai dependendo do posicionamento. O código computacional inicial para simulação de reações com nucleação e crescimento em 3D foi desenvolvido pelo Assis<sup>(3)</sup> ao longo dos trabalhos desenvolvidos no Núcleo de Modelamento Microestrutural, código computacional possui duas formas distintas de crescimento o Autômato Celular e o Cone Causal <sup>(4)</sup>.

O código foi desenvolvido em ambiente Fortran e é utilizada a paralelização em OpenMP. O fluxograma abaixo mostra esquematicamente o algoritmo desenvolvido.

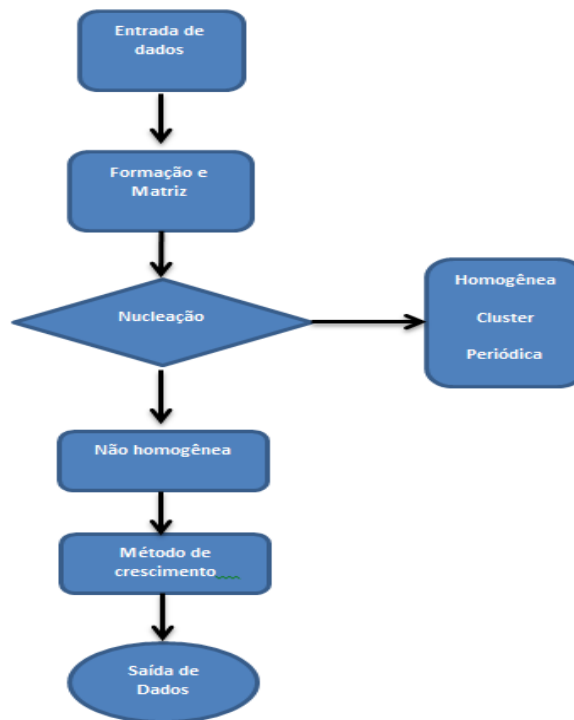


Figura 1 - Fluxograma esquemático do código desenvolvido em Fortran.

O Programa inicia-se pela entrada de dados onde é preciso especificar os parâmetros que são usados na simulação, como por exemplo: tamanho de matriz, o modo de nucleação, a regra de transição (cone causal) e quantidade de núcleos iniciais.

Após esta etapa, ocorre a formação da matriz, e a distribuição dos pontos onde serão alocados os núcleos iniciais.

Em seguida ocorre a nucleação, que ocorre por saturação de sítios. Quando finalizada a nucleação o programa entra na sub-rotina de crescimento e é executado até a matriz tenha se transformado.

Na saída de dados, o programa disponibiliza o tempo de reação fração volumétrica transformada ( $V_V$ ), área interfacial por unidade de volume ( $S_V$ ), velocidade de crescimento de cada fase e o caminho microestrutural. Também

geram outros dados que são utilizados para a visualização das microestruturas e sua evolução.

### **Nucleação não homogênea**

Nesta forma de nucleação os núcleos são distribuídos de forma não homogênea que pode variar em uma ou mais direções na matriz. Neste trabalho são mostrados e discutidos os resultados para variação de núcleos em uma única direção. A Figura 2 mostra uma distribuição de núcleos com variação ao longo do eixo Z. A intensidade na direção Z varia linearmente segundo a equação  $\lambda(z)=mz + n$ , onde m e n são constantes.

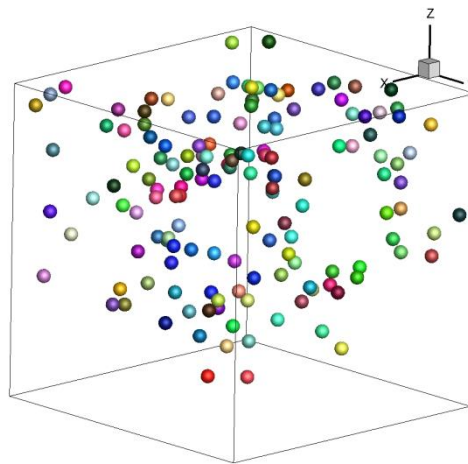


Figura 2 - Distribuição não homogênea de núcleos.

### **Cone causal**

Para o processo de crescimento na simulação computacional, neste trabalho optou-se pelo método do Cone Causal. As Figuras 3 e 4, apresentam a teoria do Cone Causal em 2D e 3D, respectivamente.

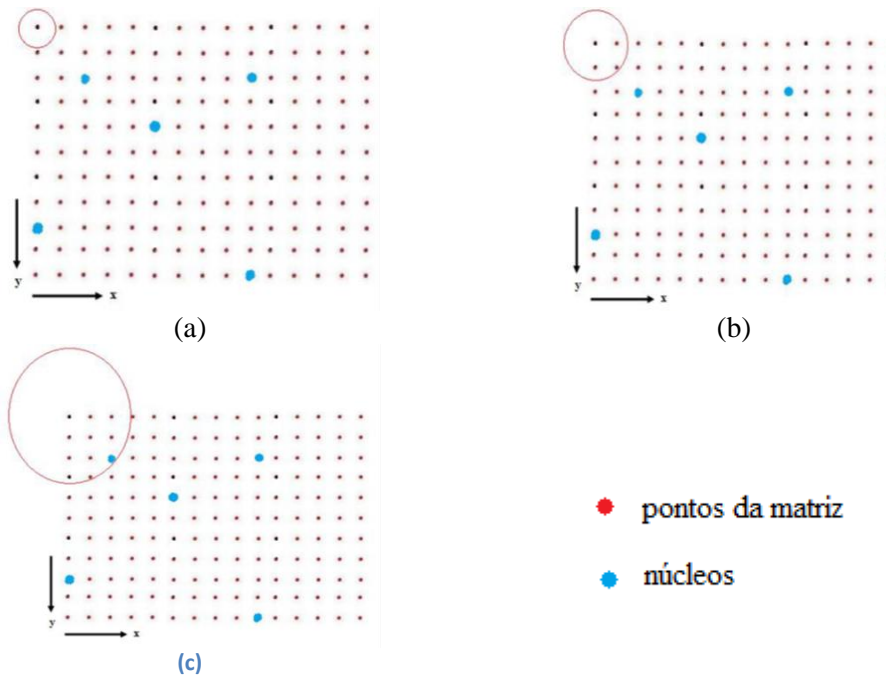


Figura 3 – Representação bidimensional da teoria do cone causal. (a) Tempo  $t_1$  (b) Tempo  $t_2$  (c) Tempo  $t_3$ . Onde  $t_3 > t_2 > t_1$ .<sup>(4)</sup>

O programa realiza iterações ao longo do tempo. Para cada iteração ocorre a transformação de um ponto qualquer sendo necessário haver pelo menos um núcleo dentro da esfera de raio  $R$  que é centrada neste ponto qualquer. Dessa forma a esfera aumenta com o tempo e a medida que o raio aumenta possibilidade de haver núcleos dentro da esfera é maior. Essa regra é realizada para todos os pontos da matriz a cada interação de tempo.

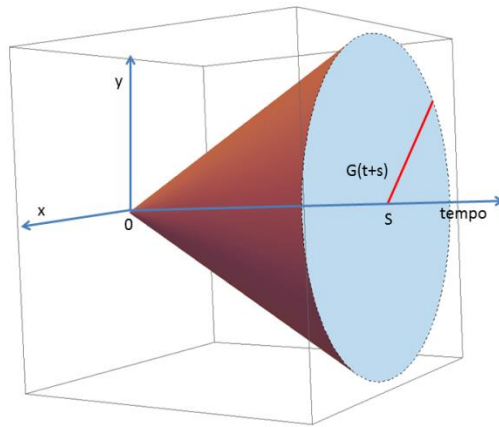


Figura 4– Representação em três dimensões,  $R^2 \times t$ , do cone causal.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

As microestruturas obtidas pela simulação computacional neste trabalho apresentam uma nucleação não uniforme na matriz distribuída de forma de um gradiente de deformação em única direção, podemos observa uma maior concentração de núcleos na parte superior da matriz. A Figura 5 mostra evolução da nucleação não homogênea em uma matriz  $300 \times 300 \times 300$ ,  $\lambda(z) = 596z + 2$ , com um numero de total de 300 núcleos.

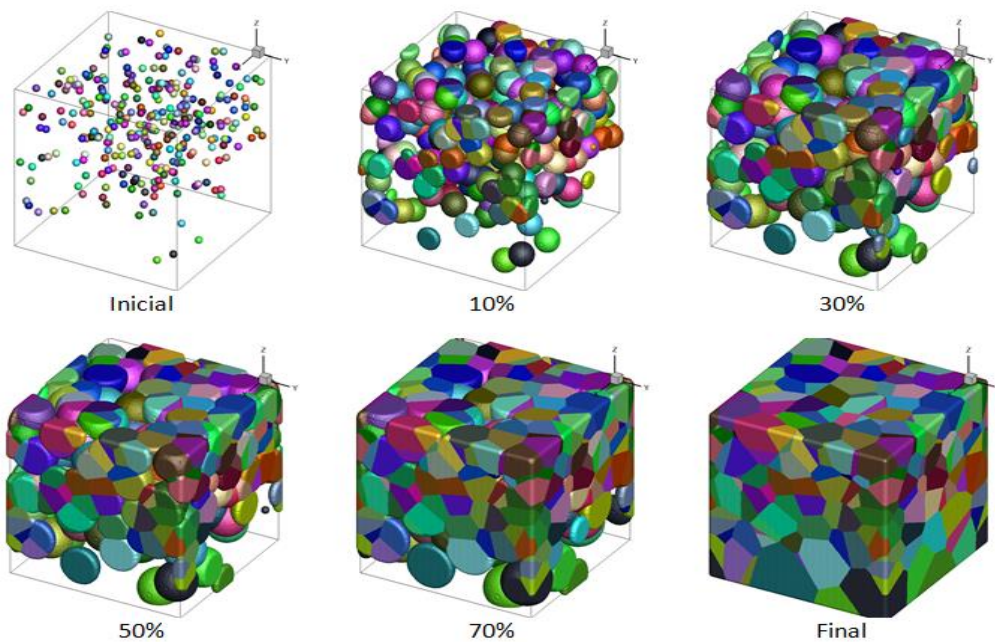


Figura 5- Representação da microestrutura simulada de nucleação não homogêneas com 300 núcleos com velocidades de crescimento iguais .

A sequência de micrografias mostra a microestrutura final da matriz e de cada um dos planos estudados. A Figura 5 se refere à simulação: matriz de 300x300x300,  $m=596$  e  $n=2$  e 300 núcleos totais.

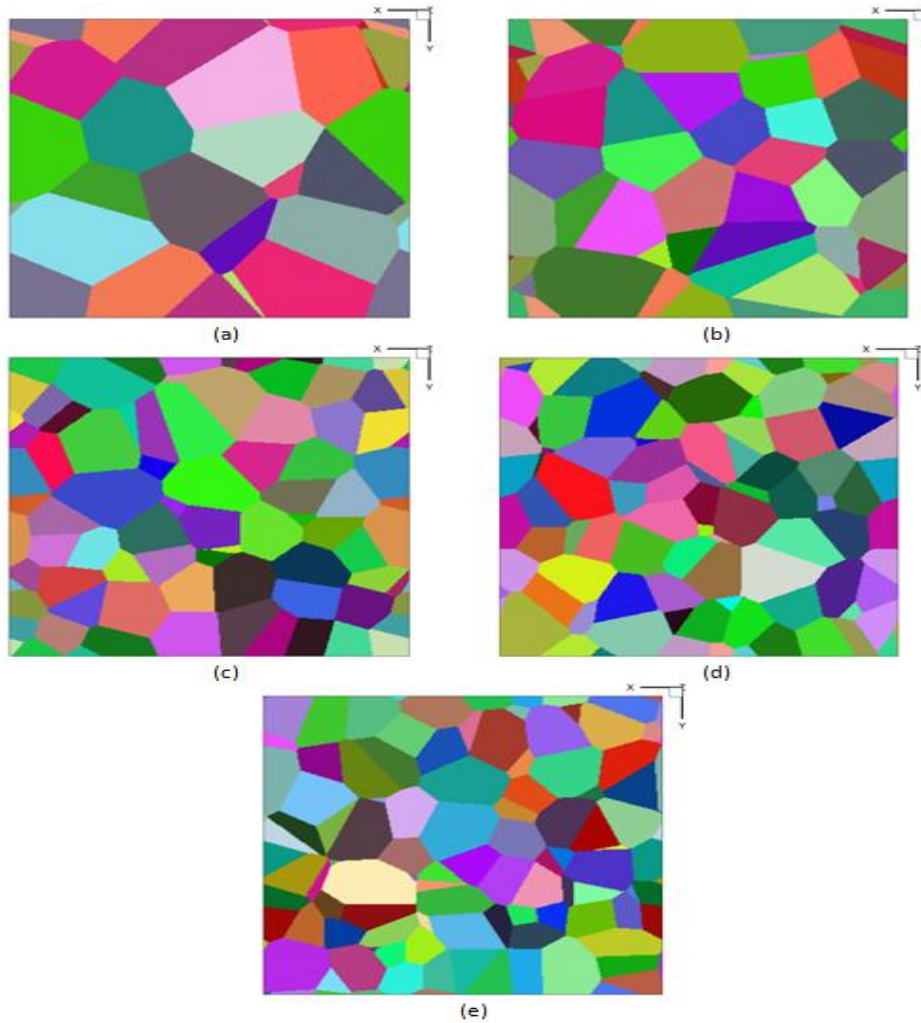


Figura 6 - Fração volumétrica em cinco planos diferentes: (a)  $V_v(0.1,t)$ , (b)  $V_v(0.3,t)$ , (c)  $V_v(0.5,t)$  e (d)  $V_v(0.7,t)$ , (e)  $V_v(0.9,t)$ .

Observa-se que tamanho dos grãos são maiores nos planos  $V_v(0.2,t)$  e  $V_v(0.4,t)$  do que nos planos  $V_v(0.7,t)$  e  $V_v(0.9,t)$  isso se dá devido a quantidade de núcleos da reação depende da sua posição na matriz. Isso vai influenciar no tamanho dos grãos onde houver uma maior quantidade de núcleos os grãos serão menores do que nas áreas onde houver um menor número de núcleos.

Na Figura 7 Mostra a comparação dos resultados da simulação computacional comparado com método analítico de Rios e Villa <sup>(1,5-8)</sup>.



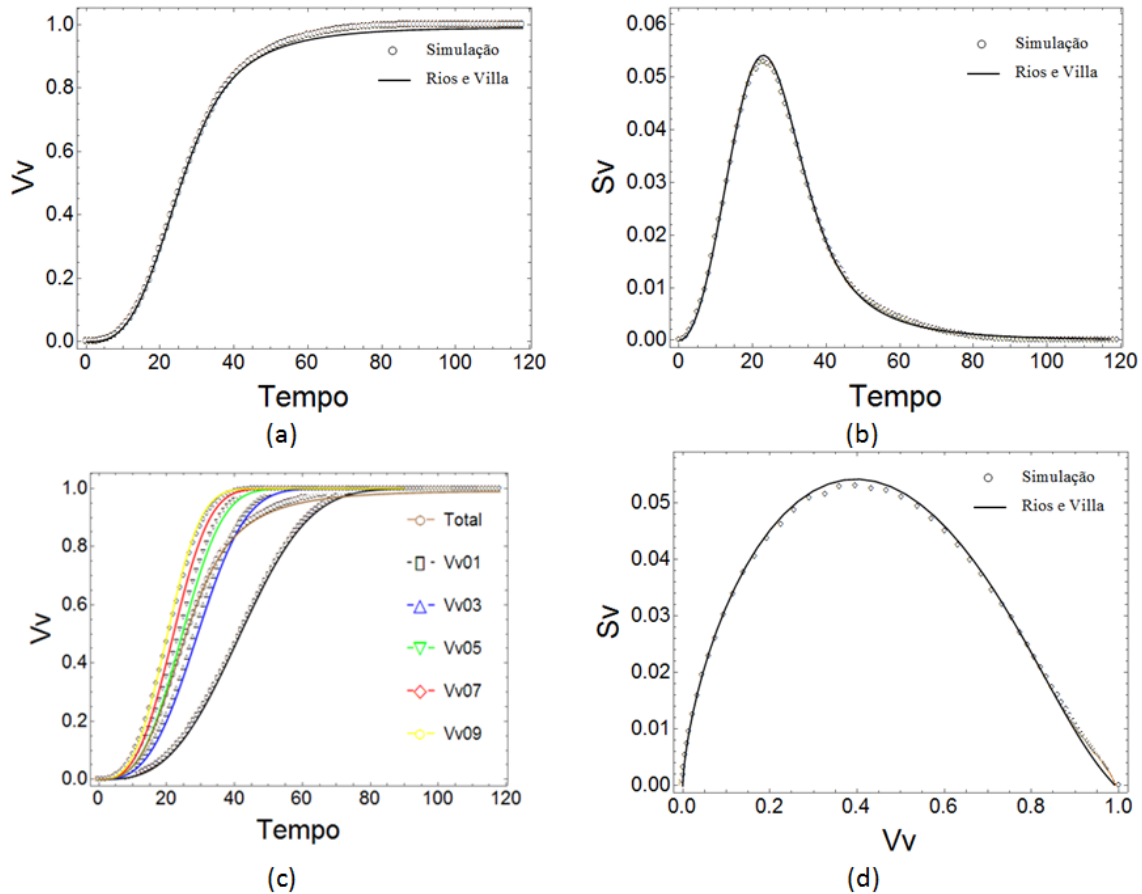


Figura 7 - Resultados da nucleação não homogênea com numero total de 300 núcleos com velocidades de crescimento iguais (a)  $V_v$  versus Tempo. (b)  $S_v$  versus Tempo. (c)  $V_v$  por plano da matriz versus Tempo. (d) Caminho Microestrutural versus Tempo.

No gráfico (c) da Figura 7 podemos observar que na região das frações de  $V_v09$  e  $V_v07$  a fração volumétrica chegou 100% em um tempo menor que a outras regiões isso se dar pelo gradiente de deformação que faz com que uma região tenha uma maior quantidade de núcleos do que as demais regiões. Dessa mesma forma gradiente de deformação influenciou no tempo de inicio da ocorrência da interferência entre as reações “impingement”.

## CONCLUSÕES

Conclui-se que o método é eficiente para análises de evoluções microestruturais não homogêneas, devido a concordância da simulação com método analítico de Rios e Villa<sup>(1,5-8)</sup> para esse caso.

A simulação da nucleação não homogênea em uma matriz 300X300X300,  $m=596$  e  $n=2$ , com um numero de núcleos total de 300 núcleos mostrou a influência

da nucleação não uniforme na matriz onde grãos dos planos  $V_v(0.1,t)$  e  $V_v(0.3,t)$  são maiores do que os dos planos  $V_v(0.5,t)$ ,  $V_v(0.7,t)$ ,  $V_v(0.9,t)$  no final da transformação.

## AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a Universidade Federal Fluminense (UFF), CNPq, CAPES e FAPERJ.

## REFERÊNCIAS

- (1) VILLA, E. e RIOS, P.R. Transformation kinetics for nucleation on random planes and lines. *Image Analysis Stereology*, vol. 30 nº3, 2011, p.153-165.
- (2) RIOS, P.R. e VILLA, E. Transformation kinetics for inhomogeneous nucleation. *Acta Materialia*, vol. 57 nº11, 2009, p.1199-1208.
- (3) ASSIS, W. L. S. Modelamento Numérico de Nucleação e Crescimento via Autômato Celular. Tese de doutorado, UFF – Volta Redonda, 2010.
- (4) RIBEIRO, T.C.S. Simulação computacional da microestrutura das transformações por nucleação e crescimento. Tese de doutorado, UFF – Volta Redonda, 2011.
- (5) RIOS, P.R. e VILLA, E. On the generalisation of JMAK's theory. *Materials Science Forum*, vol. 753, 2013, p. 137-142.
- (6) Rios, P.R., Jardim, D., Assis, W.L.S., Salazar, T.C., Villa, E. Inhomogeneous Poisson Point Process Nucleation: Comparison of Analytical Solution with Cellular Automata Simulation. *Materials Research*, vol. 12, 2001, p.219-224.
- (7) RIOS, P.R. e VILLA, E. Transformation kinetics for surface and bulk nucleation. *Acta Materialia*, volume 58, nº7, 2010, p.2752-2768.
- (8) RIOS, P.R. e VILLA, E. Simultaneous and sequential transformations. *Acta Materialia*, vol. 59, 2011 nº 4, p. 1632-1643.

## THE STUDY OF THE EFFECT INHOMOGENEOUS NUCLEATION RECRYSTALLIZATION

### ABSTRACT

*The objective of this study was a computer simulation of phase transformation when the site-saturated nucleation is allocated in the form of unidirectional nucleation gradient. The computer simulation was developed based on the methodology of Causal Cone (Stochastic Method). After analyzing the simulation results, it was observed that the final microstructure has a very similar profile to the material micrographs cold rolled and subsequently recrystallized. The simulated graphic of evolution kinetics corroborate the specific analytical theory for this particular case. It was also observed divergence with respect to the classical model of formal kinetics in this case describing the phase transformation kinetics for these cases. It was concluded that the computer simulation model is efficient in phase transformation of computational modeling with Inhomogeneous nucleation.*

**Keywords:** Recrystallization, phase transformations, Inhomogeneous nucleation, Casual Cone