



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

# Tese de Doutorado

## TRANSFORMAÇÕES DE FASE SEQUENCIAIS



**ALUNO:**  
**ANDRÉ LUIZ MORAES ALVES**

**ORIENTADOR:**  
**PROF. Ph.D PAULO RANGEL RIOS**

**Volta Redonda**  
**2019**

# **ANDRÉ LUIZ MORAES ALVES**

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica, da Universidade Federal Fluminense, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Metalúrgica. Área de concentração Modelamento e Simulação de Processos e Fenômenos.

## **TRANSFORMAÇÕES DE FASE SEQUENCIAIS**

Orientador: **Prof. Ph. D. Paulo Rangel Rios**

Área de concentração: **Modelamento e Simulação de Processos e Fenômenos**

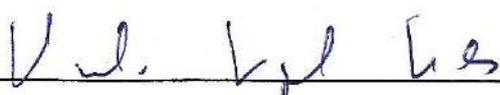
**Volta Redonda**  
2019

**ANDRÉ LUIZ MORAES ALVES**

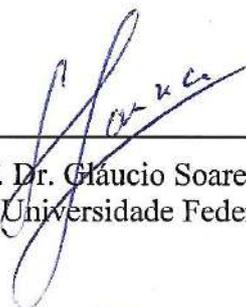
**TRANSFORMAÇÕES DE FASE SEQUENCIAIS**

Aprovado em 14 de junho de 2019.

**BANCA EXAMINADORA**



Prof. Ph.D. Paulo Rangel Rios - **Orientador**  
UFF - Universidade Federal Fluminense



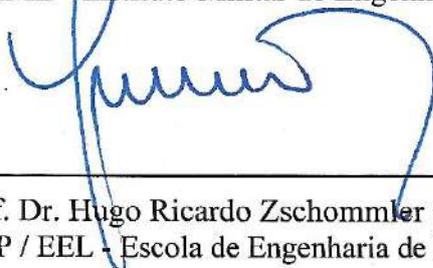
Prof. Dr. Gláucio Soares da Fonseca  
UFF - Universidade Federal Fluminense



Prof. Dr. Wesley Luiz da Silva Assis  
UFF - Universidade Federal Fluminense



Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Anderson dos Santos Paula  
IME - Instituto Militar de Engenharia



Prof. Dr. Hugo Ricardo Zschommler Sandim  
USP / EEL - Escola de Engenharia de Lorena

**Volta Redonda**  
2019

Dedico este trabalho, à minha família que é o esteio de minha vida, não há dúvidas que sem a formação que obtive por ela, esse sonho não se concretizaria. Também dedico ao professor orientador Paulo Rangel Rios, que nesses anos de convívio foi muito mais que um orientador, sempre disposto a ajudar, não poupou esforços para a minha formação, também o agradeço pelos inúmeros conselhos pessoais e profissionais, conviver e trabalhar com ele foi um grande privilégio.

## **AGRADECIMENTOS**

Primeiramente a Deus;

Ao meu pai Jânio e a minha mãe Creuza por todo incentivo, amor e apoio;

Ao meu irmão Celso e minha cunhada Marcela, por todo apoio e companheirismo;

A minha namorada, Sara por todo amor, apoio, incentivo e compreensão;

Aos familiares pelo incentivo;

Ao Prof. Paulo Rangel Rios pela orientação, incentivo e transferência de conhecimento;

A toda a equipe do Núcleo de Modelamento Microestrutural – UFF;

A todos da UFF que ajudaram de alguma forma na construção desta tese;

A concessão da bolsa de Doutorado, o presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001;

Por fim, a todos os amigos que se fizeram presentes durante esse período.

“Aquilo que escuto eu esqueço,

Aquilo que vejo eu lembro,

Aquilo que eu faço eu aprendo”.

*(Confúcio).*

## RESUMO

Nesta tese dá-se o foco às transformações de fase no estado sólido. Elas ocorrem, na maioria dos casos, em uma fase denominada matriz transformando-se, por nucleação e crescimento, em outra fase produto. Porém, com o contínuo desenvolvimento dos materiais, transformações mais complexas podem ocorrer, por exemplo, a fase matriz transformar-se em duas ou mais fases produto. Essa transformação em várias fases produto, pode se dar de maneira simultânea, onde as fases produto iniciam-se juntas, ou de maneira sequencial, onde elas iniciam-se em tempos diferentes. Nesta tese, as transformações simultâneas e sequenciais foram estudadas em detalhes, inclusive buscou-se propor parâmetros microestruturais capazes de melhor descrever qualitativa e quantitativamente as microestruturas multifásicas. No entanto, claro é que nas transformações por nucleação e crescimento, uma das etapas mais importantes, se não a mais importante, é a etapa da nucleação. Nesse contexto, buscou-se também estudar a influência que sítios preferenciais para a nucleação exercem sobre as microestruturas e conseqüentemente sobre as propriedades dos materiais. É de conhecimento que os sítios preferenciais para a nucleação, nas transformações de fase e recristalização, podem ser, entre outros, a interface de precipitados e os contornos de grão. Assim, modelou-se primeiramente a transformação de uma fase denominada matriz, que contém precipitados, em uma única fase produto, em que a nucleação da fase produto se deu na interface matriz/precipitados. Os resultados desse modelamento corroboraram com a recente teoria analítica proposta por Rios e Villa para nucleação em partículas. De posse do modelo para nucleação em precipitados, dando seqüência, aplicou-se os dois sítios preferenciais, interface matriz/precipitados e contornos de grão, às transformações simultâneas e sequenciais, de modo que cada fase produto nucleou exclusivamente em um desses sítios. Portanto, esta tese visou modelar analiticamente e computacionalmente em 3D, pelo método do cone causal, as transformações simultâneas e sequenciais em que a nucleação das fases produto ocorreu em sítios preferenciais. Discutiu-se em detalhes o efeito dessa nucleação. Modelos analíticos e resultados de simulação foram comparados graficamente e ambos se mostraram eficientes no modelamento dessas transformações.

**Palavras-chave:** Transformações de Fases, Recristalização, Simulação Computacional, Transformações Simultâneas e Sequenciais, Nucleação em Partículas, PSN.

## ABSTRACT

This thesis focused on phase transformations in the solid state. The majority phase transformations in the solid state takes place by nucleation and growth. The most common nucleation and growth transformation is a parent phase, called matrix, transforming into a product phase. However, with the continuous development of the materials more complex transformations can occur. For example when matrix transform into two or more product phases. This multi-phase transformation can occur simultaneously, where the product phases start together, or sequentially, where they start at different times. In this thesis the simultaneous and sequential transformations were studied in detail. It was proposed microstructural parameters to describe qualitatively and quantitatively the multi-phase microstructures. However, it is clear that in the transformations by nucleation and growth, the nucleation is one of the most important stage. In this context, it was also studied the influence that preferential sites for nucleation exert on the microstructures and consequently on the properties of the materials. It is already known that the preferred sites for nucleation in phase transformations and recrystallization may be, among others, the interface of precipitates and the grain boundaries. Thus, was modeled the transformation of a matrix, which contains precipitates, into a single product phase. The nucleation of the product phase occurred at the matrix/precipitates interface. The results of this step corroborated with the recent analytical theory proposed by Rios and Villa for nucleation in particles. As a next step, the two preferred sites, matrix/precipitates interface and grain boundaries, were applied to the simultaneous and sequential transformations. Each product phase nucleated exclusively at one of these sites. Therefore, this thesis aimed to model analytically and computationally, in 3D by the causal cone method, the simultaneous and sequential transformations in which the nucleation of the product phases occurred at preferred sites. The effect of this nucleation at preferred sites was discussed in detail. Analytical models and simulation results were compared graphically. Both were efficient in modeling these transformations.

**Key words:** Phase Transformations, Recrystallization, Computer Simulation, Sequential Transformations, Nucleation in Spherical Particles, PSN.

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 1</b> – Fluxograma esquemático do código computacional empregado.....	49
<b>Figura 2</b> – Representação da metodologia do cone causal em 2D: (a) $t = 1$ , (b) $t = 2$ , (c) $t = 3$ onde há a transformação da célula que é o centro da circunferência.....	51
<b>Figura 3</b> – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,01, diâmetro médio das partículas de $1 \mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural.....	58
<b>Figura 4</b> – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,01, diâmetro médio das partículas de $1 \mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada. ....	59
<b>Figura 5</b> – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,03, diâmetro médio das partículas de $1 \mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural.....	60
<b>Figura 6</b> – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,03, diâmetro médio das partículas de $1 \mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada. ....	60
<b>Figura 7</b> – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,05, diâmetro médio das partículas de $1 \mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural.....	61
<b>Figura 8</b> – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,05, diâmetro médio das partículas de $1 \mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada. ....	61
<b>Figura 9</b> – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,01, diâmetro médio das partículas de $3 \mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural.....	62
<b>Figura 10</b> – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,01, diâmetro médio das partículas de $3 \mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada. ....	63
<b>Figura 11</b> – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,03, diâmetro médio das partículas de $3 \mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural.....	63
<b>Figura 12</b> – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,03, diâmetro médio das partículas de $3 \mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) Início da transformação	

para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada. ....	64
<b>Figura 13</b> – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,05, diâmetro médio das partículas de 3 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ....	64
<b>Figura 14</b> – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,05, diâmetro médio das partículas de 3 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada. ....	65
<b>Figura 15</b> – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,01, diâmetro médio das partículas de 5 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ....	66
<b>Figura 16</b> – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,01, diâmetro médio das partículas de 5 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada. ....	66
<b>Figura 17</b> – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,03, diâmetro médio das partículas de 5 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ....	67
<b>Figura 18</b> – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,03, diâmetro médio das partículas de 5 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada. ....	67
<b>Figura 19</b> – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,05, diâmetro médio das partículas de 5 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ....	68
<b>Figura 20</b> – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,05, diâmetro médio das partículas de 5 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada. ....	68
<b>Figura 21</b> – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,1, diâmetro médio das partículas de 3 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ....	70
<b>Figura 22</b> – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,1, diâmetro médio das partículas de 3 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada. ....	70

<b>Figura 23</b> – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,3, diâmetro médio das partículas de 3 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural.....	71
<b>Figura 24</b> – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,3, diâmetro médio das partículas de 3 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada. ....	71
<b>Figura 25</b> – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,5, diâmetro médio das partículas de 3 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural.....	72
<b>Figura 26</b> – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,5, diâmetro médio das partículas de 3 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada. ....	72
<b>Figura 27</b> – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,7, diâmetro médio das partículas de 3 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural.....	73
<b>Figura 28</b> – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,7, diâmetro médio das partículas de 3 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada. ....	73
<b>Figura 29</b> – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,05, diâmetro médio das partículas de 3 $\mu\text{m}$ : (a) $c = 0,1$ ; (b) $c = 0,5$ ; (c) $c = 1$ ; (d) $c = 2$ ; (e) $c = 3$ ; (f) $c = 5$ . ....	75
<b>Figura 30</b> – Fração volumétrica de partículas máxima para a qual a distância relativa máxima entre simulação computacional e solução analítica está abaixo do limiar, $\Delta_{\text{máx}} = 15\%$ , representada em função do número de núcleos por partícula, $c$ . Houve uma boa concordância entre a solução analítica e a simulação computacional em qualquer ponto abaixo da curva...	77
<b>Figura 31</b> – Representação sobre a corroboração entre simulação computacional e modelos analíticos: (a) Baixa fração volumétrica de partículas, (b) Alta fração volumétrica de partículas, (c) Alto número de núcleos por partícula. Em preto a partícula que origina o núcleo e a região hachurada corresponde às partículas vizinhas. A linha cheia representa o crescimento inicial do núcleo, a linha tracejada o crescimento previsto pelo modelo de Alves, Villa e Rios[11] e a linha traço e ponto representa o crescimento previsto pela simulação. ....	80
<b>Figura 32</b> – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,9, diâmetro médio das partículas de 3 $\mu\text{m}$ e $c = 5$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural.....	81

<b>Figura 33</b> – Resultados da transformação com nucleação em inclusões do Tipo A (Sulfeto). (a) $V_V$ versus tempo. (b) Caminho microestrutural. ....	87
<b>Figura 34</b> – Representação da microestrutura simulada da transformação com nucleação em inclusões do Tipo A (Sulfeto). (a) Seção 2D da matriz demonstrando a nucleação nas inclusões no plano $xy$ , onde $x$ é a direção de laminação. (b) Matriz em 3D demonstrando a nucleação nas inclusões. (c) Matriz totalmente transformada. ....	88
<b>Figura 35</b> – Representação da localização das inclusões do Tipo B (Alumina) em 3D. A região pontilhada representa a nova matriz considerada para a simulação. ....	89
<b>Figura 36</b> – Resultados da transformação com nucleação em inclusões do Tipo B (Alumina). (a) $V_V$ versus tempo. (b) Caminho microestrutural. ....	89
<b>Figura 37</b> – Representação da microestrutura simulada da transformação com nucleação em inclusões do Tipo B (Alumina). (a) Seção 2D da matriz demonstrando a nucleação nas inclusões no plano $xy$ , onde $x$ é a direção de laminação. (b) Matriz em 3D demonstrando a nucleação nas inclusões. (c) Matriz totalmente transformada. ....	90
<b>Figura 38</b> – Resultados da transformação com nucleação em inclusões do Tipo C (Silicato). (a) $V_V$ versus tempo. (b) Caminho microestrutural. ....	91
<b>Figura 39</b> – Representação da microestrutura simulada da transformação com nucleação em inclusões do Tipo C (Silicato). (a) Seção 2D da matriz demonstrando a nucleação nas inclusões no plano $xy$ , onde $x$ é a direção de laminação. (b) Matriz em 3D demonstrando a nucleação nas inclusões. (c) Matriz totalmente transformada. ....	91
<b>Figura 40</b> – Resultados da transformação com nucleação em inclusões do Tipo D (Óxido). (a) $V_V$ versus tempo. (b) Caminho microestrutural. ....	92
<b>Figura 41</b> – Representação da microestrutura simulada da transformação com nucleação em inclusões do Tipo D (Óxido). (a) Seção 2D da matriz demonstrando a nucleação nas inclusões no plano $xy$ , onde $x$ é a direção de laminação. (b) Matriz em 3D demonstrando a nucleação nas inclusões. (c) Matriz totalmente transformada. ....	92
<b>Figura 42</b> – Representação da microestrutura simulada da fase matriz policristalina monofásica antes da transformação nas duas fases produto. (a) Microestrutura simulada em 3D, (b) Seção 2D da matriz totalmente transformada, (c) A mesma seção em 2D mostrando apenas os contornos de grão. ....	96
<b>Figura 43</b> – Resultados de transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ....	97

<b>Figura 44</b> – Representação da microestrutura simulada de transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ : (a) Baixa fração volumétrica para mostrar a posição dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.....	98
<b>Figura 45</b> – Volume dos 5 grãos de cada fase produto da transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ : (a) fase 1, (b) fase 2.....	98
<b>Figura 46</b> – Raio equivalente ao raio da esfera dos 5 grãos de cada fase produto da transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ : (a) fase 1, (b) fase 2.....	99
<b>Figura 47</b> – Taxa de crescimento média dos 5 grãos de cada fase produto da transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ : (a) fase 1, (b) fase 2.....	99
<b>Figura 48</b> – Distribuição do volume final de todos os grãos de cada fase produto da transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ : (a) fase 1, (b) fase 2.....	100
<b>Figura 49</b> – Resultados de transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = 1,5G_2$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural.....	101
<b>Figura 50</b> – Representação da microestrutura simulada de transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = 1,5G_2$ : (a) Baixa fração volumétrica para mostrar a posição dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.....	101
<b>Figura 51</b> – Volume dos 5 grãos de cada fase produto da transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = 1,5G_2$ : (a) fase 1, (b) fase 2.....	102
<b>Figura 52</b> – Raio equivalente ao raio da esfera dos 5 grãos de cada fase produto da transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = 1,5G_2$ : (a) fase 1, (b) fase 2.....	102
<b>Figura 53</b> – Taxa de crescimento média dos 5 grãos de cada fase produto da transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = 1,5G_2$ : (a) fase 1, (b) fase 2.....	102
<b>Figura 54</b> – Distribuição do volume final de todos os grãos de cada fase produto da transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = 1,5G_2$ : (a) fase 1, (b) fase 2.....	103
<b>Figura 55</b> – Resultados de transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural.....	104
<b>Figura 56</b> – Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) $V_{V1} = 0,1$ mostrando a nucleação da fase produto 2, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.....	104
<b>Figura 57</b> – Volume dos 5 grãos de cada fase produto da transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) fase 1, (b) fase 2.....	105

<b>Figura 58</b> – Raio equivalente ao raio da esfera dos 5 grãos de cada fase produto da transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) fase 1, (b) fase 2.....	105
<b>Figura 59</b> – Taxa de crescimento média dos 5 grãos de cada fase produto da transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) fase 1, (b) fase 2. ....	106
<b>Figura 60</b> – Distribuição do volume final de todos os grãos de cada fase produto da transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) fase 1, (b) fase 2.....	106
<b>Figura 61</b> – Resultados de transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,3$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural.....	107
<b>Figura 62</b> – Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,3$ : (a) $V_{V1} = 0,3$ mostrando a nucleação da fase produto 2, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.....	107
<b>Figura 63</b> – Volume dos 5 grãos de cada fase produto da transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,3$ : (a) fase 1, (b) fase 2. ....	108
<b>Figura 64</b> – Raio equivalente ao raio da esfera dos 5 grãos de cada fase produto da transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,3$ : (a) fase 1, (b) fase 2.....	108
<b>Figura 65</b> – Taxa de crescimento média dos 5 grãos de cada fase produto da transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,3$ : (a) fase 1, (b) fase 2. ....	109
<b>Figura 66</b> – Distribuição do volume final de todos os grãos de cada fase produto da transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,3$ : (a) fase 1, (b) fase 2.....	109
<b>Figura 67</b> – Contiguidade total de cada fase produto versus $V_V$ para a transformação simultânea e sequencial com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ em ambas as transformações. A única diferença é que, na transformação sequencial, a fase 2 surgiu quando a fase 1 atingiu $V_{V1} = 0,1$ .....	112
<b>Figura 68</b> – Resultados de transformação simultânea com $N_1 = 64$ e $N_2 = 640$ e $G_1 = 1 \mu\text{m}/\text{unid. de tempo}$ e $G_2 \cong 0,46 \mu\text{m}/\text{unid. de tempo}$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ....	116
<b>Figura 69</b> – Representação da microestrutura simulada de transformação simultânea com $N_1 = 64$ e $N_2 = 640$ e $G_1 = 1 \mu\text{m}/\text{unid. de tempo}$ e $G_2 \cong 0,46 \mu\text{m}/\text{unid. de tempo}$ : (a) Baixa fração	

volumétrica para mostrar a posição dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada. ....	116
<b>Figura 70</b> – Contiguidades de cada fase versus $V_V$ . (a) transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2 = 1 \mu\text{m} / \text{unid. de tempo}$ . (b) transformação simultânea com $N_1 = 64$ e $N_2 = 640$ e $G_1 = 1 \mu\text{m} / \text{unid. de tempo}$ e $G_2 \cong 0,46 \mu\text{m} / \text{unid. de tempo}$ . (c) transformação sequencial, a única diferença do caso mostrado em (a) é que a fase 2 começa quando a fase 1 atinge $V_{V1} = 0,1$ .....	119
<b>Figura 71</b> – Dispersão de cada fase versus $V_V$ . (a) transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2 = 1 \mu\text{m} / \text{unid. de tempo}$ . (b) transformação simultânea com $N_1 = 64$ e $N_2 = 640$ e $G_1 = 1 \mu\text{m} / \text{unid. de tempo}$ e $G_2 \cong 0,46 \mu\text{m} / \text{unid. de tempo}$ . (c) transformação sequencial, a única diferença do caso mostrado em (a) é que a fase 2 começa quando a fase 1 atinge $V_{V1} = 0,1$ . 120	120
<b>Figura 72</b> – Resultados de transformação sequencial com $N_1 = 64$ e $N_2 = 464$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ..	123
<b>Figura 73</b> – Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com $N_1 = 64$ e $N_2 = 464$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) $V_{V1} = 0,1$ mostrando a nucleação da fase produto 2, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada. ....	123
<b>Figura 74</b> – Resultados de transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_2 \cong 1,75G_1$ e nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ..	125
<b>Figura 75</b> – Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_2 \cong 1,75G_1$ e nucleação da fase 2 quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) $V_{V1} = 0,1$ mostrando a nucleação da fase produto 2, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada. ....	125
<b>Figura 76</b> – Contiguidade total de cada fase produto versus $V_V$ para a transformação simultânea e sequencial com $G_1 = G_2$ em ambas as transformações. Para a transformação simultânea $N_1 = N_2 = 64$ . Para a transformação sequencial $N_1 = 64$ e $N_2 = 464$ e surgimento da fase 2 quando a fase 1 atingiu $V_{V1} = 0,1$ .....	127
<b>Figura 77</b> – Contiguidade total de cada fase produto versus $V_V$ para a transformação simultânea e sequencial com $N_1 = N_2 = 64$ em ambas as transformações. Para a transformação simultânea $G_1 = G_2$ . Para a transformação sequencial $G_2 \cong 1,75G_1$ e surgimento da fase 2 quando a fase 1 atingiu $V_{V1} = 0,1$ .....	127

<b>Figura 78</b> – Representação da microestrutura simulada da fase matriz policristalina com precipitados esféricos, antes da transformação nas fases produto. (a) Microestrutura simulada em 3D, (b) Seção 2D da matriz totalmente transformada. ....	133
<b>Figura 79</b> – Resultados de transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 254$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ....	136
<b>Figura 80</b> – Representação da microestrutura simulada de transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 254$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a) $V_V = 0,1$ mostrando a região de origem dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada. ....	136
<b>Figura 81</b> – Resultados de transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 676$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ....	137
<b>Figura 82</b> – Representação da microestrutura simulada de transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 676$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a) $V_V = 0,1$ mostrando a região de origem dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada. ....	137
<b>Figura 83</b> – Resultados de transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 1182$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ....	138
<b>Figura 84</b> – Representação da microestrutura simulada de transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 1182$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a) $V_V = 0,1$ mostrando a região de origem dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada. ....	138
<b>Figura 85</b> – Resultados de transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 1688$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ....	140
<b>Figura 86</b> – Representação da microestrutura simulada de transformação simultânea com $N_1 = N_2 = 1688$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a) $V_V = 0,1$ mostrando a região de origem dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada. ....	140

<b>Figura 87</b> – Resultados de transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 254$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ....	141
<b>Figura 88</b> – Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 254$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) $V_{V1} = 0,1$ mostrando a região de origem dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada. ....	142
<b>Figura 89</b> – Resultados de transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 676$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ....	143
<b>Figura 90</b> – Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 676$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) $V_{V1} = 0,1$ mostrando a região de origem dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada. ....	143
<b>Figura 91</b> – Resultados de transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 1182$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ....	144
<b>Figura 92</b> – Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 1182$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) $V_{V1} = 0,1$ mostrando a região de origem dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada. ....	145
<b>Figura 93</b> – Resultados de transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 1688$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) $V_V$ versus tempo, (b) caminho microestrutural. ....	146
<b>Figura 94</b> – Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com $N_1 = N_2 = 1688$ e $G_1 = G_2$ e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando $V_{V1} = 0,1$ : (a) $V_{V1} = 0,1$ mostrando a região de origem dos núcleos, (b) $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada. ....	146

## LISTA DE TABELAS

<b>Tabela 1</b> - Fração volumétrica adotada para as partículas esféricas. ....	56
<b>Tabela 2</b> - Distância relativa máxima, $\Delta_{\text{máx}}$ , em %. Os valores em negrito estão abaixo do limite, $\Delta_{\text{máx}} = 15\%$ .....	77
<b>Tabela 3</b> - Tamanho e quantidade de inclusões adotadas nas simulações. ....	85
<b>Tabela 4</b> - Quantidade de núcleos adotados para cada fase produto.....	134

## LISTA DE ABREVIATURAS, SIGLAS E SÍMBOLOS

JMAK	Johnson, Mehl, Avrami e Kolmogorov
PSN	<i>Particle Stimulated Nucleation</i>
3D	Três Dimensões
2D	Duas Dimensões
$V_E$	Volume Estendido
$V_V$	Fração Volumétrica Transformada
$k$	Constante de Forma das Partículas
$t$	Tempo de Tratamento Térmico
$n$	Constante de Avrami que Indica o Tipo de Nucleação
$G$	Velocidade de Crescimento
$N_V$	Número de Núcleos por Unidade de Volume
$S_V$	Área Superficial Entre Material Transformado e Não Transformado por Unidade de Volume
$R$	Raio da Partícula Esférica
$c$	Média de Núcleos por Partícula
$\lambda$	Número de Partículas por Unidade de Volume
GP	Guinier-Preston
$G_1$	Velocidade de Crescimento da Fase 1
$G_2$	Velocidade de Crescimento da Fase 2
$N_{V1}$	Número de Núcleos da Fase 1 por Unidade de Volume
$N_{V2}$	Número de Núcleos da Fase 2 por Unidade de Volume
$V_{V1}$	Fração Volumétrica Transformada da Fase 1
$V_{V2}$	Fração Volumétrica Transformada da Fase 2
$S_{V1}$	Área Superficial Entre Material Transformado da Fase 1 e Material Não Transformado por Unidade de Volume
$S_{V2}$	Área Superficial Entre Material Transformado da Fase 2 e Material Não Transformado por Unidade de Volume
$t_2$	Tempo em que Ocorre a Nucleação da Fase 2 na Transformação Sequencial
$S_V^{1M}$	Área Interfacial Entre a Fase 1 e a Fase Matriz por Unidade de Volume
$S_V^{MM}$	Área Interfacial Entre a Fase Matriz e a Fase Matriz por Unidade de Volume
$S_V^{11}$	Área Interfacial Entre a Fase 1 e a Fase 1 por Unidade de Volume

$C_1$	Contiguidade da Fase 1
$\delta$	Parâmetro Dispersão
$\Delta$	Parâmetro Duplex
$R_C$	Raio da Esfera do Cone Causal
$C$	Fator de Correção para a Área Superficial da Geometria Simulada via Cone Causal
$G_S$	Velocidade de Crescimento da Forma Geométrica Simulada
$G_{AN}$	Velocidade de Crescimento da Forma Geométrica Analítica
$V_V^S$	Fração Volumétrica Transformada da Forma Geométrica Simulada
$V_V^{AN}$	Fração Volumétrica Transformada da Forma Geométrica Analítica
$S_V^S$	Área Superficial Entre Material Transformado e Não Transformado por Unidade de Volume para a Forma Geométrica Simulada
$S_V^{AN}$	Área Superficial Entre Material Transformado e Não Transformado por Unidade de Volume para a Forma Geométrica Analítica
$N$	Número de Núcleos
$S$	Área Superficial das Partículas
$N_A$	Número de Núcleos por Unidade de Área das Partículas
$S_{VP}$	Área Superficial Entre Partículas e Matriz por Unidade de Volume
$V_{VP}$	Fração Volumétrica de Partículas
$D$	Diâmetro
$R^2$	Coefficiente de Determinação
$V_{VA}$	Fração Volumétrica Dada por Solução Analítica
$V_{VS}$	Fração Volumétrica Dada por Simulação Computacional
$\Delta_{m\acute{a}x}$	Distância Relativa Máxima Entre Duas Funções
$S'$	Área Superficial das Partículas para o Caso em que Elas se Tocam
$R_{cil}$	Raio Médio dos Bastões
$h$	Altura Média do Cilindro que Forma os Bastões
$r$	Raio Equivalente ao Raio da Esfera
$dr/dt$	Taxa de Crescimento Média dos Grãos Acompanhados
$S_V^{Tot}$	Área Superficial Total de Fases Produto por Unidade de Volume
$S_V^{22}$	Área Interfacial Entre a Fase 2 e a Fase 2 por Unidade de Volume
$S_V^{12}$	Área Interfacial Entre a Fase 1 e a Fase 2 por Unidade de Volume e o Caso Oposto

$S_V^{2M}$	Área Interfacial Entre a Fase 2 e a Fase Matriz por Unidade de Volume
$C^1$	Contiguidade Total da Fase 1
$C^2$	Contiguidade Total da Fase 2
$C^{11}$	Contiguidade da Fase Produto 1
$C^{22}$	Contiguidade da Fase Produto 2
$C^{12}$	Contiguidade Entre as Fases Produto 1 e 2
$C^{ii}$	Contiguidade Entre a Mesma Fase Produto
$C^{ij}$	Contiguidade Entre as Fases Produto Diferentes
$\delta^1$	Dispersão da Fase Produto 1
$\delta^2$	Dispersão da Fase Produto 2
$\delta^i$	Dispersão de Cada Fase Produto
$\Delta^1$	Duplex da Fase Produto 1
$\Delta^2$	Duplex da Fase Produto 2
$\Delta^i$	Duplex de Cada Fase Produto
$V_V^A$	Fração Volumétrica Transformada pela Combinação dos Modelos Individuais
$V_{V1}^A$	Fração Volumétrica Transformada Individual da Fase 1
$V_{V2}^A$	Fração Volumétrica Transformada Individual da Fase 2
$S_{V1}^A$	Área Superficial Entre Material Transformado da Fase 1 e Material Não Transformado por Unidade de Volume Individual da Fase 1
$S_{V2}^A$	Área Superficial Entre Material Transformado da Fase 2 e Material Não Transformado por Unidade de Volume Individual da Fase 2

## SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO .....	25
2. OBJETIVOS .....	29
2.1. OBJETIVO GERAL.....	29
2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	29
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....	31
3.1. TRANSFORMAÇÕES DE FASE E A CINÉTICA FORMAL .....	31
3.2. NUCLEAÇÃO EM PARTÍCULAS.....	33
3.3. CINÉTICA DE TRANSFORMAÇÃO PARA NUCLEAÇÃO EM PARTÍCULAS DE SEGUNDA FASE.....	37
3.4. TRANSFORMAÇÕES SIMULTÂNEAS E SEQUENCIAIS .....	40
3.4.1. Caso Particular de Transformações Simultâneas Onde a Fase Matriz Transforma-se em Duas Fases Produto .....	41
3.4.2. Caso Particular de Transformações Sequenciais Onde a Fase Matriz Transforma-se em Duas Fases Produto .....	42
3.5. PARÂMETROS MICROESTRUTURAIS .....	44
4. METODOLOGIA .....	47
4.1. MODELO COMPUTACIONAL .....	48
4.2. CONE CAUSAL.....	50
4.3. FATOR DE CORREÇÃO PARA O $S_V$ SIMULADO PELO MÉTODO DO CONE CAUSAL .....	52
5. SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE TRANSFORMAÇÕES COM NUCLEAÇÃO NA INTERFACE DE PRECIPITADOS ESFÉRICOS .....	54
5.1. METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL.....	55
5.2. RESULTADOS.....	57
5.2.1. Partículas Esféricas com Diâmetro Médio de $1\ \mu\text{m}$ e $c = 1$ .....	58
5.2.1.1. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,01.....	58

5.2.1.2. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,03.....	59
5.2.1.3. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,05.....	60
5.2.2. Partículas Esféricas com Diâmetro Médio de 3 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ .....	62
5.2.2.1. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,01.....	62
5.2.2.2. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,03.....	63
5.2.2.3. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,05.....	64
5.2.3. Partículas Esféricas com Diâmetro Médio de 5 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ .....	65
5.2.3.1. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,01.....	65
5.2.3.2. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,03.....	66
5.2.3.3. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,05.....	67
5.2.4. Resultados Para Frações Volumétricas de Partículas Esféricas Mais Altas e Diâmetro Médio de 3 $\mu\text{m}$ e $c = 1$ .....	69
5.2.4.1. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,1.....	69
5.2.4.2. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,3.....	70
5.2.4.3. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,5.....	71
5.2.4.4. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,7.....	72
5.2.5. Resultados Para Fração Volumétrica de Partículas Esféricas Igual a 0,05 e Diâmetro Médio de 3 $\mu\text{m}$ Com Variação do Parâmetro $c$ .....	74
5.2.6. Visão Geral da Concordância Entre Simulação e Modelos Analíticos.....	76
5.3. DISCUSSÃO.....	78
5.4. CONCLUSÕES.....	81
6. NOVO MODELO DE NUCLEAÇÃO EM PARTÍCULAS APLICADO A INCLUSÕES NÃO METÁLICAS NOS AÇOS.....	83
6.1. METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL.....	84
6.2. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	85
6.2.1. Inclusões Tipo A (Sulfeto).....	87
6.2.2. Inclusões Tipo B (Alumina).....	88
6.2.3. Inclusões Tipo C (Silicato).....	90

6.2.4. Inclusões Tipo D (Óxido) .....	91
6.3. CONCLUSÕES.....	92
7. SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE TRANSFORMAÇÕES SIMULTÂNEAS E SEQUENCIAIS .....	94
7.1. METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL.....	95
7.2. RESULTADOS.....	96
7.2.1. Transformações Simultâneas .....	97
7.2.1.1. Transformações Simultâneas com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ .....	97
7.2.1.2. Transformações Simultâneas com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = 1,5G_2$ .....	100
7.2.2. Transformações Sequenciais .....	103
7.2.2.1. Transformações Sequenciais com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ e Nucleação da Fase Produto 2 em $V_V = 0,1$ .....	103
7.2.2.2. Transformações Sequenciais com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ e Nucleação da Fase Produto 2 em $V_V = 0,3$ .....	107
7.3. DISCUSSÃO .....	110
7.3.1. Descritores Microestruturais para Materiais Multifásicos.....	110
7.3.2. Casos em que as Transformações Simultâneas e Sequenciais Podem Ser Confundidas .....	121
7.3.2.1. Variação do Número de Núcleos da Fase 2 com $G_1 = G_2$ .....	122
7.3.2.2. Variação da Velocidade de Crescimento da Fase 2 com $N_1 = N_2 = 64$ .....	124
7.3.2.3. Distinção Entre as Transformações .....	125
7.4. CONCLUSÕES.....	128
8. SIMULAÇÃO DE TRANSFORMAÇÕES SIMULTÂNEAS E SEQUENCIAIS EM QUE A FASE PRODUTO 1 NUCLEOU NA INTERFACE MATRIZ/PARTÍCULA E A FASE PRODUTO 2 NOS CONTORNOS DE GRÃO .....	130
8.1. METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL.....	132
8.2. RESULTADOS E DISCUSSÃO .....	134
8.2.1. Transformações Simultâneas .....	135

8.2.1.1. Transformações Simultâneas com $N_1 = N_2 = 254$ e $G_1 = G_2$ .....	135
8.2.1.2. Transformações Simultâneas com $N_1 = N_2 = 676$ e $G_1 = G_2$ .....	137
8.2.1.3. Transformações Simultâneas com $N_1 = N_2 = 1182$ e $G_1 = G_2$ .....	138
8.2.1.4. Transformações Simultâneas com $N_1 = N_2 = 1688$ e $G_1 = G_2$ .....	139
8.2.2. Transformações Sequenciais .....	140
8.2.2.1. Transformações Sequenciais com $N_1 = N_2 = 254$ e $G_1 = G_2$ .....	140
8.2.2.2. Transformações Sequenciais com $N_1 = N_2 = 676$ e $G_1 = G_2$ .....	142
8.2.2.3. Transformações Sequenciais com $N_1 = N_2 = 1182$ e $G_1 = G_2$ .....	143
8.2.2.4. Transformações Sequenciais com $N_1 = N_2 = 1688$ e $G_1 = G_2$ .....	145
8.3. CONCLUSÕES.....	147
9. CONSIDERAÇÕES FINAIS .....	149
10. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS .....	151
11. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	152
12. APÊNDICES.....	159
12.1. TRABALHOS PUBLICADOS DURANTE O DESENVOLVIMENTO DESTA TESE .....	159
12.1.1. Artigos completos publicados em periódicos.....	159
12.1.2. Trabalhos completos publicados em anais de congressos .....	160
12.1.3. Resumos expandidos publicados em anais de congressos .....	162
12.1.4. Resumos publicados em anais de congressos .....	162
12.2. DEFINIÇÃO DE MAIS PARÂMETROS MICROESTRUTURAIS PARA MATERIAIS MULTIFÁSICOS.....	164

## 1. INTRODUÇÃO

Dos materiais simples aos materiais complexos, quase todos apresentam alguma transformação de fase. Assim, o estudo dessas transformações é algo indispensável no avanço tecnológico dos materiais. Na literatura há uma vasta classe de transformações. Nesta tese dá-se o foco às transformações que ocorrem no estado sólido, por nucleação e crescimento. A recristalização, apesar de não ser propriamente uma transformação de fase, será tratada nesta tese como tal, uma vez que seu mecanismo é bastante semelhante às transformações por nucleação e crescimento.

O modelo mais utilizado para o modelamento das transformações de fase por nucleação e crescimento é o modelo da cinética formal. Os trabalhos de Johnson e Mehl[1], Kolmogorov[2] e Avrami[3–5] também conhecidos como JMAK, constituem a sua base. O modelo da cinética formal de JMAK foi idealizado ainda nos anos 1930 e é capaz de modelar a transformação de uma fase matriz em outra fase, ou o crescimento das regiões recristalizadas consumindo uma matriz deformada. Até a atualidade o modelo de JMAK já foi revisitado por vários pesquisadores que o generalizou de várias formas[6–10].

Claro é que nessas transformações por nucleação e crescimento, uma das etapas mais importantes, se não a mais importante, é a etapa da nucleação. Pelos conceitos da teoria clássica da nucleação é de conhecimento que a nucleação heterogênea é favorecida, portanto, sítios preferenciais para a nucleação podem ser, entre outros, a interface de precipitados e os contornos de grão. Assim buscou-se estudar o efeito desses diferentes sítios na nucleação.

Nesse contexto, o primeiro caso estudado foi a transformação por nucleação e crescimento de uma fase denominada matriz, que contém precipitados, em uma única fase produto, em que a nucleação da fase produto se deu na interface matriz/precipitados. Partículas, precipitados e inclusões são chamados da mesma maneira nesta tese. Através desse primeiro

estudo, modelou-se computacionalmente essas transformações, corroborando com a recente teoria analítica de Rios e Villa, vide Alves, Villa e Rios[11]. Assim, obteve-se para vários casos a curva da cinética ao longo de toda a transformação e variados exemplos de microestruturas simuladas que podem ser geradas por essas transformações.

Entretanto, esta tese se propõe a considerar transformações simultâneas e sequenciais, que são casos mais complexos do que a simples transformação de uma fase matriz em uma outra única fase produto. Logo, como um segundo estudo, abordou-se as transformações em que a fase matriz transforma-se em duas fases produto distintas. Essa transformação em duas fases produto, pode ocorrer de maneira simultânea, onde as duas fases iniciam-se no mesmo instante, ou de maneira sequencial, onde as fases iniciam-se em tempos diferentes. Em 2011, Rios e Villa[12], desenvolveram métodos analíticos exatos que descrevem as transformações simultâneas e sequenciais. Em trabalhos anteriores, Alves[13,14] simulou utilizando o método do cone causal vários casos de transformações simultâneas e sequenciais, comparando seus resultados com o modelo analítico de Rios e Villa[12], comprovando que as simulações computacionais podem ser utilizadas no modelamento das transformações simultâneas e sequenciais. De fato, apesar de sua relevância, as transformações simultâneas podem ser consideradas como um caso particular de transformações sequenciais, quando as fases produto iniciam-se no mesmo tempo, por esse motivo intitulou-se esta tese como transformações sequenciais, muito embora ambas as transformações tenham sido estudadas.

No presente estudo das transformações simultâneas e sequenciais, abordou-se primeiramente, assim como em trabalhos prévios[13,14], os casos em que a nucleação das duas fases produto ocorreu de maneira uniformemente aleatória na matriz. Nessa primeira abordagem, buscou-se ir além de Alves[13], foram propostos parâmetros microestruturais capazes de caracterizar qualitativa e quantitativamente as microestruturas simuladas correspondentes à essas transformações. Ressalta-se que essas microestruturas apresentam um maior grau de dificuldade de se caracterizar, uma vez que apresentam mais de uma fase produto.

Como um próximo passo, ainda se tratando das transformações simultâneas e sequenciais, fez-se considerações sobre a nucleação das duas novas fases produto. Partindo-se de uma prévia microestrutura simulada que possui partículas, considerou-se a transformação simultânea e/ou sequencial em que a fase produto 1 nucleou na interface matriz/partícula e a fase produto 2 nos contornos de grão. Discutiu-se em detalhes o efeito dessa nucleação em sítios preferenciais, nas microestruturas simuladas e conseqüentemente nas propriedades dos materiais que sofrem essas transformações.

A grande motivação para a presente tese é que muitos pesquisadores reportaram em diferentes materiais e diferentes técnicas, que as regiões de interface de precipitados e regiões de contornos de grão favorecem a nucleação, em muitos casos pela ocorrência da nucleação heterogênea. Por exemplo, Goetz[15] observou na recristalização dinâmica que a nucleação ocorreu tanto nos contornos de grão quanto na interface de precipitados. Ele reportou que os precipitados agiram como sítios adicionais. Logo, é de relevante interesse para o campo das transformações de fase de se possuir modelos analíticos e computacionais capazes de modelar as transformações em que a nucleação ocorre nesses sítios preferenciais. Quanto maior o grau de sofisticação desses modelos, maiores as chances de o pesquisador extrair inferências sobre as transformações, o que auxiliaria na prática experimental.

Assim, esta tese se propõe a abordar em diferentes capítulos os temas expostos anteriormente. No capítulo 3 é apresentada uma breve revisão bibliográfica sobre: as transformações de fase e modelo JMAK; a nucleação em precipitados; as transformações simultâneas e sequenciais; e por fim sobre parâmetros microestruturais. O capítulo 4 aborda toda a metodologia empregada para a construção desta tese.

No capítulo 5, estudou-se vários casos de transformações de uma fase matriz, que contém precipitados esféricos, em uma outra fase produto, em todos os casos a nucleação da fase produto se deu na interface matriz/partículas. Várias considerações a respeito da dimensão e volume dos precipitados foram estudadas. Vale ressaltar que essas transformações são válidas para a nucleação estimulada pela partícula, do inglês “*Particle Stimulated Nucleation*”, PSN, durante a recristalização, bem como para transformações de fase. Todos os casos foram comparados com o novo modelo de nucleação em partículas de Alves, Villa e Rios[11].

Ressalta-se ainda que assim como no modelo de Alves, Villa e Rios[11] no capítulo 5 considerou-se apenas partículas esféricas, no entanto, em materiais reais as partículas podem não ser esféricas, como é o caso das inclusões não metálicas mais comuns dos aços que segundo a ASTM-E45[16] são classificadas em quatro tipos: A-Sulfureto, B-Alumina, C-Silicato e D-Óxido. Portanto, no capítulo 6, aplicou-se a metodologia da nucleação em partículas esféricas, discutida no capítulo 5, em inclusões não metálicas dos aços. Considerou-se as inclusões presentes na norma ASTM-E45[16] e em todos os casos buscou-se reproduzir a classificação da ASTM-E45[16] de série grossa, e severidade de nível 3, considerando-se a geometria das inclusões como aquelas reportadas em produtos submetidos a laminação.

No capítulo 7, exibiu-se simulações de transformações simultâneas e sequenciais e aplicou-se a essas simulações técnicas de metalografia quantitativa e parâmetros

microestruturais com o intuito de se caracterizar qualitativa e quantitativamente as microestruturas que podem ser geradas por essas transformações simultâneas e sequenciais. Os resultados desse capítulo foram comparados com o modelo analítico de Rios e Villa[12] e serviram como base para o capítulo seguinte.

No capítulo 8, abordou-se o modelamento das transformações simultâneas e sequenciais em que, partindo-se de uma prévia microestrutura simulada que contém partículas, a fase produto 1 nucleou na interface matriz/partícula e a fase produto 2 nos contornos de grão. Variou-se o número de núcleos de cada fase produto para uma melhor investigação do efeito da nucleação em sítios preferenciais. O capítulo 9 apresenta as considerações finais de todo o estudo abordado por esta tese de doutorado.

Cabe ainda salientar que durante a realização desta tese, foram publicados 29 trabalhos, dos quais 6 em periódicos internacionais de relevância, inclusive com conceitos A e B no Qualis CAPES, e dentre eles destaca-se os dois trabalhos publicados na *Acta Materialia*. A lista completa dessas publicações encontra-se no Apêndice 12.1.

## **2. OBJETIVOS**

### **2.1. OBJETIVO GERAL**

O objetivo principal desta tese é modelar analiticamente e computacionalmente em 3D as transformações simultâneas e sequenciais em que a nucleação das fases produto ocorre em sítios preferenciais. Os sítios preferenciais adotados foram a superfície de precipitados e os contornos de grão.

### **2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS**

- Obter um código computacional, capaz de simular com fidelidade as transformações de fase em que uma fase matriz, que possui partículas esféricas, se transforma em outra única fase produto onde a nucleação dessa fase produto ocorre com todos os núcleos situados na interface matriz/partículas;
- Comparar as simulações computacionais do item anterior com o modelo analítico de Alves, Villa e Rios[11] e assim extrair conclusões pertinentes;
- Aplicar a metodologia de nucleação em partículas esféricas para situações em que as partículas não são esféricas, tornando assim as simulações mais próximas de casos reais;

- Estudar técnicas de caracterização microestrutural e analisar a viabilidade da aplicação dessas para as microestruturas obtidas por simulação em 3D, aprimorando assim a análise qualitativa e quantitativa das microestruturas simuladas;
- Propor parâmetros microestruturais capazes de caracterizar qualitativa e quantitativamente as microestruturas multifásicas;
- Expandir o código computacional do primeiro item para as situações em que se transforma uma matriz prévia que possui precipitados em duas fases produto de maneira simultânea ou sequencial, onde a nucleação das fases produto ocorre na interface matriz/partículas e nos contornos de grão;
- Avaliar a influência que esses sítios preferenciais exercem sobre as microestruturas e conseqüentemente sobre as propriedades dos materiais que sofrem essas transformações;
- Testar os modelos em diversas situações, desde mais corriqueiras, a situações que podem ser difíceis de se investigar em materiais reais.

### 3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

#### 3.1. TRANSFORMAÇÕES DE FASE E A CINÉTICA FORMAL

As transformações de fase ocorrem na maioria dos materiais, ela é fruto de uma reação interna do material para fins da diminuição da sua energia interna, ou seja, para o atingimento do estado de menor energia, ou de maior equilíbrio termodinâmico. Pode-se ter uma alta gama de classificações para as transformações de fase, nesta tese o foco foi dado às transformações de fase no estado sólido. Grande parte das transformações sólido-sólido ocorre pelo fenômeno da nucleação e crescimento e elas podem ou não ser difusionais.

Um dos modelos mais utilizados para o modelamento das transformações por nucleação e crescimento, foi desenvolvido ainda nos anos 30, pelos trabalhos de Johnson e Mehl[1], Kolmogorov[2] e Avrami[3–5], conhecido também por modelo JMAK. A teoria desenvolvida por eles modela a cinética das regiões transformadas. Observa-se a aplicação do modelo JMAK em uma gama de transformações, seja em materiais metálicos ou não. Algumas dessas aplicações podem ser vistas na cristalização de polímeros[17], na recristalização[18], nas transformações de austenita-perlita[1], no espalhamento (“*spread*”) da martensita[19,20] e no crescimento anormal em BaTiO<sub>3</sub> [21,22].

Inicialmente para o entendimento da teoria de JMAK, deve-se entender o conceito de volume estendido,  $V_E$ . Para a transformação de uma fase matriz em uma outra fase  $\alpha$ , por exemplo, a consideração de  $V_E$  é que os novos grãos de fase  $\alpha$  cresçam sem interferência, ou seja, eles cresceriam até a ocupação de todo o espaço amostral e também um grão cresceria para dentro dos outros grãos vizinhos. Sabe-se que na prática ocorre a interferência ou colisão, do inglês “*impingement*”, que trata do encontro dos grãos vizinhos, e a posterior disputa entre eles

para o crescimento sobre o volume ainda não transformado da matriz, ou seja, eles disputam entre si, e um grão afeta o crescimento do outro. É fácil perceber que o  $V_E$  apresenta um volume muito maior, que o volume real transformado.

O modelo JMAK, através de uma relação matemática, faz uso do  $V_E$ , e obtém a fração volumétrica real, ou fração recristalizada,  $V_V$ . Esta relação matemática é observada na Equação (1) e leva em conta que os núcleos da nova fase surjam em qualquer lugar da matriz, ou seja eles possuem uma distribuição espacial de forma uniformemente aleatória.

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

A Equação (1) é obtida para a saturação de sítios, ou seja, quando todos os núcleos surgem no instante inicial, e tem um caráter sigmoidal. Pode-se também adotar a equação de Avrami, Equação (2), muito próxima a anterior.

$$V_V(t) = 1 - \exp(-k t^n) \quad (2)$$

Onde:  $t$  é o tempo de tratamento térmico,  $k$  é a constante de forma das partículas que crescem em função do tempo e  $n$  representa a constante de Avrami. Aplicando a Equação (2) para grãos esféricos, nucleação por saturação de sítios e velocidade de crescimento constante,  $G$ , ela toma a forma da Equação (3).

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

Derivando-se a Equação (3), encontra-se a área superficial entre material transformado e não transformado por unidade de volume,  $S_V$ .

Apesar de ser amplamente adotado para várias transformações de fase, para se fazer uso do modelo JMAK é necessário algumas considerações, dentre elas, citam-se: o espaço amostral deve ser infinito, os núcleos devem possuir forma geométrica semelhante e estarem distribuídos aleatoriamente na amostra, o crescimento deve ser isotrópico e é somente afetado pela ocorrência do “*impingement*”. Obviamente não se pode obedecer essas considerações em todos os casos, como por exemplo em alguns casos adotados nesta tese, onde a nucleação não ocorreu distribuída aleatoriamente na matriz, mas sim ocupando os sítios presentes nas interfaces de

partículas e contornos de grão, portanto essa condição de nucleação não uniformemente distribuída no espaço, pode causar uma eventual discordância com o modelo de JMAK.

### 3.2. NUCLEAÇÃO EM PARTÍCULAS

A nucleação em partículas pode ocorrer em vários casos, do ponto de vista da teoria clássica de nucleação ela pode ser considerada como uma nucleação heterogênea, que por sua vez tem vantagens físicas com relação à nucleação homogênea. A vantagem da nucleação heterogênea ocorre, pois, a barreira energética para a nucleação nesse caso é menor, e também pelo fato do volume do novo núcleo ser menor, apesar de mantido o seu raio crítico.

Bott e Rios[23] empregando os conceitos clássicos de nucleação, estudaram a efetividade que inclusões não metálicas esféricas tem ao agirem como sítios de nucleação para a ferrita acicular em metal de solda. Eles adotaram o conceito de nucleação heterogênea para a nucleação nas partículas não metálicas e demonstraram que inclusões maiores, são mais efetivas na nucleação da ferrita acicular do que as pequenas, uma vez que quanto maior as inclusões, mais heterogênea se torna a nucleação. Eles sugeriram ainda que o tamanho comum para as partículas esféricas independente da composição, varia entre 0,1 a 6,0  $\mu\text{m}$  de diâmetro, e que ao se ultrapassar esse tamanho, pouco é ganho em efetividade para a nucleação. Um outro ponto interessante discutido por eles é de que o aumento da fração volumétrica das partículas, mantendo-se o mesmo tamanho de partículas e os demais parâmetros constantes, apresenta apenas um pequeno efeito na efetividade da nucleação.

Em se tratando de recristalização, a complexidade das subestruturas geradas pela deformação deve ser considerada. Quando ocorre deformação no material, a partícula, geralmente mais resistente, causa um efeito na região do seu entorno. A deformação nas vizinhanças das partículas é mais severa, conseqüentemente, maior o acúmulo de energia nesta região, o que favorece a nucleação. Esse fenômeno é o PSN, que é observado em vários materiais e ligas, e estima-se que para a sua maior eficiência, deve-se considerar o espaçamento entre as partículas e também o tamanho crítico para as partículas, caso elas sejam menores que esse tamanho crítico elas podem inibir a recristalização e funcionar como barreira para os contornos de grão, influenciando em seu crescimento, o chamado efeito ancoramento, do inglês, “*pinning effect*”. Vale observar que o PSN não é o único mecanismo para a nucleação em

recristalização, a presença de outros sítios também pode ocorrer, como por exemplo os contornos de grão.

O PSN é objeto de estudo de diversos pesquisadores, Gawne e Higgins[24] por exemplo mostraram em seu trabalho que os carbonetos foram exclusivamente os sítios de nucleação para a recristalização do ferro 0,4% em peso de carbono. Estes carbonetos encontravam-se distribuídos aleatoriamente no material e os autores sugeriram em suas análises que existe um tamanho crítico de partícula para que ocorra a nucleação na recristalização, e esse tamanho crítico está associado ao volume da partícula. Eles sugeriram em seu trabalho que a partícula deve ter volume suficiente para conter um subgrão, assim o tamanho mínimo da partícula seria de mesma ordem do tamanho do subgrão, eles encontraram um diâmetro médio de 0,5  $\mu\text{m}$  para os subgrãos e todas as partículas que não agiram como sítios para a nucleação, tinham tamanhos menores que esse. Outro ponto interessante abordado por Gawne e Higgins[24] é de que as partículas localizadas próximas ao contorno de grão agiram mais fortemente como sítios de nucleação do que as partículas no interior dos grãos. Eles acreditaram que isso se dá, devido à complexidade da deformação na região do contorno de grão que acaba por fornecer um nível maior de deformação na vizinhança das partículas nesse caso, o que favorece a nucleação por ser uma região de maior energia. Considerando o mesmo fenômeno, os autores concluíram ainda que um grupo de partículas age melhor como sítios de nucleação, do que uma partícula sozinha. Sugeriram que isso ocorre devido ao estarem em grupo, a vizinhança dessas partículas acaba ganhando um maior nível de deformação e conseqüentemente há uma maior tendência de agirem como sítios de nucleação.

Em seu trabalho Nes[25] também sugeriu a existência de um tamanho crítico para as partículas para que elas ajam como sítios de nucleação e ocorra o PSN, caso essas partículas fossem menores elas tenderiam a inibir tanto a nucleação quanto o crescimento dos grãos. Ele também sugeriu que um tamanho razoável seria um tamanho semelhante ao diâmetro dos subgrãos, aproximadamente de 0,5-1,0  $\mu\text{m}$ . Uma consideração importante afirmada por Nes[25] é que embora as partículas maiores ajam como sítios de nucleação, elas tem a sua efetividade drasticamente afetada pela variação na sua dispersão. Ele observou ainda que uma maior dispersão de partículas finas tem efeito negativo na nucleação, por outro lado uma maior dispersão de partículas maiores é equivalente ao aumento do tamanho das partículas e/ou o aumento do número de partículas, o que irá favorecer a nucleação. Ele afirma ainda, portanto, que a dispersão das partículas é fisicamente o parâmetro mais significativo.

Humphreys[26] evidenciou a ocorrência do PSN em seu estudo sobre a recristalização com nucleação em partículas de segunda fase em uma liga de Al, notando que a recristalização ocorre mais rapidamente no material que contém partículas de segunda fase do que no material que não contém. Ele observou que mesmo para reduções superiores a 95%, não houve evidências que as partículas sofreram deformação e que se essas partículas forem finas e dispersas elas inibem a recristalização, já se forem grandes e dispersas promovem a recristalização, pois tanto a nucleação, quanto o crescimento dos grãos são favorecidos com o aumento das partículas. Um ponto interessante sugerido por Humphreys[26] é que na maioria dos casos ocorreu o surgimento de apenas um núcleo por partícula e que esse núcleo pode não estar exclusivamente localizado na interface entre partícula e matriz, mas sim na região deformada, vizinha a partícula. Ele sugere ainda que o tamanho de grão final quando ocorre o PSN, pode ser determinado diretamente através da relação entre o espaçamento entre as partículas, o que condiz com o raciocínio do surgimento de apenas um núcleo por partícula, se esses núcleos tiverem a mesma velocidade de crescimento, eles provavelmente se encontrarão na metade do espaço que há entre essas partículas.

Koken et al.[27] também disseram que o tamanho das partículas assim como a distribuição espacial das mesmas são muito importantes para se determinar em quais partículas ocorre o PSN, uma vez que na maioria dos casos a densidade de núcleos recristalizados é muito menor que a densidade de partículas. Eles identificaram a nucleação de novos grãos recristalizados na vizinhança de grandes partículas agrupadas, do inglês, “*clusters*”, e sugeriram que para que se ocorra PSN nessa região, ela deve conter uma densidade local de partículas de três a cinco vezes a densidade média de partículas. Nesse contexto o PSN envolve apenas uma pequena quantidade de partículas e eles observaram então que a nucleação depende fortemente do agrupamento delas.

Ørsund e Nes[28,29], estudaram a ocorrência do PSN através da análise da textura apresentada pelos novos grãos em uma liga Al-Mn, concluíram que a altas temperaturas a nucleação se dá na região deformada vizinha a partícula, já a baixas temperaturas o núcleo surge na interface da partícula, e cresce em direção à região deformada. Eles afirmaram que a principal diferença entre os dois casos é que no primeiro os novos grãos apresentaram texturas aleatórias, já no segundo caso, apresentaram uma textura próxima a textura de laminação. Eles sugeriram também que a partícula tem um tamanho crítico e se o diâmetro médio é menor que o tamanho crítico somente ocorre a nucleação na região deformada vizinha a partícula. Já se o tamanho médio for maior que o crítico, há uma transição entre os dois casos de nucleação.

Habiby e Humphreys[30] também demonstraram que a diferença de orientação cristalográfica entre os núcleos recristalizados e a região vizinha deformada, depende da temperatura de recristalização. Eles estudaram a orientação inicial e final dos grãos nucleados exclusivamente nas partículas, PSN, e observaram que a textura do material totalmente recristalizado não necessariamente é a mesma textura apresentada pelos núcleos.

Humphreys[31], observou que ocorre o PSN também para partículas de Sílica em Níquel e que muitos dos grãos recristalizados eram associados a partículas grandes. Um ponto interessante abordado por ele é que no início da transformação, os grãos embora equiaxiais apresentaram contornos facetados, porém na análise do material totalmente recristalizado foi observado que os grãos apresentaram contornos com certa curvatura, assim como o observado em vários outros metais.

Goetz[15] modelou a ocorrência do PSN durante a recristalização dinâmica, e observou que com partículas de 3,0-3,2  $\mu\text{m}$  a recristalização dinâmica ocorre a temperaturas mais baixas e no interior dos grãos, devido ao PSN, e não somente nos contornos de grão, como sugere a teoria clássica da recristalização dinâmica. Em seu modelo as partículas agiram apenas como sítios adicionais para a nucleação, ou seja, também ocorreu nucleação nos contornos de grão e a deformação ao redor das partículas não foi considerada. Goetz[15] concluiu ainda que o PSN aumentou a quantidade de nucleação e conseqüentemente a velocidade de recristalização, e também que a combinação entre a nucleação heterogênea dos contornos de grão e a nucleação homogênea das partículas resultou em expoentes de Avrami de 2,03 e 2,44 para frações volumétricas de partículas igual a 0,25% e 0,04% respectivamente, valores esses mais altos do que os expoentes típicos da recristalização dinâmica sem a presença de PSN, na ordem de 1,3-1,8.

Cock et al.[32] propuseram um modelo para a recristalização de aço baixo carbono laminado a frio com a presença de precipitados, baseando-se na teoria de JMAK. As partículas de cementita neste material agem como sítios para a nucleação dos grãos recristalizados, ocorrendo o PSN. Em seu modelo, foi considerado o carbono equivalente do aço que determina a quantidade de cementita precipitada e a temperatura de processamento que define a morfologia e a distribuição dessas partículas. Eles observaram que a orientação dos grãos recristalizados nucleados nas partículas de cementita é aleatória, da mesma maneira que as zonas de deformação também possuem orientação aleatória. Também afirmaram que teores de carbono mais altos tendem a acelerar a recristalização e causar um afinamento e também a diminuição do espaçamento entre as partículas, uma vez que um maior teor de carbono aumenta

a quantidade de partículas. Os autores concluíram que seu modelo foi bom ao prever a fração volumétrica recristalizada dos casos estudados, mas que ele ligeiramente subestima o efeito de partículas grandes e superestima o efeito de partículas pequenas. Eles acreditaram que isso ocorreu pela necessidade excessiva de simplificação da nucleação e do “*impingement*”.

Zhang et al.[33] fizeram um estudo em 3D da ocorrência do PSN em uma liga de Al. Eles consideraram partículas grandes aquelas que tiveram mais de 3  $\mu\text{m}$ , e as menores de 0,5-3  $\mu\text{m}$  foram consideradas como dispersóides. Em todo o volume da amostra avaliada observaram um total de 2423 núcleos em quatro tipos de sítios: 90% desses núcleos foram encontrados nos grupos, “*clusters*”, de partículas grandes, 2,8% em partículas grandes sozinhas, 5% em grandes dispersóides e o restante em regiões sem partículas e dispersóides. Foi reportado que todas as partículas grandes, sozinhas ou em “*clusters*” apresentaram PSN. Os autores afirmaram ainda que pode haver interpretações equivocadas ao se analisar em 2D visto que as partículas se estendem pela seção transversal à seção 2D em análise. Como exemplo, citaram a diferença para os dados obtidos em seu trabalho, ao se efetuar a análise em 2D, apenas 74% dos núcleos seriam classificados como próximos a grupos, “*clusters*”, de partículas grandes, em contraste com o valor encontrado para a análise em 3D de 90%.

Zhang et. al.[34] revelaram que ocorre PSN também em partículas de  $\text{TiC}_x$  em uma liga Ti-35V-15Cr-0,3Si-0,1C (wt%). Foi observado que os sítios de nucleação preferenciais para essa liga são as vizinhanças das partículas de  $\text{TiC}_x$  e que os grãos recristalizados originados por PSN apresentaram texturas aleatórias.

Nota-se claramente através dos diversos trabalhos acima citados que a nucleação em partículas é de grande relevância no estudo das transformações de fase. A literatura sugere um tamanho médio de partículas de 1  $\mu\text{m}$  a 6  $\mu\text{m}$ , e que a maneira que elas se encontram distribuídas no espaço amostral influencia diretamente na ocorrência da nucleação. Todas essas informações extraídas da literatura foram consideradas para o modelamento das transformações, assim como também abordadas nas discussões seguintes.

### **3.3. CINÉTICA DE TRANSFORMAÇÃO PARA NUCLEAÇÃO EM PARTÍCULAS DE SEGUNDA FASE**

Em seu trabalho inicial, Johnson e Mehl[1], Kolmogorov[2] e Avrami[3-5] (JMAK), não propuseram mecanismos físicos específicos para nucleação e crescimento, em vez disso foi

considerado que a nucleação poderia ocorrer tanto com uma taxa de nucleação constante quanto com a saturação de sítios, e que os núcleos eram distribuídos aleatoriamente no espaço amostral. Entretanto, na prática, surgem muitas situações que diferem significativamente das suposições originais de JMAK. Talvez o caso mais simples que não satisfaça as suposições de JMAK seja de que a velocidade pode não ser constante durante a transformação, contudo, neste caso particular, JMAK pode ser facilmente generalizado pela introdução de uma velocidade dependente do tempo. De fato, a própria Avrami[3–5] reconheceu que poderiam ocorrer desvios de suas suposições e propôs uma forma generalizada de sua equação que é conhecida até hoje como a equação de Avrami, vide Equação (2).

Pode-se dizer que o modelo de JMAK deu origem a dois caminhos para o modelamento da cinética formal. Por um dos caminhos, de maneira análoga a JMAK, os pesquisadores tentam derivar expressões analíticas exatas fazendo suposições diferentes sobre a nucleação e crescimento, visando a abrangência a casos distintos dos abordados por JMAK. Um belo exemplo desse primeiro caminho é o trabalho de Cahn[6] sobre a nucleação em planos e linhas, uma vez que ele derivou equações matemáticas exatas para modelar transformações nucleadas em planos e linhas aleatórias. Em um segundo caminho, os pesquisadores baseiam-se na Equação (2) como ponto de partida e desenvolvem metodologias formais para casos bastante particulares, adequando-se a Equação (2) para situações em que informações detalhadas sobre a nucleação e crescimento não estão disponíveis. Existe um grande número de artigos baseados nessa última abordagem, uma revisão abrangente pode ser encontrada em Liu et al.[35].

Baseando-se nos desenvolvimentos recentes da Geometria Estocástica[36], um número significativo de artigos têm surgido, talvez o primeiro trabalho baseado nos conceitos da Geometria Estocástica tenha sido o de Sekimoto[37]. Em seu trabalho, ele forneceu uma expressão para as funções de correlação de  $n$ -pontos descrevendo a nucleação e crescimento em circunstâncias gerais. Com base na abordagem de Sekimoto[37], Rickman et al.[38] apresentaram um tratamento geral para a nucleação heterogênea. Recentemente, Rickman e Barmak[39] obtiveram uma função de correlação de  $n$ -pontos para as situações onde ocorreu a nucleação em que os núcleos tem correlação e a nucleação em que os núcleos não tem correlação.

É de conhecimento que um dos desafios da cinética formal é modelar a nucleação, particularmente, a localização dos núcleos dentro da matriz. Há ainda a possibilidade de os núcleos terem correlação ou não[40,41]. Rios, Villa e colaboradores[10,12,14,42–49] focando principalmente na distribuição dos núcleos no espaço amostral derivaram expressões

matemáticas exatas para generalizar o modelo de JMAK para as transformações nas quais a nucleação e o crescimento são significativamente diferentes daqueles originalmente propostos por JMAK. Dando continuidade, Alves, Villa e Rios[11] aplicaram a metodologia desenvolvida anteriormente por Rios e Villa[10,42,43,46] ao problema da nucleação na interface entre partículas de segunda fase e a fase matriz. Como já dito anteriormente a nucleação na interface de precipitados pode ocorrer em várias circunstâncias, por exemplo, na recristalização tem-se o PSN[26,33,50,51], entretanto, como um caso completamente diferente também pode ocorrer a nucleação em partículas que se formam dentro do metal de solda[23,52,53]. Apesar de sua óbvia importância científica e tecnológica não há muitos modelos computacionais[15,54,55] ou analíticos[28,32] disponíveis para nucleação em partículas. Os modelos normalmente focam na recristalização por PSN e enfatizam fortemente a textura resultante da nucleação nas partículas.

O novo modelo de Alves, Villa e Rios[11] adota uma abordagem do tipo de JMAK, não fazendo suposições específicas sobre o mecanismo físico da transformação, nem sobre o material. Para o seu desenvolvimento considerou-se a transformação de uma fase matriz que possui precipitados esféricos distribuídos aleatoriamente no espaço amostral, em uma outra fase produto em que a nucleação dessa nova fase produto ocorreu na interface matriz/partículas, por saturação de sítios. Essa nucleação na superfície das partículas também foi aleatória e seguiu a distribuição de Poisson homogênea[10,36] com uma média de núcleos por unidade de área de partículas. As Equações (4) e (5) a seguir foram retiradas de Alves, Villa e Rios[11], trata-se das equações exatas que descrevem a cinética da transformação, elas foram utilizadas nos capítulos 5, 6 e 8 e são mostradas aqui para a conveniência dos leitores. Para mais detalhes sobre o novo modelo analítico para a nucleação em partículas de segunda fase e o desenvolvimento detalhado das Equações (4) e (5), vide [11].

$$\begin{aligned} &\text{Para } 0 \leq t \leq 2R/G \\ V_V(t) = &1 - \exp\left(-\lambda \left[4\pi \int_R^{Gt+R} \left\{1 - \exp\left(-\frac{c}{4\pi R^2} 2\pi R \left(R - \frac{\rho^2 + R^2 - G^2 t^2}{2\rho}\right)\right)\right\} \rho^2 d\rho\right]\right) \end{aligned} \quad (4)$$

Para  $t > 2R/G$

$$\begin{aligned}
 V_V(t) = 1 - \exp \left( -\lambda \left[ (1 - e^{-c}) \frac{4}{3} \pi ((Gt - R)^3 - R^3) \right. \right. \\
 \left. \left. + 4\pi \int_{Gt-R}^{Gt+R} \left\{ 1 \right. \right. \right. \\
 \left. \left. \left. - \exp \left( -\frac{c}{4\pi R^2} 2\pi R \left( R - \frac{\rho^2 + R^2 - G^2 t^2}{2\rho} \right) \right) \right\} \rho^2 d\rho \right] \right)
 \end{aligned} \tag{5}$$

Onde  $R$  é o raio da partícula,  $c$  é a média de núcleos por partícula e  $\lambda$  é o número de partículas por unidade de volume. Derivando-se as Equações (4) e (5), estima-se a área superficial entre material transformado e não transformado por unidade de volume,  $S_V$ .

### 3.4. TRANSFORMAÇÕES SIMULTÂNEAS E SEQUENCIAIS

A maioria das metodologias das transformações sólido-sólido, tratam normalmente do modelamento da transformação de uma fase matriz em outra única fase produto, ou o crescimento das regiões recristalizadas consumindo uma matriz deformada. No entanto, com o advento de novos e complexos materiais, podem surgir situações em que a matriz transformasse gerando duas ou mais distintas fases produto. Essas fases produto podem se formar simultaneamente ou sequencialmente.

Transformações simultâneas têm sido objeto de um número relativamente pequeno de modelos[12,56–59]. Este número diminui ainda mais considerando-se o caso mais geral em que os produtos de transformação formam-se sequencialmente[12]. Sequencialmente, neste contexto, significa que um produto de transformação começa a formar-se quando o outro produto já atingiu uma certa fração de volume transformada. Pode-se encontrar vários exemplos de transformações simultâneas e sequenciais, mesmo em materiais "tradicionais". Por exemplo, a sequência de precipitação de carbonetos durante a têmpera de aços ou a sequência de precipitação a partir de zonas GP observada em ligas de alumínio.

Um modelo analítico para modelar as transformações simultâneas e sequenciais foi proposto por Rios e Villa[12], em seu modelo eles propuseram que as transformações ocorram de maneira independente. Alves[13] simulou massivamente, via cone causal, vários casos envolvendo transformações simultâneas e sequenciais e em todos os casos abordados o modelo e a simulação se mostraram eficientes.

Vale ressaltar que através do princípio da superposição abordado por Rios e Villa[12], quando as transformações são consideradas independentes, pode-se usar modelos que inicialmente foram desenvolvidos para a transformação envolvendo a formação de uma única fase produto, para se obter o modelo para as situações em que duas ou mais fases produto se formam simultaneamente ou sequencialmente. Com esse princípio obtém-se tanto parâmetros globais assim como parâmetros individuais de cada fase produto ao longo da transformação.

Nesta tese optou-se por alguns casos particulares das transformações simultâneas e sequencias previstas por Rios e Villa[12], onde a transformação transcorre gerando dois produtos de transformação independentes e distintos, 1 e 2. A seguir são explicitadas, para a conveniência dos leitores, as equações extraídas do modelo analítico generalizado, essas equações foram usadas nos capítulos 7 e 8. O modelo generalizado das transformações simultâneas e sequencias pode ser visto no trabalho de Rios e Villa[12].

### **3.4.1. Caso Particular de Transformações Simultâneas Onde a Fase Matriz Transforma-se em Duas Fases Produto**

Para o caso de uma fase matriz transformando-se em duas fases produto simultaneamente, isto é, as fases 1 e 2, surgem no mesmo instante de tempo, considerando-se que cada fase possui velocidades constantes e independentes,  $G_1$  e  $G_2$  e número de núcleos por unidade de volume  $N_{V1}$  e  $N_{V2}$  também independentes. Para a nucleação em ambos os casos por saturação de sítios e os núcleos distribuídos aleatoriamente no espaço amostral, é fácil perceber que a cinética de cada fase produto é regida pela Equação (3). Baseado na Equação (3) e através do princípio da superposição obtém-se o modelo para essa transformação simultânea, assim a fração volumétrica da fase 1,  $V_{V1}$ , pode ser estimada pela Equação (6).

$$V_{V1}(t) = \frac{N_{V1}G_1^3}{N_{V1}G_1^3 + N_{V2}G_2^3} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{4\pi}{3}(N_{V1}G_1^3 + N_{V2}G_2^3)t^3\right) \right] \quad (6)$$

Pode-se obter a fração volumétrica da fase 2,  $V_{V2}$ , substituindo-se o termo  $N_{V1}G_1^3$  presente no dividendo da Equação (6), por  $N_{V2}G_2^3$ . Deve-se substituir somente o termo da fração e não o termo presente na exponencial. Já a fração volumétrica total,  $V_V$ , é obtida pela Equação (7).

$$V_V(t) = V_{V1}(t) + V_{V2}(t) \quad (7)$$

Empregando-se o mesmo raciocínio, calcula-se a quantidade de área interfacial entre material recristalizado e não recristalizado por unidade de volume para a fase 1,  $S_{V1}$ , através da Equação (8).

$$S_{V1}(t) = \frac{N_{V1}G_1^2}{N_{V1}G_1^2 + N_{V2}G_2^2} \left[ 4\pi(N_{V1}G_1^2 + N_{V2}G_2^2)t^2 \exp\left(-\frac{4\pi}{3}(N_{V1}G_1^3 + N_{V2}G_2^3)t^3\right) \right] \quad (8)$$

Novamente obtém-se a área interfacial entre material recristalizado e não recristalizado por unidade de volume para a fase 2,  $S_{V2}$ , de maneira análoga à obtenção de  $V_{V2}$ . Pode-se calcular a quantidade de área interfacial entre material recristalizado e não recristalizado por unidade de volume total,  $S_V$ , através do mesmo raciocínio empregado na Equação (7). A obtenção de  $S_V$  se faz relevante uma vez que o parâmetro de transformação mais empregado após  $V_V$  seja a curva de  $S_V$  versus  $V_V$  conhecida como caminho microestrutural[9,18].

De posse de  $V_V$  e  $S_V$  pode-se fazer uso da Equação (9), conhecida em metalurgia como equação de Cahn e Hagel[60] para estimar a velocidade de crescimento da transformação,  $G$ , e também para a velocidade de crescimento individual de cada fase,  $G_1$  ou  $G_2$ :

$$G(t) = \frac{1}{S_V(t)} \frac{\partial V_V(t)}{\partial t} \quad (9)$$

### **3.4.2. Caso Particular de Transformações Sequenciais Onde a Fase Matriz Transforma-se em Duas Fases Produto**

Para o caso de uma fase matriz transformando-se em duas fases produto sequencialmente, isto é, a fase 1 inicia-se no tempo  $t = 0$ , e a fase 2 inicia-se em um tempo posterior  $t_2$ , considerando-se também que as fases produto possuem velocidades constantes e independentes,  $G_1$  e  $G_2$  e número de núcleos por unidade de volume  $N_{V1}$  e  $N_{V2}$  e que a nucleação também ocorra em ambos os casos por saturação de sítios e os núcleos sejam distribuídos aleatoriamente no espaço amostral, tem-se novamente que a cinética das fases individuais são regidas pela Equação (3). Portanto, novamente fazendo-se uso do princípio da superposição

pode-se estimar as frações volumétricas de cada fase dessa transformação sequencial, para um tempo  $t < t_2$ , pelas Equações (10) e (11).

$$V_{V1}(t) = \int_0^t 4\pi N_{V1} G_1^3 s^2 \exp\left(-\frac{4\pi}{3} N_{V1} G_1^3 s^3\right) ds \quad (10)$$

$$V_{V2}(t) = 0 \quad (11)$$

Quando o tempo  $t$ , passa a ser maior que  $t_2$ , considera-se a presença da fase 2 assim as Equações (10) e (11) tomam a forma das Equações (12) e (13).

$$V_{V12}(t) = \int_{t_2}^t 4\pi N_{V1} G_1^3 s^2 \exp\left(-\frac{4\pi}{3} (N_{V1} G_1^3 s^3 + N_{V2} G_2^3 (s - s_2)^3)\right) ds \quad (12)$$

$$V_{V22}(t) = \int_{t_2}^t 4\pi N_{V2} G_2^3 (s - s_2)^2 \exp\left(-\frac{4\pi}{3} (N_{V1} G_1^3 s^3 + N_{V2} G_2^3 (s - s_2)^3)\right) ds \quad (13)$$

A fração volumétrica total, pode ser obtida de maneira semelhante a Equação (7). Vale ressaltar que neste caso as frações volumétricas individuais mudam com relação ao tempo  $t$  ser menor ou maior que o tempo  $t_2$ .

As quantidades de área interfacial entre material transformado e não transformado por unidade de volume de cada fase, para um tempo  $t < t_2$ , podem ser calculadas pelas Equações (14) e (15).

$$S_{V1}(t) = 4\pi N_{V1} G_1^2 t^2 \exp\left(-\frac{4\pi}{3} N_{V1} G_1^3 t^3\right) \quad (14)$$

$$S_{V2}(t) = 0 \quad (15)$$

Novamente quando o tempo  $t$ , passa a ser maior que  $t_2$ , considera-se a presença da fase 2. As Equações (14) e (15) tomam a forma das Equações (16) e (17).

$$S_{V12}(t) = 4\pi N_{V1} G_1^2 t^2 \exp\left(-\frac{4\pi}{3} (N_{V1} G_1^3 t^3 + N_{V2} G_2^3 (t - t_2)^3)\right) \quad (16)$$

$$S_{V22}(t) = 4\pi N_{V2} G_2^2 (t - t_2)^2 \exp\left(-\frac{4\pi}{3} (N_{V1} G_1^3 t^3 + N_{V2} G_2^3 (t - t_2)^3)\right) \quad (17)$$

A quantidade de área interfacial entre material transformado e não transformado por unidade de volume total também é calculada de maneira análoga a Equação (7). A velocidade de crescimento de cada fase pode ser calculada através da Equação (9).

### 3.5. PARÂMETROS MICROESTRUTURAIS

Tipicamente as transformações por nucleação e crescimento são descritas pela cinética da transformação, isto é, pela medida da fração volumétrica transformada,  $V_V$ , em função do tempo. A análise da cinética é a base para entender a transformação, além dela, pode-se reunir uma quantidade significativa de informações sobre a transformação analisando-se a sua evolução microestrutural ao longo do tempo, para tal, emprega-se parâmetros microestruturais adicionais. Neste sentido, existem parâmetros bem conhecidos em metalografia quantitativa, dentre eles cita-se: tamanho médio e distribuição dos tamanhos de grãos, número de faces dos grãos, curvatura das interfaces, entre outros. Outros parâmetros que são menos populares, mas que bastante eficientes [61] são: contiguidade, dispersão e duplex. Esses três últimos são estimados com base nas áreas interfaciais existentes ao longo da transformação. Entre os parâmetros microestruturais as medidas metalográficas quantitativas em uma seção planar ainda se fazem presentes por sua simplicidade e baixo custo, entretanto há significativo avanço dessas técnicas de caracterização, com destaque para as técnicas em 3D.

Considerando uma transformação, a situação mais comum é a transformação de uma fase matriz policristalina em várias regiões de uma única fase produto, aqui designada fase 1. Neste caso, além de  $V_V$ , tem-se a área interfacial entre: a) fase matriz e fase 1,  $S_V$  ou  $S_V^{1M}$ ; b) fase matriz e fase matriz,  $S_V^{MM}$ ; c) fase 1 e fase 1,  $S_V^{11}$ . De fato, a medida mais comum, após  $V_V$ , é a de  $S_V$ .  $S_V$  é a interface entre a fase 1 e a fase matriz, ela é uma interface dinâmica que migra à medida que o crescimento da fase 1 ocorre. Há também as interfaces estáticas que podem estar presentes antes do início da transformação, como é o caso dos contornos de grão,  $S_V^{MM}$ , de uma fase matriz policristalina, ou também podem aparecer durante a transformação devido ao “*impingement*”, entre as regiões transformadas. Por exemplo, diferentes regiões de crescimento da fase 1 podem se colidir umas com as outras, a partir dessa colisão, uma interface estática entre a fase 1 e a fase 1,  $S_V^{11}$ , aparece. O comportamento dessas interfaces estáticas durante a

transformação pode fornecer informações valiosas sobre a evolução microestrutural, por exemplo, o consumo de contornos de grão da fase matriz ao longo do tempo, isto é a evolução de  $S_V^{MM}$  ao longo do tempo, pode ser mais severo se os núcleos da nova fase produto estão localizados preferencialmente nos contornos de grão da fase matriz. Indo além, o comportamento de  $S_V^{11}$  pode produzir evidências de como está ocorrendo o “*impingement*” das regiões transformadas da fase 1, e essa ocorrência está relacionada com a localização dos núcleos da fase 1 dentro da fase matriz.

Vários parâmetros microestruturais podem ser definidos levando em conta as interfaces estáticas, entretanto, vale a pena mencionar o trabalho da Hornbogen[62] que dedicou atenção significativa a essas interfaces. Fonseca et. al.[61] aplicaram os conceitos de Hornbogen[62] a simulações computacionais em que uma única fase se formou a partir de uma fase matriz, chegando na conclusão de que, além de  $V_V$  e  $S_V$ , a contiguidade e a dispersão foram boas escolhas para uma descrição mais detalhada da evolução microestrutural. Voltando à transformação simples da fase matriz na fase 1, a contiguidade da fase 1 pode ser definida pela Equação (18).

$$C_1 = \frac{2S_V^{11}}{2S_V^{11} + S_V^{1M}} \quad (18)$$

A contiguidade tem propriedades interessantes especialmente em relação ao início do “*impingement*” entre as regiões transformadas, veja [61,63–65], essencialmente ela captura o comportamento das interfaces entre a mesma fase. Um fato a se destacar é que a contiguidade, Equação (18), varia de zero a um, assim como a fração volumétrica transformada.

Além da contiguidade Hornbogen[62] também definiu o parâmetro dispersão,  $\delta$ , Equação (19), e o parâmetro duplex,  $\Delta$ , Equação (20).

$$\delta = \frac{S_V^{1M}}{S_V^{MM}} \quad (19)$$

$$\Delta = \frac{S_V^{11}}{S_V^{MM}} \quad (20)$$

O parâmetro de dispersão mede a relação entre as áreas interfaciais de fases distintas e as áreas interfaciais da fase matriz, já o parâmetro duplex mede a relação entre as áreas interfaciais de uma mesma fase e as áreas interfaciais da fase matriz. A inconveniência é que

tanto a dispersão quanto o duplex, Equações (19) e (20) respectivamente, tendem ao infinito à medida que a fração volumétrica transformada tende para um, isso ocorre porque  $S_V^{MM}$  tende a zero.

Os parâmetros acima descritos, Equações (18), (19) e (20), foram definidos baseando-se na transformação de uma fase matriz policristalina em várias regiões de uma única fase produto, a fase 1, entretanto, podem ocorrer transformações mais complexas, um exemplo é a transformação em que duas ou mais fases produto se formam a partir da fase matriz. Nos casos em que ocorre a transformação da fase matriz em mais de uma fase produto, o número de possíveis interfaces entre as fases aumenta à medida que o número de fases aumenta. Diretamente falando, se uma transformação envolve a formação de  $n$  fases, haverá  $n$  possibilidades de combinações de interfaces entre as  $n$  fases, uma vez que as  $n$  fases podem se encontrar. Consequentemente, quanto maior o número de possíveis interfaces, maior o grau de dificuldade para se aplicar os parâmetros descritos acima na caracterização da evolução microestrutural. Esta tese buscou aprimorar os parâmetros acima mencionados aplicando-os às microestruturas simuladas da transformação em que a fase matriz transformou-se em duas fases produto. A grande vantagem de se aplicar esses parâmetros em simulação computacional é que os dados podem ser obtidos diretamente da simulação, ou seja, são obtidos mais facilmente sem a dependência de análise posterior e não envolvem erros significativos que podem existir em análises experimentais.

#### **4. METODOLOGIA**

Esta tese trata do modelamento computacional de transformações de fase, baseando-se principalmente em casos reais reportados pela literatura. É de conhecimento que a simulação computacional de transformações de fase permite estudar a variação de uma série de parâmetros, o que é de grande interesse do pesquisador, pois através dessa generalização pode-se testar os modelos em uma série de situações, inclusive em situações que podem ser difíceis de se investigar experimentalmente. A aplicação de parâmetros cada vez mais realistas aumenta a possibilidade de o pesquisador extrair da simulação inferências para os experimentos reais. Neste contexto, todas as simulações realizadas nesta tese foram realizadas por programação própria, elaborou-se código computacional escrito em linguagem Fortran 2003 através do Microsoft Visual Studio 2012 ®, e para o auxílio na análise dos resultados de simulação adotou-se os seguintes softwares: Wolfram Mathematica 10 ®, Tecplot 360™.

Todo o estudo desenvolvido com a elaboração desta tese está reportado nos capítulos seguintes. Esses capítulos foram organizados de forma gradual e evolutiva. Iniciou-se pelo capítulo 5, as transformações de fase com a presença de precipitados, nesse capítulo considerou-se a transformação de uma fase matriz, que contém precipitados esféricos, em uma outra fase produto. Estudou-se em detalhes quais os efeitos da nucleação exclusiva da nova fase produto na interface matriz/partículas. Dando sequência, no capítulo 6, aplicou-se a metodologia discutida no capítulo 5 às inclusões não metálicas dos aços, que são descritas pela norma ASTM-E45[16]. Como um passo seguinte, realizou-se no capítulo 7 o modelamento computacional das transformações simultâneas e sequenciais, aplicando às microestruturas geradas técnicas de caracterização microestruturais e de metalografia quantitativa, a fim de se conhecer ainda mais essas transformações. No capítulo 8 expandiu-se o estudo das transformações simultâneas e sequenciais considerando-se sítios preferenciais de nucleação

para cada fase produto. Buscou-se uma unificação dos estudos abordados nos capítulos anteriores, nesse capítulo adotou-se a transformação de uma fase matriz policristalina com a presença de partículas, objeto do capítulo 5, em duas fases produto, de forma simultânea ou sequencial, objeto do capítulo 7, porém a fase produto 1 nucleou nas interfaces matriz/partículas e a fase produto 2 nos contornos de grão da fase matriz.

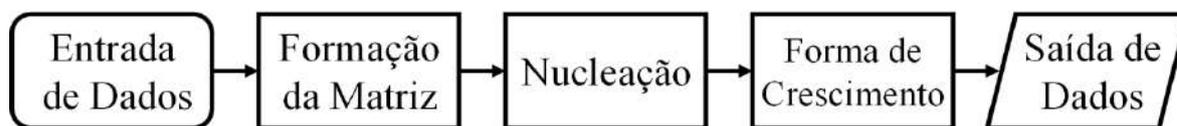
É importante mencionar que, para todas as simulações apresentadas nesta tese, foram realizadas 50 simulações e que os gráficos mostrados foram o valor médio dos dados dessas 50 simulações.

#### **4.1. MODELO COMPUTACIONAL**

Para a elaboração desta tese utilizou-se o código inicial desenvolvido pelo Prof. Dr. Wesley Luiz da Silva Assis[66,67], onde deste algoritmo inicial se aproveitou, principalmente, a forma de crescimento, rotina esta responsável pelo crescimento dos núcleos das novas fases e que faz uso do método do cone causal, que será discutido no item 4.2, parte da modificação e desenvolvimento de novas rotinas foi iniciada em Alves[13]. Como mencionado anteriormente o modelamento computacional elaborado nesta tese, ocorreu por programação própria, e durante o seu desenvolvimento, destaca-se os seguintes algoritmos criados:

- Algoritmo para identificação da área interfacial entre os grãos;
- Algoritmo para o cálculo de contiguidades;
- Algoritmo para o cálculo da distribuição de volumes dos grãos ao fim da transformação;
- Algoritmo para o acompanhamento do crescimento individual de grãos;
- Algoritmo para a formação de microestruturas simuladas com precipitados;
- Algoritmo para a transformação da fase matriz que contém partículas em uma nova fase produto, onde a nucleação dessa nova fase produto se deu na interface matriz/partículas;
- Algoritmo para a identificação das regiões que são contornos de grão da fase matriz policristalina e que são interface entre a fase matriz e precipitados;
- Algoritmo para a simulação de transformações simultâneas e sequenciais em que a nucleação da fase produto 1 ocorreu na interface matriz/partículas e a nucleação da fase produto 2 ocorreu nos contornos de grão da fase matriz policristalina.

Para o desenvolvimento do código computacional e anexação desses vários algoritmos criados, adotou-se a programação estruturada. Na Figura 1 mostra-se o fluxograma esquemático do código computacional empregado, o que permite uma visualização mais clara da estrutura lógica do programa desenvolvido.



**Figura 1** – Fluxograma esquemático do código computacional empregado.

A primeira etapa do fluxograma, mostrado na Figura 1, consiste-se na Entrada de Dados. Nela coloca-se todos os parâmetros adotados para a simulação. Um exemplo é a definição do tamanho da matriz que é alocada na etapa seguinte, a matriz consiste em um aglomerado de pequenas células cúbicas, em todas as simulações desta tese adotou-se uma matriz cúbica de 300 x 300 x 300 células cúbicas.

A segunda etapa é a formação da matriz, onde há a alocação do tamanho pré-fixado da matriz na memória do computador. Destaca-se que na etapa de formação da matriz, pode-se ter uma matriz vazia, em branco, ou também pode-se adotar como matriz uma microestrutura simulada previamente, ou seja, adotar uma fase matriz policristalina como entrada para uma nova simulação, assim consequentemente ocorrerá a transformação da fase matriz em outras fases produtos. Nos casos abordados por esta tese, essa matriz também pode conter precipitados. Na etapa da criação dos precipitados, estes são distribuídos aleatoriamente numa matriz em branco, iniciam-se pequenos e crescem até que atinjam o volume pré-fixado. Caso a simulação adote uma fase matriz policristalina, depois da criação dos precipitados, ocorre a nucleação dos grãos que fazem da fase matriz em branco uma estrutura policristalina. Após os grãos consumirem todo o volume livre da matriz, isto é a região da matriz fora dos precipitados, é feita uma varredura dessa matriz policristalina recém-criada para a identificação de todas as células que são interface entre partículas e a fase matriz e que são contornos de grão.

A terceira etapa da Figura 1 é a etapa da nucleação, onde ocorre o surgimento das novas fases, vale destacar que nos modelamentos das transformações de fase objetiva-se que cada núcleo seja independente do outro, o modelo que sugere independência é o processo de ponto de Poisson. Assim, nesta tese o número de núcleos de cada fase foi definido por variáveis aleatórias de Poisson. O processo de ponto de Poisson homogêneo substitui o conceito “uniformemente aleatório” empregado por JMAK. Mais detalhes sobre processo de ponto de Poisson, pode ser visto nas referências [10,36]. Um outro ponto importante é que nas

simulações abordadas todos os sítios disponíveis para a nucleação foram ocupados no instante inicial, ou seja, considerou-se a saturação de sítios. Destaca-se que caso a simulação ocorra com uma matriz em branco, não há sítios pré-determinados, assim a nucleação ocorre por processo de ponto de Poisson homogêneo. Caso a simulação leve em conta uma fase matriz policristalina, ou seja, uma microestrutura simulada previamente, os sítios pré-determinados podem ser os contornos de grão e/ou as interfaces matriz/partículas, caso ela possua partículas. Nesses casos em que a nucleação das fases produto situaram-se em sítios preferenciais, a mesma ocorreu de maneira aleatória nesses sítios determinados. Vale ressaltar ainda que nas transformações que envolvem mais de uma fase produto, a nucleação dessas fases produtos pode ocorrer de maneira simultânea ou sequencial.

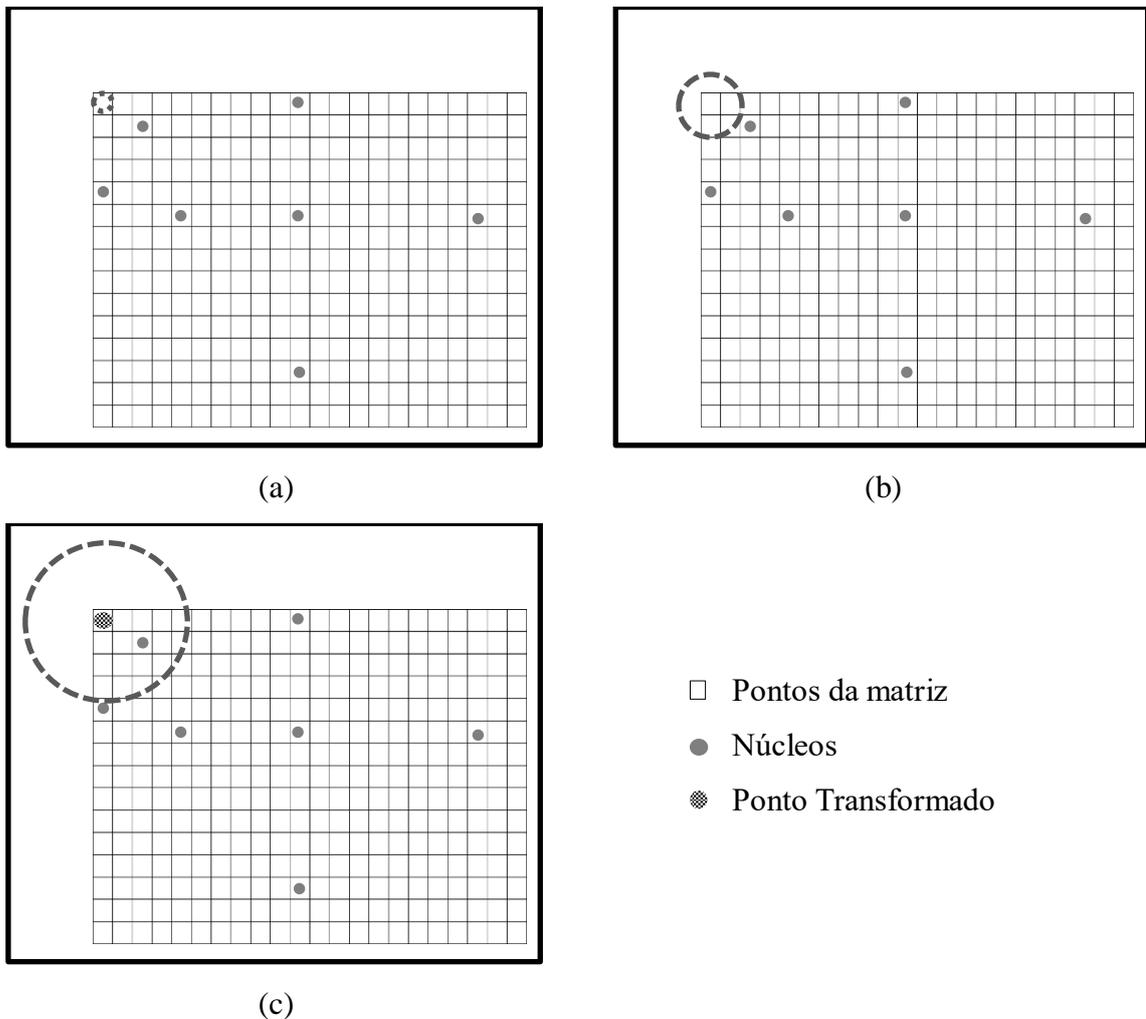
Concluída a etapa da nucleação, ocorre o crescimento desses novos núcleos, quarta etapa da Figura 1, assim tem-se o crescimento das novas fases produto até que elas ocupem todo o volume da matriz que sofre a transformação. Adotou-se para a forma de crescimento a metodologia do cone causal, tratada na seção 4.2. Um ponto a se destacar é que condições de contorno periódicas foram adotadas de tal modo que quando um grão em crescimento atinge a parede de extremidade da matriz esse grão tem seu crescimento continuado na parede oposta, através das condições de contorno periódicas simula-se uma amostra infinita.

Ao término das interações, na saída de dados, última etapa da Figura 1, ocorre a escrita de todos os arquivos com os dados da simulação. O programa imprime os dados de interesse, resultado de todos os cálculos realizados e que foram considerados na entrada de dados, dentre esses dados impressos, cita-se: fração volumétrica transformada,  $V_V$ , área interfacial por unidade de volume,  $S_V$ , velocidades de crescimento das fases, caminho microestrutural, tempo de reação, contiguidades, duplex, dispersão e outros. Também são impressos os dados para a construção das microestruturas 3D.

## 4.2. CONE CAUSAL

O cone causal[46,68] foi a metodologia adotada para o crescimento das fases nas simulações realizadas nesta tese. A regra de transição do cone causal em 3D adota que um ponto da matriz, célula da matriz em questão, seja o centro de uma esfera de raio  $R_C = G t$ , onde  $G$  é a velocidade de crescimento e  $t$  é o tempo, e para que esse ponto se transforme é necessário que haja alguma outra célula que tem a condição de um núcleo, dentro dessa esfera, ou seja, uma

célula que é um núcleo deve estar dentro dessa esfera para que ocorra a transformação do ponto que é o centro da esfera. Através da transformação o ponto que é o centro da esfera, recém transformado, passa a ter a mesma condição do núcleo que esteve dentro da esfera, como a esfera possui raio  $R_C$  que aumenta com o tempo, quanto maior o tempo considerado, maior a probabilidade de haver pelo menos um núcleo dentro dessa esfera, logo maior a chance de se transformar aquele ponto centro da esfera. A simulação inicia-se no tempo  $t = 0$ , onde ocorre a nucleação, e em cada tempo, todas as células da matriz são verificadas, logo considera-se que cada célula é um ponto centro da esfera do cone causal, assim em cada interação verifica-se quais células serão transformadas naquele tempo. Com o intuito de agilizar as simulações adotou-se nessa etapa a paralelização em OpenMp, assim cada processador do microcomputador analisa uma célula da matriz. Na Figura 2 ilustra-se a teoria do cone causal em 2D, tratando-se de 2D, substitui-se esfera por circunferência.



**Figura 2** – Representação da metodologia do cone causal em 2D: (a)  $t = 1$ , (b)  $t = 2$ , (c)  $t = 3$  onde há a transformação da célula que é o centro da circunferência.

### 4.3. FATOR DE CORREÇÃO PARA O $S_V$ SIMULADO PELO MÉTODO DO CONE CAUSAL

Em um trabalho anterior, Alves[13] descreveu analiticamente o cone causal em 3D e concluiu que o volume de uma forma geométrica simulada por cone causal pode ser aproximado ao volume da mesma forma geométrica descrita analiticamente, já a área interfacial não. De fato, a matriz de simulação consiste-se em um conglomerado de células cúbicas, assim nas simulações qualquer forma geométrica é formada pelo empilhamento de várias dessas células, o que inevitavelmente causa a essa forma geométrica simulada uma superfície irregular, essa irregularidade na superfície faz com que a forma geométrica simulada apresente área superficial maior que a área superficial de uma forma geométrica analítica. Tentando compensar essa diferença entre as áreas interfaciais simulada e analítica, Alves[13], considerando o crescimento de um único grão na matriz, propôs um fator de correção  $C = 1,5$ , ou seja a área interfacial simulada nessa condição foi 1,5 vezes maior que a área interfacial analítica.

Com o desenvolvimento desta tese, percebeu-se que nem todos os casos puderam ser ajustados pelo fator de 1,5. A imposição de novas condições para a nucleação das novas fases produto fez com que a relação entre áreas interfaciais simulada e analítica mudassem. Não é trivial perceber que a localização geométrica do núcleo influencia na relação entre as áreas interfaciais dos grãos ao longo da transformação, porém, como esses grãos concorrem entre si pelo volume “vazio” da matriz, ou a região ainda não transformada, o eventual choque, “*impingement*”, desses grãos alteram o grau de irregularidade das formas geométricas simuladas. Em virtude dessa alteração, fez-se necessário uma metodologia mais precisa para o cálculo do fator de correção. Utilizando-se da Equação (9) para estimar a velocidade de crescimento de cada forma geométrica, tem-se a velocidade de crescimento da forma geométrica simulada e a velocidade de crescimento da forma geométrica analítica pelas Equações (21) e (22), respectivamente.

$$G_S(t) = \frac{1}{S_V^S(t)} \frac{dV_V^S(t)}{dt} \quad (21)$$

$$G_{AN}(t) = \frac{1}{S_V^{AN}(t)} \frac{dV_V^{AN}(t)}{dt} \quad (22)$$

Onde,  $S_V^S$  é a área interfacial por unidade de volume da forma geométrica simulada e  $S_V^{AN}$  é a área interfacial por unidade de volume da forma geométrica analítica. Sabendo-se que os volumes de ambas as formas geométricas são iguais [13] e igualando-se as Equações (21) e (22), uma vez que são adotados os mesmos parâmetros para a simulação e modelo analítico, é fácil chegar a Equação (23).

$$\frac{S_V^S}{S_V^{AN}} = \frac{G_{AN}}{G_S} \quad (23)$$

Pela Equação (23) estima-se a relação entre  $S_V^S$  e  $S_V^{AN}$ , ou seja, o fator de correção para as áreas interfaciais entre a forma geométrica simulada e analítica. As Equações (21) e (22) são empregadas em cada interação, isso quer dizer, em cada instante de tempo no decorrer da transformação, e como nesta tese adotou-se velocidade de crescimento constante, percebe-se facilmente pela Equação (22) que  $G_{AN}$  é constante, em contrapartida, devido ao efeito da irregularidade presente nas superfícies simuladas,  $G_S$  sofre pequenas variações ao longo do tempo, assim para se aplicar  $G_S$  na Equação (23) adota-se o valor médio de  $G_S$  ao longo do tempo, ou seja, a mediana de  $G_S$  ao longo do tempo. Assim, substituindo-se o valor constante de  $G_{AN}$  e a mediana de  $G_S$  na Equação (23) obtém-se o fator de correção para a compensação da área interfacial simulada por unidade de volume.

## **5. SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE TRANSFORMAÇÕES COM NUCLEAÇÃO NA INTERFACE DE PRECIPITADOS ESFÉRICOS**

Nesse capítulo considerou-se as transformações de fase em que o surgimento da nova fase, ou nucleação da nova fase, ocorreu na interface de partículas esféricas. Alves, Villa e Rios[11] desenvolveram um modelo analítico que descreve a cinética da transformação por nucleação e crescimento em que a nucleação se dá na interface de partículas esféricas. Este novo modelo é baseado em geometria estocástica, emprega a saturação de sítios e é capaz de modelar a curva da cinética ao longo de toda a transformação. Embora seja exato, o modelo matemático faz algumas suposições que limitam sua validade, portanto, a simulação computacional ajudou a estabelecer dentro de quais limites o presente modelo analítico pode ser empregado com segurança. A simulação computacional abordada nesse capítulo seguiu a mesma abordagem fenomenológica do modelo analítico descrito brevemente na seção 3.3, ela gerou as microestruturas e os resultados de simulação foram comparados com os resultados analíticos.

Desse modo, nesse capítulo realizou-se simulações em 3D, pelo método do cone causal[46,68], de transformações de fase por nucleação e crescimento, nas quais a nucleação da nova fase se deu na interface de precipitados esféricos e comparou-se essas simulações ao modelo de JMAK, Equação (3), e ao novo modelo apresentado por Alves, Villa e Rios[11], Equações (4) e (5). Através das simulações testou-se exaustivamente os modelos em diversas situações, inclusive nas quais que podem ser difíceis de se investigar em um material real. Uma discussão detalhada foi feita nesse capítulo sobre em que circunstâncias os modelos são válidos para o modelamento das transformações em que o surgimento da nova fase ocorre na interface de precipitados esféricos.

## 5.1. METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Simulou-se a transformação de uma matriz inicial que contém partículas esféricas, em uma outra fase produto, porém os núcleos dessa nova fase produto surgiram na interface matriz/partículas. Ressalta-se que essa nucleação ocorreu por saturação de sítios e seguiu a distribuição de Poisson homogênea na área superficial das partículas, ou seja, dessa maneira podem haver partículas com mais de um núcleo e partículas sem nenhum núcleo.

O número médio de núcleos por partículas,  $c$ , variou de 0,1 a 10 e as transformações possuíram um número de núcleos,  $N$ , correlacionado com  $c$ . O novo modelo apresentado por Alves, Villa e Rios[11], não considera que haja “*impingement*” entre as partículas, logo, quando as partículas não se tocam, um  $c = 1$  significa que se tem 1 núcleo por partícula e, conseqüentemente, o número de núcleos é igual ao número de partículas. Ao se definir a área superficial das partículas por,  $S$ , se pode estimar o número de núcleos por unidade de área das partículas esféricas,  $N_A$ , por  $N / S$  ou ainda por  $c / (4\pi R^2)$ , onde  $R$  é o raio médio das partículas. Por essas definições,  $c = N_A (4\pi R^2)$  ou ainda  $c = N (4\pi R^2) / S$ . Entretanto, na simulação pode ocorrer o “*impingement*”, ou seja, as partículas podem se tocar, diminuindo a área superficial de partículas,  $S$ . Portanto, para se manter o  $c$  constante, e conseqüentemente, o  $N_A$  constante e igual ao do modelo analítico, fez-se necessário calcular o número de núcleos  $N$  que foram inseridos em cada simulação. Para esse cálculo, adotou-se como base a área superficial entre partículas e matriz por unidade de volume,  $S_{VP}$ , extraída diretamente da simulação.  $S_{VP}$  multiplicado pelo volume da matriz é o próprio  $S$  medido diretamente da microestrutura.

Uma boa atenção foi dada para o caso em que  $c = 1$ , uma vez que esses casos convenientemente servem como base para comparação com outros casos mais particulares. Nas simulações em que  $c = 1$  variou-se também o diâmetro das partículas para se estudar o efeito deste na transformação.

A velocidade de crescimento,  $G$ , foi adotada constante e igual ao incremento de 1 célula unitária. Com o intuito de aproximar as simulações dos casos reais, e realizar alguns testes com os modelos, optou-se por variar a fração volumétrica das partículas,  $V_{VP}$ , na matriz de acordo com a Tabela 1.

**Tabela 1** - Fração volumétrica adotada para as partículas esféricas.

<i>Fração volumétrica das partículas esféricas na matriz</i>
<b>0,01</b>
<b>0,03</b>
<b>0,05</b>
<b>0,1</b>
<b>0,3</b>
<b>0,5</b>
<b>0,7</b>
<b>0,9</b>

Adotou-se frações volumétricas altas, maiores que 0,1, no intuito de analisar a capacidade do modelo analítico nessas condições mais rigorosas. A literatura sugere ser comum partículas esféricas com diâmetros,  $D$ , de 1  $\mu\text{m}$  a 6  $\mu\text{m}$  e fração volumétrica de precipitados de 0,01 a 0,05. Nos casos estudados para as frações volumétricas de partículas de até 0,05 empregou-se partículas esféricas com diâmetros de 1  $\mu\text{m}$ , 3  $\mu\text{m}$  e 5  $\mu\text{m}$ . Para os casos em que as frações volumétricas de partículas ultrapassaram 0,05 empregou-se partículas esféricas com diâmetro médio de 3  $\mu\text{m}$ .

Para se obter um número de partículas e conseqüentemente um número de núcleos viável para as simulações, em cada caso se fez necessário a dimensionalização da matriz. Na dimensionalização, relacionou-se a quantidade de células cúbicas com o diâmetro das partículas esféricas de tal modo que se obteve um número máximo de partículas na matriz de cerca de dez mil. A dimensionalização ocorreu da seguinte forma: para as partículas consideradas de 1  $\mu\text{m}$  de diâmetro obteve-se um diâmetro médio dessas partículas de cerca de 10 células cúbicas, como a matriz possui 300 células cúbicas em cada dimensão, através de uma relação direta é fácil observar que se 10 células equivalem a 1  $\mu\text{m}$ , 300 células equivalem a 30  $\mu\text{m}$ , assim o espaço amostral nesses casos foi de 30  $\mu\text{m}$ . Para as partículas de 3  $\mu\text{m}$  de diâmetro, obteve-se um diâmetro médio de 15 células cúbicas, assim 15 células equivalem a 3  $\mu\text{m}$ , logo 300 células equivalem a 60  $\mu\text{m}$ , que foi o espaço amostral desse caso. De maneira análoga para as partículas de 5  $\mu\text{m}$  de diâmetro obteve-se um diâmetro médio de 20 células cúbicas, assim o espaço amostral foi de 75  $\mu\text{m}$ .

As relações de dimensionalização foram mantidas com referência aos diâmetros médios das partículas esféricas, para se obter diferentes frações volumétricas de partículas, alterou-se o número de partículas, e não o diâmetro médio delas. Para uma quantificação apurada, calculou-se com base no raio médio das partículas,  $R$ , o volume que cada partícula ocupa, então dividiu-se o volume que deveria ser ocupado por partículas pelo volume médio de cada partícula, assim obteve-se em cada caso o número de partículas que deveriam ser geradas.

As partículas esféricas foram geradas aleatoriamente na matriz, todas nuclearam em  $t = 0$  e cresceram até atingirem o diâmetro  $D$ , pré-fixado e conseqüentemente atingirem a fração volumétrica desejada, ressalta-se que cada partícula é independente, sendo assim podem haver partículas maiores e menores na mesma matriz. Porém, o diâmetro médio de todas as partículas foi o diâmetro previamente fixado. Acredita-se que esta condição se aproxima mais dos casos reais, uma vez que em uma amostra real os precipitados, se esféricos, podem não ter todos o mesmo diâmetro.

Um ponto importante a se destacar é que ao longo da transformação da matriz na fase produto a fração volumétrica transformada,  $V_V$ , obtida pela simulação foi a fração volumétrica transformada do volume livre da matriz, ou seja, uma fração volumétrica transformada considerando a região de fora das partículas, isso significa que todo o volume de fora das partículas foi transformado. Essa condição é condizente, uma vez que a fase produto não pode crescer para dentro das partículas de segunda fase.

## 5.2. RESULTADOS

Como resultados construiu-se uma comparação direta entre as simulações e os modelos analíticos anteriormente apresentados. Para tal optou-se por gráficos da cinética da transformação em função do tempo, curva  $V_V$  versus Tempo e também gráficos do caminho microestrutural[9,18]. Em todos os casos demonstrou-se também as microestruturas geradas através da simulação computacional onde os precipitados esféricos são representados pela cor preta, e os grãos da nova fase produto são cinzas.

Nos seguintes gráficos apresentou-se: os dados das simulações que são representados por pontos, os dados previstos pelo modelo de Alves, Villa e Rios[11], Equações (4) e (5), que são representados pela linha tracejada, e por fim os dados previstos pelo modelo analítico de

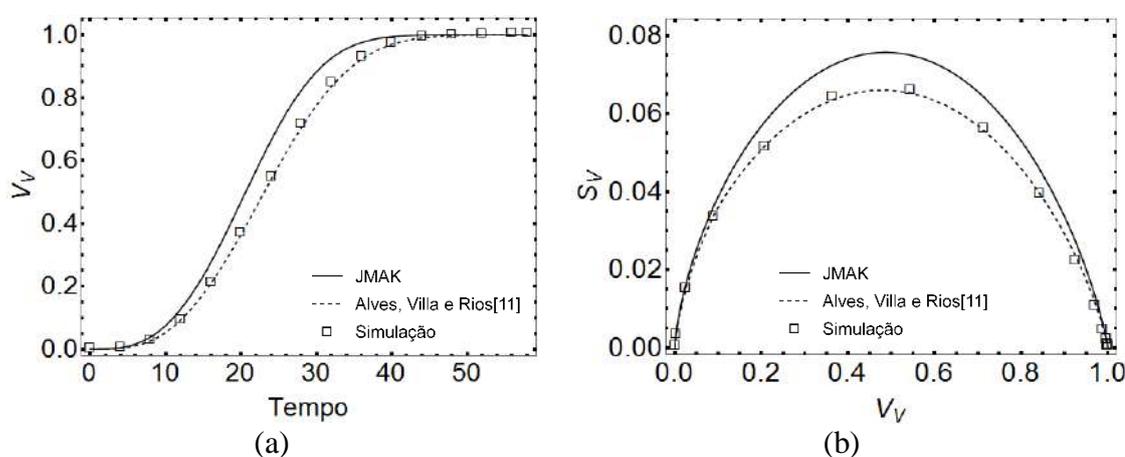
JMAK, Equação (3), que são representados pela linha cheia. Nem todos os pontos de simulação foram representados para tornar mais fácil a visualização dos gráficos.

### 5.2.1. Partículas Esféricas com Diâmetro Médio de 1 $\mu\text{m}$ e $c = 1$

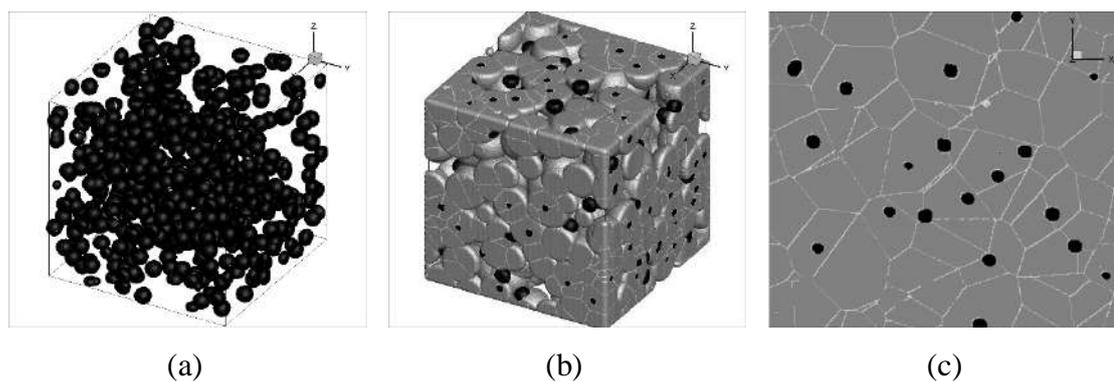
Nos casos a seguir, simulou-se uma matriz de 30  $\mu\text{m}$  x 30  $\mu\text{m}$  x 30  $\mu\text{m}$ , o diâmetro médio das partículas esféricas foi em torno de 1,2  $\mu\text{m}$ . A velocidade de crescimento,  $G$ , foi considerada constante e igual ao comprimento de uma célula cúbica na simulação, ou seja 0,10  $\mu\text{m}$ .

#### 5.2.1.1. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,01

Nesse caso o número de partículas esféricas foi de 516 e o número de núcleos,  $N$ , calculado foi de 501. Na Figura 3, tem-se ótima concordância entre a simulação computacional e o modelo de Alves, Villa e Rios[11]. Através da Figura 3-a, observa-se claramente que a cinética da transformação é bem descrita pelo modelo, assim como na Figura 3-b, o  $S_V$  também apresenta uma ótima concordância. Já o modelo JMAK não apresenta uma boa concordância, como já era esperado. O modelo de JMAK emprega algumas considerações, e dentre elas não está prevista a existência de precipitados no espaço amostral. Além do fato de que o fenômeno da nucleação tratado nesse capítulo difere da nucleação uniformemente aleatória abordada por JMAK. Na Figura 4 observa-se a evolução microestrutural simulada desse caso.



**Figura 3** – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,01, diâmetro médio das partículas de 1  $\mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.

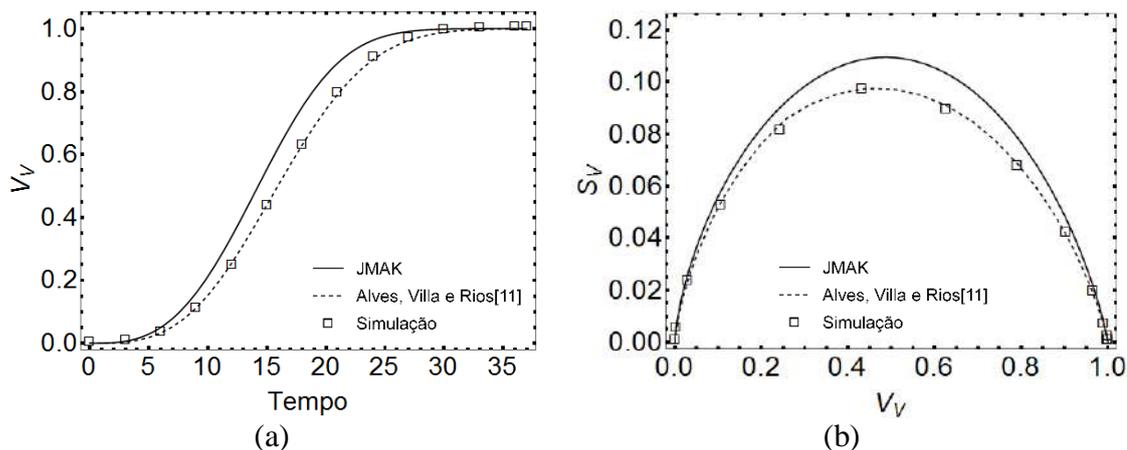


**Figura 4** – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,01, diâmetro médio das partículas de  $1 \mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada.

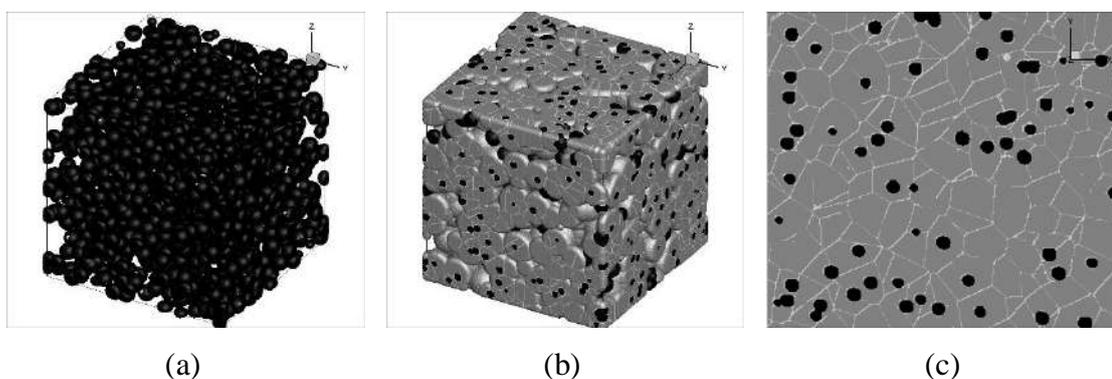
Na Figura 4-c mostra-se uma seção 2D da microestrutura simulada em 3D, e ao observá-la tem-se a impressão de que o número médio de núcleos por partícula foi diferente de 1, ou seja, ela passa a impressão de que  $c \neq 1$ , além disso também transmite a impressão de que há alguns grãos que podem não ter sido nucleados na interface matriz/partículas. Entretanto essas impressões são apenas um efeito de se visualizar uma seção 2D de uma microestrutura em 3D, de fato, todos os grãos foram nucleados na interface matriz/partícula.

#### **5.2.1.2. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,03**

Para esse caso teve-se 1547 partículas esféricas e o número de núcleos,  $N$ , calculado foi de 1464. Na Figura 5, novamente se tem boa concordância entre a simulação computacional e o modelo de Alves, Villa e Rios [11]. Novamente não há boa concordância com o modelo JMAK. Na Figura 6 demonstra-se a microestrutura simulada desse caso.



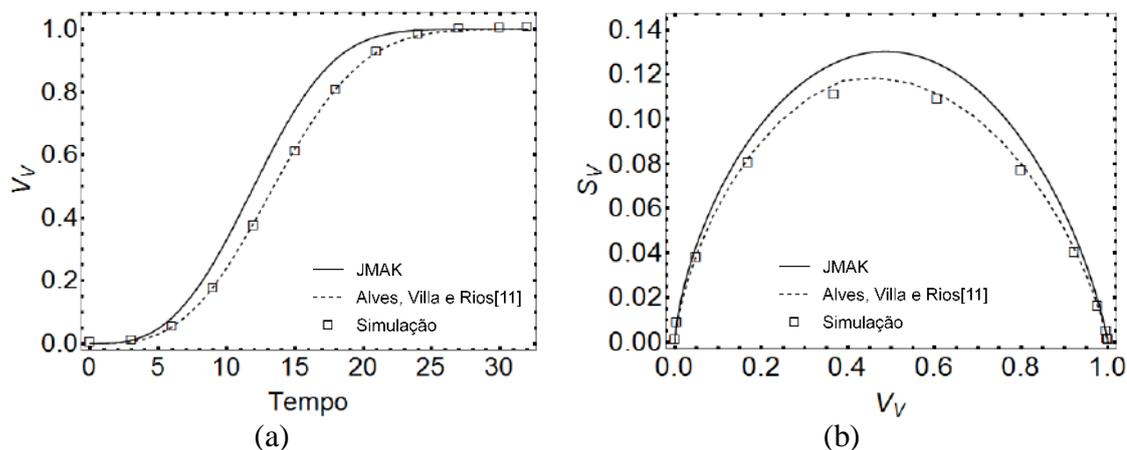
**Figura 5** – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,03, diâmetro médio das partículas de 1  $\mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



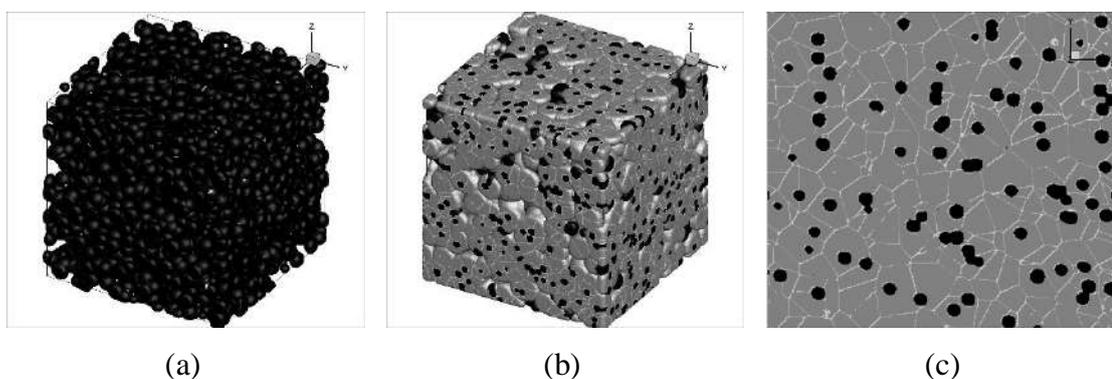
**Figura 6** – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,03, diâmetro médio das partículas de 1  $\mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada.

### 5.2.1.3. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,05

Agora considerou-se 2578 partículas esféricas e  $N = 2381$ . Através da Figura 7 observa-se mais uma vez que para partículas de diâmetro de 1  $\mu\text{m}$  há uma excelente concordância entre a simulação computacional e o modelo de Alves, Villa e Rios[11]. Porém, como era de se esperar as transformações em questão não são bem modeladas por JMAK. Na Figura 8 se tem a evolução microestrutural simulada.



**Figura 7** – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,05, diâmetro médio das partículas de  $1\ \mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



**Figura 8** – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,05, diâmetro médio das partículas de  $1\ \mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada.

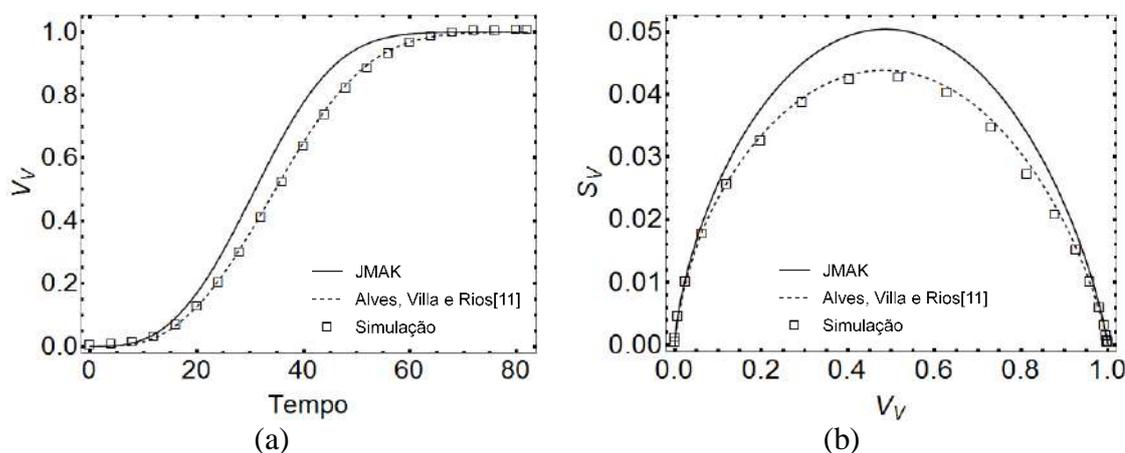
Comparando-se os três casos, Figuras 4, 6 e 8, nota-se claramente que ambos apresentam o mesmo tamanho para as partículas e que há um aumento gradual do número de partículas, uma vez que o volume de partículas aumenta. Também se observa, como esperado, um refinamento dos tamanhos de grãos devido ao aumento do número de núcleos que veio acompanhado do aumento da quantidade de partículas, para a manutenção de  $c = 1$ .

### 5.2.2. Partículas Esféricas com Diâmetro Médio de 3 $\mu\text{m}$ e $c = 1$

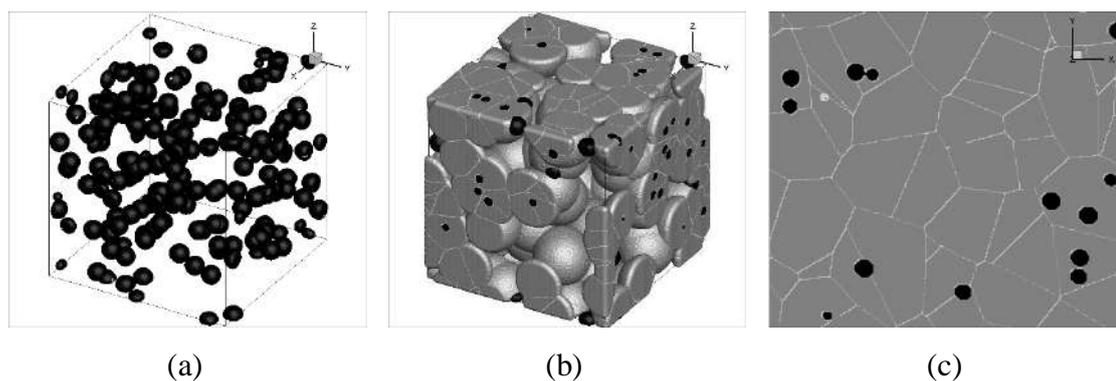
Agora, simulou-se uma matriz de 60  $\mu\text{m}$  x 60  $\mu\text{m}$  x 60  $\mu\text{m}$ , o diâmetro médio das partículas esféricas foi de aproximadamente 3,2  $\mu\text{m}$ . A velocidade de crescimento,  $G$ , novamente foi considerada constante e igual ao comprimento de uma célula cúbica na simulação, que nesse caso equivale a 0,20  $\mu\text{m}$ .

#### 5.2.2.1. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,01

Para esse caso o número de partículas esféricas foi de 153 e o número de núcleos,  $N$ , calculado foi de 149. Na Figura 9, novamente observa-se boa concordância entre a simulação computacional e o modelo de Alves, Villa e Rios[11] tanto para  $V_V$  como para  $S_V$ . O modelo JMAK também diverge nesse caso. Na Figura 10 demonstra-se a microestrutura simulada.



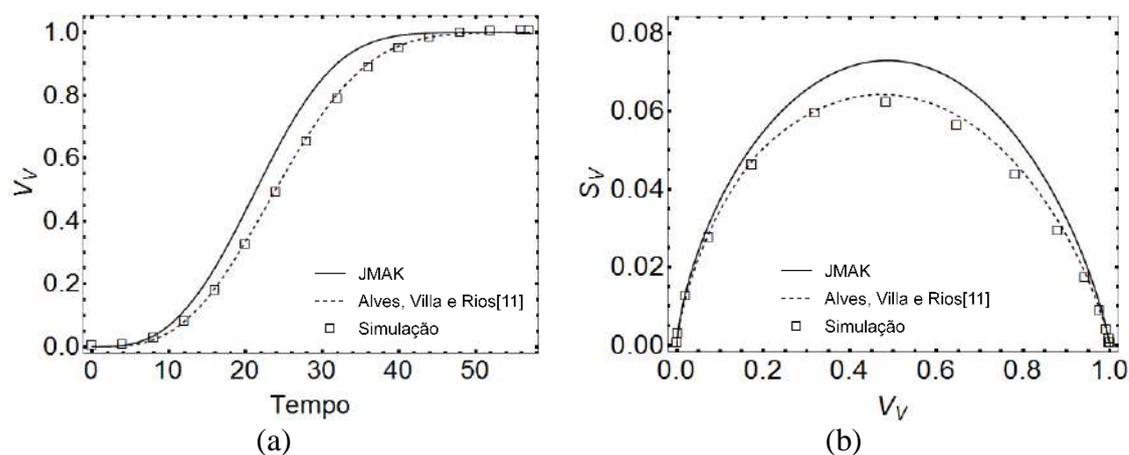
**Figura 9** – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,01, diâmetro médio das partículas de 3  $\mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



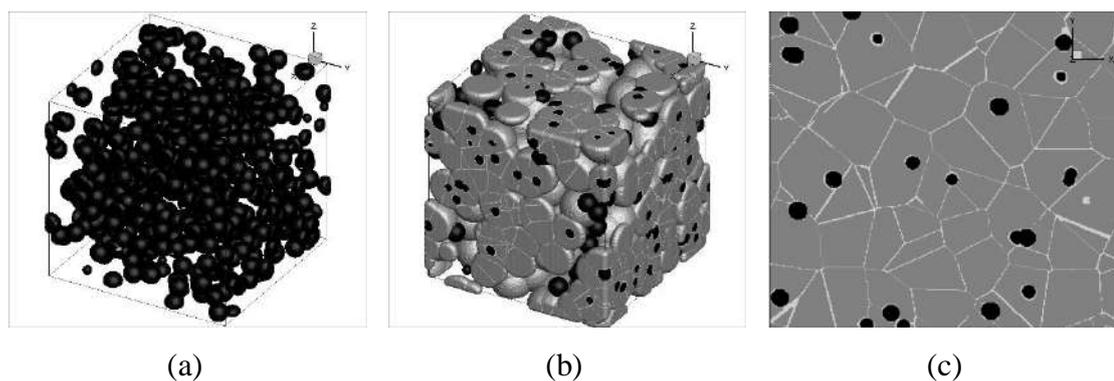
**Figura 10** – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,01, diâmetro médio das partículas de  $3 \mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada.

#### 5.2.2.2. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,03

Nesse caso empregou-se 458 partículas esféricas e o  $N$  calculado foi de 441. Novamente na Figura 11 demonstra-se boa concordância entre a simulação computacional e o modelo de Alves, Villa e Rios[11]. A simulação continua divergindo do modelo JMAK. Na Figura 12 têm-se a microestrutura simulada desse caso.



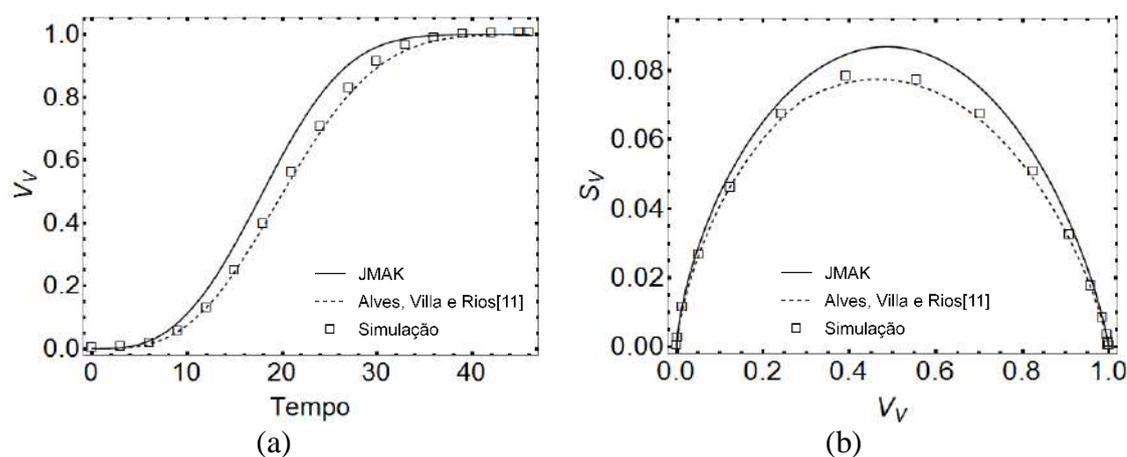
**Figura 11** – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,03, diâmetro médio das partículas de  $3 \mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



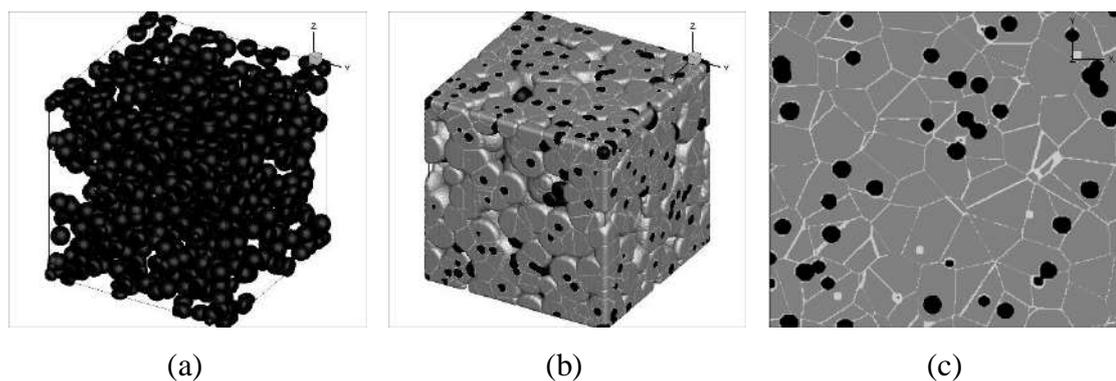
**Figura 12** – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,03, diâmetro médio das partículas de  $3 \mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada.

### 5.2.2.3. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,05

Agora adotou-se 764 partículas esféricas e  $N$  calculado igual a 724. Observa-se na Figura 13 que como nos demais casos há uma boa concordância entre a simulação computacional e o modelo de Alves, Villa e Rios[11]. E que não há essa boa concordância com o modelo JMAK. Na Figura 14 demonstra-se a evolução da microestrutura simulada desse caso.



**Figura 13** – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,05, diâmetro médio das partículas de  $3 \mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



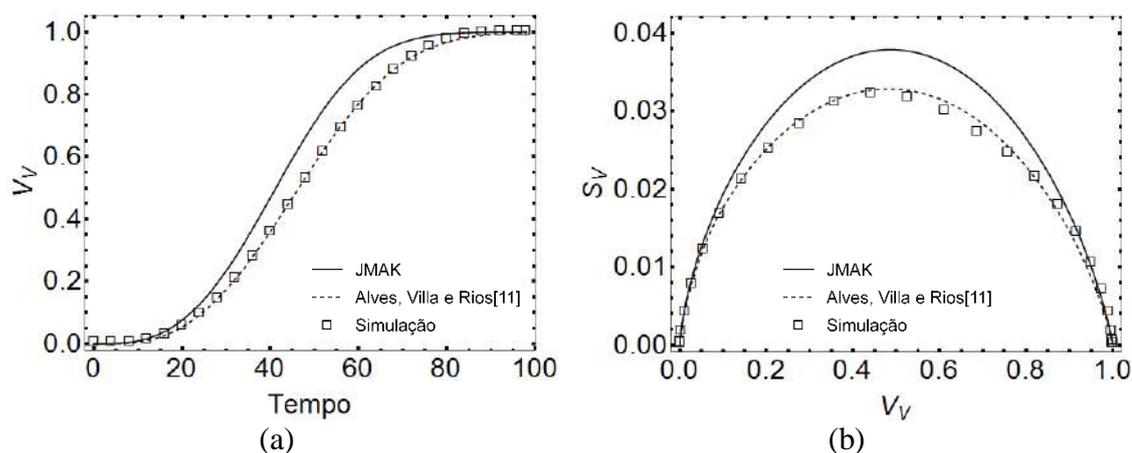
**Figura 14** – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,05, diâmetro médio das partículas de  $3\ \mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada.

### **5.2.3. Partículas Esféricas com Diâmetro Médio de $5\ \mu\text{m}$ e $c = 1$**

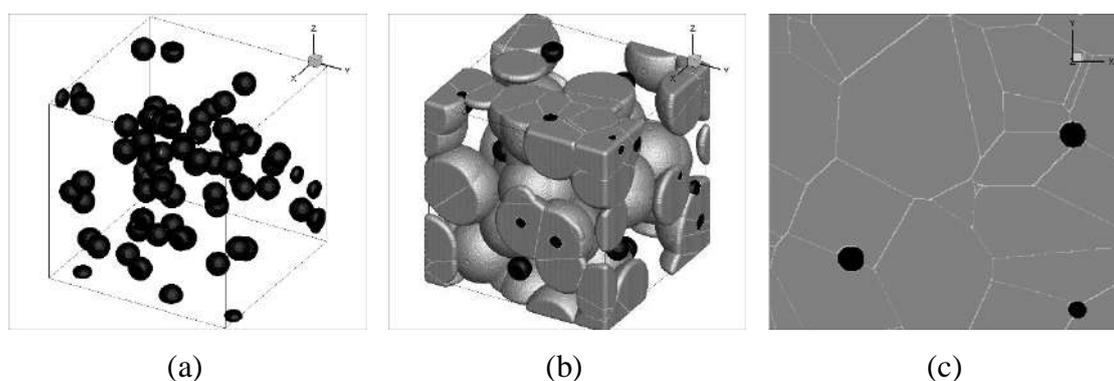
Para os casos dessa seção, considerou-se uma matriz de  $75\ \mu\text{m} \times 75\ \mu\text{m} \times 75\ \mu\text{m}$ , e o diâmetro médio das partículas esféricas foi em torno de  $5,4\ \mu\text{m}$ . A velocidade de crescimento,  $G$ , também foi considerada constante e igual ao comprimento de uma célula cúbica na simulação, que nesse caso equivale a  $0,25\ \mu\text{m}$ .

#### **5.2.3.1. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,01**

Nos resultados apresentados na Figura 15 a seguir, o número de partículas esféricas foi de 64 e  $N = 63$ . Novamente nota-se excelente concordância entre a simulação computacional e o modelo de Alves, Villa e Rios[11], isso já não ocorre para o modelo JMAK. A microestrutura simulada desse caso é mostrada na Figura 16.



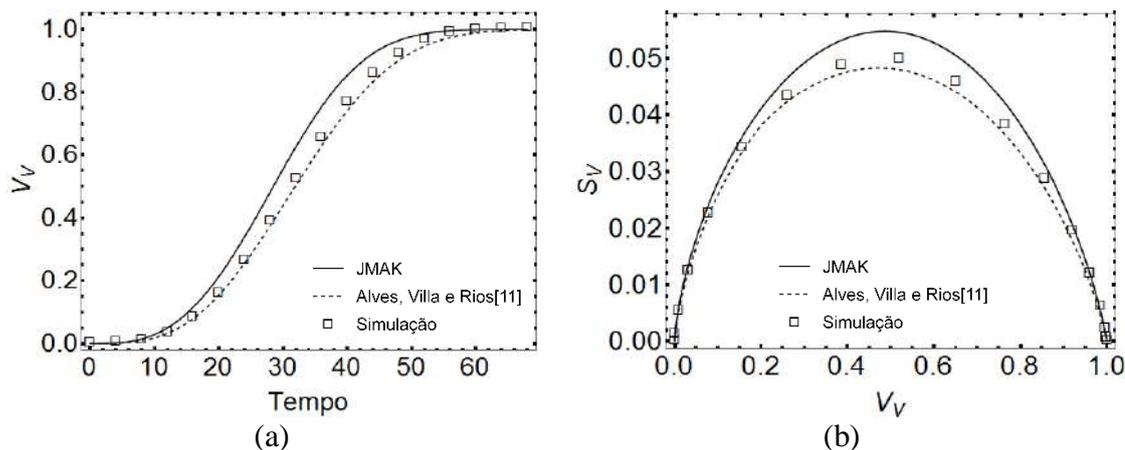
**Figura 15** – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,01, diâmetro médio das partículas de 5  $\mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



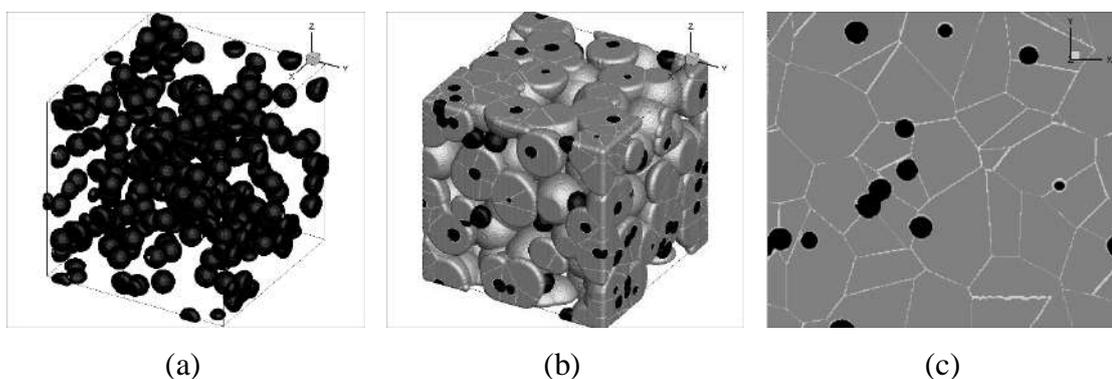
**Figura 16** – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,01, diâmetro médio das partículas de 5  $\mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada.

### 5.2.3.2. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,03

Para o caso da Figura 17, o número de partículas esféricas considerado foi 193 e o  $N$  igual a 186. Novamente há ótima concordância entre a simulação computacional e o modelo de Alves, Villa e Rios[11] e a concordância com o modelo JMAK não é boa. Na Figura 18 mostra-se a evolução da microestrutura simulada desse caso.



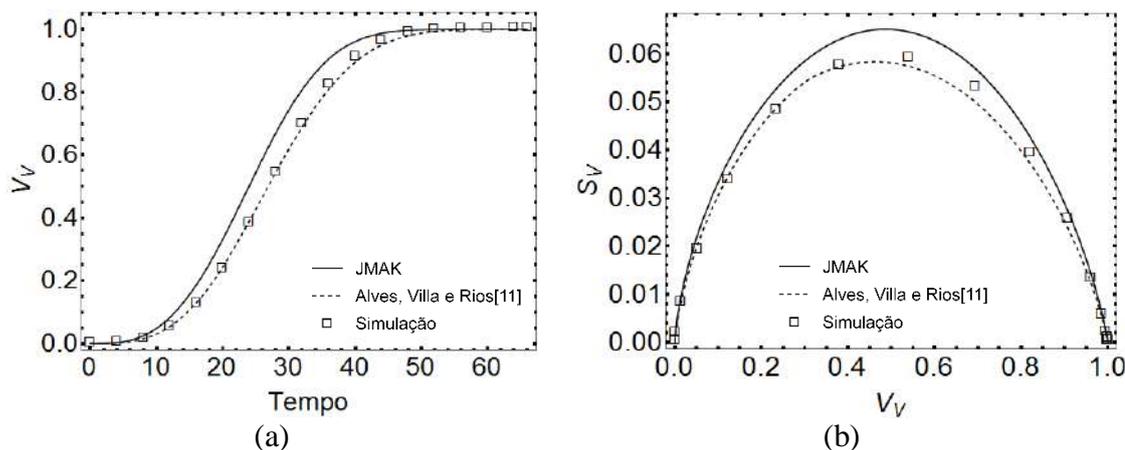
**Figura 17** – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,03, diâmetro médio das partículas de 5  $\mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



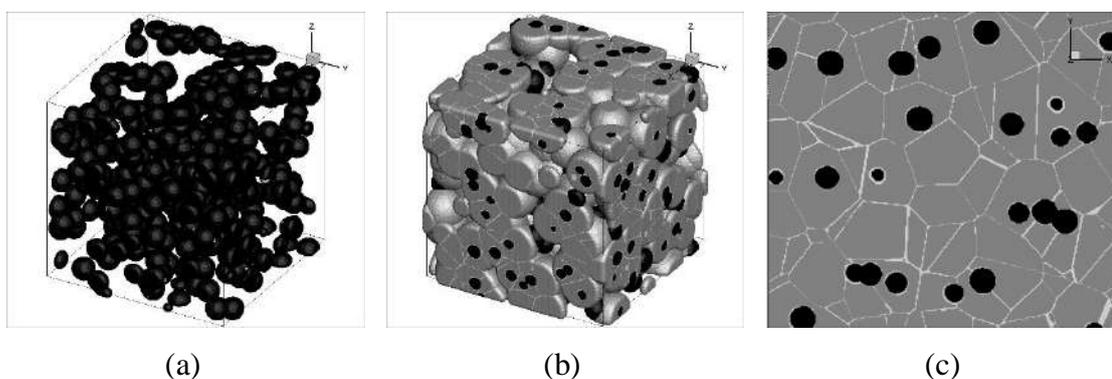
**Figura 18** – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,03, diâmetro médio das partículas de 5  $\mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada.

### 5.2.3.3. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,05

Nesse caso utilizou-se 322 partículas esféricas e  $N = 304$ . Na Figura 19 nota-se que a boa concordância entre a simulação computacional e o modelo de Alves, Villa e Rios[11] permanece, mesmo para os casos em que as partículas têm diâmetros um pouco maiores. Já a concordância com o modelo JMAK não é boa novamente. Na Figura 20 demonstra-se a evolução microestrutural simulada desse caso.



**Figura 19** – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,05, diâmetro médio das partículas de  $5 \mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



**Figura 20** – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,05, diâmetro médio das partículas de  $5 \mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada.

Analisando-se os casos mostrados, Figuras 3 a 20, nota-se que apesar da variação tanto do tamanho quanto em volume das partículas, todas as simulações corroboraram muito bem com o novo modelo de Alves, Villa e Rios[11]. Como já mencionado anteriormente, a literatura sugere ser comum partículas esféricas com diâmetros,  $D$ , de  $1 \mu\text{m}$  a  $6 \mu\text{m}$  e fração volumétrica de precipitados de 0,01 a 0,05, por esse motivo nessa seção abrangeu-se toda essa faixa de valores. Um ponto importante é que com essa abrangência mostrou-se que tanto as simulações quanto o modelo de Alves, Villa e Rios[11] podem ser usados com segurança no modelamento das transformações.

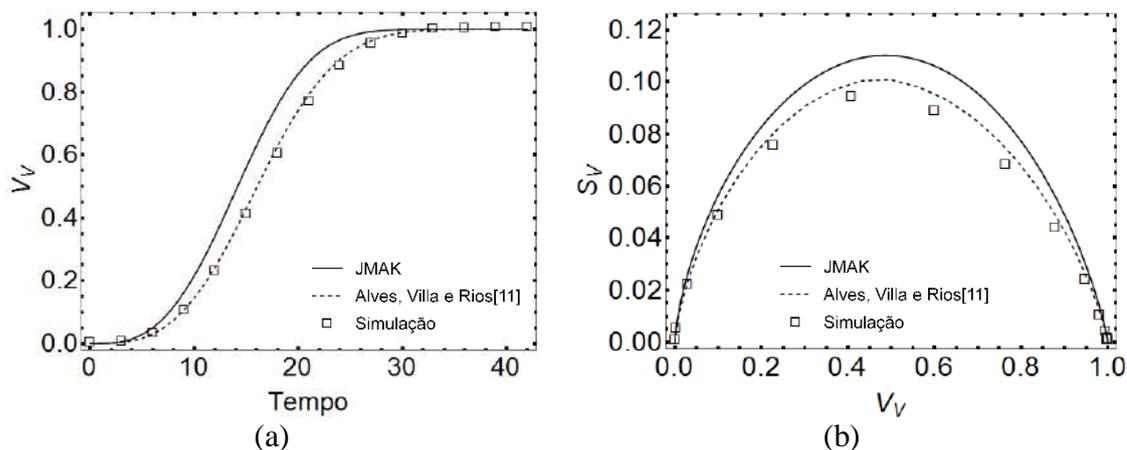
#### **5.2.4. Resultados Para Frações Volumétricas de Partículas Esféricas Mais Altas e Diâmetro Médio de 3 $\mu\text{m}$ e $c = 1$**

Nessa seção, considerou-se situações mais severas que podem ser difíceis de se investigar em um material real, simulou-se casos em que há altas frações volumétricas de precipitados esféricos. A intenção em se aumentar a quantidade de partículas esféricas, é a de aumentar o grau de sobreposição das partículas, o “*impingement*” entre elas. As partículas são distribuídas aleatoriamente na matriz, através do processo de ponto de Poisson, e para que elas ocupassem mais volume aumentou-se o número de partículas mantendo-se o diâmetro médio delas, assim é fácil notar que quanto maior o volume de partículas mais as partículas se sobrepõem.

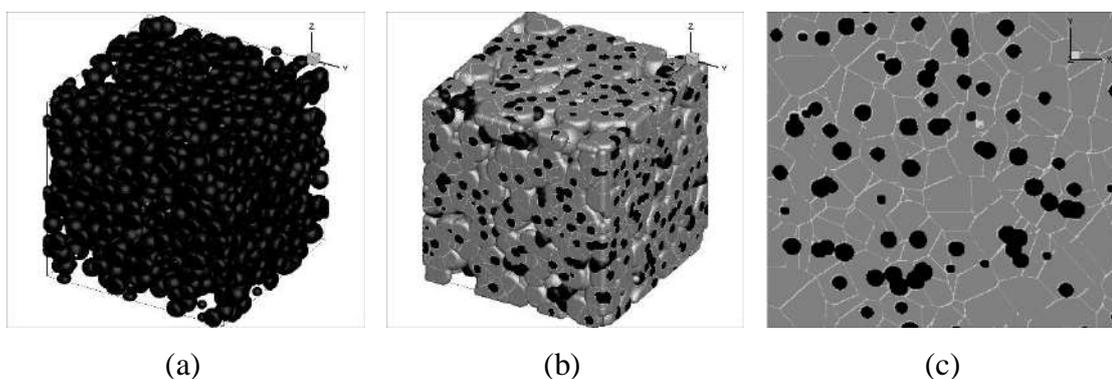
Como na seção 5.2.2, também nessa seção, considerou-se uma matriz de 60  $\mu\text{m}$  x 60  $\mu\text{m}$  x 60  $\mu\text{m}$ , o diâmetro médio das partículas esféricas foi de aproximadamente 3,1  $\mu\text{m}$ . A velocidade de crescimento,  $G$ , de novo foi mantida constante e igual ao comprimento de uma célula cúbica na simulação, equivalente a 0,20  $\mu\text{m}$ .

##### **5.2.4.1. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,1**

Nesse caso o número de partículas esféricas foi de 1528 e o número de núcleos,  $N$ , calculado foi de 1395. Na Figura 21, observa-se que a cinética da transformação continua sendo bem descrita pelo modelo de Alves, Villa e Rios[11], assim como  $S_V$ . Novamente nota-se um desvio com relação ao modelo JMAK. Na Figura 22 têm-se a evolução microestrutural simulada desse caso.



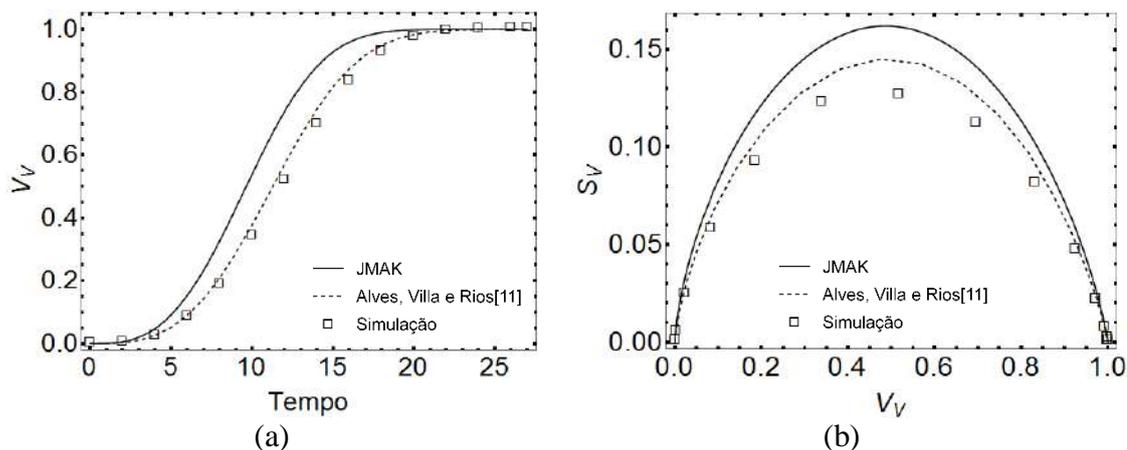
**Figura 21** – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,1, diâmetro médio das partículas de  $3 \mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



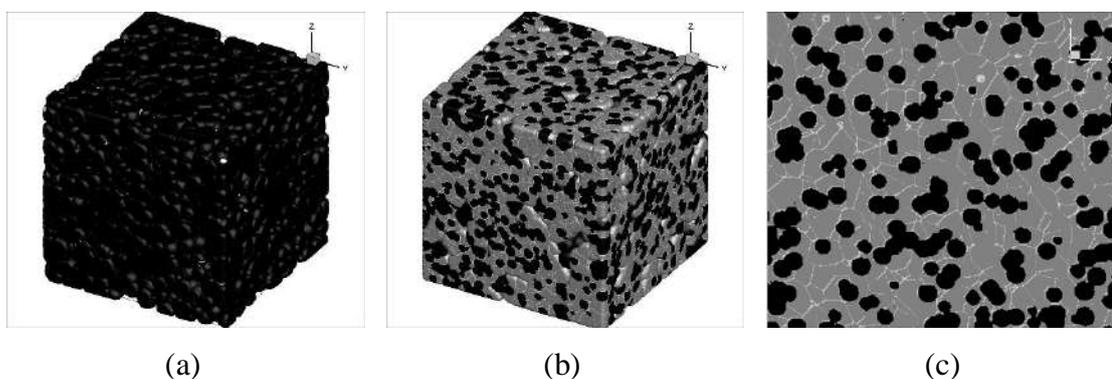
**Figura 22** – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,1, diâmetro médio das partículas de  $3 \mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada.

#### 5.2.4.2. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,3

Para esse caso adotou-se 4584 partículas esféricas e o  $N$  calculado foi de 3486. Na Figura 23-a, nota-se que a cinética da transformação tem boa concordância com o modelo de Alves, Villa e Rios[11], porém na Figura 23-b pode-se observar que há um pequeno desvio em  $S_V$ . O desvio com relação ao modelo JMAK continua. Na Figura 24 mostra-se a microestrutura simulada deste caso, é evidente um número cada vez maior de partículas.



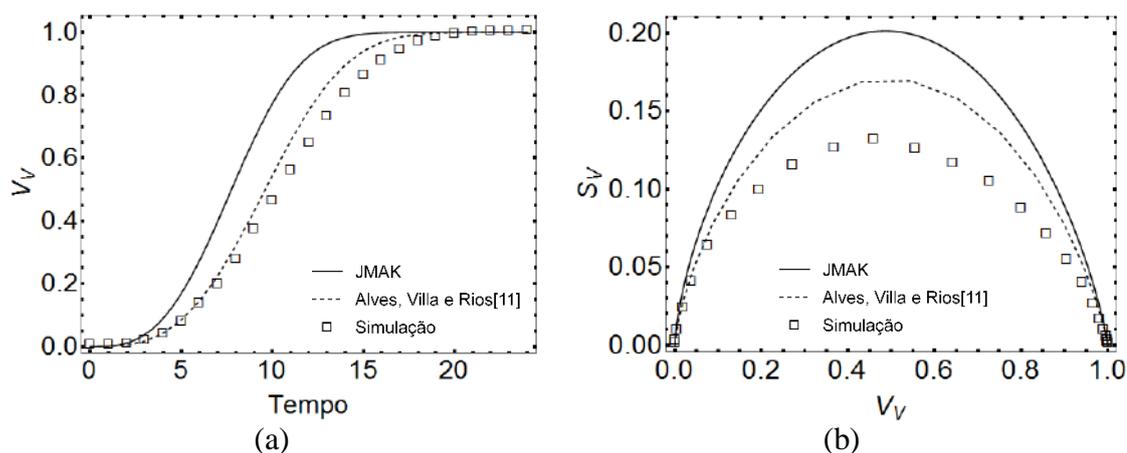
**Figura 23** – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,3, diâmetro médio das partículas de  $3 \mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



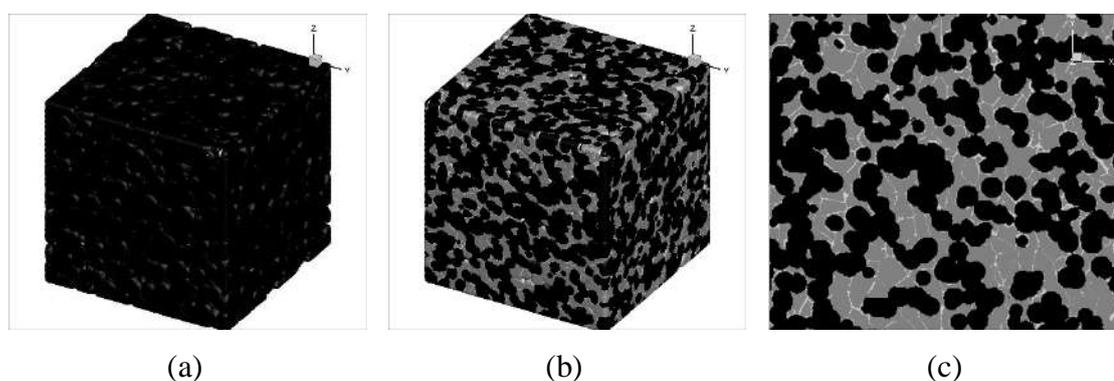
**Figura 24** – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,3, diâmetro médio das partículas de  $3 \mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada.

#### 5.2.4.3. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,5

Agora considerou-se 7639 partículas esféricas e o  $N$  calculado foi de 3977. Pode-se notar na Figura 25-a, que nesse caso já há um pequeno desvio entre a simulação e o modelo de Alves, Villa e Rios[11], esse desvio fica ainda maior para o  $S_V$ , Figura 25-b. O desvio com relação ao modelo JMAK também é aumentado. Na Figura 26 têm-se a evolução microestrutural desse caso. Na Figura 26-c, observa-se claramente uma grande sobreposição das partículas.



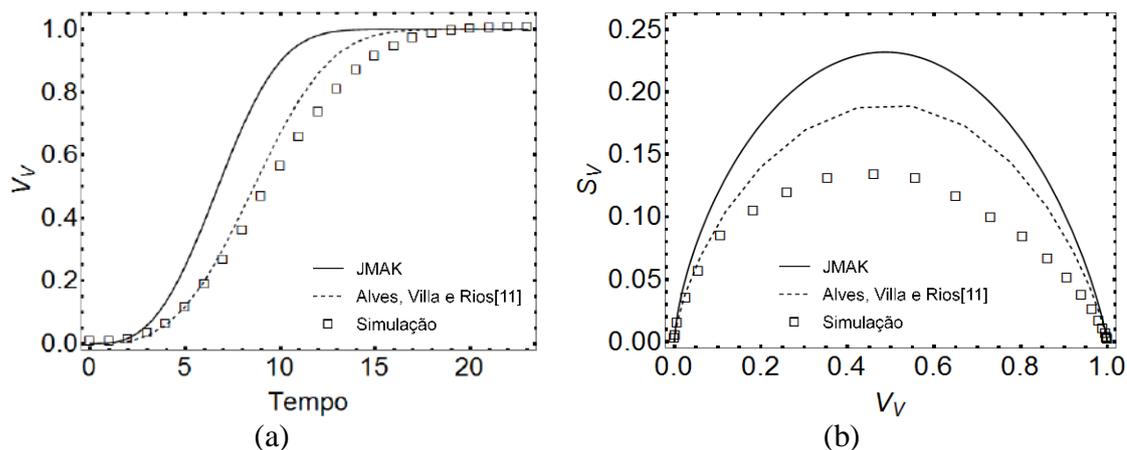
**Figura 25** – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,5, diâmetro médio das partículas de 3  $\mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



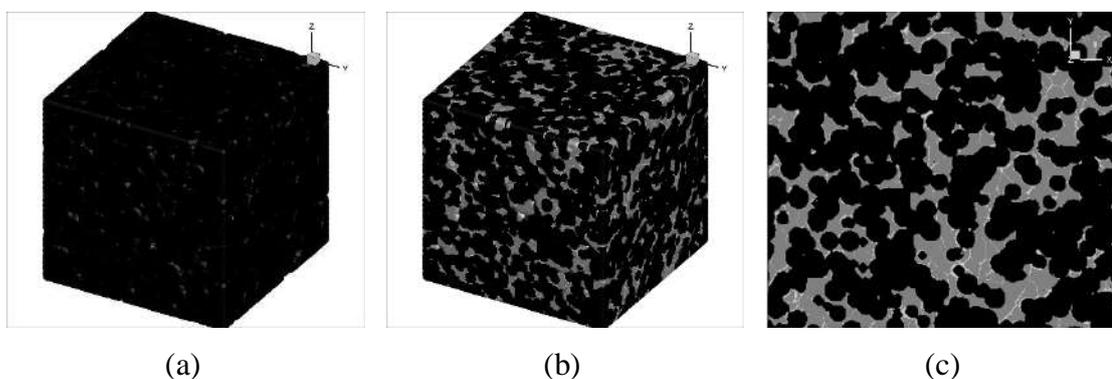
**Figura 26** – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,5, diâmetro médio das partículas de 3  $\mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada.

#### 5.2.4.4. Fração Volumétrica de Partículas Igual a 0,7

Para esse caso ainda mais severo, considerou-se 10695 partículas esféricas e um  $N$  calculado igual a 4233. Na Figura 27 observa-se que o desvio entre a simulação e os modelos é ainda maior. Na Figura 28 mostra-se a microestrutura simulada. Na Figura 28-c, nota-se a matriz com grande quantidade de partículas, e quase não se distingue partículas individuais.



**Figura 27** – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,7, diâmetro médio das partículas de  $3 \mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.

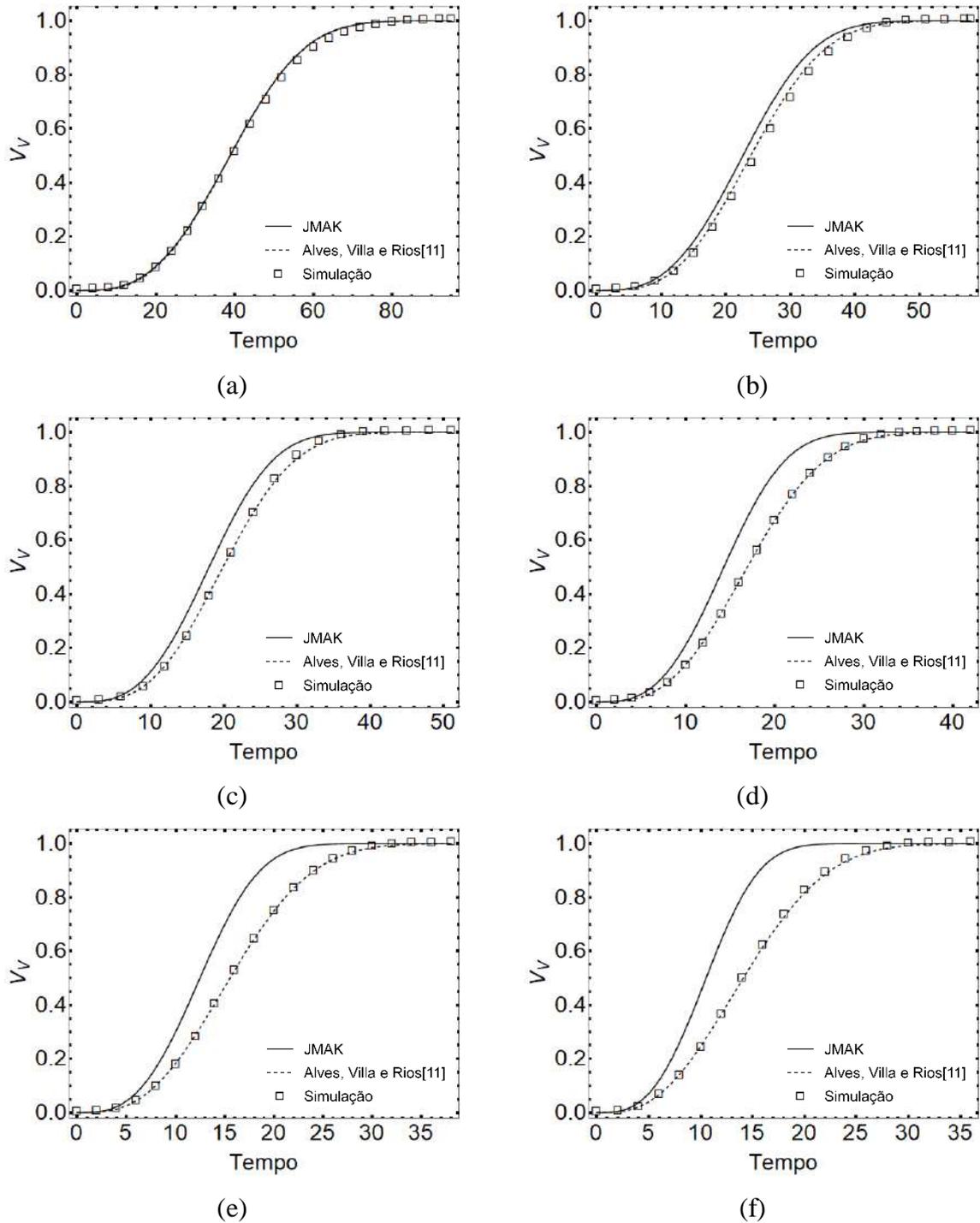


**Figura 28** – Representação da microestrutura simulada para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,7, diâmetro médio das partículas de  $3 \mu\text{m}$  e  $c = 1$ : (a) Início da transformação para mostrar a posição das partículas esféricas e dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção em 2D da matriz totalmente transformada.

Através da análise das curvas de cinética, isto é,  $V_V$  versus Tempo, exibidas nessa seção, mantendo-se  $c = 1$ , nota-se claramente que até uma fração volumétrica de partículas,  $V_{VP} = 0,3$  mostrada na Figura 23 tem-se uma boa concordância entre as simulações e o novo modelo de Alves, Villa e Rios[11]. Vale se destacar que os coeficientes de determinação,  $R^2$ , em todos esses casos, até  $V_{VP} = 0,3$ , foram muito altos, acima de 0,99. Em todos esses casos, o caminho microestrutural também mostrou boa concordância. Entretanto, para  $V_{VP}$  maior ou igual a 0,5, não se observou uma boa concordância entre as simulações e o novo modelo de Alves, Villa e Rios[11]. A descrição do porquê ocorre os desvios entre simulação e novo modelo analítico quando se tem um alto  $V_{VP}$  e  $c = 1$ , serão tratados em detalhes na seção 5.3.

### **5.2.5. Resultados Para Fração Volumétrica de Partículas Esféricas Igual a 0,05 e Diâmetro Médio de 3 $\mu\text{m}$ Com Variação do Parâmetro $c$**

Nessa seção adotou-se uma fração volumétrica de partículas constante,  $V_{VP} = 0,05$  e um diâmetro médio para as partículas de 3  $\mu\text{m}$  variando-se o parâmetro  $c$ . Por conveniência, para uma melhor comparação optou-se por mostrar apenas as curvas de  $V_V$  versus Tempo para todos os casos simulados. Na Figura 29 mostra-se uma comparação entre os resultados de simulação computacional e os resultados dos modelos analíticos de Alves, Villa e Rios[11] e de JMAK, onde o número de núcleos por partícula mudou de  $c = 0,1$  até  $c = 5$ , nota-se através da Figura 29, que a concordância entre as simulações e o modelo analítico de Alves, Villa e Rios[11] é muito boa. Na Figura 29 também se compara os resultados com o modelo de JMAK, destacando-se que quando o valor de  $c$  e  $V_{VP}$  diminuem a curva de JMAK se aproxima da simulação, Figura 29-a, e conseqüentemente da solução analítica de Alves, Villa e Rios[11].



**Figura 29** – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,05, diâmetro médio das partículas de 3  $\mu\text{m}$ : (a)  $c = 0,1$ ; (b)  $c = 0,5$ ; (c)  $c = 1$ ; (d)  $c = 2$ ; (e)  $c = 3$ ; (f)  $c = 5$ .

### 5.2.6. Visão Geral da Concordância Entre Simulação e Modelos Analíticos

Até aqui, o conceito de concordância ou não entre resultados de simulação e modelos analíticos se deu apenas pela forma visual, ou seja, visualização dos gráficos e figuras. Entretanto, para uma avaliação mais apurada da existência de concordância entre a função dada por solução analítica,  $V_{VA}$ , e a função produzida pela simulação computacional,  $V_{VS}$ , se fez necessário escolher parâmetros quantitativos adequados. A escolha inicial foi o coeficiente de determinação,  $R^2$ , porém nos resultados apresentados nessa seção o  $R^2$  foi geralmente superior a 0,9, exceto nos casos mais extremos, deste modo o  $R^2$  não se mostrou muito útil para discriminar quantitativamente e qualitativamente se houve uma boa concordância entre simulação e modelos. Como uma outra opção, definiu-se uma distância relativa máxima entre as duas funções,  $\Delta_{m\acute{a}x}$ , em % pela Equação (24).

$$\Delta_{m\acute{a}x}(\%) = \frac{V_{VS}(x) - V_{VA}(x)}{V_{VS}(x)} \times 100 \quad (24)$$

Este parâmetro reporta a distância relativa máxima entre as duas funções ao longo do eixo  $V_V$ . Vale destacar que no início das transformações, para pequenos  $V_V$ , ambas as funções devem ser semelhantes, de fato quando na ausência do “*impingement*” todas as curvas tendem a concordar.

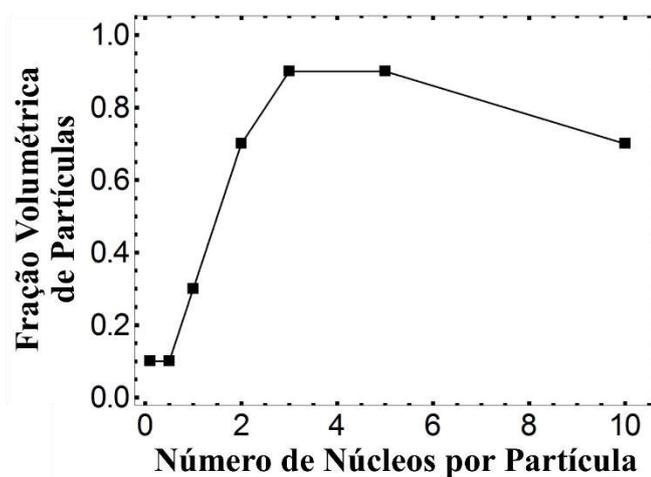
Além da definição de  $\Delta_{m\acute{a}x}$ , tornou-se necessária uma definição de qual o desvio tolerável, ou seja, um limiar para o  $\Delta_{m\acute{a}x}$ , abaixo do qual é aceitável se dizer que há concordância entre as funções. Esse limiar foi baseado na experiência de medidas metalográficas quantitativas. Uma medida metalográfica quantitativa é normalmente boa ou até muito boa se o seu erro relativo for de cerca de  $\pm 5\%$ , em alguns casos, onde a medição é difícil, é aceitável ter um erro de até  $\pm 10\%$ . Portanto, é razoável definir o limite para  $\Delta_{m\acute{a}x}$  entre esses dois valores, assim o  $\Delta_{m\acute{a}x}$  (limiar) = 15%, para  $\Delta_{m\acute{a}x}$  abaixo desse limite, considerou-se que a concordância entre a solução analítica e a simulação computacional foi aceitável.

Na Tabela 2 mostra-se uma visão geral dos valores de  $\Delta_{m\acute{a}x}$  para os casos simulados em que o diâmetro médio das partículas foi de 3  $\mu\text{m}$ , os valores em negrito foram aqueles que estão abaixo do limite,  $\Delta_{m\acute{a}x} = 15\%$ . Na Figura 30 tem-se a Tabela 2 em forma de um gráfico. Através da Figura 30, nota-se mais facilmente a fração máxima de volume de partículas,  $V_{VP}$ , para a qual a concordância entre simulação e o modelo analítico de Alves, Villa e Rios[11] foi boa, ou

seja, a região abaixo da curva representa a região na qual a simulação computacional e a solução analítica coincidiram.

**Tabela 2** - Distância relativa máxima,  $\Delta_{\text{máx}}$ , em %. Os valores em negrito estão abaixo do limite,  $\Delta_{\text{máx}} = 15\%$ .

Fração Volumétrica de Partículas, $V_{VP}$	Número de Núcleos por Partícula, $c$						
	$c = 0,1$	$c = 0,5$	$c = 1$	$c = 2$	$c = 3$	$c = 5$	$c = 10$
0,01	<b>2,8</b>	<b>2,9</b>	<b>7,3</b>	<b>4,6</b>	<b>8,4</b>	<b>6,2</b>	<b>6,1</b>
0,05	<b>4,4</b>	<b>9,1</b>	<b>4,4</b>	<b>2,7</b>	<b>2,0</b>	<b>1,6</b>	<b>1,2</b>
0,1	<b>13,9</b>	<b>11,5</b>	<b>9,1</b>	<b>7,4</b>	<b>6,2</b>	<b>3,9</b>	<b>2,7</b>
0,3	21,1	18,4	<b>14,3</b>	<b>10,7</b>	<b>9,4</b>	<b>5,9</b>	<b>3,1</b>
0,5	55,6	28,8	19,2	<b>10,4</b>	<b>6,1</b>	<b>1,9</b>	<b>5,4</b>
0,7	78,8	34,3	20,4	<b>10,6</b>	<b>5,2</b>	<b>2,5</b>	<b>7,5</b>
0,9	244,5	75,8	40,4	17,3	<b>9,1</b>	<b>13,1</b>	23,7



**Figura 30** – Fração volumétrica de partículas máxima para a qual a distância relativa máxima entre simulação computacional e solução analítica está abaixo do limiar,  $\Delta_{\text{máx}} = 15\%$ , representada em função do número de núcleos por partícula,  $c$ . Houve uma boa concordância entre a solução analítica e a simulação computacional em qualquer ponto abaixo da curva.

Observando-se a Tabela 2, percebe-se que a solução analítica foi boa para valores de  $0,1 < c < 10$  para  $V_{VP}$  menor que 0,1, vale mencionar que a solução analítica foi desenvolvida objetivando os casos em que  $V_{VP}$  é menor que 0,1, portanto não houve surpresa nesta

concordância entre simulação e modelo analítico. No entanto, na Tabela 2 mostra-se também que, para  $c > 2$ , a solução analítica também foi bem aplicada às transformações com alto  $V_{VP}$ .

Um ponto interessante é que, embora o diâmetro médio das partículas considerado na Tabela 2 tenha sido o de 3  $\mu\text{m}$ , o resultado presente na Tabela 2 é independente desse diâmetro médio das partículas. De fato, na consideração de que o comprimento da célula unitária da simulação foi de 0,4  $\mu\text{m}$  em vez dos 0,2  $\mu\text{m}$  usados, o diâmetro das partículas duplicaria para 6  $\mu\text{m}$ , ainda assim, isso significaria apenas uma mudança de escala e não mudaria a geometria do problema. O número de núcleos por unidade de área das partículas,  $N_A$ , diminuiria uma vez que é igual a  $c / (4\pi R^2)$  onde  $R$  é o raio da partícula, mas isso não afetaria os resultados analíticos ou de simulação.

### 5.3. DISCUSSÃO

A primeira observação importante a se fazer é de que em todos os casos simulados, para cada matriz, isto é, para cada espaço amostral, considerou-se apenas partículas de mesmo tamanho, nos casos reais normalmente se tem uma distribuição de tamanhos de partícula. Optou-se por não adaptar as abordagens dessa seção aos casos reais mais complexos, pois isto complicaria consideravelmente as simulações, ao passo que provavelmente não mudaria as tendências gerais já observadas.

Na Figura 31 ilustra-se o comportamento da corroboração entre os resultados de simulação e os resultados do modelo de Alves, Villa e Rios[11]. Pelo modelo de Alves, Villa e Rios[11] uma nova região nucleada em uma partícula não cresce para dentro dessa partícula, no entanto, e esta é a suposição crítica, o crescimento desta nova região “*ignora*” a presença de todas as outras partículas. Quando não há ou há muito pouco “*impingement*” entre as partículas, esta consideração não é um problema, porque a nova região nucleada pode simplesmente crescer e nem sua forma ou velocidade de crescimento são afetadas pela presença de uma partícula isolada. Como a nova região “*ignora*” a presença de todas as outras partículas, o modelo geométrico do crescimento da nova região não prevê qualquer efeito de barreira ou qualquer distorção de uma região em crescimento quando encontra uma partícula isolada. Isso é ilustrado na Figura 31-a.

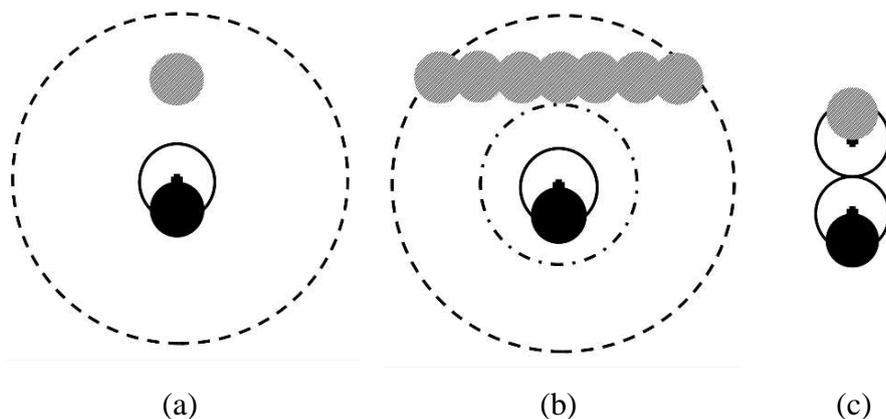
Através da simulação computacional percebeu-se que quando se tem uma baixa fração volumétrica de partículas acoplada a um baixo número de núcleos por partícula:  $c = 0,1$  e  $V_{VP}$

= 0,01 ou mesmo  $V_{VP} = 0,05$ , tanto a simulação quanto o modelo analítico de Alves, Villa e Rios[11] se aproximam de JMAK, vide Figura 29. Um baixo  $c$ , por exemplo  $c = 0,1$  significa que se tem em média um núcleo a cada dez partículas, como as partículas estão localizadas no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson (uniformemente aleatório), esse pequeno número de núcleos por partícula tende também a estar localizado no espaço como um processo de ponto de Poisson. Assim, a solução analítica de Alves, Villa e Rios[11] tende para a solução de JMAK. Isso ocorre justamente porque a solução analítica de Alves, Villa e Rios[11] “ignora” a presença de partículas vizinhas isoladas, considerando apenas a partícula onde surgiu o núcleo. Novamente na Figura 31-a ilustra-se essas circunstâncias. Na Figura 29-a confirma-se que JMAK, a solução analítica de Alves, Villa e Rios[11] e a simulação computacional coincidem nesse caso extremo.

Quando se aumenta a fração volumétrica de partículas,  $V_{VP}$ , o “impingement” torna-se mais importante, e causa influência significativa no decorrer da transformação. Como já dito anteriormente a solução analítica de Alves, Villa e Rios[11] não considera que haja “impingement” entre as novas regiões de crescimento e as partículas vizinhas, isto é, se o número de núcleos por partículas é pequeno,  $c = 0,1$ , as novas regiões simplesmente crescem através das partículas vizinhas, na Figura 31-b mostra-se essa condição, a linha tracejada representa o crescimento do novo núcleo pela consideração do modelo de Alves, Villa e Rios[11] ignorando o “impingement” com as partículas vizinhas. Por outro lado, ao contrário da solução analítica, a simulação computacional “enxerga” as partículas vizinhas como obstáculos e uma  $V_{VP}$  alta pode bloquear o crescimento das regiões simuladas. Na Figura 31-b mostra-se essa condição através da linha ponto-tracejada, que corresponde ao crescimento da simulação computacional. Devido a essa influência das partículas vizinhas no crescimento a simulação computacional apresenta um crescimento mais lento do que a solução analítica e essa disparidade é cada vez maior a medida que se aumenta  $V_{VP}$  e se diminui  $c$ . Nas Figuras 25 e 27 mostra-se bem esta tendência, percebe-se facilmente um desvio entre a simulação computacional e os modelos analíticos, a simulação apresenta crescimento mais lento em ambas as figuras.

Quando se tem um maior número de núcleos por partículas,  $c \geq 1$ , a solução analítica apresenta boa concordância com a simulação computacional. Com um número maior de núcleos por partícula, o “impingement” entre as novas regiões, Figura 31-c, predomina sobre o “impingement” entre as novas regiões e as partículas vizinhas, mostradas na Figura 31-b. Na Figura 31-c mostra-se que as novas regiões colidem umas com as outras e o efeito de bloqueio

das partículas, Figura 31-b, passa a ser menos importante. Na Figura 31-c ilustra-se que um  $c$  alto minimiza o “*impingement*” entre uma nova região e outras partículas e intensifica o “*impingement*” entre regiões transformadas. Assim, a simulação tende a coincidir com a solução analítica, logo tem-se uma boa concordância entre a solução analítica de Alves, Villa e Rios[11] e a simulação computacional.



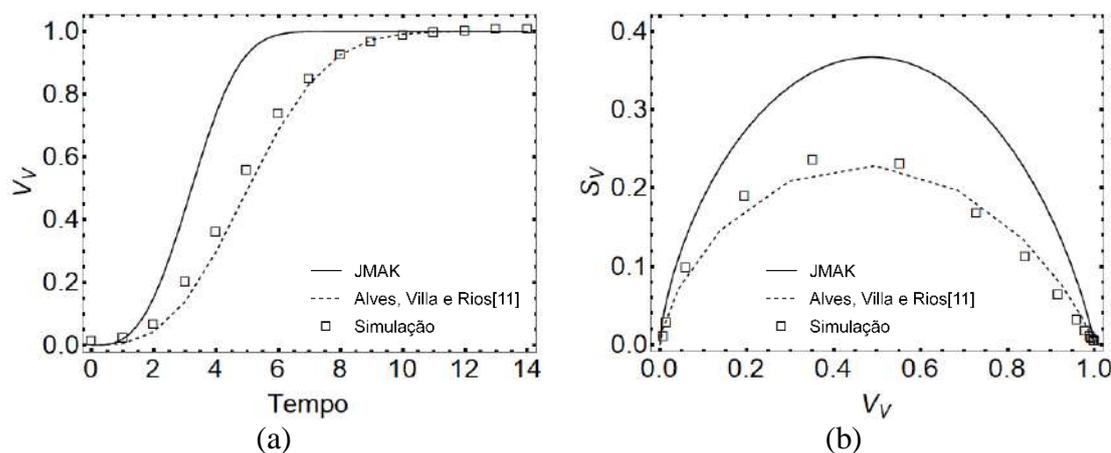
**Figura 31** – Representação sobre a corroboração entre simulação computacional e modelos analíticos: (a) Baixa fração volumétrica de partículas, (b) Alta fração volumétrica de partículas, (c) Alto número de núcleos por partícula. Em preto a partícula que origina o núcleo e a região hachurada corresponde às partículas vizinhas. A linha cheia representa o crescimento inicial do núcleo, a linha tracejada o crescimento previsto pelo modelo de Alves, Villa e Rios[11] e a linha traço e ponto representa o crescimento previsto pela simulação.

Pela Figura 31-a observa-se que para pequenas frações volumétricas de partículas, a nova região, originada na interface da partícula na parte inferior da figura (região preta), contorna a partícula vizinha na frente dela (região hachurada), esta partícula vizinha não interfere no crescimento da nova região. A linha tracejada mostra o tamanho da nova região prevista pela solução analítica e pode-se dizer que a nova região cresce como se a partícula vizinha não estivesse lá. Em contrapartida, como observa-se na Figura 31-b, a situação muda significativamente se houver uma fração volumétrica de partículas muito alta: agora há uma “*barreira*” de partículas vizinhas. A solução analítica trata essa “*barreira*” como se ela não existisse, ou seja, da mesma forma que para uma única partícula. No entanto, a barreira impede o crescimento na simulação computacional, a nova região, limitada pela linha traço e ponto, colide com a barreira, logo, para altas frações volumétricas de partículas e pequeno número de núcleos, a cinética de crescimento prevista pela simulação computacional é mais lenta do que a da solução analítica. Por fim, na situação em que se tem um elevado número de núcleos por

partícula, digamos  $c > 1$ , mostrada na Figura 31-c, a nova região originada na interface da partícula na parte inferior da figura (região preta), colide com a nova região originada na partícula vizinha (região hachurada) no topo da figura, assim passa a ocorrer o “impingement” entre as novas regiões deixando de ocorrer o “impingement” entre as novas regiões e as partículas vizinhas.

Na Figura 32 mostra-se um exemplo desse efeito de  $c \geq 1$ , considerou-se nesse caso  $c = 5$  e  $V_{VP} = 0,9$ . Nota-se que a simulação computacional e a solução analítica mostram boa concordância, mesmo com  $V_{VP}$  extremamente alta.

Em resumo, para  $V_{VP}$  até 0,1, pode-se usar a solução analítica de Alves, Villa e Rios[11] para um  $c$  variando de 0,1 até 10. Com  $V_{VP}$  maior que 0,1 pode-se ainda obter boa concordância entre a simulação computacional e a solução analítica até um  $V_{VP}$  de aproximadamente 0,7 e para que essa boa concordância ocorra, deve-se manter o  $c > 1$ .



**Figura 32** – Resultados para fração volumétrica de partículas esféricas de 0,9, diâmetro médio das partículas de 3  $\mu\text{m}$  e  $c = 5$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.

## 5.4. CONCLUSÕES

A simulação computacional ajudou a mostrar dentro de quais limites a solução analítica de Alves, Villa e Rios[11] pode ser útil. O desenvolvimento da metodologia e a comparação entre a solução analítica e a simulação computacional permitiu as seguintes conclusões:

- Foi possível simular computacionalmente em 3D com fidelidade as transformações de fase em que a nucleação ocorreu na interface matriz/partículas.

- O código computacional capaz de simular essas transformações foi criado com sucesso.
- Na maioria dos casos estudados as simulações tiveram uma ótima concordância com o modelo analítico de Alves, Villa e Rios[11]. Nenhum ajuste de curvas foi realizado. Estudou-se uma variedade de casos em que a concordância entre os modelos foi excelente, provando assim que tanto a simulação e o modelo analítico podem ser empregados no modelamento dessas transformações de fase.
- A solução analítica funciona muito bem para frações volumétricas de partículas,  $V_{VP}$ , inferiores a 0,1.
- Para baixo número de núcleos por partículas,  $c = 0,1$  e baixas frações volumétricas de partículas,  $V_{VP} = 0,01$ , a solução analítica e a simulação computacional se aproximaram da solução clássica de JMAK.
- Para frações volumétricas de partículas, acima de 0,1, o “*impingement*” entre as partículas torna-se cada vez mais importante. Nesses casos, o modelo analítico concordou bem com as simulações apenas quando  $c > 1$ .
- A faixa de fração volumétrica de partículas e o número médio de núcleos por partícula, dentro do qual a solução analítica e a simulação computacional tiveram boa concordância, foram resumidas na Tabela 2 e na Figura 30.
- Quando a solução analítica de Alves, Villa e Rios[11] pode ser utilizada para altas frações volumétricas de partículas, torna-se possível utilizá-la para modelar situações muito diferentes da nucleação na interface matriz/partícula. Por exemplo, pode-se considerar que a região aqui chamada de partículas, partículas que sofreram “*impingement*”, seja uma região transformada previamente por uma outra fase produto, ou seja, a solução analítica pode ser usada para modelar transformações sequenciais em que a primeira transformação atinge uma dada fração volumétrica, por exemplo entre 0,1 a 0,7, e a segunda transformação ocorra com a nucleação na interface entre matriz e a primeira fase produto.

## **6. NOVO MODELO DE NUCLEACÃO EM PARTÍCULAS APLICADO A INCLUSÕES NÃO METÁLICAS NOS AÇOS**

Como discutido no capítulo 5, Alves, Villa e Rios[11], baseando-se em JMAK, desenvolveram um modelo analítico empregando conceitos de geometria estocástica para transformações por nucleação e crescimento nas quais os núcleos estão localizados na interface de partículas esféricas. Seu modelo analítico é válido para PSN durante a recristalização, bem como para transformações de fase que tenham a nucleação na interface de precipitados previamente existentes. Este novo modelo emprega a saturação de sítios e é capaz de modelar a curva da cinética ao longo de toda a transformação.

Porém, o modelo de Alves, Villa e Rios[11] leva em consideração partículas esféricas e é de conhecimento que em casos reais, nem sempre estarão presentes partículas de formato esférico. Um exemplo de partículas não esféricas são as inclusões não metálicas que são comumente encontradas em aços. Desse modo, nesse capítulo aplicou-se a metodologia desenvolvida no capítulo anterior às transformações em que a nucleação da nova fase ocorreu na interface de inclusões não metálicas que são comumente encontradas em aços. Buscou-se reportar os casos explícitos na norma ASTM-E45[16], assim as inclusões não metálicas consideradas foram: Tipo A (Sulfeto), Tipo B (Alumina), Tipo C (Silicato) e Tipo D (Óxido). Em todos os casos buscou-se reproduzir a classificação da ASTM-E45[16] de série grossa, e severidade de nível 3, considerando-se a geometria das inclusões como aquelas reportadas em produtos submetidos a laminação.

Esse capítulo traz simulações em 3D, pelo método do cone causal, de recristalização ou transformações de fase por nucleação e crescimento, nas quais a nucleação da nova fase se deu na interface dos quatro tipos de inclusões reportadas pela ASTM-E45[16]. As simulações foram

comparadas diretamente com o novo modelo de Alves, Villa e Rios[11] e ao modelo JMAK, assim, garantiu-se que as simulações e o novo modelo analítico podem ser utilizadas no modelamento dessas transformações.

## 6.1. METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Simulou-se a transformação de uma matriz inicial que contém inclusões não metálicas, em uma outra fase produto, porém os núcleos dessa nova fase produto surgiram na interface matriz/partículas. A nova fase produto foi capaz de crescer na região fora das inclusões, isto é, ao fim da transformação, a fase produto ocupou todo o volume da matriz, fora das partículas.

Por conveniência considerou-se a nucleação de um núcleo por partícula, isto é,  $c = 1$ . Com um núcleo por partícula, pode-se considerar que o número de núcleos,  $N$ , deve ser o mesmo que o número de partículas. Entretanto, nessa condição o  $N$  é igual ao número de partículas somente se as partículas não se tocarem, uma vez que, como mencionado por Alves, Villa e Rios[11], seu modelo analítico não considera que haja “*impingement*” entre as partículas, vide capítulo 5. Ressalta-se que essa nucleação ocorreu por saturação de sítios e seguiu a distribuição de Poisson homogênea na área superficial das inclusões, ou seja, com essa condição podem haver inclusões com mais de um núcleo e inclusões sem nenhum núcleo.

A velocidade de crescimento,  $G$ , foi adotada constante e igual ao incremento de 1 célula unitária. As inclusões geradas foram uniformemente distribuídas na matriz e cresceram, cada uma com a forma geométrica específica, até atingirem o tamanho médio desejado, ressalta-se que cada inclusão é independente, sendo assim podem haver inclusões maiores e menores na mesma matriz.

A dimensionalização da matriz ocorreu de maneira simples buscando-se reproduzir a área de observação explicitada na ASTM-E45[16] que é de 710  $\mu\text{m}$ . Essa medida, porém, refere-se aos eixos em um plano em 2D. Assim, nas simulações considerou-se uma matriz em 3D com 300 x 300 x 300 células, ou 750  $\mu\text{m}$  x 750  $\mu\text{m}$  x 750  $\mu\text{m}$ , portanto cada célula cúbica da matriz equivale a 2,5  $\mu\text{m}$ . Ressalta-se, entretanto, que essas medidas são arbitrárias, pode-se atribuir qualquer valor de escala as células cúbicas, nesse capítulo apenas buscou-se, para a conveniência dos leitores, se aproximar das dimensões abordadas pela norma ASTM-E45[16]. A relação de tamanho e quantidade de inclusões adotadas nas simulações encontra-se na Tabela 3.

**Tabela 3** - Tamanho e quantidade de inclusões adotadas nas simulações.

<i>Inclusões Tipo</i>	<b>Comprimento (<math>\mu\text{m}</math>)</b>	<b>Largura (<math>\mu\text{m}</math>)</b>	<b>Quantidade média de inclusões por plano (corte 2D)</b>	<b>Quantidade total de inclusões na matriz</b>
<i>A (Sulfeto)</i>	150	10	7	525
<i>B (Alumina)</i>	12,5	12,5	25	120
<i>C (Silicato)</i>	300	10	3	225
<i>D (Óxido)</i>	12,5	12,5	36	2160

Para os casos do Tipo A e Tipo C, nas simulações considerou-se formato de bastões com extremidades esféricas para as inclusões. Para o caso do Tipo B, considerou-se formato esférico para os precipitados, porém os mesmos encontram-se em uma região restrita de  $60 \mu\text{m}$  nos eixos  $y$  e  $z$ , sendo distribuídos ao longo de todo eixo  $x$ . Para o caso do Tipo D, considerou-se formato esférico e partículas uniformemente distribuídas na matriz.

## 6.2. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Como resultados realizou-se uma comparação direta entre as simulações e os modelos analíticos de JMAK e Alves, Villa e Rios[11]. Para tal obteve-se gráficos da cinética da transformação em função do tempo, curva  $V_V$  versus Tempo e também gráficos do caminho microestrutural. Nesses gráficos os dados das simulações foram representados por pontos, os dados previstos pelo modelo de Alves, Villa e Rios[11], Equações (4) e (5), foram representados por linha tracejada, e por fim os dados previstos pelo modelo analítico de JMAK, Equação (3), foram representados por linha cheia. Para facilitar a leitura dos gráficos nem todos os pontos de simulação foram representados. Para todos os casos também se demonstrou as microestruturas geradas através da simulação computacional. Nas microestruturas as inclusões não metálicas foram representadas pela cor preta, e os grãos da nova fase formada, pela cor cinza.

Nesse capítulo considerou-se a nucleação de um núcleo por partícula, isto é,  $c = 1$ . Como visto no capítulo 5, se  $c = 1$ , o número de núcleos,  $N$ , é igual ao número de partículas, quando as partículas não se tocam. Se  $S$  é a área superficial das partículas quando elas não se tocam, pode-se definir  $S'$  como a área superficial das partículas para o caso em que elas se tocam. Portanto, é fácil perceber que  $S' < S$  uma vez que a área interfacial entre partículas e matriz diminui como resultado de as partículas se tocarem. Novamente frisa-se que  $S_{VP}$  é a área

superficial entre partículas e matriz por unidade de volume, extraída diretamente da simulação, e que  $S_{VP}$  multiplicado pelo volume da matriz é o próprio  $S'$  medido diretamente da microestrutura. Nesse contexto, como também visto no capítulo 5, pode-se calcular o valor de  $c$  para o caso de partículas esféricas pela Equação (25).

$$c = \frac{N (4 \pi R^2)}{S'} \quad (25)$$

Onde  $R$  é o raio médio das partículas. Destaca-se que para o modelo analítico  $S' = S$ . Assim, torna-se fácil perceber que, como na prática  $S' < S$  e as partículas tem tamanho fixo, para se manter o  $c$  constante, e conseqüentemente o número de núcleos por unidade de área das partículas,  $N_A$ , constante nas simulações e modelo analítico, se faz necessário calcular um novo número de núcleos, e este será menor.

As inclusões não metálicas dos Tipos B e D são esféricas. Assim, calcula-se o  $c$  e o  $N$  desses casos diretamente pela Equação (25). Entretanto as inclusões não metálicas dos Tipos A e C não são esféricas e no modelo de Alves, Villa e Rios[11] existem parâmetros críticos que podem ser modificados para adaptar sua solução para partículas não esféricas. Esses parâmetros são: a) o número de núcleos por partícula,  $c$ ; b) o raio das partículas esféricas. Vide Equações (4) e (5).

É possível se estimar o  $c$  para partículas de qualquer geometria. Para o caso das inclusões dos Tipos A e C, a Equação (25) torna-se a Equação (26), que considera a área do bastão, um cilindro com pontas esféricas. Nesse caso,  $R_{cil}$  é o raio médio dos bastões e  $h$  é a altura média do cilindro que forma os bastões.

$$c = \frac{N [(2 \pi R_{cil} h) + (4 \pi R_{cil}^2)]}{S'} \quad (26)$$

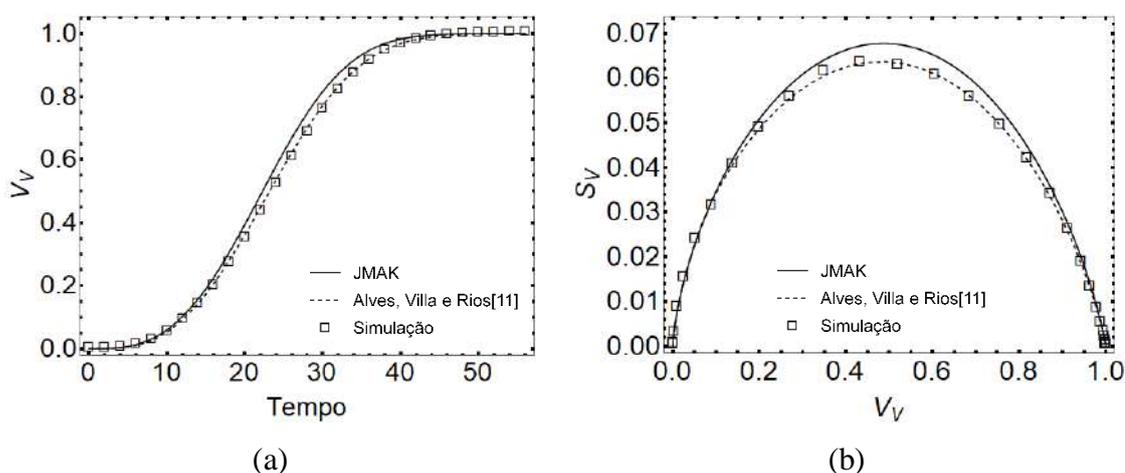
Entretanto, quando as partículas não são esféricas deve-se inserir nas Equações (4) e (5) o raio equivalente ao raio da esfera, ou seja, de posse do volume das partículas que não possuem formato esférico, calcula-se um raio equivalente ao raio das esferas que ocupariam o mesmo volume, e considera-se esse raio equivalente no modelo analítico que foi desenvolvido para partículas esféricas.

Um fato importante é que por meio dessa técnica, além da fração volumétrica de partículas,  $V_{VP}$ , para se ajustar o modelo a partículas com geometrias diferentes, se faz

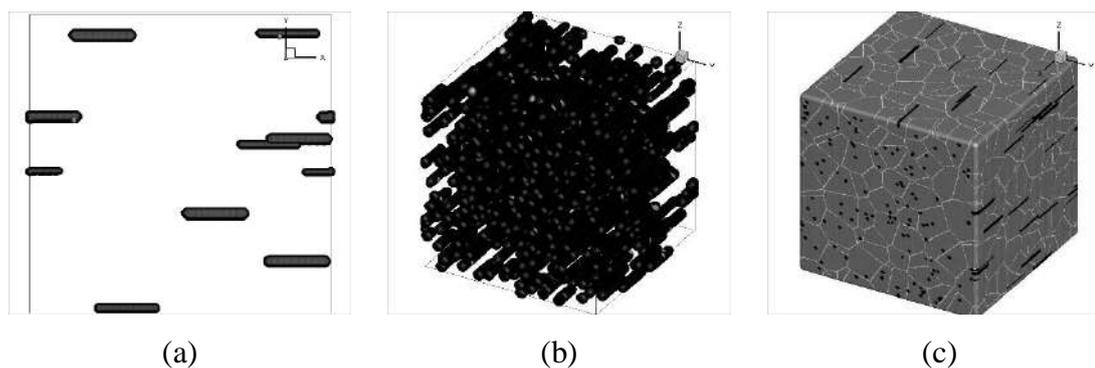
necessário apenas o conhecimento do  $S_{VP}$  das inclusões não metálicas e o tamanho médio das inclusões, o que pode ser medido facilmente pelo experimentalista.

### 6.2.1. Inclusões Tipo A (Sulfeto)

Nesse caso o número de inclusões não metálicas foi de 525, como descrito na Tabela 3. Assim, o número de núcleos,  $N$ , calculado foi de 399. Na Figura 33, tem-se ótima concordância entre a simulação computacional e o modelo de Alves, Villa e Rios[11]. Através da Figura 33-a, observa-se claramente que a cinética da transformação é bem descrita pelo modelo, assim como na Figura 33-b, o  $S_V$  também apresenta uma ótima concordância. Como foi discutido na seção 5.3, nesse caso particular, como se tem um baixo  $V_{VP}$  tanto a simulação quanto o modelo analítico de Alves, Villa e Rios[11] se aproximam de JMAK. Entretanto, o modelo de Alves, Villa e Rios[11] apresenta uma melhor concordância. É importante notar que, embora as inclusões do Tipo A (Sulfeto) sejam muito diferentes de esferas, a concordância entre a simulação e o novo modelo analítico de Alves, Villa e Rios[11] permanece excelente. Na Figura 34 observa-se a presença das inclusões na matriz em 2D e 3D, onde observa-se claramente a sua forma, também é observada a microestrutura simulada desse caso.



**Figura 33** – Resultados da transformação com nucleação em inclusões do Tipo A (Sulfeto). (a)  $V_V$  versus tempo. (b) Caminho microestrutural.



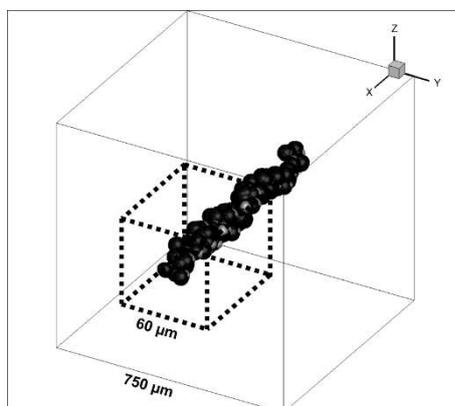
**Figura 34** – Representação da microestrutura simulada da transformação com nucleação em inclusões do Tipo A (Sulfeto). (a) Seção 2D da matriz demonstrando a nucleação nas inclusões no plano  $xy$ , onde  $x$  é a direção de laminação. (b) Matriz em 3D demonstrando a nucleação nas inclusões. (c) Matriz totalmente transformada.

### 6.2.2. Inclusões Tipo B (Alumina)

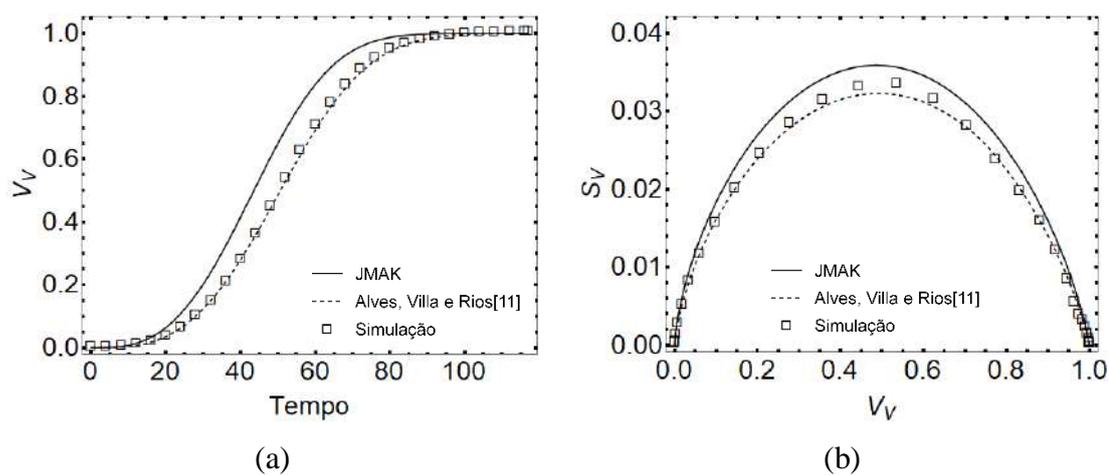
Para esse caso em particular as inclusões foram consideradas esféricas. Essa representação pode não ser a melhor aproximação da forma real das inclusões do Tipo B (Alumina), entretanto, o ponto crucial é que as inclusões foram distribuídas em uma faixa central da matriz, de modo que a faixa foi escolhida como  $30\ \mu\text{m}$  para cima e para baixo do plano central da direção  $y$  e  $z$ , respectivamente. Portanto, essa faixa tem um total de  $60\ \mu\text{m}$  no centro da direção  $y$  e  $z$ , englobando toda a direção  $x$ , como pode ser observado na Figura 35. Para o acompanhamento efetivo da transformação, considerou-se a região delimitada pelo cubo pontilhado da Figura 35, assim a matriz de  $300 \times 300 \times 300$  células nesse caso foi considerada como uma matriz de  $60\ \mu\text{m} \times 60\ \mu\text{m} \times 60\ \mu\text{m}$ . A grosso modo, esse fato é semelhante a dar um zoom à matriz cúbica original com  $750\ \mu\text{m} \times 750\ \mu\text{m} \times 750\ \mu\text{m}$ .

Na matriz de  $750\ \mu\text{m} \times 750\ \mu\text{m} \times 750\ \mu\text{m}$  o número de inclusões não metálicas foi de 120, como descrito na Tabela 3. Para a matriz de  $60\ \mu\text{m} \times 60\ \mu\text{m} \times 60\ \mu\text{m}$  foi considerado um número compatível de inclusões, o equivalente a 50 partículas, com o número de núcleos,  $N$ , calculado de 41. Ambos os resultados apresentados nas Figuras 36 e 37 são da matriz de  $60\ \mu\text{m} \times 60\ \mu\text{m} \times 60\ \mu\text{m}$ . Pode-se observar na Figura 36 que, mesmo com nova dimensão na matriz de transformação, também houve ótima concordância entre a simulação computacional e o modelo de Alves, Villa e Rios[11]. Porém, a simulação em questão não foi bem modelada pelo modelo de JMAK. Na Figura 37 observa-se a presença das inclusões na matriz em 2D e 3D, assim como

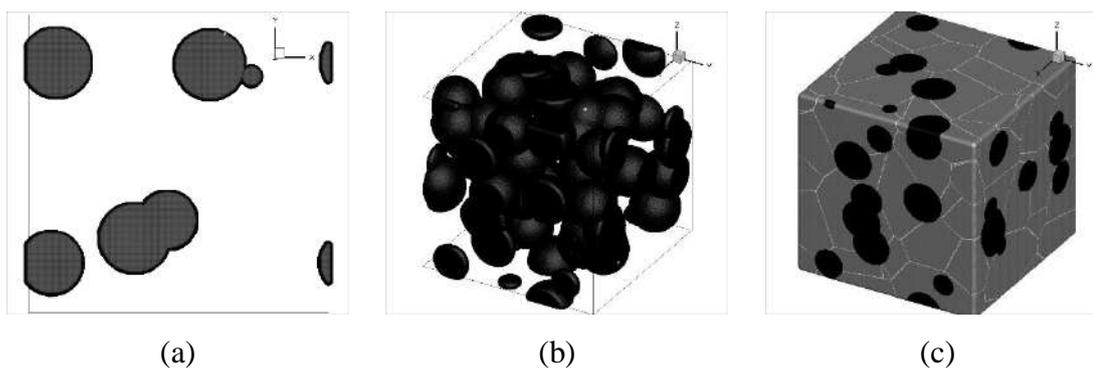
a microestrutura simulada desse caso. Pode-se ver que as partículas são maiores devido à nova dimensão adotada neste caso específico.



**Figura 35** – Representação da localização das inclusões do Tipo B (Alumina) em 3D. A região pontilhada representa a nova matriz considerada para a simulação.



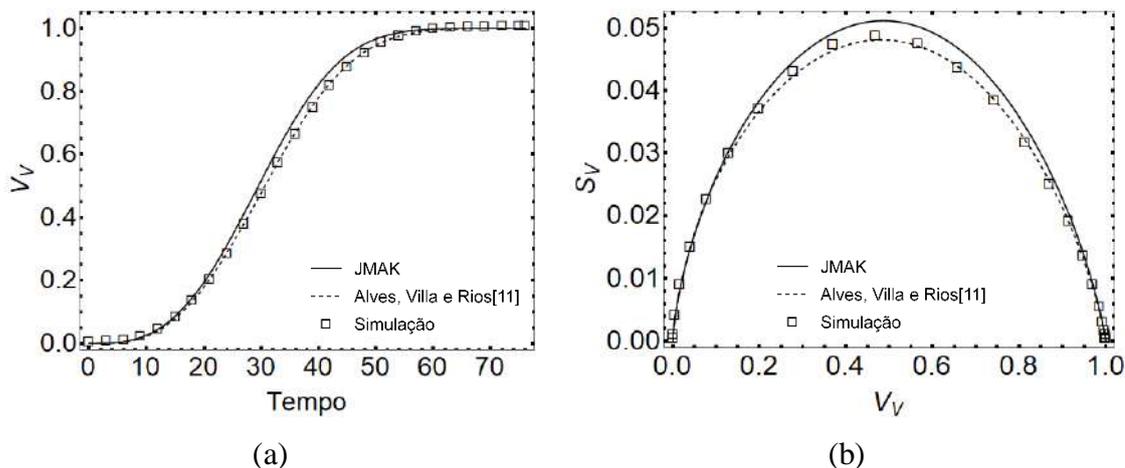
**Figura 36** – Resultados da transformação com nucleação em inclusões do Tipo B (Alumina). (a)  $V_V$  versus tempo. (b) Caminho microestrutural.



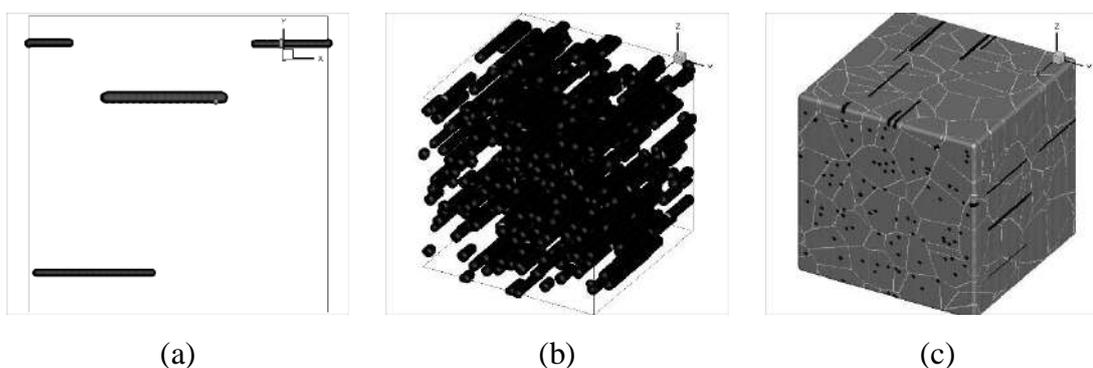
**Figura 37** – Representação da microestrutura simulada da transformação com nucleação em inclusões do Tipo B (Alumina). (a) Seção 2D da matriz demonstrando a nucleação nas inclusões no plano  $xy$ , onde  $x$  é a direção de laminação. (b) Matriz em 3D demonstrando a nucleação nas inclusões. (c) Matriz totalmente transformada.

### 6.2.3. Inclusões Tipo C (Silicato)

Como reportado pela ASTM-E45[16], as inclusões Tipo A e Tipo C tem grande semelhança, portanto, para esse caso a simulação foi semelhante ao caso do Tipo A mostrado na seção 6.2.1. Nesse caso o número de inclusões não metálicas foi de 225, como descrito na Tabela 3. O número de núcleos,  $N$ , calculado foi de 172. Na Figura 38, novamente tem-se ótima concordância entre a simulação computacional e o modelo de Alves, Villa e Rios[11] tanto no  $V_V$  quanto em  $S_V$ . Assim como no caso da seção 6.2.1 (Tipo A), tanto a simulação quanto o modelo analítico de Alves, Villa e Rios[11] se aproximam de JMAK devido ao baixo  $V_{VP}$ . Entretanto, a melhor concordância com a simulação ocorreu com o modelo de Alves, Villa e Rios[11]. Na Figura 39 observa-se a presença das inclusões na matriz em 2D e 3D, assim como a microestrutura simulada para esse caso. Comparando-se a Figura 39 com a Figura 34 observa-se facilmente que o caso Tipo A, Figura 34, apresenta mais inclusões e que apesar de as inclusões entre o Tipo A e Tipo C terem a mesma geometria as inclusões do Tipo C são maiores.



**Figura 38** – Resultados da transformação com nucleação em inclusões do Tipo C (Silicato). (a)  $V_V$  versus tempo. (b) Caminho microestrutural.

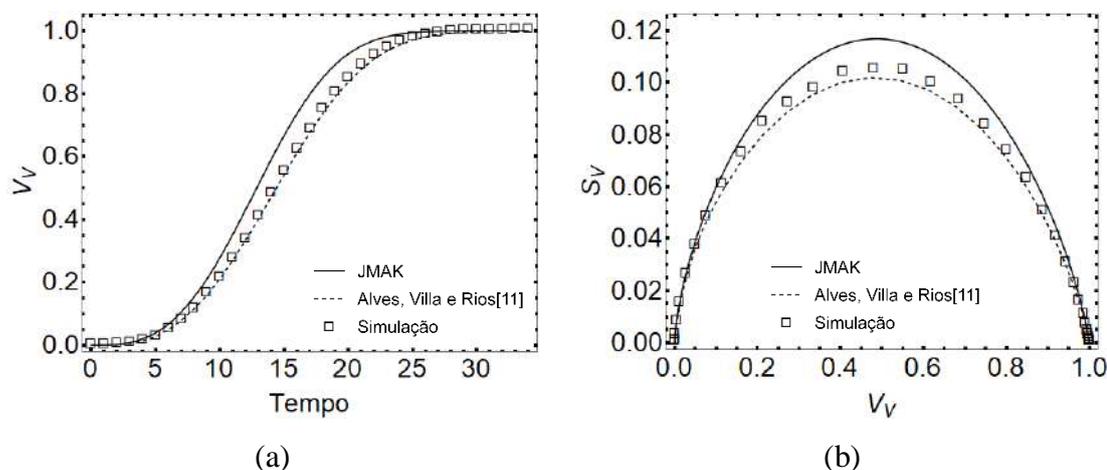


**Figura 39** – Representação da microestrutura simulada da transformação com nucleação em inclusões do Tipo C (Silicato). (a) Seção 2D da matriz demonstrando a nucleação nas inclusões no plano  $xy$ , onde  $x$  é a direção de laminação. (b) Matriz em 3D demonstrando a nucleação nas inclusões. (c) Matriz totalmente transformada.

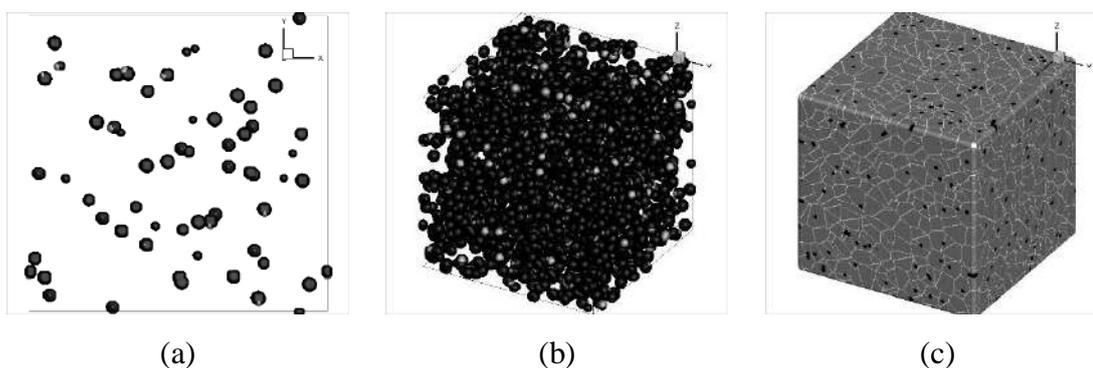
#### 6.2.4. Inclusões Tipo D (Óxido)

Nesse caso específico as inclusões não metálicas tiveram formato esférico e distribuição por Poisson homogêneo na matriz, o que tornou esse caso bastante semelhante ao caso de partículas esféricas abordado no capítulo 5. Assim, como esperado, houve uma excelente concordância entre a simulação computacional e o modelo de Alves, Villa e Rios[11] como pode ser visto na Figura 40. Para esse caso o número de inclusões não metálicas foi, de acordo com a Tabela 3, igual a 2160. O número de núcleos,  $N$ , calculado foi de 2080. Observa-se que o modelo JMAK não apresentou uma boa concordância com a simulação. Na Figura 41 mostra-

se a presença das inclusões esféricas na matriz em 2D e 3D, assim como a microestrutura totalmente transformada desse caso. Percebe-se que essa microestrutura simulada é similar às microestruturas simuladas apresentadas no capítulo 5.



**Figura 40** – Resultados da transformação com nucleação em inclusões do Tipo D (Óxido). (a)  $V_V$  versus tempo. (b) Caminho microestrutural.



**Figura 41** – Representação da microestrutura simulada da transformação com nucleação em inclusões do Tipo D (Óxido). (a) Seção 2D da matriz demonstrando a nucleação nas inclusões no plano  $xy$ , onde  $x$  é a direção de laminação. (b) Matriz em 3D demonstrando a nucleação nas inclusões. (c) Matriz totalmente transformada.

### 6.3. CONCLUSÕES

Esse capítulo realizou simulações computacionais em 3D de transformações de fase e recristalização em que a nucleação da nova fase ocorreu na interface de inclusões não metálicas dos tipos: A (Sulfeto), B (Alumina), C (Silicato) e D (Óxido), que são comumente encontradas

em aços e reportadas pela ASTM-E45[16]. Com a comparação das simulações com os modelos analíticos, concluiu-se que:

- Em todos os casos as simulações tiveram uma ótima concordância com o modelo analítico de Alves, Villa e Rios[11]. Esse fato prova que as simulações e o modelo analítico podem ser empregados no modelamento da recristalização e das transformações de fase desses materiais. Vale destacar que nenhum ajuste de curvas foi realizado.
- O novo modelo de Alves, Villa e Rios[11] foi bem aplicado, apesar das diferenças nas geometrias das partículas o modelo foi facilmente ajustado apenas se calculando um novo valor do parâmetro  $c$ , número de núcleos por partícula, e adotando-se o raio equivalente ao raio das esferas que ocupariam o mesmo volume. Para o cálculo do raio equivalente necessita-se da fração volumétrica de partículas,  $V_{VP}$ , e para o cálculo de  $c$  se faz necessário apenas o conhecimento do  $S_{VP}$  das inclusões não metálicas e do tamanho médio das inclusões, o que pode ser medido facilmente pelo experimentalista.
- Como esperado, a simulação computacional não apresentou boa concordância com o modelo de JMAK. O modelo de JMAK emprega algumas considerações, e dentre elas não está prevista a existência de partículas no espaço amostral. Além do fato de que o fenômeno da nucleação tratado nesse capítulo difere substancialmente daquele abordado por JMAK.
- A metodologia discutida no capítulo 5, que trata apenas de partículas esféricas, foi facilmente aplicada a casos em que as partículas não possuem formato esférico. Através das considerações feitas, mostrou-se que tanto modelo analítico quanto modelo computacional podem se adaptar a partículas de qualquer geometria.

## **7. SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE TRANSFORMAÇÕES SIMULTÂNEAS E SEQUENCIAIS**

Os casos abordados nesse capítulo são casos mais complexos do que a simples transformação de uma fase matriz em uma outra fase produto, transformação essa que é prevista pela maioria dos modelos. Abordou-se aqui as transformações em que a fase matriz transforma-se em duas distintas fases produto. Essa transformação em duas fases produto, pode ocorrer de maneira simultânea, onde as duas fases iniciam-se no mesmo instante, ou de maneira sequencial, onde as fases iniciam-se em tempos diferentes.

Em se tratando do modelamento das transformações simultâneas e sequenciais, Rios e Villa[12], desenvolveram métodos analíticos exatos que descrevem essas transformações, considerando que elas sejam independentes. O método analítico é capaz de fornecer de forma individualizada a cinética de transformação das fases produto. Complementando o modelo analítico, o modelamento computacional pode trazer as possíveis microestruturas que as transformações simultâneas e sequenciais podem apresentar.

Nesse sentido, em um trabalho anterior, Alves[13] simulou utilizando o método do cone causal, vários casos de transformações simultâneas e sequenciais. Porém em seu trabalho, todas as análises foram feitas utilizando a inspeção visual sobre as microestruturas 3D simuladas. Uma caracterização visual dessas microestruturas pode não ser suficiente para uma análise mais apurada. Portanto nesse capítulo, visa-se estender o trabalho de Alves[13], e analisar mais detalhadamente as microestruturas 3D. Para tal se fez uso de alguns parâmetros de caracterização microestrutural, como: o parâmetro da contiguidade, o parâmetro da dispersão, o parâmetro duplex, a distribuição dos tamanhos dos grãos ao fim das transformações e o acompanhamento do crescimento de grãos individuais.

Assim como apontado por Alves[13,14], podem existir casos em que as transformações simultâneas e sequenciais apresentem resultados semelhantes, o que causa uma dificuldade na identificação do tipo de transformação. Por exemplo, classificar se duas regiões de recristalização cada uma com um componente de textura, são transformações simultâneas ou sequenciais. Normalmente, no caso da evolução da textura, presume-se que as transformações se originem no mesmo instante de tempo [69], mas isso pode não ser verdade, as transformações podem, de fato, originar-se em diferentes instantes e, portanto, serem transformações sequenciais. Nesse sentido, fazendo-se uso dos parâmetros microestruturais citados acima, também se investigou o que acontece quando se analisa duas transformações, supondo que sejam simultâneas, quando de fato são sequenciais. Uma suposição errada sobre a natureza das duas transformações pode ter uma influência profunda nas inferências feitas sobre a nucleação e sobre as taxas de crescimento dessas transformações.

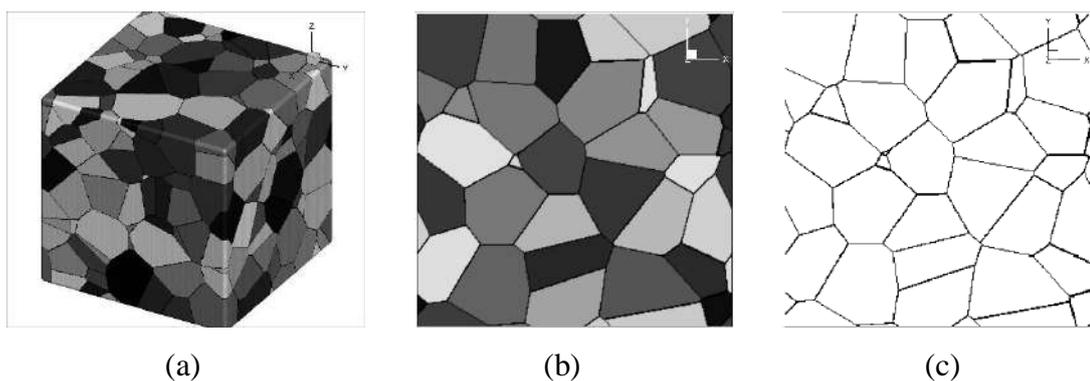
## 7.1. METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Considerou-se o comprimento de cada célula cúbica equivale a 1  $\mu\text{m}$ , assim a matriz de simulação considerada foi de 300 $\mu\text{m}$  x 300 $\mu\text{m}$  x 300 $\mu\text{m}$ . Adotou-se a saturação de sítios com o número de núcleos de cada fase produto definido por processo de ponto de Poisson homogêneo.

Como base para a transformação adotou-se uma fase matriz policristalina, onde 128 núcleos distribuídos no espaço por um processo de ponto de Poisson homogêneo a geraram. Portanto, a fase matriz policristalina teve 128 grãos com tamanho médio de grão de aproximadamente 60  $\mu\text{m}$ . Na Figura 42 mostra-se a microestrutura simulada da fase matriz.

Partindo da matriz policristalina considerou-se a transformação dela em duas fases produto distintas, denominadas, fase 1 e fase 2. As fases produto possuem número de núcleos iniciais,  $N_1$  e  $N_2$ , e velocidades de crescimento,  $G_1$  e  $G_2$ . Tanto número de núcleos quanto as velocidades são independentes, e podem assumir valores diferentes ou iguais.

Por conveniência, o tempo de incubação considerado para a segunda fase da transformação sequencial foi escolhido como sendo quando a fase produto 1 apresenta fração volumétrica transformada,  $V_{V1}$ , igual a 0,1 e 0,3. O objetivo dessa variação é enfatizar o efeito do tempo de incubação.



**Figura 42** – Representação da microestrutura simulada da fase matriz policristalina monofásica antes da transformação nas duas fases produto. (a) Microestrutura simulada em 3D, (b) Seção 2D da matriz totalmente transformada, (c) A mesma seção em 2D mostrando apenas os contornos de grão.

## 7.2. RESULTADOS

Na sequência demonstra-se alguns casos de transformações simultâneas e sequenciais, em todos eles comparou-se os resultados de simulação com o modelo analítico de Rios e Villa[12], descrito na seção 3.4. Nessas comparações os dados da simulação foram representados por pontos e os dados provenientes das equações analíticas por linhas. O coeficiente de determinação,  $R^2$ , foi calculado para todos os casos, e foi invariavelmente maior que 0,99. Não se mostrou todos os pontos de simulação para não se sobrecarregar os gráficos.

Para a comparação entre simulação e modelo analítico, mostram-se as curvas de cinética das transformações individuais e da transformação total, curva  $V_V$  versus Tempo e a curva de  $S_V$  versus  $V_V$ , o caminho microestrutural. Em todos os casos mostrou-se as microestruturas simuladas, onde a fase produto 1 é a mais clara e a fase produto 2 a mais escura. Quantificou-se sobre as microestruturas simuladas o tamanho médio dos grãos, apresentando-se a distribuição de volume final de todos eles. Também se adotou o acompanhamento de cinco grãos individuais de cada fase produto, a escolha desses grãos ocorreu de forma aleatória. Com os volumes dos grãos individuais, pôde-se calcular o raio equivalente ao raio da esfera,  $r(t)$ , através da Equação (27).

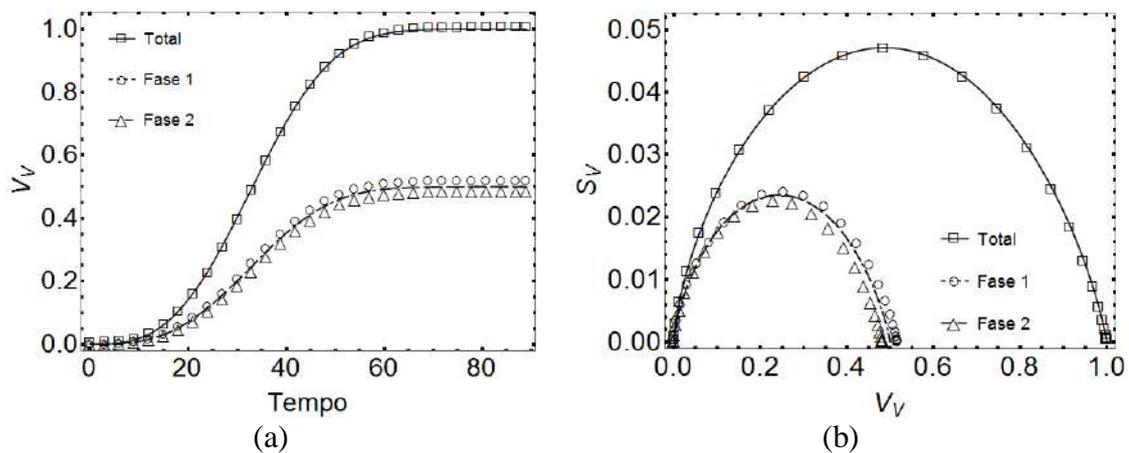
$$r(t) = \sqrt[3]{\frac{3 \text{Volume}(t)}{4\pi}} \quad (27)$$

A taxa de crescimento média desses grãos acompanhados, também foi calculada, fazendo-se  $dr/dt$ .

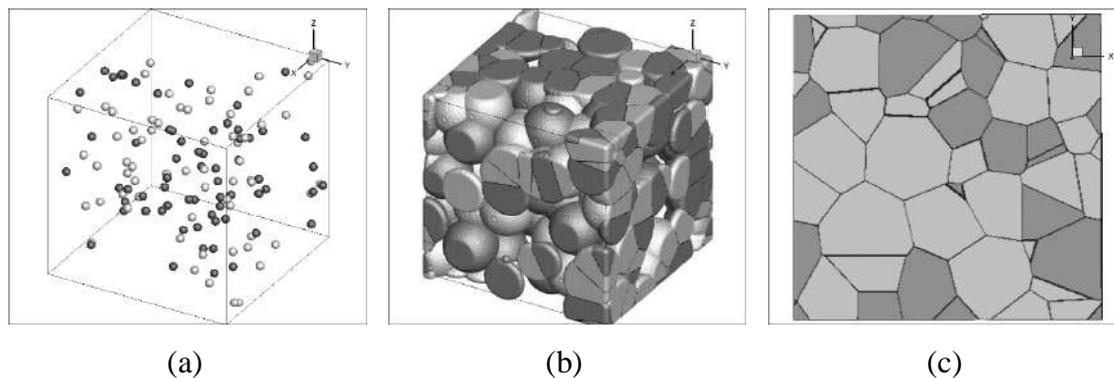
### 7.2.1. Transformações Simultâneas

#### 7.2.1.1. Transformações Simultâneas com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$

Considerou-se nesse caso uma transformação simultânea com número de núcleos  $N_1 = N_2 = 64$  e velocidades de crescimento,  $G_1 = G_2$ . Novamente, empregou-se esses valores com o objetivo de se obter grãos recristalizados com tamanho aproximado de  $60 \mu\text{m}$ . Como era de se esperar, como ambas as fases possuem os mesmos parâmetros, elas contribuem igualmente para a transformação, e no término se tem  $V_{V1} = V_{V2} = 0,5$ . Na Figura 43, observa-se uma ótima concordância entre a simulação computacional e o modelo analítico de Rios e Villa[12]. Na Figura 44 mostra-se a sua evolução microestrutural simulada, assim como a microestrutura final. Observa-se o início das duas fases no tempo inicial, evidenciando-se que se trata de uma transformação simultânea.

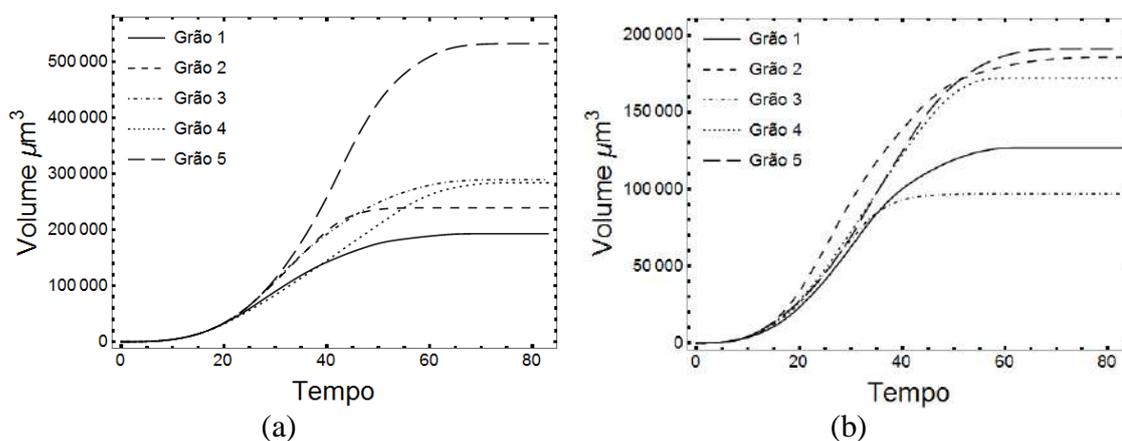


**Figura 43** – Resultados de transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.

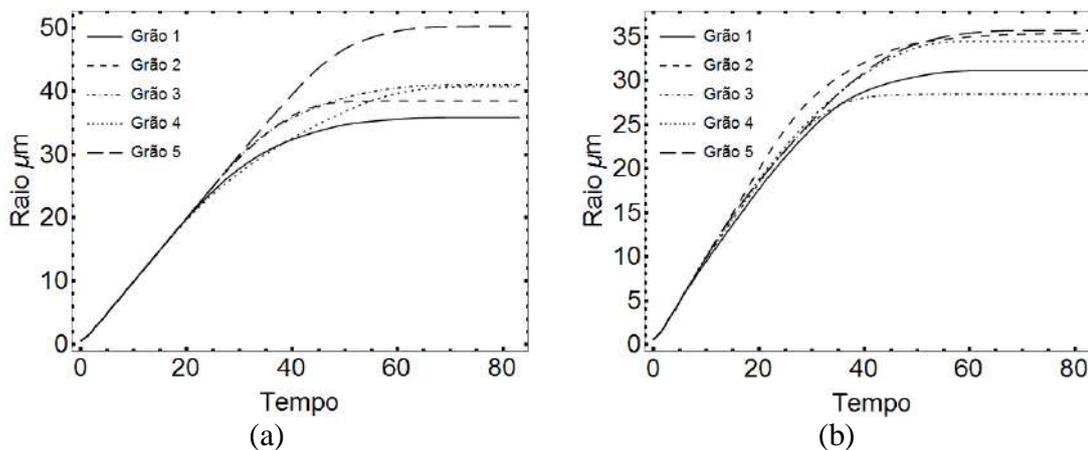


**Figura 44** – Representação da microestrutura simulada de transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$ : (a) Baixa fração volumétrica para mostrar a posição dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

Na Figura 45, tem-se a evolução volumétrica de 5 grãos de cada fase produto. Vale ressaltar que esses 5 grãos são escolhidos aleatoriamente em cada simulação, e o crescimento deles é fortemente dependente da região em que se encontram. O crescimento dos grãos é afetado pelo “*impingement*” com os grãos vizinhos, logo o grão que se situa mais afastado ou apresenta um menor número de grãos vizinhos, cresce mais. Na Figura 46 mostra-se o raio equivalente ao raio da esfera, calculado através dos volumes individuais dos 5 grãos de cada fase produto escolhidos.

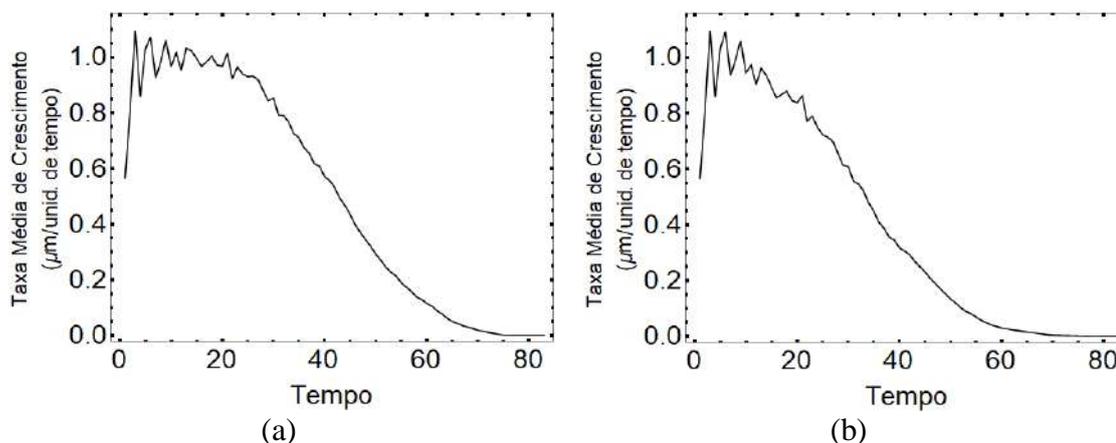


**Figura 45** – Volume dos 5 grãos de cada fase produto da transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$ : (a) fase 1, (b) fase 2.



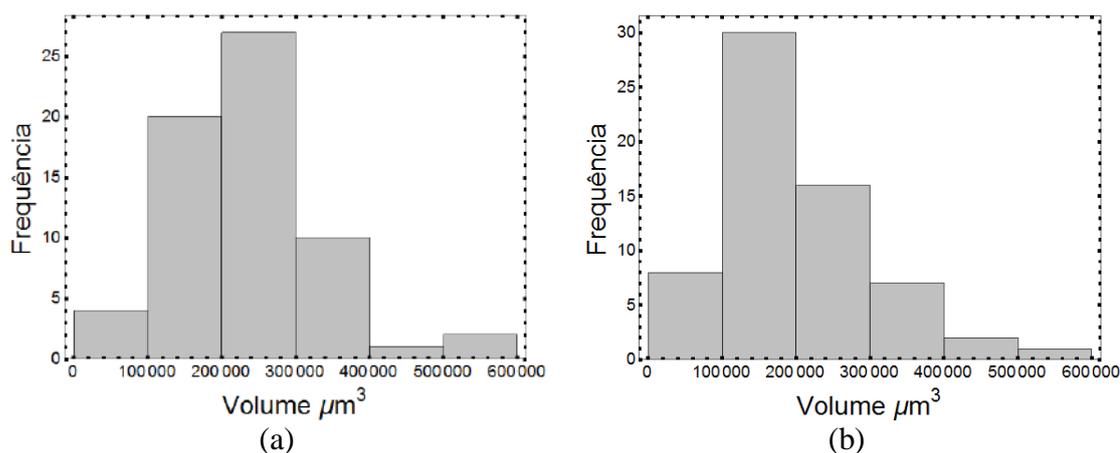
**Figura 46** – Raio equivalente ao raio da esfera dos 5 grãos de cada fase produto da transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$ : (a) fase 1, (b) fase 2.

Através da média dos raios equivalentes, pôde-se calcular a taxa de crescimento média de cada fase produto, mostradas na Figura 47. Nota-se que as duas fases têm taxas de crescimento semelhantes.



**Figura 47** – Taxa de crescimento média dos 5 grãos de cada fase produto da transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$ : (a) fase 1, (b) fase 2.

Para dimensionar o tamanho de grão médio, construiu-se a distribuição do volume final de todos os grãos de cada fase produto, Figura 48. Observa-se maiores frequências de tamanho de grão na mesma faixa para ambas as fases produto.

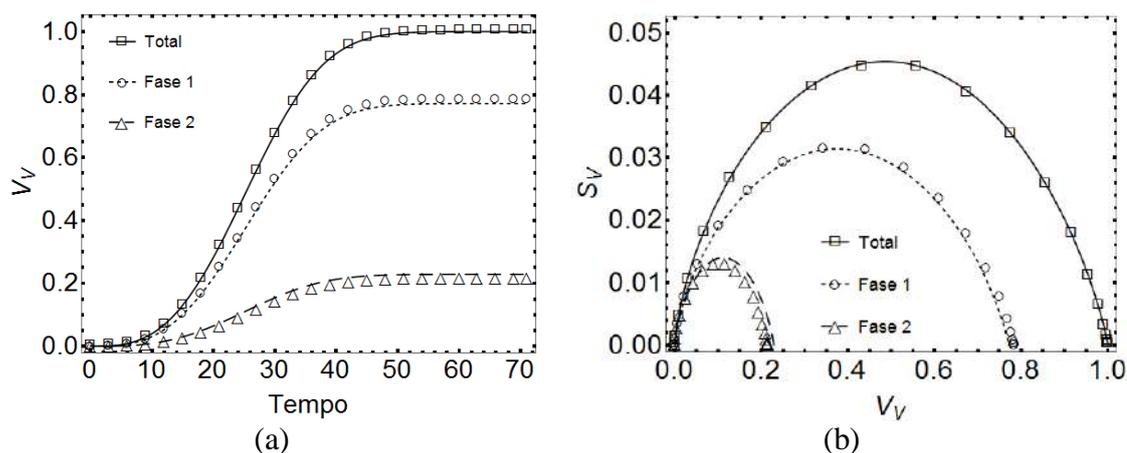


**Figura 48** – Distribuição do volume final de todos os grãos de cada fase produto da transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$ : (a) fase 1, (b) fase 2.

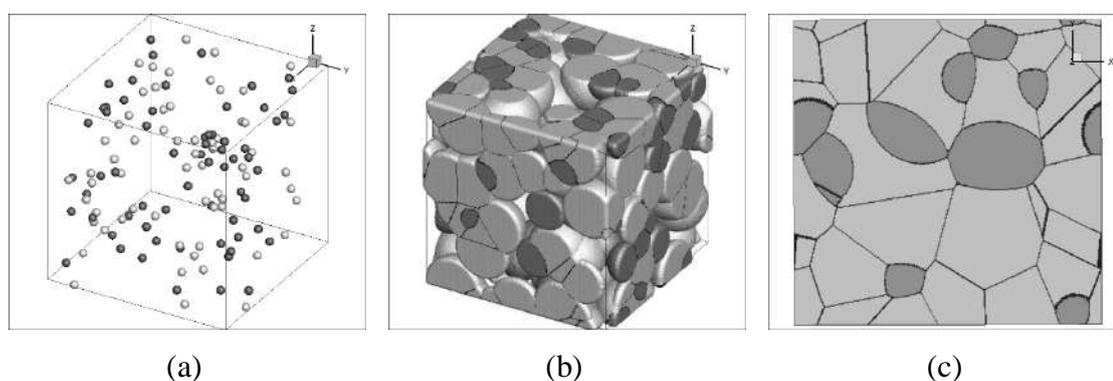
### 7.2.1.2. Transformações Simultâneas com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = 1,5G_2$

Da seção anterior, observou-se que em uma transformação simultânea com os mesmos parâmetros para as fases produto, têm-se contribuições bastante semelhantes de cada fase produto. Variando-se, por exemplo, as velocidades de crescimento das fases produto, pode-se impor uma diferenciação na cinética das transformações. Na Figura 49 mostra-se as curvas para  $G_1 = 1,5G_2$ . O número de núcleos de cada fase é mantido  $N_1 = N_2 = 64$ . Com estes parâmetros observa-se, como esperado, uma contribuição maior da fase produto 1. Mais uma vez se tem boa concordância entre a simulação e o modelo analítico. Como as duas fases se iniciam no tempo inicial e tem o mesmo número de núcleos, ao se escolher o caso oposto, isto é,  $G_2 = 1,5G_1$ , se tem os mesmos valores absolutos, mas com a inversão da fase 1 pela fase 2.

Na Figura 50 tem-se a microestrutura simulada deste caso. Observando-se a Figura 50-c, nota-se uma diferença nas curvaturas das interfaces. As interfaces entre os grãos da mesma fase, são retas, já as interfaces entre os grãos da fase 1 e da fase 2, que apresentam diferentes velocidades de crescimento, apresentam curvaturas. Isso se dá pelo fato da fase mais rápida envolver a fase mais lenta.

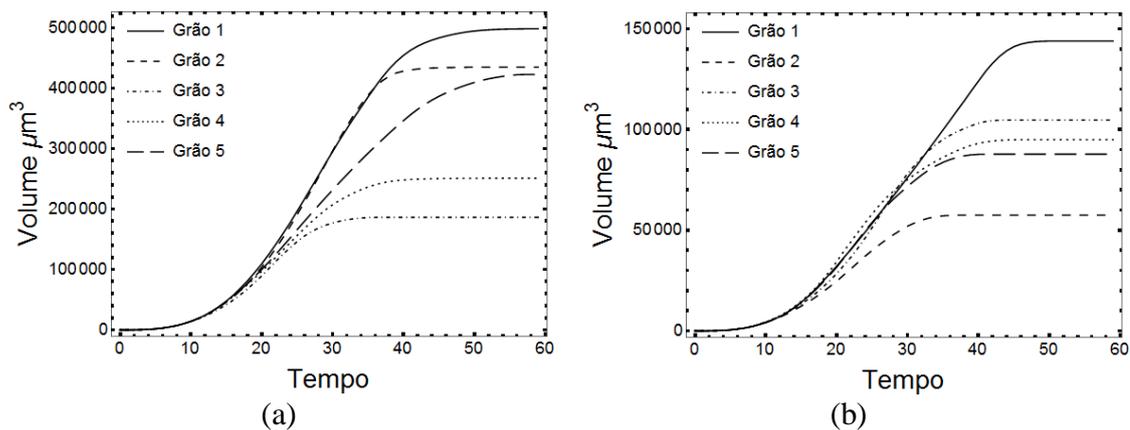


**Figura 49** – Resultados de transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = 1,5G_2$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.

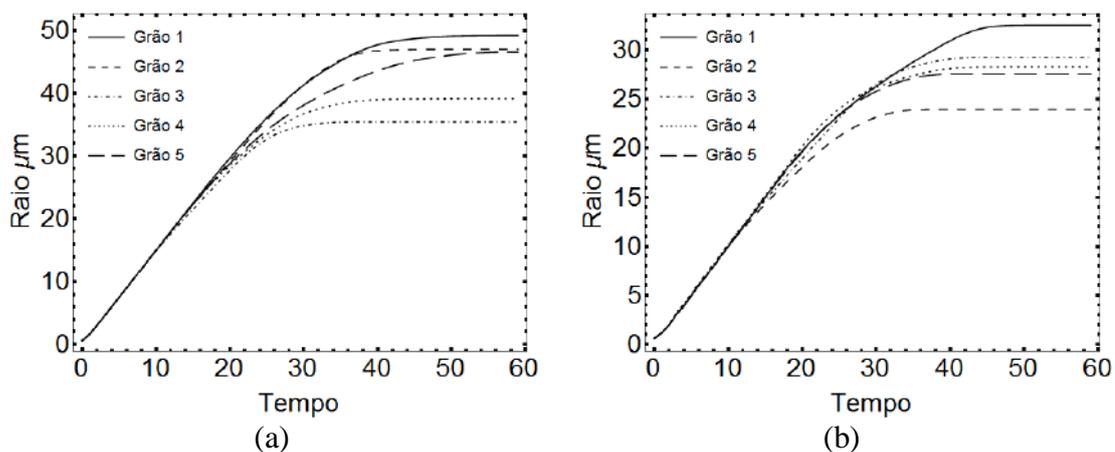


**Figura 50** – Representação da microestrutura simulada de transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = 1,5G_2$ : (a) Baixa fração volumétrica para mostrar a posição dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

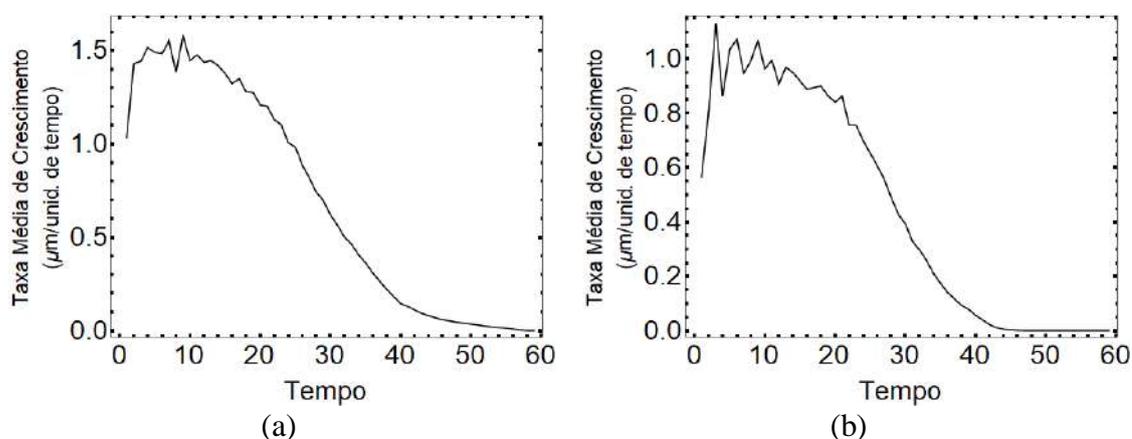
Na Figura 51, tem-se a evolução volumétrica dos 5 grãos de cada fase. Observa-se que os grãos da fase 2 tem tamanho menor, o que condiz com a sua microestrutura, Figura 50. Na Figura 52 mostra-se o raio equivalente ao raio da esfera, calculado. Novamente através da média dos raios equivalentes, pôde-se calcular a taxa de crescimento média de cada fase, Figura 53 onde observa-se claramente que a fase 1 tem taxa de crescimento média 1,5 vezes maior que a taxa da fase 2.



**Figura 51** – Volume dos 5 grãos de cada fase produto da transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = 1,5G_2$ : (a) fase 1, (b) fase 2.

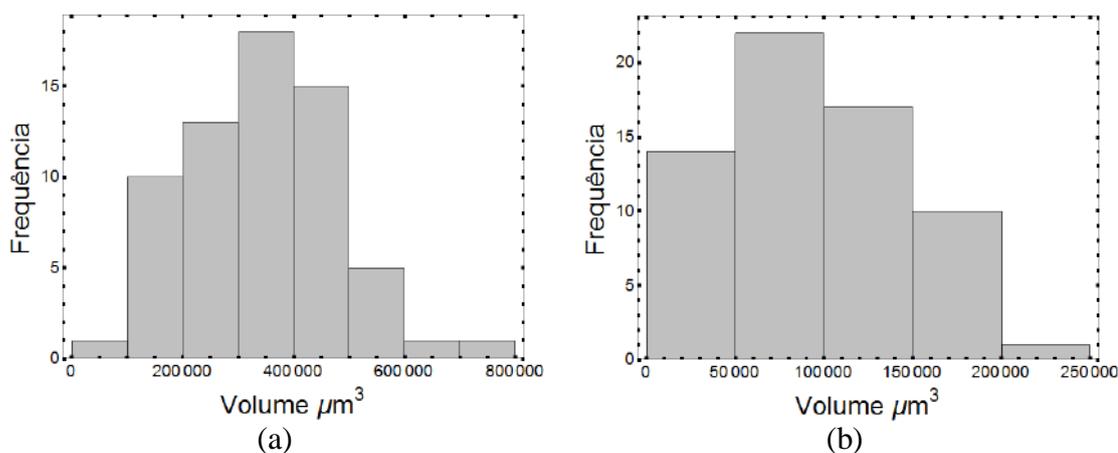


**Figura 52** – Raio equivalente ao raio da esfera dos 5 grãos de cada fase produto da transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = 1,5G_2$ : (a) fase 1, (b) fase 2.



**Figura 53** – Taxa de crescimento média dos 5 grãos de cada fase produto da transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = 1,5G_2$ : (a) fase 1, (b) fase 2.

Na Figura 54, pode-se observar a distribuição do volume final de todos os grãos de cada fase produto. Como citado anteriormente, além da fase 2 ter menor contribuição, também é menor o seu tamanho de grão médio.



**Figura 54** – Distribuição do volume final de todos os grãos de cada fase produto da transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = 1,5G_2$ : (a) fase 1, (b) fase 2.

## 7.2.2. Transformações Sequenciais

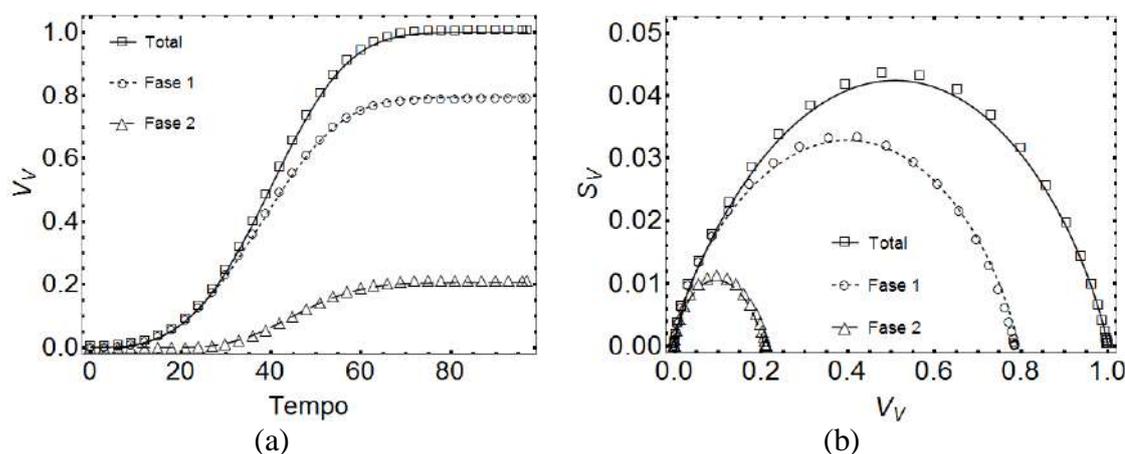
### 7.2.2.1. Transformações Sequenciais com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ e Nucleação da Fase

#### Produto 2 em $V_V = 0,1$

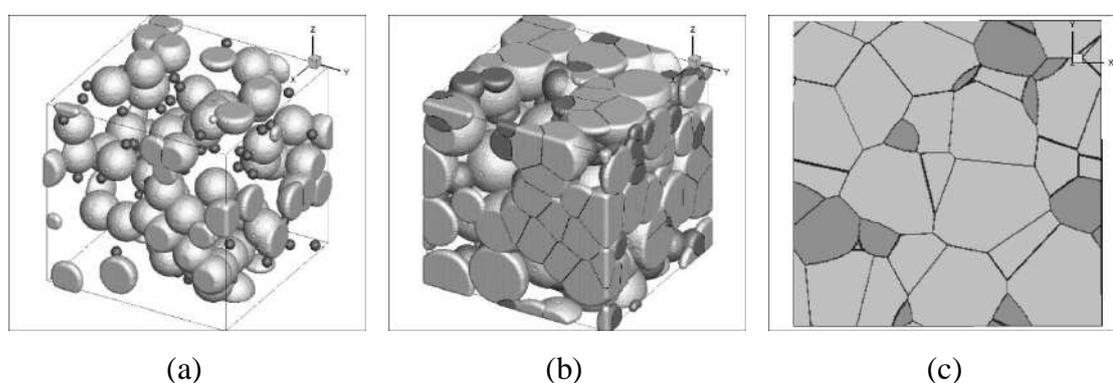
Para o caso das transformações sequenciais, também se considerou  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$ . Na Figura 55, a nucleação da fase produto 2 ocorreu quando a fase produto 1 atingiu  $V_{V1} = 0,1$ . A simulação nesse caso também apresentou uma boa concordância com a metodologia analítica de Rios e Villa[12]. Na Figura 56 apresenta-se a microestrutura simulada dessa transformação sequencial. Nota-se claramente a nucleação da fase 2 ocorrendo quando  $V_{V1} = 0,1$ .

Comparando-se a transformação sequencial em que a nucleação da fase produto 2 ocorreu quando a fase produto 1 atingiu  $V_{V1} = 0,1$ , Figura 55, com a transformação simultânea com os mesmos parâmetros, Figura 43, visualiza-se que a fase 2 da transformação sequencial tem uma menor contribuição em volume do que a fase 2 da transformação simultânea. Nesses casos o número de núcleos e as velocidades de crescimento, são iguais, a única diferença é o

tempo de incubação da fase 2, logo, a fase 1 da transformação sequencial domina a transformação, para uma relativamente pequena vantagem sobre a fase 2, uma fração volumétrica transformada inicial de 0,1. Este domínio se dá, devido ao aspecto sigmoidal da curva da cinética, quando a fase 2 começa ela ainda encontra-se crescendo lentamente, enquanto que a fase 1 já atingiu a região de elevada taxa de crescimento. Assim, a fase 1 domina a transformação.

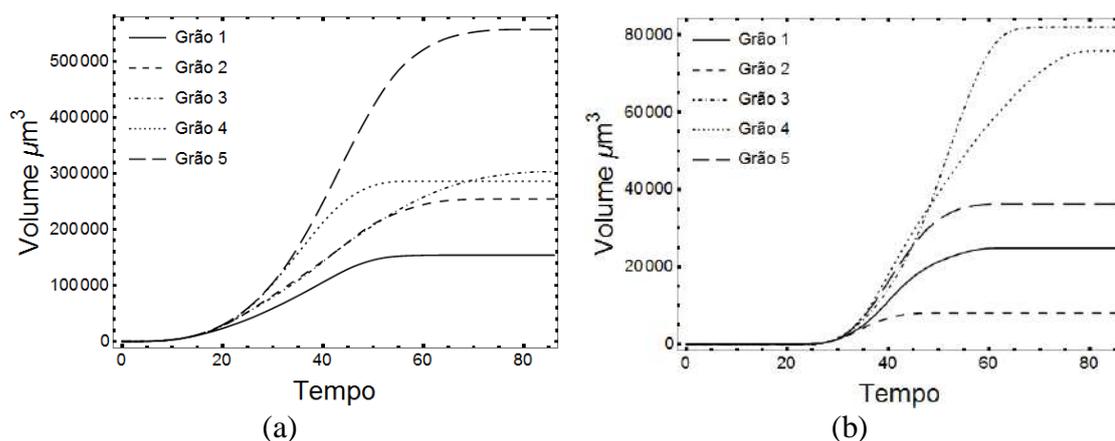


**Figura 55** – Resultados de transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.

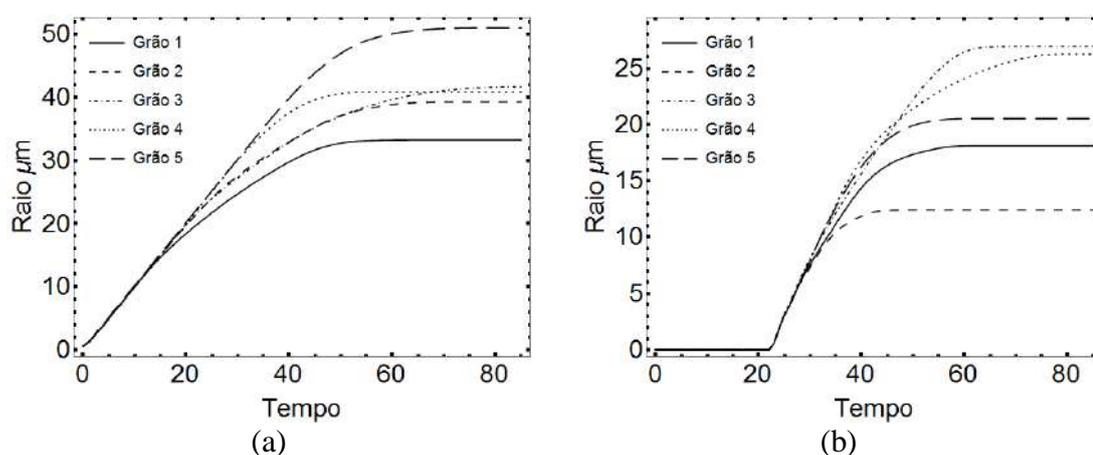


**Figura 56** – Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a)  $V_{V1} = 0,1$  mostrando a nucleação da fase produto 2, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

Na Figura 57 apresenta-se a evolução volumétrica dos 5 grãos de cada fase produto. Na Figura 58 tem-se o raio equivalente ao raio da esfera calculado.

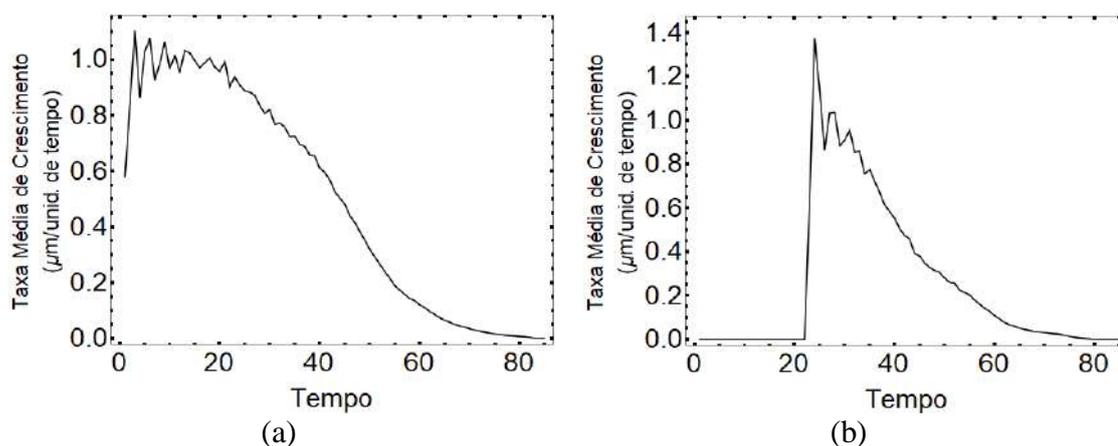


**Figura 57** – Volume dos 5 grãos de cada fase produto da transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a) fase 1, (b) fase 2.



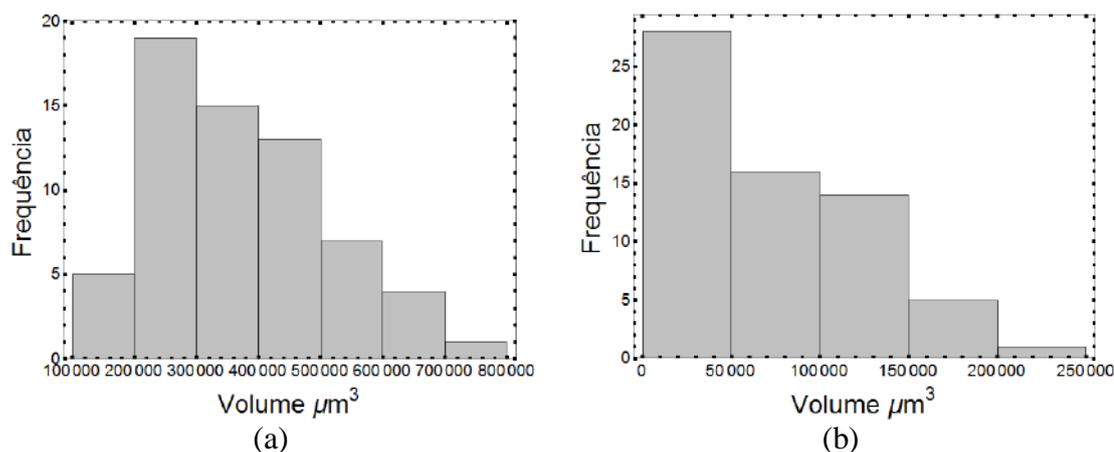
**Figura 58** – Raio equivalente ao raio da esfera dos 5 grãos de cada fase produto da transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a) fase 1, (b) fase 2.

Com a média dos raios equivalentes, calculou-se a taxa de crescimento média de cada fase produto, Figura 59, observa-se um pico na taxa de crescimento média da fase 2. Acredita-se que esse pico ocorra, pois, ao iniciar-se a maioria dos grãos da fase 2 ainda não sofre com o “impingement”.



**Figura 59** – Taxa de crescimento média dos 5 grãos de cada fase produto da transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a) fase 1, (b) fase 2.

Através da distribuição do volume final de todos os grãos de cada fase produto, mostrada na Figura 60, observa-se neste caso que os grãos da fase 2 tem tamanho muito menor, o que confirma o observado na sua microestrutura, Figura 56. Este tamanho de grão, significativamente menor da fase 2 também pode ser explicado pelo domínio da fase 1. Devido ao domínio existente da fase 1, ela ocupa uma maior proporção do volume, logo os grãos da fase 2 sofrem com o “*impingement*” mais precocemente e têm seu crescimento prejudicado.



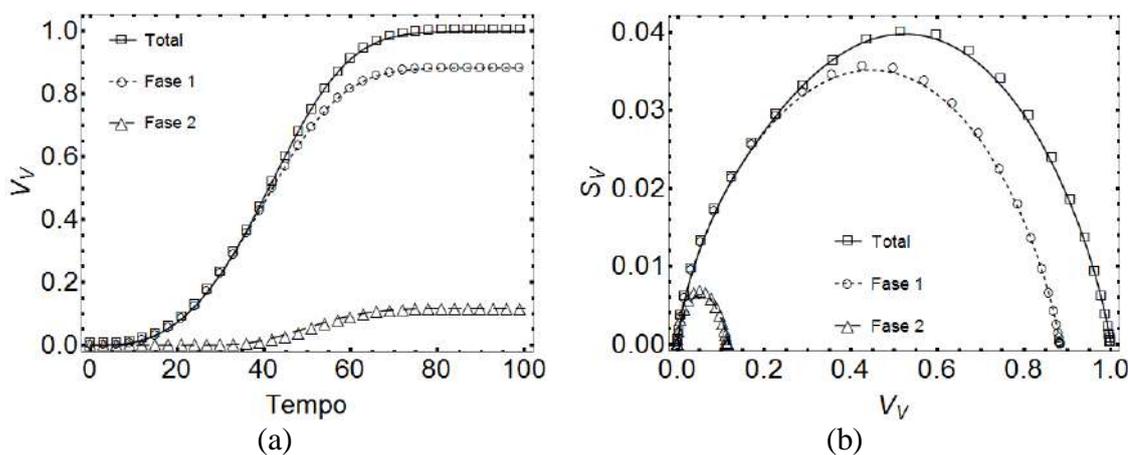
**Figura 60** – Distribuição do volume final de todos os grãos de cada fase produto da transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a) fase 1, (b) fase 2.

### 7.2.2.2. Transformações Sequenciais com $N_1 = N_2 = 64$ e $G_1 = G_2$ e Nucleação da Fase

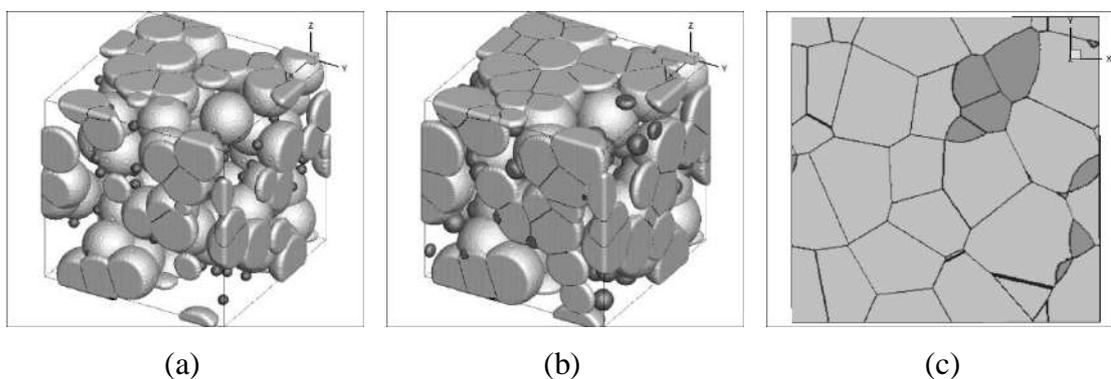
#### Produto 2 em $V_V = 0,3$

Com a intenção de se enfatizar o efeito do tempo de incubação da fase 2 dessas transformações sequenciais, demonstra-se na Figura 61, uma transformação sequencial que possui novamente  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$ , porém agora a nucleação da fase produto 2 ocorreu quando a fase produto 1 atingiu  $V_{V1} = 0,3$ . Existe uma boa concordância entre o modelo analítico e a simulação. Na Figura 62 apresenta-se a microestrutura simulada desse caso.

Como previsto por Rios e Villa[12], quando a vantagem da fase 1 sobre a fase 2 aumenta para uma fração volumétrica transformada inicial de 0,3, o domínio da fase 1 é ainda maior, como observa-se na Figura 62.

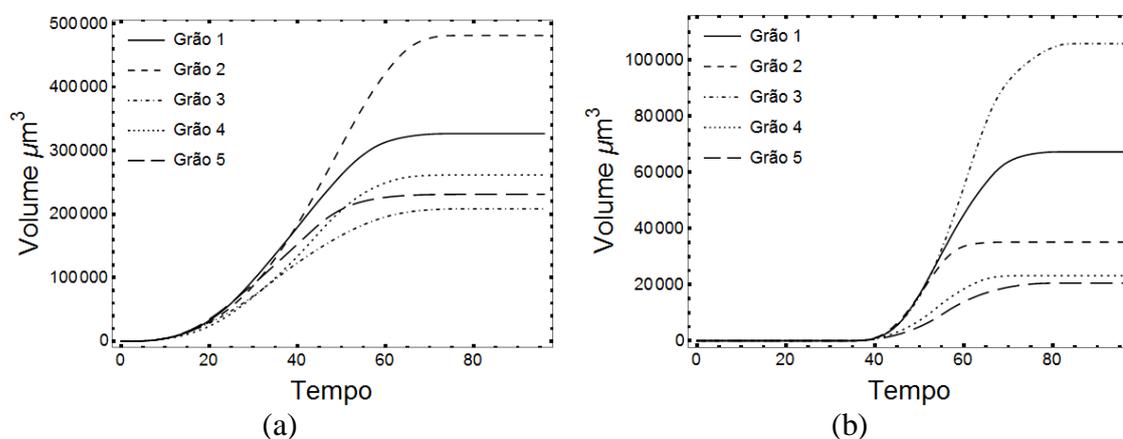


**Figura 61** – Resultados de transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,3$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.

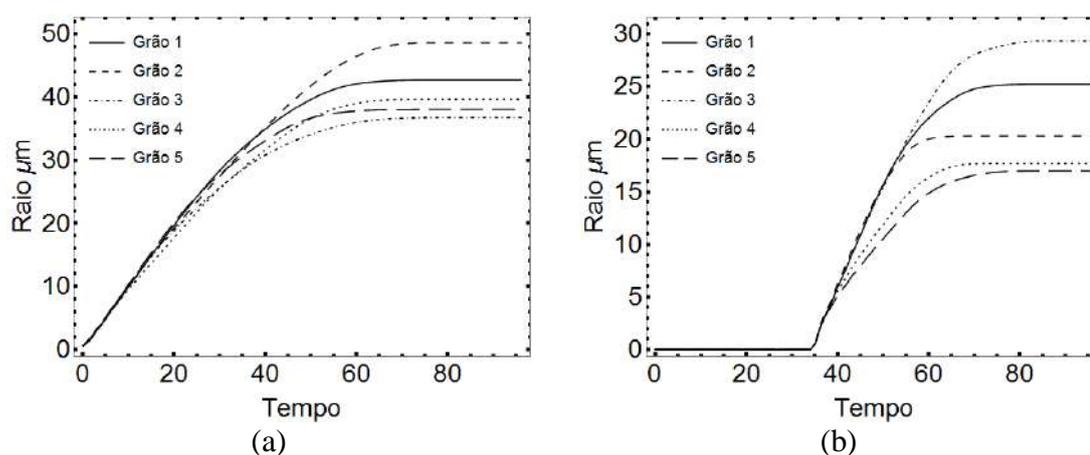


**Figura 62** – Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,3$ : (a)  $V_{V1} = 0,3$  mostrando a nucleação da fase produto 2, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

Na Figura 63 apresenta-se a evolução volumétrica dos 5 grãos de cada fase produto. Através dessas medidas calculou-se o raio equivalente ao raio da esfera, Figura 64.

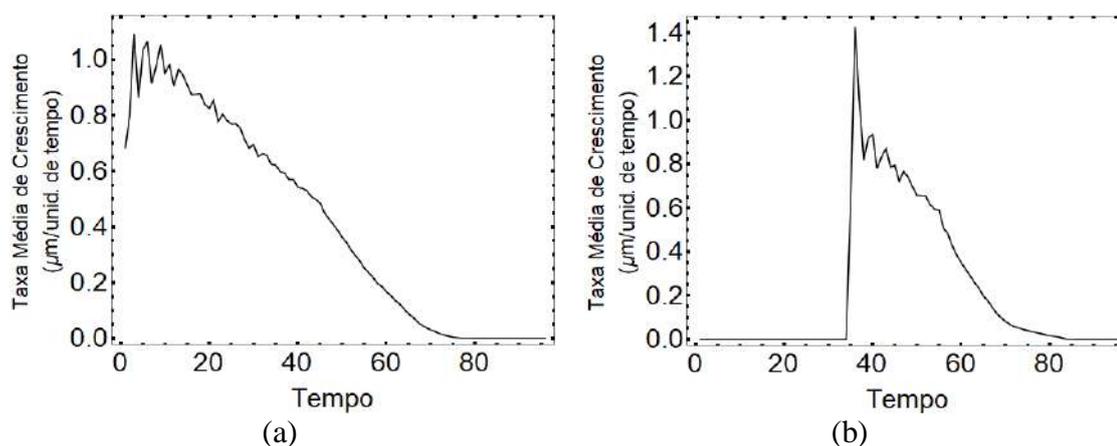


**Figura 63** – Volume dos 5 grãos de cada fase produto da transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,3$ : (a) fase 1, (b) fase 2.



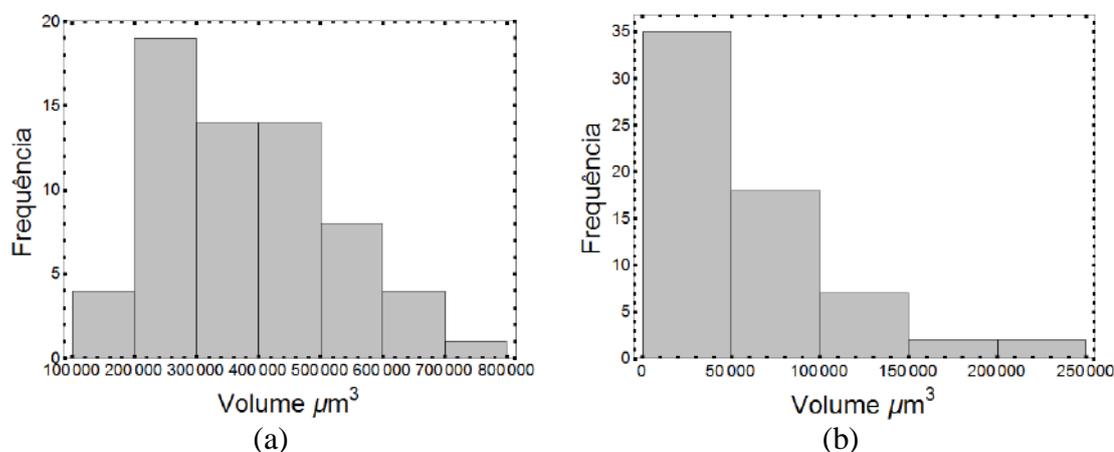
**Figura 64** – Raio equivalente ao raio da esfera dos 5 grãos de cada fase produto da transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,3$ : (a) fase 1, (b) fase 2.

Novamente, calculou-se a taxa de crescimento média de cada fase produto, Figura 65. Assim como o observado na Figura 59, novamente observa-se um pico na taxa média de crescimento da fase 2.



**Figura 65** – Taxa de crescimento média dos 5 grãos de cada fase produto da transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,3$ : (a) fase 1, (b) fase 2.

Na Figura 66 mostra-se a distribuição do volume final de todos os grãos de cada fase produto desta transformação. Pode-se observar que os grãos da fase 2 tem tamanho ainda menor, quando comparada à distribuição mostrada na Figura 60, como era de se esperar uma vez que o tempo de incubação foi ainda maior nesse caso, favorecendo assim a fase produto 1.



**Figura 66** – Distribuição do volume final de todos os grãos de cada fase produto da transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,3$ : (a) fase 1, (b) fase 2.

## 7.3. DISCUSSÃO

### 7.3.1. Descritores Microestruturais para Materiais Multifásicos

Como mostrado na seção anterior, a microestrutura é a grande vantagem que a simulação computacional tem sobre os métodos analíticos. Para aproveitar ao máximo as informações contidas na microestrutura, é necessário definir parâmetros que melhorem a caracterização de cada fase. Estes parâmetros podem ser difíceis, se possíveis, de se calcular analiticamente, mas podem ser mensurados a partir da simulação.

Destaca-se ainda que algumas transformações podem não ser muito sensíveis à curva cinética,  $V_V$  versus Tempo, ou ao caminho microestrutural. Nesse contexto é importante ser mais preciso quanto ao significado de “*sensibilidad*” de um parâmetro. Matematicamente, dois números são iguais ou não, isto é, se dois números diferem em qualquer quantidade, digamos, em 0,1% ou 0,01%, eles são diferentes. No entanto, quando se trata de quantidades determinadas experimentalmente a situação é diferente, devido principalmente aos resultados experimentais estarem sujeitos a erros experimentais. Por exemplo,  $\pm 5\%$  é um erro experimental razoável para uma boa prática metalográfica, assim, para duas transformações, se um parâmetro é capaz de diferir de outro por 2%, não há sentido se distinguir essas duas transformações, pois a diferença está bem abaixo dos erros experimentais. Portanto, a questão não é apenas medir e definir parâmetros para caracterizar as transformações, mas parâmetros que são sensíveis o suficiente para que suas diferenças estejam acima dos erros experimentais.

Partindo-se dessa premissa, nesta seção definiu-se primeiramente parâmetros para a situação em que duas fases produto se formam a partir de uma fase matriz. Após essa primeira etapa buscou-se também generalizar esses parâmetros para situações em que duas ou mais fases produto se formam. Quando três fases estão presentes na transformação, isto é, inicialmente tem-se a matriz policristalina, posteriormente com o surgimento das fases produto 1 e 2, têm-se as três fases e no final da transformação a fase matriz é totalmente consumida, restando apenas as fases produto 1 e 2, há muito mais parâmetros que podem ser definidos do que quando ocorre a transformação da matriz em uma fase produto.

A primeira definição que se faz necessária é a Equação (28), área superficial total de fases produto por unidade de volume,  $S_V^{Tot}$ .

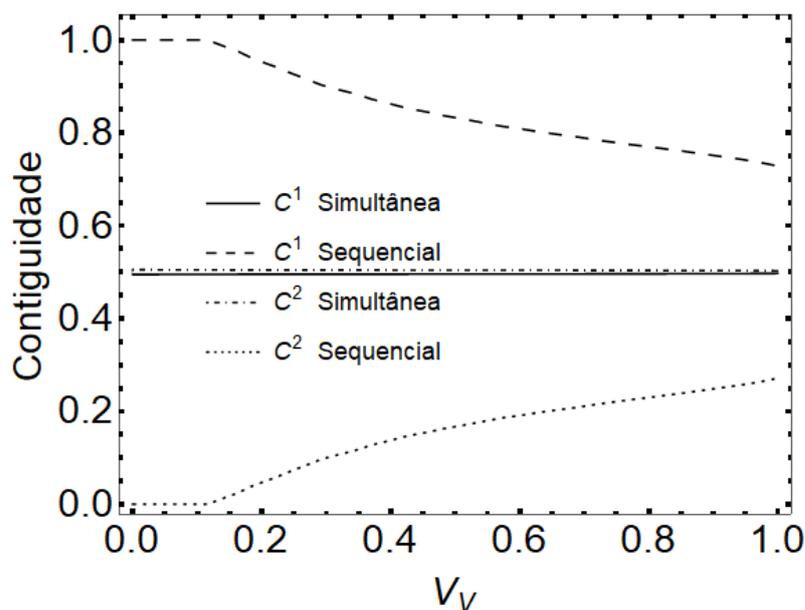
$$S_V^{Tot} = 2S_V^{11} + 2S_V^{22} + 2S_V^{12} + S_V^{1M} + S_V^{2M} \quad (28)$$

Onde,  $S_V^{11}$  é a área interfacial por unidade de volume entre fase 1 e fase 1.  $S_V^{22}$  é a área interfacial por unidade de volume entre fase 2 e fase 2.  $S_V^{12}$  é a área interfacial por unidade de volume entre fase 1 e fase 2 e o caso oposto, isto é, a área interfacial por unidade de volume entre fase 2 e fase 1.  $S_V^{1M}$  é a área interfacial por unidade de volume entre fase 1 e a matriz ou região não transformada e  $S_V^{2M}$  é a área interfacial por unidade de volume entre fase 2 e a matriz.

De posse de  $S_V^{Tot}$  pode-se fazer a primeira definição do parâmetro da contiguidade para casos em que se tem a formação de duas fases produto, assim relacionando todas as possíveis áreas superficiais das fases produto, define-se a contiguidade total da fase 1, Equação (29), e de forma análoga a contiguidade total da fase 2, Equação (30). Note que  $C^1 = 1 - C^2$ . Na Figura 67 mostra-se as Equações (29) e (30) aplicadas às transformações simultâneas e sequenciais em que  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$  e, no caso da sequencial a nucleação da fase 2 ocorreu quando  $V_{V1} = 0,1$ . Essas transformações simultâneas e sequenciais foram mostradas na seção anterior, nas Figuras 43 e 55, respectivamente. A única diferença entre elas é que, na transformação sequencial, a fase 2 surgiu quando a fase 1 atingiu  $V_{V1} = 0,1$ .

$$C^1 = \frac{2S_V^{11} + S_V^{12} + S_V^{1M}}{S_V^{Tot}} \quad (29)$$

$$C^2 = \frac{2S_V^{22} + S_V^{12} + S_V^{2M}}{S_V^{Tot}} \quad (30)$$



**Figura 67** – Contiguidade total de cada fase produto versus  $V_V$  para a transformação simultânea e sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$  em ambas as transformações. A única diferença é que, na transformação sequencial, a fase 2 surgiu quando a fase 1 atingiu  $V_{V1} = 0,1$ .

Pela Figura 67, nota-se claramente que a contiguidade total de cada fase produto,  $C^1$  e  $C^2$ , das transformações simultâneas e sequenciais são completamente diferentes.  $C^1$  e  $C^2$  para a transformação simultânea são iguais e constantes durante toda a transformação. Isso era esperado, pois ambas as fases têm o mesmo número de núcleos e a mesma velocidade de crescimento. Para a transformação sequencial,  $C^1$  e  $C^2$  tem um comportamento muito distinto. A  $C^1$  é alta na transformação sequencial porque no início da transformação existe apenas a fase 1 e ela permanece constante até a fase 2 surgir. O oposto acontece com  $C^2$ , ela é constante e igual a zero no começo porque a fase 2 ainda não existe.

Embora as contiguidades definidas acima distingam bem o comportamento das transformações, seu uso em casos reais pode ser complexo, haja vista a necessidade de se quantificar diversas áreas interfaciais dos diferentes produtos gerados pela transformação. Assim, buscando-se uma maneira mais simplificada de se definir as contiguidades almejou-se reter a forma da Equação (18), que trata de parâmetros para quando há apenas uma fase produto. A maneira mais natural de se fazer isso foi manter-se a forma da Equação (18) e aplicá-la para quando há outras interfaces, assim define-se outras três contiguidades. A contiguidade da fase produto 1,  $C^{11}$ , Equação (31), a contiguidade da fase produto 2,  $C^{22}$ , Equação (32), e a contiguidade entre as fases produto,  $C^{12}$ , Equação (33).

$$C^{11} = \frac{2S_V^{11}}{2S_V^{11} + S_V^{1M}} \quad (31)$$

$$C^{22} = \frac{2S_V^{22}}{2S_V^{22} + S_V^{2M}} \quad (32)$$

$$C^{12} = \frac{2S_V^{12}}{2S_V^{12} + S_V^{1M} + S_V^{2M}} \quad (33)$$

É fácil notar que as Equações (31-33) retêm a simplicidade da Equação (18). Elas podem ainda ser facilmente generalizadas para materiais multifásicos, assumindo a forma das Equações (34) e (35).

$$C^{ii} = \frac{2S_V^{ii}}{2S_V^{ii} + S_V^{iM}} \quad (34)$$

$$C^{ij} = \frac{2S_V^{ij}}{2S_V^{ij} + S_V^{iM} + S_V^{jM}} \quad (35)$$

Onde “ $i$ ” e “ $j \neq i$ ”, correspondem às fases produto numeradas de 1 a  $n$ .

Até aqui definiu-se parâmetros em que não se envolveu as áreas interfaciais da fase matriz policristalina,  $S_V^{MM}$ , todavia, o consumo de  $S_V^{MM}$  ao longo da transformação pode dar preciosas informações a respeito dessa transformação. Assim, levando-se em conta a  $S_V^{MM}$ , pode-se propor a dispersão de cada fase produto,  $\delta^1$  e  $\delta^2$ , através das Equações (36) e (37), respectivamente.

$$\delta^1 = \frac{S_V^{1M}}{S_V^{MM}} \quad (36)$$

$$\delta^2 = \frac{S_V^{2M}}{S_V^{MM}} \quad (37)$$

Nota-se que estes parâmetros são formalmente idênticos ao parâmetro de dispersão proposto por Hornbogen[62], Equação (19). Para transformações com mais de duas fases produto, generaliza-se as Equações (36) e (37) através da Equação (38).

$$\delta^i = \frac{S_V^{iM}}{S_V^{MM}} \quad (38)$$

Da mesma maneira, também se pode definir o parâmetro duplex de cada fase produto,  $\Delta^1$  e  $\Delta^2$ , pelas Equações (39) e (40).

$$\Delta^1 = \frac{S_V^{11}}{S_V^{MM}} \quad (39)$$

$$\Delta^2 = \frac{S_V^{22}}{S_V^{MM}} \quad (40)$$

E generalizando esse parâmetro para mais de duas fases produto, tem-se a Equação (41).

$$\Delta^i = \frac{S_V^{ii}}{S_V^{MM}} \quad (41)$$

Embora se tenha definido o parâmetro duplex para cada fase produto, Fonseca et. al.[61] mostraram que na transformação em que se forma uma única fase produto, a contiguidade e a dispersão foram suficientes para uma melhor descrição da evolução microestrutural. O mesmo aconteceu em trabalhos preliminares desta tese, portanto, optou-se por apenas se mostrar nessa seção os parâmetros multifásicos da contiguidade e da dispersão.

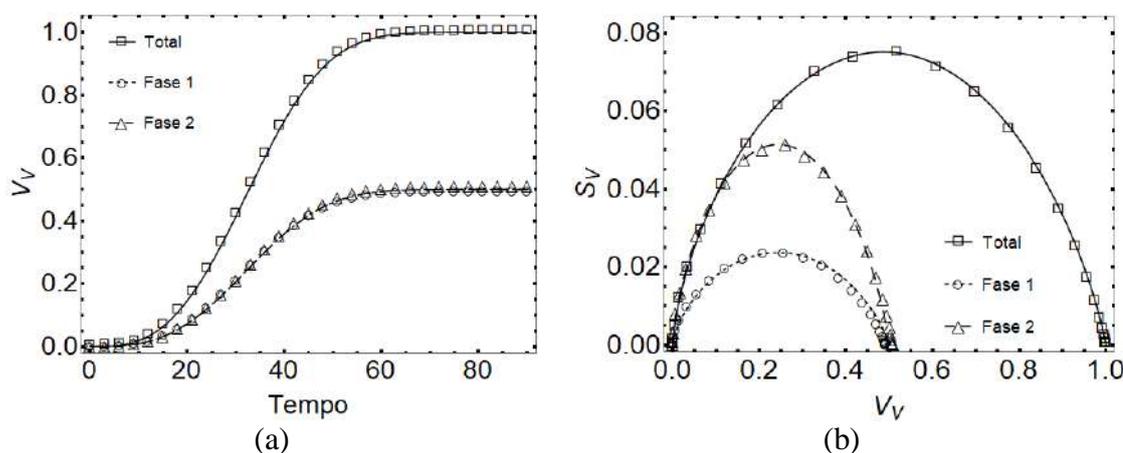
Para melhor elucidar os parâmetros acima propostos, Equações (31-41), aplicou-se os mesmos a três casos de transformações simultâneas e sequenciais distintos. O primeiro caso é o de duas transformações simultâneas em que cada fase produto tem o mesmo número de núcleos e mesma velocidade, Figura 43. Esse caso servirá de referência, uma vez que todos os parâmetros das fases produto foram iguais. O segundo caso considera duas transformações simultâneas em que a fase produto 2 tem dez vezes mais núcleos que a fase produto 1. Nesse caso, manteve-se, assim como no primeiro caso,  $V_{V1} = V_{V2}$  compensando-se a velocidade de crescimento das fases produto. O terceiro caso leva em conta duas transformações sequenciais

em que a fase produto 2 iniciou-se quando a fase produto 1 atingiu  $V_{V1} = 0,1$ , Figura 55, a única diferença desse terceiro caso com o primeiro caso é que a fase produto 2 surgiu depois de a fase produto 1 ter atingido  $V_{V1} = 0,1$ .

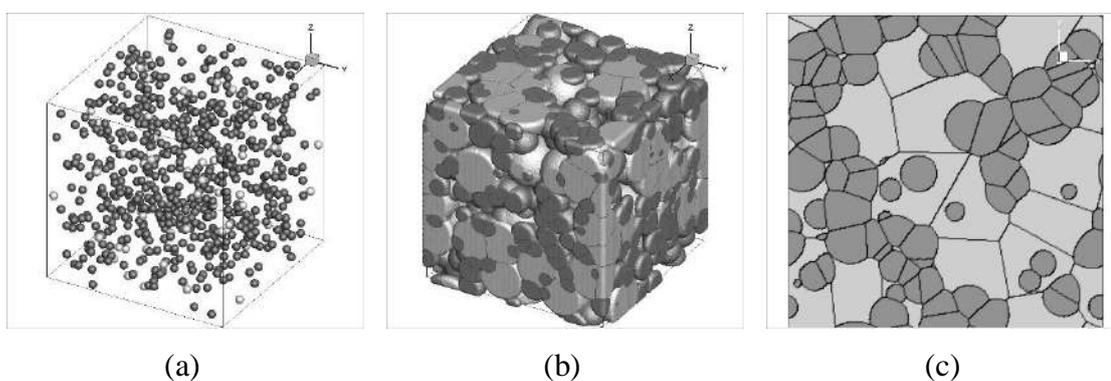
A transformação simultânea do segundo caso utilizou os seguintes parâmetros,  $N_1 = 64$  e  $N_2 = 640$  e velocidades de crescimento  $G_1 = 1 \mu\text{m}/\text{unidade de tempo}$  e  $G_2 = \sqrt[3]{\frac{N_1 G_1^3}{N_2}} \cong 0,46 \mu\text{m}/\text{unidade de tempo}$ . Com esses parâmetros tem-se que  $N_1 G_1^3 = N_2 G_2^3$  e conseqüentemente  $V_{V1} = V_{V2}$ , como é mostrado na Figura 68. Essa escolha objetivou manter  $V_{V1} = V_{V2}$ , da mesma maneira que o primeiro caso, mostrado na Figura 43, mas com uma microestrutura bastante diferente, como pode-se ver claramente, comparando-se a Figura 44 com a Figura 69, que mostra a evolução microestrutural desse segundo caso. No caso da Figura 69, a menor velocidade e maior número de núcleos da fase produto 2 resultou em a fase 2 ter um número maior de grãos, porém grãos menores do que a fase 1, o que gerou uma microestrutura da fase 2 bastante distinta da fase 1, em contraste com a Figura 44, em que ambas as fases 1 e 2 tiveram microestruturas idênticas, refletindo as cinéticas também idênticas,  $V_{V1} = V_{V2}$ . A vantagem de se comparar esses dois primeiros casos é que como em ambos  $V_{V1} = V_{V2}$  e as microestruturas são diferentes pôde-se eliminar o efeito da cinética nos parâmetros microestruturais estudados.

Vale se destacar que a microestrutura da Figura 69 também se difere bastante da microestrutura do terceiro caso, a transformação sequencial em que a fase produto 2 iniciou-se quando a fase produto 1 atingiu  $V_{V1} = 0,1$ , mostrada na Figura 56.

Na Figura 68-b mostra-se a diferença entre o caminho microestrutural das fases produto 1 e 2 desse segundo caso. Nota-se que como a fase 2 tem mais grãos, porém grãos menores que a fase 1, a área interfacial da fase 2 é maior que a da fase 1, assim, a área interfacial total para ambas as fases é maior na Figura 68-b do que na Figura 43-b. Além disso, os caminhos microestruturais na Figura 68-b também são típicos de transformações que ocorrem por saturação de sítios, ou seja, simétricos com o ponto máximo aproximadamente na metade da transformação.



**Figura 68** – Resultados de transformação simultânea com  $N_1 = 64$  e  $N_2 = 640$  e  $G_1 = 1 \mu\text{m}/\text{unid.}$  de tempo e  $G_2 \cong 0,46 \mu\text{m}/\text{unid.}$  de tempo: (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



**Figura 69** – Representação da microestrutura simulada de transformação simultânea com  $N_1 = 64$  e  $N_2 = 640$  e  $G_1 = 1 \mu\text{m}/\text{unid.}$  de tempo e  $G_2 \cong 0,46 \mu\text{m}/\text{unid.}$  de tempo: (a) Baixa fração volumétrica para mostrar a posição dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

Nas Figuras 70 e 71 tem-se a contiguidade de cada fase produto, Equações (31-33), e a dispersão de cada fase produto, Equações (36-37), respectivamente. Na Figura 70 revela-se o comportamento da contiguidade em função da fração volumétrica para os três casos aqui estudados. Na Figura 70-a mostra-se o resultado do primeiro caso, como o número de núcleos é o mesmo, e a velocidade de crescimento é a mesma para ambas as fases produto, era de se esperar que as contiguidades  $C^{11}$  e  $C^{22}$  também fossem iguais. No entanto, uma informação extra extraída da Figura 70-a é de que  $C^{12}$  é igual a  $C^{11}$  e  $C^{22}$ , ou seja, a contiguidade resultante do “impingement” entre a fase 1 e fase 2 tem o mesmo valor que a contiguidade resultante do “impingement” entre a mesma fase produto. Na Figura 70-b mostra-se que isso não é verdade

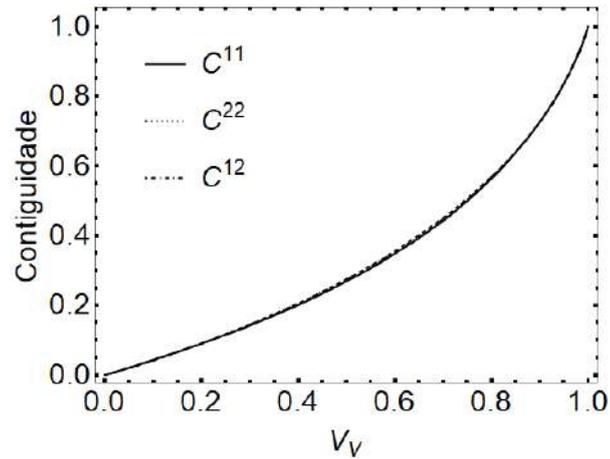
para o segundo caso, a transformação simultânea em que a fase 2 tem dez vezes mais núcleos, nesse segundo caso  $C^{12}$  é maior (não muito) do que  $C^{11}$  e  $C^{22}$ . Na Figura 70-b também mostra-se que a contiguidade  $C^{22}$  é igual a  $C^{11}$ , embora a fase produto 2 tenha uma área interfacial por unidade de volume maior do que a fase produto 1. A contiguidade refere-se ao arranjo de uma determinada fase no espaço, se todas as regiões dessa fase são esféricas e dispersas aleatoriamente na matriz, a contiguidade deve ser a mesma, entretanto, se por exemplo houver “*Cluster*”, observa-se uma diferença significativa na contiguidade [63]. Nas simulações aqui reportadas tanto a fase 1 como a fase 2 tem seus núcleos distribuídos de forma uniformemente aleatória na matriz, portanto, sua contiguidade deve ser a mesma.

Na Figura 70-c mostra-se o resultado do terceiro caso, transformação sequencial, nota-se que a situação muda,  $C^{12}$  é maior que  $C^{22}$  mas menor que  $C^{11}$ , uma possível razão para isso é que, em contraste com as transformações simultâneas, o comportamento da fração volumétrica das fases individuais durante a transformação sequencial é muito diferente. Como a fase 2 começa em um tempo posterior, a contribuição da fase 1 para a fração volumétrica total é muito maior do que a contribuição da fase 2, como foi visto na Figura 56. Além disso, embora os núcleos de ambas as fases sejam distribuídos de forma uniformemente aleatória na matriz, o fato da fase 1 começar mais cedo influencia no arranjo espacial da fase 2 e, portanto, influencia na sua contiguidade. Observa-se  $C^{12}$  significativamente maior que  $C^{22}$  porque quando a fase 2 surge a fase 1 já está presente, logo, o “*impingement*” entre as fases 1 e 2 começa mais cedo do que o “*impingement*” entre a própria fase 2. Para os presentes propósitos, o ponto principal aqui é a capacidade que as contiguidades,  $C^{12}$ ,  $C^{11}$  e  $C^{22}$ , tem em distinguir o comportamento dos três tipos de interfaces ao longo da transformação.

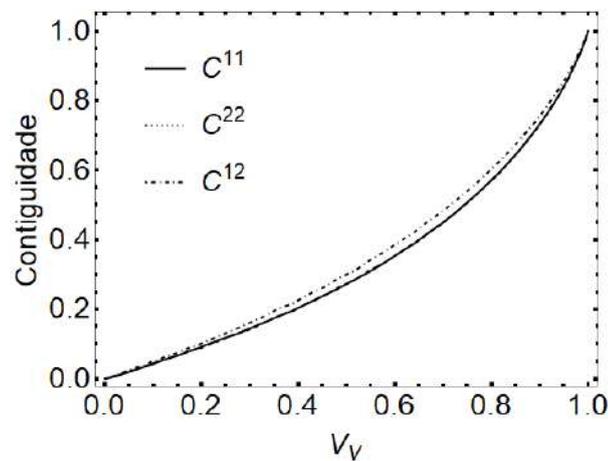
Na Figura 71 mostra-se os parâmetros de dispersão de cada fase produto. Na Figura 71-a tem-se o comportamento que já foi discutido acima, como o número de núcleos e a velocidade das fases produto 1 e 2 são as mesmas, conseqüentemente, o valor do parâmetro de dispersão são iguais para ambas as fases. A situação muda na Figura 71-b, onde o parâmetro de dispersão da fase 2 reflete o fato de que a fase 2 tem mais interfaces que a fase 1, uma vez que nesse segundo caso embora fase 1 e fase 2 tenham se iniciado juntas, a fase 2 tem dez vezes mais núcleos, e conseqüentemente, o parâmetro de dispersão da fase 2 é maior do que o parâmetro de dispersão da fase 1. Em contraste com as Figuras 71-a e 71-b, nesse terceiro caso, transformação sequencial, na Figura 71-c mostra-se que a dispersão da fase 1 é maior do que a da fase 2. A razão para isso é o fato de que a fração volumétrica da fase produto 1 é muito maior

que a fração volumétrica da fase produto 2, e isso implica que a área interfacial entre a fase 1 e a matriz também seja muito maior do que a área interfacial entre a fase 2 e a matriz.

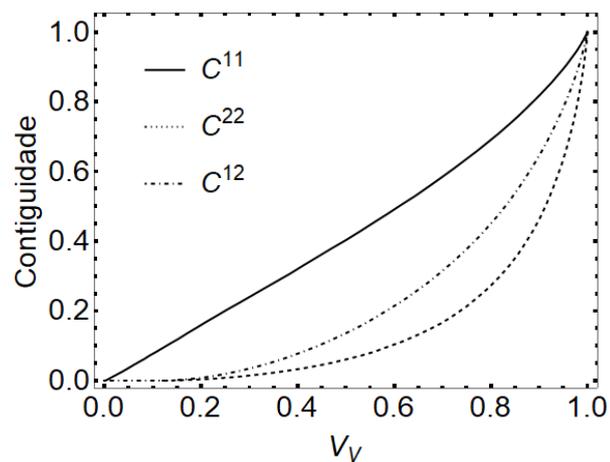
Vale se destacar que, como mencionado anteriormente, nesses casos aqui adotados, tem-se mais de uma fase produto envolvida na transformação, e conseqüentemente existe um número significativo de possíveis áreas interfaciais, assim, talvez se possa definir outros parâmetros para a contigüidade, a dispersão e o duplex. O problema que se identificou ao se adotar definições muito diferentes das definições apresentadas nas Equações (18-20) é de como interpretar os resultados, talvez o comportamento de uma microestrutura contendo duas fases pode ser tomado como um ponto de partida. Assim, não se pode negligenciar a possibilidade de que existam transformações que possuam características específicas, e que para esses casos talvez se faça necessário definir os parâmetros de contigüidade e dispersão de maneira diferente. No Apêndice 12.2 listou-se todas as definições que surgiram com o desenvolvimento desta tese, deixa-se claro, entretanto, que não é fácil se investigar todas as possibilidades presentes na transformação, no entanto, os parâmetros definidos nessa seção foram os que se mostraram os mais úteis para o estudo. Os outros parâmetros também aparentemente deram bons resultados, porém, os definidos aqui combinaram resultados confiáveis, simplicidade e interpretação direta, além de permanecerem próximos das definições originais dos parâmetros usados para caracterizar uma fase matriz transformando-se em uma única fase produto.



(a)

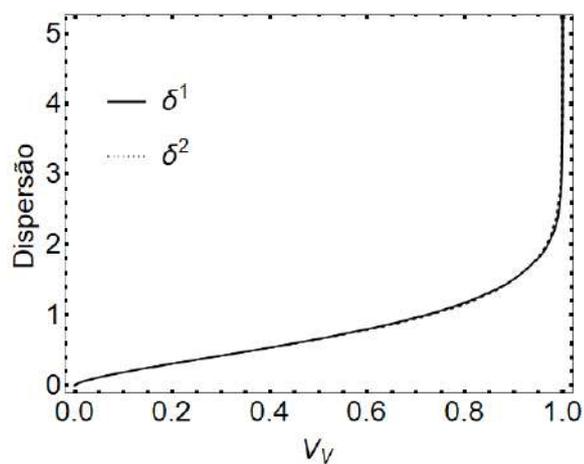


(b)

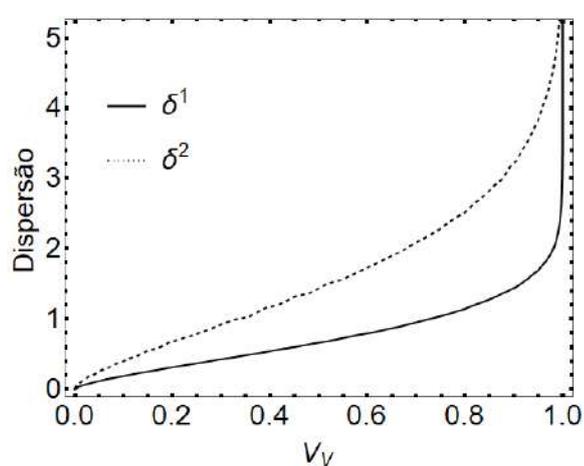


(c)

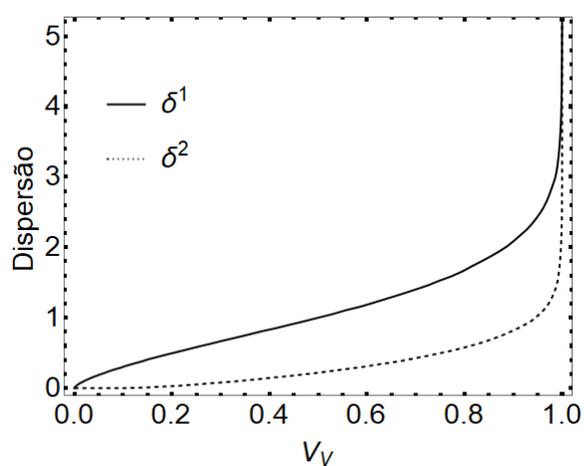
**Figura 70** – Contiguidades de cada fase versus  $V_V$ . (a) transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2 = 1 \mu\text{m} / \text{unid. de tempo}$ . (b) transformação simultânea com  $N_1 = 64$  e  $N_2 = 640$  e  $G_1 = 1 \mu\text{m} / \text{unid. de tempo}$  e  $G_2 \cong 0,46 \mu\text{m} / \text{unid. de tempo}$ . (c) transformação sequencial, a única diferença do caso mostrado em (a) é que a fase 2 começa quando a fase 1 atinge  $V_{V1} = 0,1$ .



(a)



(b)



(c)

**Figura 71** – Dispersão de cada fase versus  $V_V$ . (a) transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2 = 1 \mu\text{m} / \text{unid. de tempo}$ . (b) transformação simultânea com  $N_1 = 64$  e  $N_2 = 640$  e  $G_1 = 1 \mu\text{m} / \text{unid. de tempo}$  e  $G_2 \cong 0,46 \mu\text{m} / \text{unid. de tempo}$ . (c) transformação sequencial, a única diferença do caso mostrado em (a) é que a fase 2 começa quando a fase 1 atinge  $V_{V1} = 0,1$ .

### **7.3.2. Casos em que as Transformações Simultâneas e Sequenciais Podem Ser Confundidas**

Como foi observado por Alves[13,14], podem haver circunstâncias que levem as transformações simultâneas e sequenciais a terem resultados próximos. Esta similaridade de resultados aliada a erros experimentais pode dificultar a classificação pelo experimentalista se uma transformação ocorreu de forma simultânea ou sequencial. Como também visto por Rios e Villa[12], comparando-se as Figuras 43 e 55, nota-se claramente que um tempo de incubação relativamente pequeno, onde para a transformação sequencial a fase 2 surgiu quando a fase 1 atingiu  $V_{V1} = 0,1$ , já é suficiente para diferenciar drasticamente o comportamento das transformações simultâneas e sequenciais. Entretanto, podem haver transformações reais em que esse tempo de incubação seja menor, e evidentemente, quanto menor esse tempo de incubação, mais próxima a transformação sequencial fica da transformação simultânea.

Nesse contexto, uma questão fundamental é localizar o ponto, ou pontos, em que uma certa fase começa a se formar. Em alguns casos, esse ponto é bem evidente, por exemplo, ao se considerar a perlita como uma transformação simultânea de ferrita e cementita, é intuitivo o pensamento de que ambas as fases se iniciam aproximadamente ao mesmo tempo, e crescem com a mesma velocidade. Um outro exemplo poderia ser o da formação da perlita após o término do crescimento da ferrita, nesse caso, também é claro em que ponto a transição começa. No entanto, existem casos mais complexos, por exemplo, o caso da nucleação da ferrita acicular na interface de partículas localizadas dentro do metal de solda, em competição com o crescimento da ferrita alotriomórfica nucleada nos contornos de grão. Os tempos de incubação para a nucleação da ferrita nos contornos de grão e na interface das partículas podem não ser iguais, além disso, as velocidades de crescimento são certamente diferentes dependendo da morfologia da ferrita, portanto, para este caso, é difícil se afirmar se as transformações ocorrem de maneira simultânea ou sequencial.

Uma outra ocorrência comum e de grande interesse é a nucleação e crescimento de regiões recristalizadas pertencentes a diferentes componentes de textura. Normalmente, interpreta-se essas transformações como começando ao mesmo tempo, entretanto, em muitos casos torna-se difícil saber se isso é verdade ou não, devido principalmente ao fato de que os componentes de textura podem ter diferentes tempos de incubação. A interpretação da cinética dessas transformações pode gerar informações críticas sobre o número de núcleos e a velocidade de crescimento de cada componente de textura [47,69], se esta análise é baseada em

uma suposição de que a transformação é simultânea, onde de fato tem-se uma transformação sequencial, então a informação obtida pode não ser confiável.

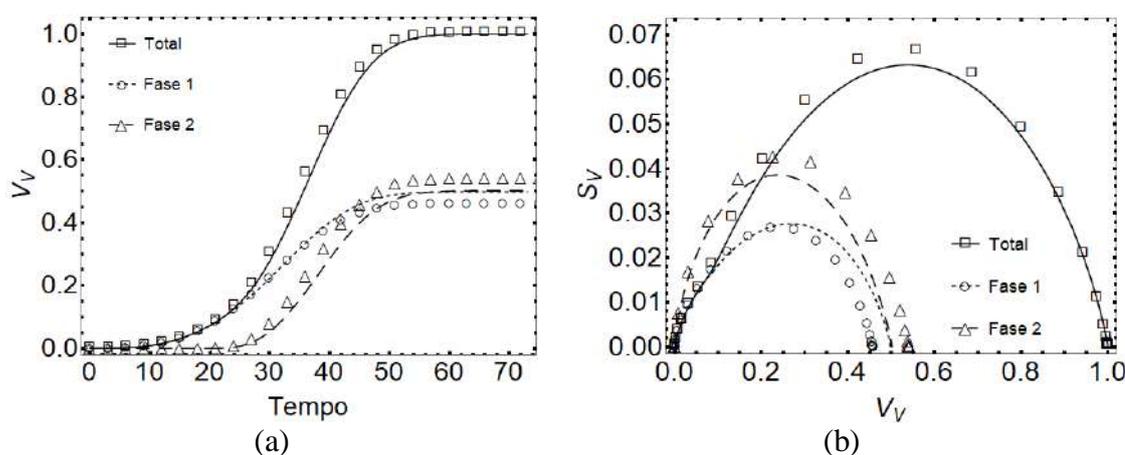
Baseando-se nos parágrafos anteriores, nesta seção, demonstrou-se as dificuldades que podem surgir em tais circunstâncias. Para tal, realizou-se novas simulações que foram conduzidas de forma a produzir a mesma fração volumétrica para cada fase produto ao final da transformação, logo ao cessar a transformação tem-se  $V_{V1} = V_{V2} = 0,5$ . Note que, como observado na Figura 43, quando uma transformação é simultânea e possui os mesmos parâmetros para ambas as fases, isto é,  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$ , as fases produto contribuem igualmente para a transformação e naturalmente se tem  $V_{V1} = V_{V2} = 0,5$ . Por outro lado, considerando-se uma transformação sequencial com os mesmos parâmetros, e como única diferença a de que a fase produto 2 comece quando a fase produto 1 atinja  $V_{V1} = 0,1$ , há uma contribuição muito diferente das fases produto para a transformação, justamente pela existência desse tempo de incubação da fase 2, na Figura 55 ilustra-se isso muito bem. Portanto, para se ter no final da transformação sequencial  $V_{V1} = V_{V2} = 0,5$ , deve-se compensar o tempo de incubação da fase produto 2. Para tal, tomando-se como base os casos presentes nas Figuras 43 e 55, nas novas simulações abaixo, manteve-se constantes o número de núcleos e velocidade de crescimento da fase produto 1, e variou-se esses parâmetros para a fase produto 2. Logo, os parâmetros para a fase 1 foram  $N_1 = 64$  e  $G_1$  constante, e para a fase 2, considerou-se o surgimento da mesma quando a fase 1 atingiu  $V_{V1} = 0,1$  e primeiramente manteve-se  $G_1 = G_2$  variando-se o  $N_2$  e, em seguida manteve-se  $N_1 = N_2 = 64$  e variou-se  $G_2$ .

### **7.3.2.1. Variação do Número de Núcleos da Fase 2 com $G_1 = G_2$**

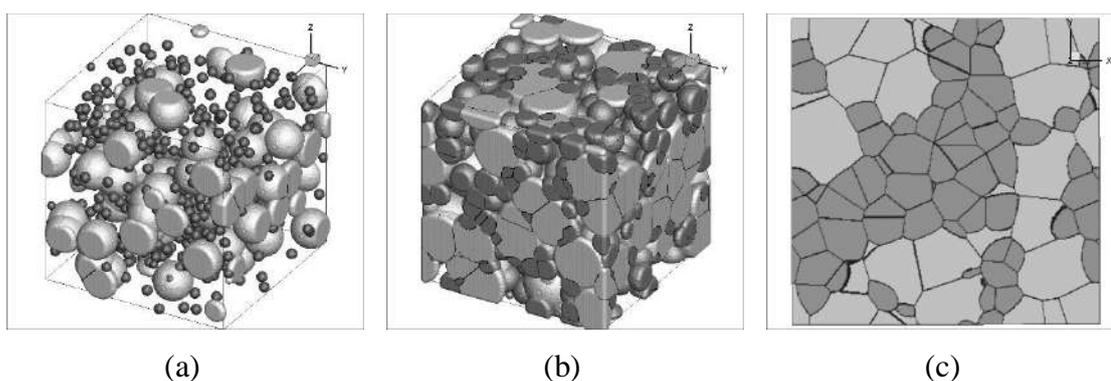
Para esse caso,  $G_1 = G_2$ , então a transformação simultânea com o número de núcleos  $N_1 = N_2 = 64$ , Figura 43, é equivalente a uma transformação sequencial com  $N_1 = 64$  e  $N_2 = 464$ . Como se pode ver na Figura 72-a, ao final da transformação tem-se  $V_{V1} = V_{V2} = 0,5$  e ao compará-la com a Figura 43-a, nota-se que as curvas são bastante semelhantes. Na Figura 72-b mostra-se o caminho microestrutural e comparando-se com o  $S_V$  da transformação simultânea, Figura 43-b, nota-se que o  $S_V$  da transformação sequencial é maior. Esse fato era esperado devido ao maior número de núcleos da fase produto 2 na transformação sequencial, mas vale notar que a diferença no  $S_V$  não é muito grande e que experimentos podem ter erros

experimentais significativos, digamos  $\pm 10\%$  ou mais, portanto, pode-se ter dificuldades na distinção dessas curvas.

Na Figura 73 mostra-se a evolução microestrutural da transformação sequencial para este caso particular. Quando comparada com a evolução microestrutural da transformação simultânea, Figura 44, a fase produto 2 da transformação sequencial, evidentemente exibe um tamanho de grão menor devido ao seu maior número de núcleos, este poderia ser um indicador para o experimentalista ao examinar a microestrutura real. O aumento do número de núcleos foi necessário para compensar o tempo de incubação existente.



**Figura 72** – Resultados de transformação sequencial com  $N_1 = 64$  e  $N_2 = 464$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



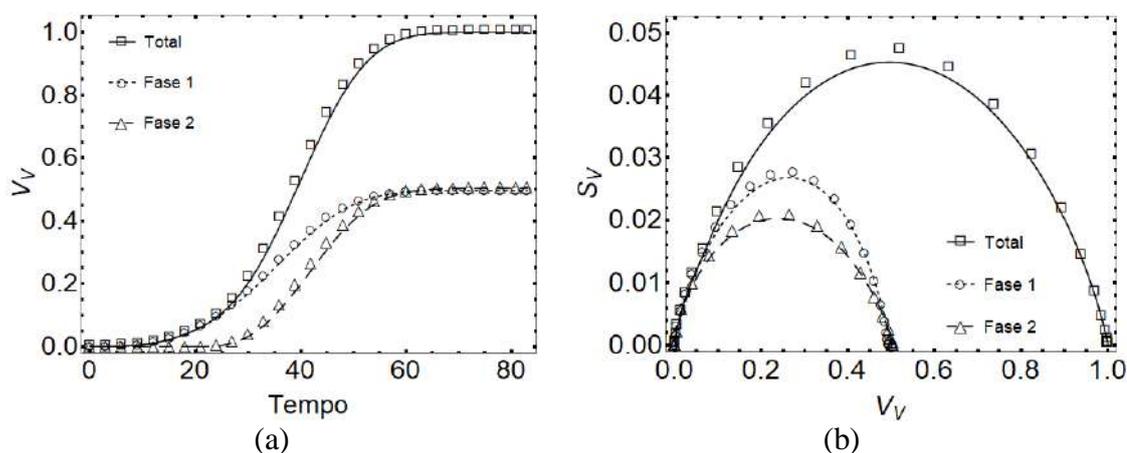
**Figura 73** – Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com  $N_1 = 64$  e  $N_2 = 464$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a)  $V_V = 0,1$  mostrando a nucleação da fase produto 2, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

### **7.3.2.2. Variação da Velocidade de Crescimento da Fase 2 com $N_1 = N_2 = 64$**

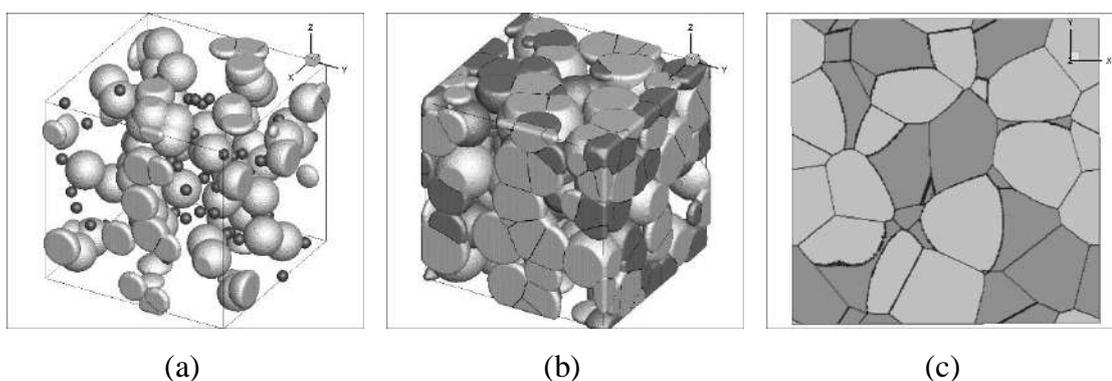
Mantendo-se  $N_1 = N_2 = 64$  atingiu-se  $V_{V1} = V_{V2} = 0,5$  ao final dessa transformação sequencial adotando-se  $G_2 \cong 1,75G_1$ . Na Figura 74-a mostra-se uma concordância um tanto melhor entre a cinética da fase 1 e da fase 2 do que a observada no caso anterior, onde o número de núcleos foi alterado, Figura 72-a. Na Figura 74-a novamente nota-se semelhança com as curvas da transformação simultânea exibida na Figura 43-a. Na Figura 74-b mostra-se o caminho microestrutural, e comparando-se com o caminho microestrutural da transformação simultânea, Figura 43-b, nota-se que o  $S_V$  para a transformação sequencial desse caso encontra-se mais próximo do  $S_V$  da transformação simultânea.

Na Figura 75 apresenta-se a evolução microestrutural da transformação sequencial desse caso, pode-se observar claramente o surgimento da fase 2 quando a fase 1 atingiu  $V_{V1} = 0,1$ . Comparando-se a Figura 75 com a evolução microestrutural da transformação simultânea, Figura 44, há uma boa similaridade entre as microestruturas após a transformação e ambas as transformações exibem tamanhos de grãos semelhantes.

Assim como observou-se na Figura 50, na Figura 75-c mostra-se que diferentes velocidades de crescimento resultam em contornos de grão curvos entre a fase produto 1 e 2. Quando grãos da mesma fase se encontram, eles têm a mesma velocidade, logo não há curvatura, em contrapartida, quando se encontram grãos de fases diferentes, a fase que possui a maior velocidade de transformação apresenta uma interface côncava. Os grãos da fase mais veloz têm interface côncava pelo fato de que eles tendem a envolver os grãos vizinhos que tem uma velocidade menor. A consideração da curvatura das interfaces pode ser um ponto interessante de se analisar em uma microestrutura real. As simulações e a teoria [70–72] sugerem que, caso se observe interfaces curvas em uma microestrutura real, isso pode ser um sinal de transformação sequencial ou pode sugerir a existência de uma diferença nas velocidades de crescimento entre os grãos. Entretanto, cabe observar que a curvatura nas interfaces reportadas acima, se referem à microestrutura logo após a transformação de fase, se um crescimento de grão posterior for permitido, então provavelmente todas as interfaces fiquem curvadas à medida que elas atingirem seus ângulos diedrais de equilíbrio.



**Figura 74** – Resultados de transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_2 \cong 1,75G_1$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



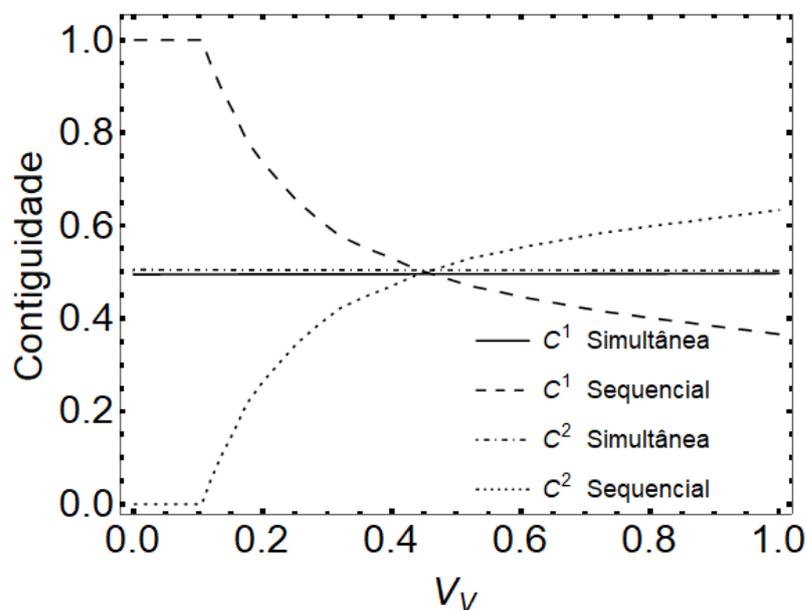
**Figura 75** – Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_2 \cong 1,75G_1$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a)  $V_V = 0,1$  mostrando a nucleação da fase produto 2, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

### 7.3.2.3. Distinção Entre as Transformações

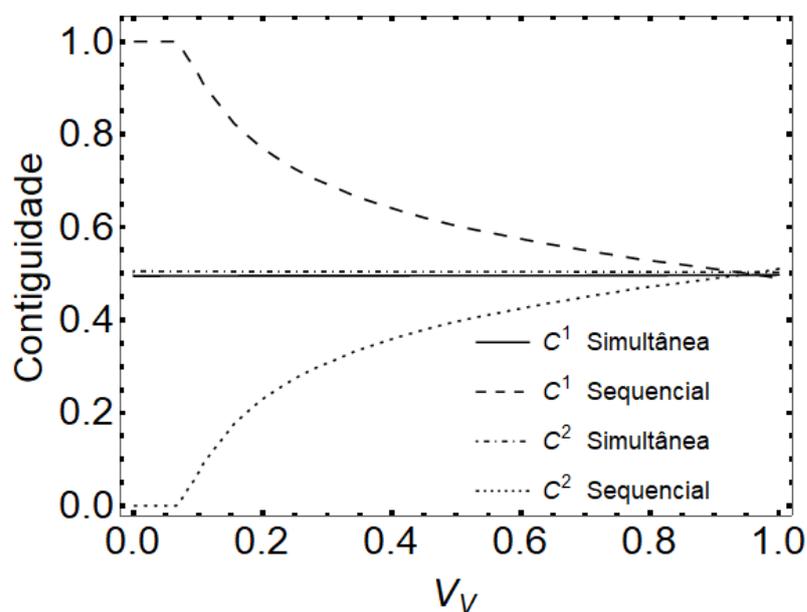
Os resultados discutidos anteriormente, Figuras 72 e 74, mostraram que existe uma aparente similaridade entre as transformações simultâneas e sequenciais, desde que o número de núcleos e/ou velocidade de crescimento da fase 2 da transformação sequencial seja favorável a compensar o tempo de incubação existente. Nessas circunstâncias, pode ser complexo para o pesquisador distinguir entre os dois tipos de transformações, simultâneas ou sequenciais, devido principalmente a dificuldade na determinação do tempo de origem da transformação que nucleou depois.

Para ajudar na distinção, recorre-se novamente à análise da microestrutura. Como visto na seção 7.3.1, a contiguidade se mostrou um parâmetro interessante na análise microestrutural, ela pode ajudar na distinção entre as transformações simultâneas e sequenciais sem a necessidade de se determinar o tempo de origem da transformação que nucleou depois. Portanto, a contiguidade fornece um parâmetro extra que caracteriza quantitativamente as microestruturas simuladas, elas podem ser muito úteis na prática, destacando diferenças que não são tão claras quando se usa apenas  $V_V$  e  $S_V$  ou inspeção visual.

Para a distinção entre os dois tipos de transformação, adotou-se a contiguidade total de cada fase produto, Equações (29) e (30), uma vez que como mostrado pela Figura 67 elas mostraram aspectos muito diferentes para cada transformação. Na Figura 76 mostra-se a contiguidade para a transformação simultânea representada na Figura 43, e a contiguidade para a transformação sequencial mostrada na Figura 72. Assim como mostrado na Figura 67, nota-se claramente que as contiguidades  $C^1$  e  $C^2$  resultaram em curvas que são prontamente distinguíveis para cada transformação. Na Figura 77 também se mostra a contiguidade para a transformação simultânea representada na Figura 43, e a contiguidade para a transformação sequencial mostrada na Figura 74, novamente as contiguidades  $C^1$  e  $C^2$  produziram curvas que são muito dissimilares para estas transformações. Portanto, pode-se afirmar que a contiguidade total de cada fase produto é capaz de distinguir as transformações simultâneas e sequenciais, mesmo para as transformações similares a contiguidade se mostrou muito eficiente, e evidenciou as características de cada transformação de forma clara, não deixando nenhuma dúvida para o pesquisador na distinção entre as transformações simultâneas e sequenciais.



**Figura 76** – Contiguidade total de cada fase produto versus  $V_V$  para a transformação simultânea e sequencial com  $G_1 = G_2$  em ambas as transformações. Para a transformação simultânea  $N_1 = N_2 = 64$ . Para a transformação sequencial  $N_1 = 64$  e  $N_2 = 464$  e surgimento da fase 2 quando a fase 1 atingiu  $V_{V1} = 0,1$ .



**Figura 77** – Contiguidade total de cada fase produto versus  $V_V$  para a transformação simultânea e sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$  em ambas as transformações. Para a transformação simultânea  $G_1 = G_2$ . Para a transformação sequencial  $G_2 \cong 1,75G_1$  e surgimento da fase 2 quando a fase 1 atingiu  $V_{V1} = 0,1$ .

## 7.4. CONCLUSÕES

Simulação computacional e métodos analíticos foram empregados para investigar transformações simultâneas e sequenciais. A partir dos resultados obtidos nesse capítulo conclui-se que:

- Todas as simulações computacionais mostraram excelente concordância com o modelo analítico de Rios e Villa[12]. Nenhuma curva mostrada em qualquer figura foi obtida usando ajuste de curva, isso garante a solidez da metodologia de simulação.
- Foi possível obter vários exemplos de microestruturas 3D, que podem ser produzidas por transformações simultâneas e sequencias. Também se aplicou com sucesso algumas técnicas de caracterização microestrutural nas microestruturas 3D obtidas.
- O acompanhamento do volume dos grãos das fases se mostrou um bom parâmetro, através dele, pôde-se estimar o tamanho dos grãos de cada fase presente na transformação, além disso possibilitou o cálculo da taxa de crescimento desses grãos e demonstrou que cada grão evolui de uma maneira particular, porém apresentam a mesma curva característica de crescimento.
- As simulações computacionais são capazes de produzir as microestruturas e essa talvez seja sua grande vantagem sobre os modelos analíticos. Portanto, foi importante introduzir parâmetros, calculados diretamente das microestruturas simuladas, que possam contribuir para uma melhor compreensão qualitativa e quantitativa da microestrutura além dos tradicionais  $V_V$  e  $S_V$ .
- Três novos parâmetros descritores microestruturais para materiais multifásicos, contiguidade, dispersão e duplex, foram definidos nesse capítulo. Embora uma atenção especial tenha sido dada para a situação em que uma fase matriz transforma-se em duas fases produto, podendo ocorrer de forma simultânea ou sequencial, esses parâmetros também podem ser empregados em transformações que contenham mais de duas fases produto. Testou-se esses novos parâmetros usando microestruturas geradas por simulações computacionais em três casos simples e em todos os casos, os parâmetros se comportaram bem e foram bastante distintos para cada fase produto.

- Várias definições desses parâmetros foram feitas, porém os parâmetros definidos no corpo do texto desse capítulo combinaram resultados confiáveis, simplicidade e interpretação direta, além de permanecerem próximos das definições originais dos parâmetros usados para caracterizar uma fase matriz transformando-se em uma única fase produto. Ressalta-se, entretanto, que a transformação de uma fase matriz em duas (ou mais fases produto) pode produzir microestruturas complexas, por esse motivo, é difícil garantir que os parâmetros propostos consigam capturar essa complexidade em todos os possíveis casos. Para situações diferentes recomenda-se recorrer os outros parâmetros definidos no Apêndice 12.2.
- Sobre a semelhança entre as transformações simultâneas e sequenciais, observou-se que, apesar de casos bastante particulares, pode haver similaridade em algumas transformações simultâneas e sequenciais. As análises abordadas nesse capítulo demonstraram que podem surgir resultados potencialmente enganosos quando o pesquisador analisa uma transformação sequencial supondo erroneamente que é uma transformação simultânea. Tanto o número de núcleos quanto a velocidade de crescimento obtida podem estar significativamente errados quando tal erro é cometido.
- O parâmetro da contiguidade total de cada fase produto, definido nesse capítulo foi capaz de distinguir de forma convincente a evolução microestrutural entre a fase produto 1 e 2, na transformação da fase matriz em duas fases produto. Portanto, pode-se afirmar que a contiguidade total de cada fase produto é capaz de distinguir as transformações simultâneas e sequenciais. E um ponto importante é que esse parâmetro também pode ser facilmente medido a partir de microestruturas reais.

## **8. SIMULAÇÃO DE TRANSFORMAÇÕES SIMULTÂNEAS E SEQUENCIAIS EM QUE A FASE PRODUTO 1 NUCLEOU NA INTERFACE MATRIZ/PARTÍCULA E A FASE PRODUTO 2 NOS CONTORNOS DE GRÃO**

Como foi dito anteriormente, esse capítulo visa unificar as metodologias empregadas nos capítulos anteriores. Para tal, considerou-se a transformação de uma fase matriz policristalina que possui precipitados esféricos em duas fases produto, 1 e 2, ocorrendo de maneira simultânea e sequencial. A transformação com a presença de precipitados foi tratada nos capítulos 5 e 6, em contrapartida a transformação simultânea e sequencial foi tratada no capítulo 7. Entretanto, além da unificação, nesse capítulo fez-se considerações sobre a nucleação das duas novas fases produto, portanto, buscou-se estudar qual a influência que dois sítios preferenciais têm sobre as transformações. Esses dois sítios preferenciais foram a interface matriz/partículas e os contornos de grão, de modo que a fase produto 1 nucleou na interface matriz/partículas e a fase produto 2 nos contornos de grão.

É de conhecimento que as regiões de interface de precipitados e regiões de contornos de grão podem ser regiões preferenciais para a nucleação. Goetz[15], por exemplo, observou a nucleação nesses dois sítios preferenciais na recristalização dinâmica. Quando se trata da recristalização esses sítios ganham ainda mais relevância, uma vez que diferentes regiões recristalizadas com diferentes componentes de textura podem surgir e a textura pode ser influenciada pelo sítio que as originou.

Nesse contexto é justificável o interesse nesse capítulo. Aqui realizou-se tanto modelamento computacional quanto o modelamento analítico para as transformações simultâneas e sequenciais que nucleiam exclusivamente nos sítios preferenciais. Cabe destacar

que o modelamento analítico foi realizado adotando-se o princípio da superposição de Rios e Villa[12].

Como dito na seção 3.4, através do princípio da superposição pode-se usar modelos que inicialmente foram desenvolvidos para a transformação envolvendo a formação de uma única fase produto, para se obter o modelo para as situações em que duas ou mais fases produto se formam simultaneamente ou sequencialmente. Nos casos abordados nesse capítulo a fase produto 1 nucleou na interface matriz/partículas, portanto ela é regida pelas Equações (4) e (5), vide capítulo 5, por outro lado, a fase produto 2 nucleou nos contornos de grão e apesar de serem sítios preferenciais, essa transformação é bem modelada por JMAK, a Equação (3), assim como foi mostrado por Fonseca et. al.[61].

Para a transformação simultânea, isto é, as fases 1 e 2 iniciando-se juntas no tempo  $t = 0$ , pelo princípio da superposição de Rios e Villa[12] pode-se obter a fração volumétrica esperada pela combinação dos modelos individuais das duas fases,  $V_V^A(t)$ , através da Equação (42).

$$V_V^A(t) = 1 - ((1 - V_{V1}^A(t)) \times (1 - V_{V2}^A(t))) \quad (42)$$

Onde os termos com o sobrescrito “A” são os modelos individuais considerando-se como se apenas essa única transformação estivesse ocorrendo. Essa consideração significa que  $V_{V1}^A(t)$  é a Equação (4) ou (5), e  $V_{V2}^A(t)$  é a Equação (3). De posse de  $V_V^A(t)$  pode-se obter a fração volumétrica da fase produto 1 na transformação simultânea pela Equação (43).

$$V_{V1}(t) = \int_0^t \frac{1 - V_V^A(s)}{1 - V_{V1}^A(s)} \frac{\partial V_{V1}^A(s)}{\partial s} ds \quad (43)$$

Uma expressão análoga pode ser obtida para a fração volumétrica da fase 2,  $V_{V2}(t)$ , apenas substituindo-se 1 por 2 na Equação (43).

De forma semelhante, obtém-se a nova quantidade de área interfacial entre material recristalizado e não recristalizado por unidade de volume para a fase 1,  $S_{V1}$ , através da Equação (44).

$$S_{V1}(t) = \frac{1 - V_V^A(t)}{1 - V_{V1}^A(t)} S_{V1}^A(t) \quad (44)$$

Novamente, a mesma expressão para a fase 2, pode ser obtida pela substituição de 1 por 2 na Equação (44).

Para a transformação sequencial, a fase 1 inicia-se no tempo  $t = 0$ , e a fase 2 inicia-se em um tempo posterior  $t_2$ , como consequência, quando o tempo  $t < t_2$ , há apenas a fase 1 e  $V_{V1}(t)$  é a Equação (4) ou (5), e  $V_{V2}(t) = 0$ . Da mesma maneira,  $S_{V1}(t) = S_{V1}^A(t)$  e  $S_{V2}(t) = 0$ . Quando a transformação passa o tempo  $t_2$ , isto é  $t \geq t_2$  as duas fases estão presentes, assim de forma semelhante a Equação (43), obtém-se a fração volumétrica da fase produto 1 na transformação sequencial pela Equação (45).

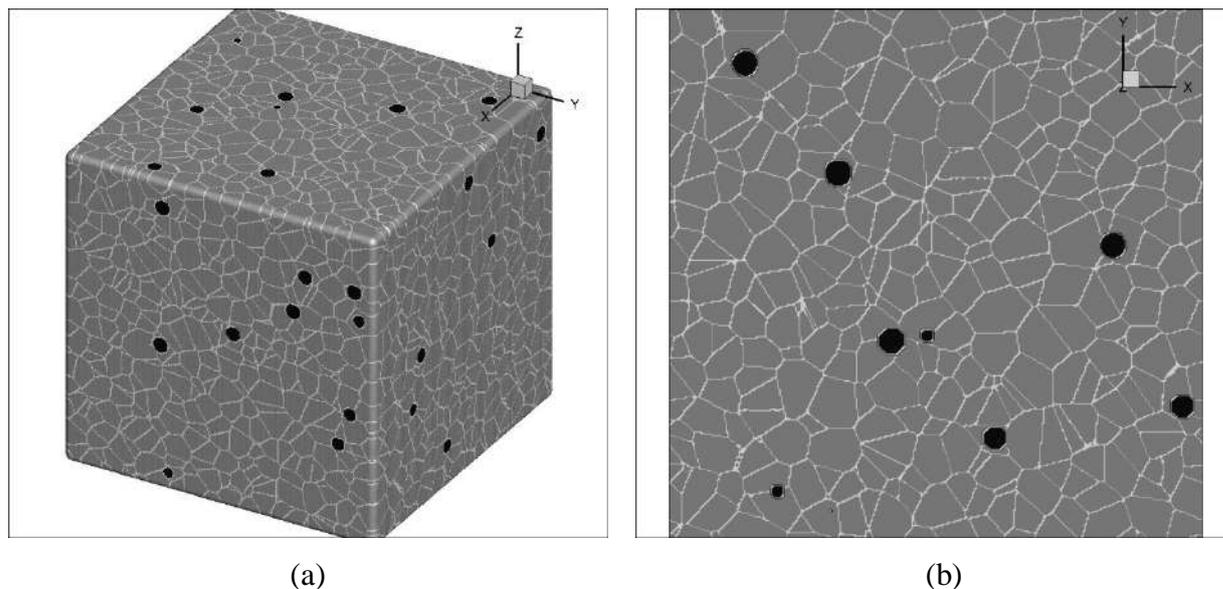
$$V_{V1}(t) = \int_{t_2}^t 1 - V_V^A(s) \frac{\partial \ln(1 - V_{V1}^A(t))}{\partial t} ds \quad (45)$$

Novamente, obtém-se uma expressão análoga para  $V_{V2}(t)$  apenas se substituindo 1 por 2 na Equação (45). Vale mais uma vez se destacar que a Equação (45) é válida apenas para quando  $t \geq t_2$ . Quando  $t \geq t_2$  a área interfacial entre material recristalizado e não recristalizado por unidade de volume para cada fase produto também pode ser estimada pela Equação (44). As Equações (42-45) foram propostas na discussão do princípio da superposição de Rios e Villa[12], e adaptadas aqui por conveniência.

Com as novas expressões para  $V_{V1}(t)$  e  $V_{V2}(t)$  as demais considerações presentes na seção 3.4 são válidas, isto é, pode-se novamente estimar a fração volumétrica total,  $V_V$ , e as velocidades de crescimento de cada fase,  $G_1$  ou  $G_2$ , pelas Equações (7) e (9) respectivamente.

## 8.1. METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Nessa seção, a matriz de 300 x 300 x 300 células cúbicas foi adotada como uma matriz de 100  $\mu\text{m}$  x 100  $\mu\text{m}$  x 100  $\mu\text{m}$ . Como base para a transformação adotou-se uma fase matriz policristalina que contém partículas esféricas, essa matriz pode ser vista na Figura 78. As partículas esféricas tiveram um diâmetro médio de 5  $\mu\text{m}$  e 153 partículas ocuparam um volume de 1% dessa matriz. Na geração dessa matriz policristalina, 3376 núcleos surgiram na interface matriz/partículas, o tamanho médio de grão ao final da transformação foi de aproximadamente 10  $\mu\text{m}$ . Essa matriz policristalina foi desenvolvida com a metodologia descrita no capítulo 5, portanto, nota-se bastante semelhança entre a Figura 78, com as microestruturas simuladas mostradas no capítulo 5.



**Figura 78** – Representação da microestrutura simulada da fase matriz policristalina com precipitados esféricos, antes da transformação nas fases produto. (a) Microestrutura simulada em 3D, (b) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

Assim como no capítulo 7, partindo da matriz policristalina considerou-se a transformação dela em duas fases produto distintas, denominadas, fase 1 e fase 2. As fases produto possuem número de núcleos iniciais,  $N_1$  e  $N_2$ , e velocidades de crescimento,  $G_1$  e  $G_2$  ambos independentes e iguais. Entretanto, nesse capítulo adotou-se sítios preferenciais para a nucleação de cada fase. A fase 1 nucleou na interface matriz/partículas e a fase 2 nos contornos de grão da matriz policristalina. Para ambas as fases, a nucleação foi por saturação de sítios e a velocidade de avanço das interfaces foi mantida constante. Definiu-se o número de núcleos de cada fase produto por processo de ponto de Poisson homogêneo, ou seja, embora existam sítios preferenciais para cada fase, ambas tiveram os núcleos uniformemente distribuídos nesses sítios preferenciais.

A transformação da fase matriz policristalina nas fases produto 1 e 2 se dá de maneira simultânea ou sequencial. Novamente, o tempo de incubação considerado para a nucleação da segunda fase da transformação sequencial foi quando a fase produto 1 apresentou fração volumétrica transformada,  $V_{V1} = 0,1$ .

Para uma melhor avaliação da influência de cada sítio preferencial variou-se nas simulações o número de núcleos de cada fase produto. Por conveniência, adotou-se percentuais do número de núcleos da matriz policristalina, ou seja, a matriz policristalina possui 3376 núcleos, 15% desse valor equivale a 506,4, entretanto adotou-se número de núcleos iguais para

cada fase produto e os mesmos devem assumir valores inteiros, assim nas simulações para o caso em que se considerou 15% do número de núcleos da matriz policristalina, teve-se  $N_1 = N_2 = 254$ , totalizando 508 núcleos. O número de núcleos empregados correspondeu a 15%, 40%, 70% e 100% do número total de núcleos utilizado para a geração da matriz policristalina. Nesse contexto, na Tabela 4 mostra-se o número de núcleos adotados para cada fase produto, assim como o número de núcleos total,  $N_1 + N_2$ .

**Tabela 4** - Quantidade de núcleos adotados para cada fase produto.

<i>Porcentagem da quantidade total de núcleos, 3376</i>	<b>Número de núcleos adotados para cada fase</b>	<b>Número de núcleos total, <math>N_1 + N_2</math></b>
15%	254	508
40%	676	1352
70%	1182	2364
100%	1688	3376

## 8.2. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na sequência demonstra-se os casos em que a fase matriz policristalina que contém precipitados esféricos se transforma em duas fases produto de forma simultânea ou sequencial onde a fase produto 1 nucleou na interface matriz/partículas e a fase produto 2 nucleou nos contornos de grão. Para todos os casos comparou-se os resultados de simulação com as Equações (43-45), portanto, para a comparação entre simulação e modelo analítico, mostraram-se as curvas de cinética,  $V_V$  versus Tempo e a curva do caminho microestrutural. Nessas comparações os dados da simulação foram representados por pontos e os dados provenientes das equações analíticas por linhas. Assim como no capítulo anterior obteve-se em todos os casos um coeficiente de determinação,  $R^2$ , invariavelmente maior que 0,99. Também se mostrou as microestruturas simuladas, onde a fase produto 1 é a mais clara e a fase produto 2 a mais escura, em preto foram representadas as partículas esféricas.

Vale destacar que o volume disponível para a transformação é o volume livre da matriz policristalina, ou seja, as regiões fora das partículas, nenhuma das fases cresce para dentro das partículas. Ao se atingir  $V_V = 1$  significa que se ocupou toda a matriz com exceção das partículas.

## 8.2.1. Transformações Simultâneas

### 8.2.1.1. Transformações Simultâneas com $N_1 = N_2 = 254$ e $G_1 = G_2$

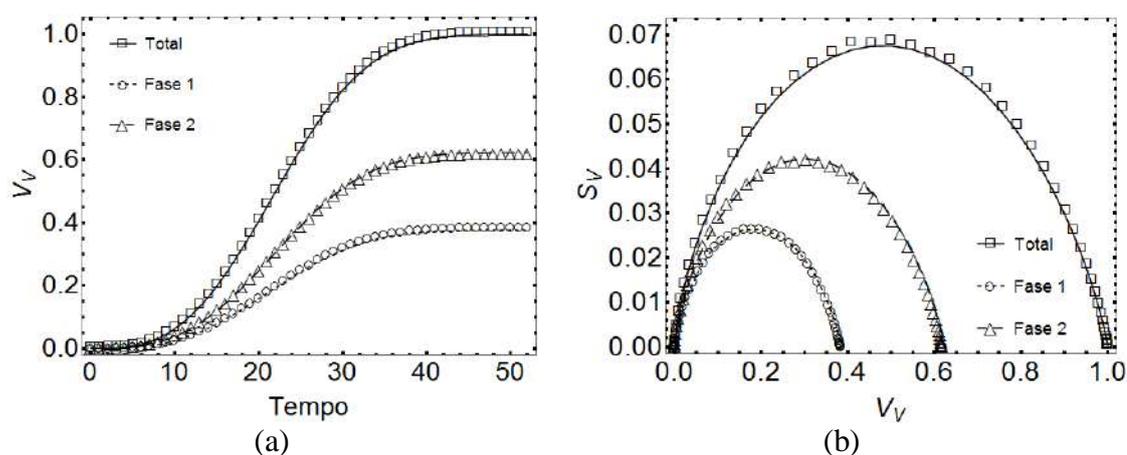
Considerou-se nesse caso uma transformação simultânea com número de núcleos  $N_1 = N_2 = 254$ , que representa 15% do número total de núcleos, vide Tabela 4, e velocidades de crescimento,  $G_1 = G_2$ . Na Figura 79 observa-se uma ótima concordância entre a simulação computacional e o modelo analítico proveniente das Equações (43-45).

Na Figura 79-a observa-se um comportamento interessante, embora as duas fases produto tenham surgido juntas e possuam os mesmos parâmetros, isto é,  $N_1 = N_2 = 254$  e  $G_1 = G_2$  elas contribuem de maneira distinta para a transformação. Diferentemente do que foi observado na Figura 43, em que ambas contribuíram igualmente para a transformação e chegaram ao final da transformação com  $V_{V1} = V_{V2} = 0,5$ . Na Figura 43 as fases produto também tiveram mesmos parâmetros,  $N_1 = N_2 = 64$  e  $G_1 = G_2$ , mas foram distribuídas uniformemente na matriz. A contribuição distinta de cada fase produto se deve ao fato de que cada uma nucleou em um sítio diferente, a fase 1 que nucleou na interface matriz/partículas teve seu crescimento influenciado pelas partículas. Como foi dito, nenhuma das fases é capaz de crescer para dentro das partículas, então é intuitivo pensar que a fase 1 que surgiu na superfície da partícula, tenha um crescimento menor. Os grãos da fase 1, no início da transformação, não conseguem manter seu formato esférico devido ao “*impingement*” com as partículas, na verdade eles crescem como uma calota esférica, e só voltam a ser esféricos após “*atravessarem*” a partícula na qual nucleou. Por outro lado, os grãos da fase 2, que surgiram nos contornos de grão, mantém seu formato esférico, pois demoram mais a sofrer com o “*impingement*”, portanto, crescem mais. Esse efeito do “*impingement*” na fase 1 e na fase 2 acarreta numa maior fração volumétrica da fase 2, como mostrado na Figura 79-a.

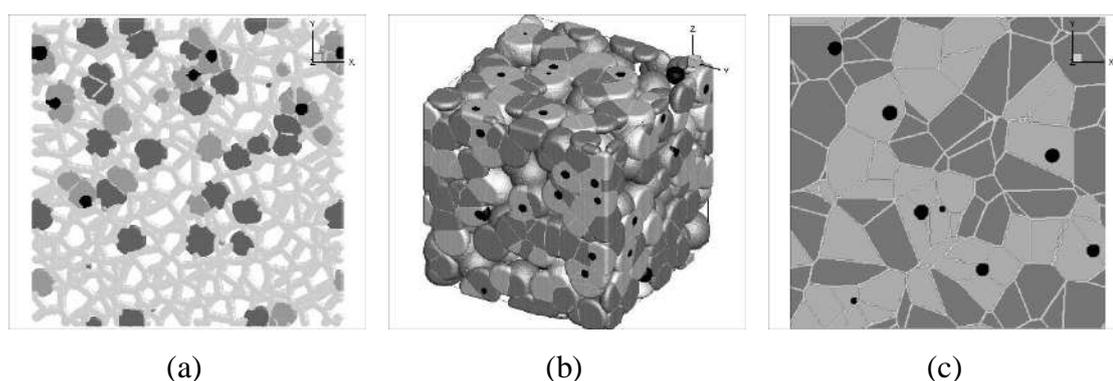
Na Figura 79-b também mostra-se o mesmo efeito para o  $S_V$ , nota-se claramente que  $S_{V1} < S_{V2}$ , uma vez que parte da área superficial da fase 1, não está em contato com a matriz, mas sim com as partículas. Destaca-se que a fase 2 também pode encontrar as partículas, porém, a fase 1 que nucleou nas partículas tem esse efeito muito mais expressivo.

Na Figura 80 mostra-se a evolução microestrutural simulada desse caso. Na Figura 80-a, evidencia-se que a maioria dos grãos da fase 1, regiões mais claras, encontram-se próximos às partículas, já os grãos da fase 2, regiões mais escuras, encontram-se próximos aos contornos

de grão da matriz policristalina prévia. A tecelagem na Figura 80-a, e nas demais que se seguem, representa a região dos contornos de grão da matriz policristalina prévia. Também pela Figura 80-a, observa-se que para  $V_V = 0,1$  torna-se difícil diferenciar os tamanhos de grão de cada fase, isso é um indicador que ambas as fases nuclearam no mesmo instante. Observando-se a Figura 80-c, nota-se regiões da fase 2 envolvendo partículas e regiões da fase 1 sem partículas, entretanto, destaca-se que esse é novamente um efeito da análise de uma seção em 2D de uma microestrutura 3D. De fato todos os núcleos da fase 1, surgiram na interface matriz/partículas e todos os núcleos da fase 2 surgiram nos contornos de grão da matriz policristalina prévia.



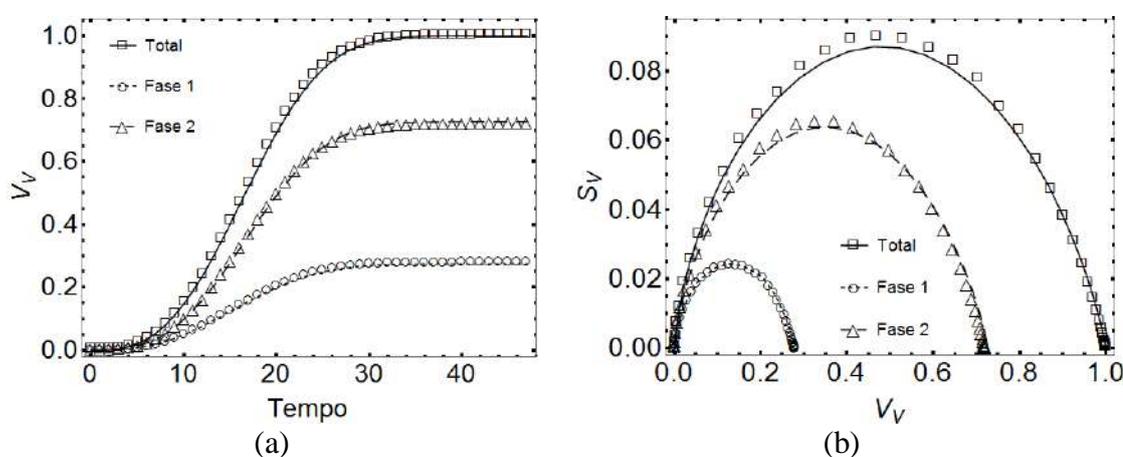
**Figura 79** – Resultados de transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 254$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



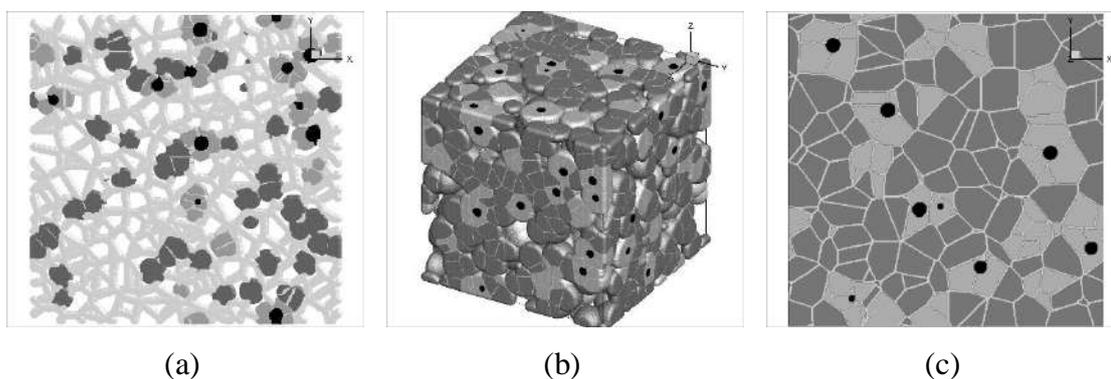
**Figura 80** – Representação da microestrutura simulada de transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 254$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a)  $V_V = 0,1$  mostrando a região de origem dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

### 8.2.1.2. Transformações Simultâneas com $N_1 = N_2 = 676$ e $G_1 = G_2$

Nesse caso teve-se  $N_1 = N_2 = 676$ , que representa 40% do número total de núcleos, vide Tabela 4, e novamente  $G_1 = G_2$ . Na Figura 81 mostra-se que também houve ótima concordância entre a simulação computacional e o modelo analítico. O mesmo efeito proporcionado pelo processo de nucleação em sítios preferenciais, discutido na seção anterior foi observado nesse caso. Entretanto, com um maior número de núcleos para cada fase, esse efeito torna-se mais acentuado. Na Figura 82 mostra-se a evolução microestrutural simulada desse caso, observa-se mais facilmente através da microestrutura o predomínio da fase 2.



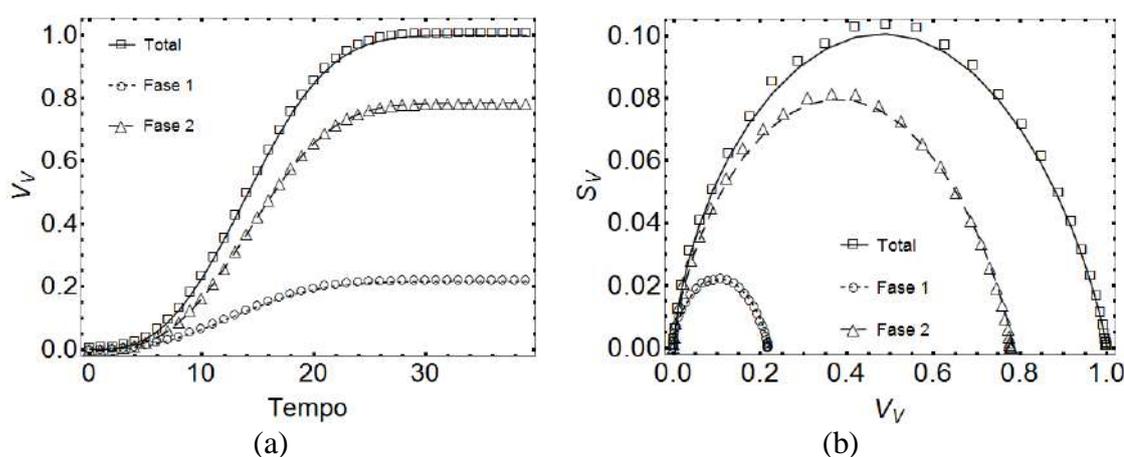
**Figura 81** – Resultados de transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 676$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



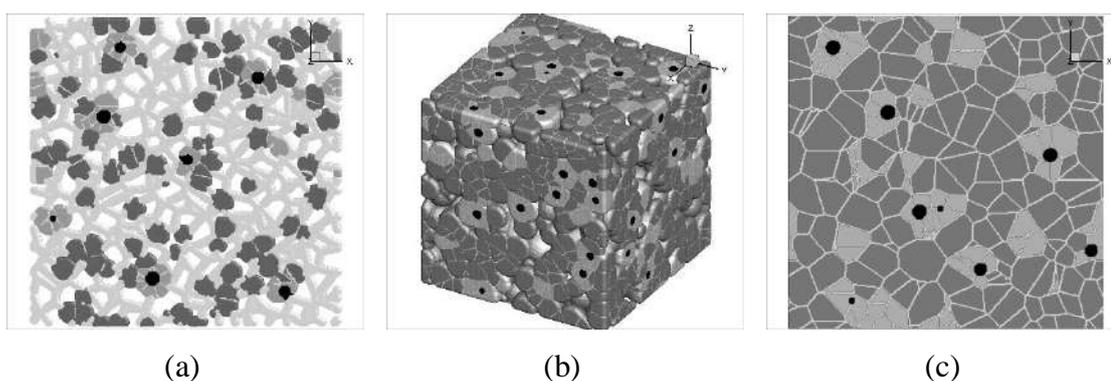
**Figura 82** – Representação da microestrutura simulada de transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 676$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a)  $V_V = 0,1$  mostrando a região de origem dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

### 8.2.1.3. Transformações Simultâneas com $N_1 = N_2 = 1182$ e $G_1 = G_2$

Para esse caso considerou-se  $G_1 = G_2$  mas com  $N_1 = N_2 = 1182$ , que representa 70% do número total de núcleos, vide Tabela 4. Novamente observa-se pela Figura 83 que foi boa a concordância entre simulação e modelo analítico. Assim como no caso anterior, com o aumento do número de núcleos de cada fase, aumentou-se o predomínio da fase 2. Esse predomínio também pode ser observado na Figura 84, que mostra a microestrutura simulada desse caso.



**Figura 83** – Resultados de transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 1182$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



**Figura 84** – Representação da microestrutura simulada de transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 1182$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a)  $V_V = 0,1$  mostrando a região de origem dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

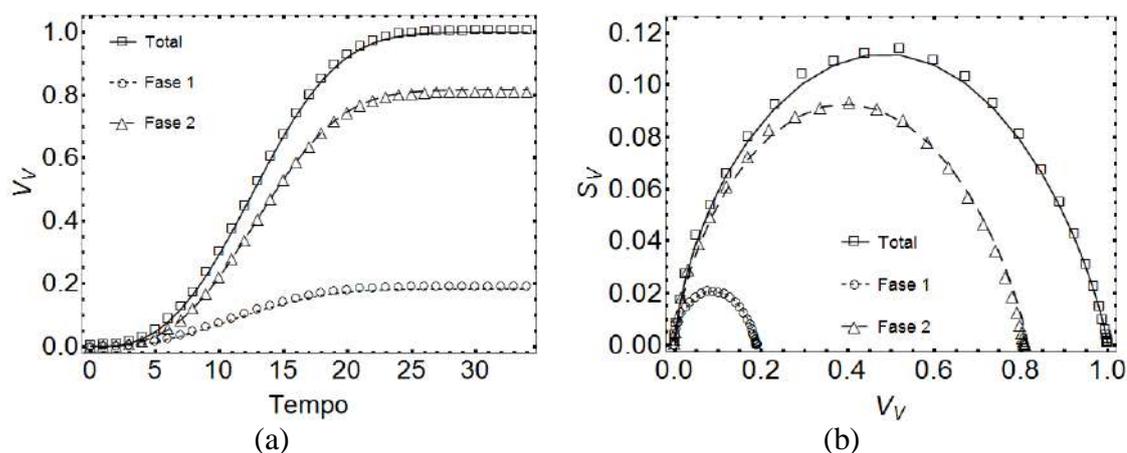
#### 8.2.1.4. Transformações Simultâneas com $N_1 = N_2 = 1688$ e $G_1 = G_2$

Nesse caso considerou-se  $N_1 = N_2 = 1688$ , que representa 100% do número total de núcleos, vide Tabela 4, e mais uma vez  $G_1 = G_2$ . Pela Figura 85, observa-se que mesmo variando-se o número de núcleos a boa concordância entre simulação e modelo analítico permanece. Novamente evidencia-se que com um maior número de núcleos para cada fase, maior foi o predomínio da fase 2, atingindo cerca de 80% do volume disponível para a transformação. Na Figura 86 mostra-se a evolução microestrutural desse caso. Observa-se claramente uma maior contribuição da fase 2.

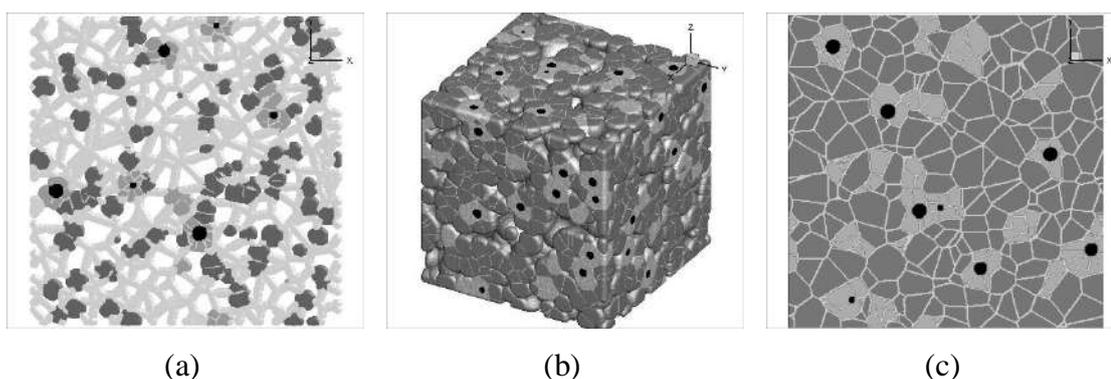
O predomínio da fase produto 2 se dá pelo mesmo efeito do “*impingement*” discutido nos casos anteriores. Acredita-se que o aumento no número de núcleos acentua o efeito do “*impingement*” na fase 1, que nucleou na interface matriz/partículas. De fato, aumentando-se o número de núcleos, como o número de partículas é fixo, aumenta-se o número médio de núcleos por partícula,  $c$ . Na simulação dessa seção são 153 partículas com 1688 núcleos para a fase 1, isso significa um  $c > 10$ . Quanto maior o  $c$ , maior a probabilidade de que os núcleos que surgiram nas partículas se encontrem, e conseqüentemente, além desses núcleos sofrerem o “*impingement*” imediato com a partícula no qual nucleou, ele sofre de maneira precoce com o “*impingement*” com os grãos vizinhos que também nuclearam na mesma partícula. Em casos extremos, quando há saturação das partículas, o crescimento dos núcleos que nuclearam nas partículas só se dá na direção normal às partículas. Esse “*impingement*” precoce é evidenciado na Figura 86-a, onde observa-se que os grãos da fase 1, rapidamente envolvem as partículas e crescem “espremidos” uns contra os outros.

Nesse contexto, como a fase 1 sofre com o “*impingement*” das partículas e com o “*impingement*” entre os grãos que nuclearam na mesma partícula, ela tem o crescimento ainda mais afetado e em contrapartida ocorre um maior predomínio da fase 2. Apesar de a fase 2 também ter um aumento no número de núcleos, a área de contornos de grão, onde a fase 2 nucleou, é evidentemente muito maior que a área de partículas, portanto a fase 2 tem menor probabilidade de encontrar um grão vizinho do que a fase 1, assim sofre menos com o “*impingement*”. Esse fato pode ser evidenciado quando se compara o tamanho de grão da fase 1 com o da fase 2 na Figura 86-c, nota-se claramente um tamanho de grão maior para a fase 2.

Um outro efeito evidente do aumento do número de núcleos é a diminuição gradual do tamanho de grão das fases produto. Observa-se esse efeito comparando-se as Figuras 80, 82, 84 e 86.



**Figura 85** – Resultados de transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 1688$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



**Figura 86** – Representação da microestrutura simulada de transformação simultânea com  $N_1 = N_2 = 1688$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão: (a)  $V_V = 0,1$  mostrando a região de origem dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

## 8.2.2. Transformações Sequenciais

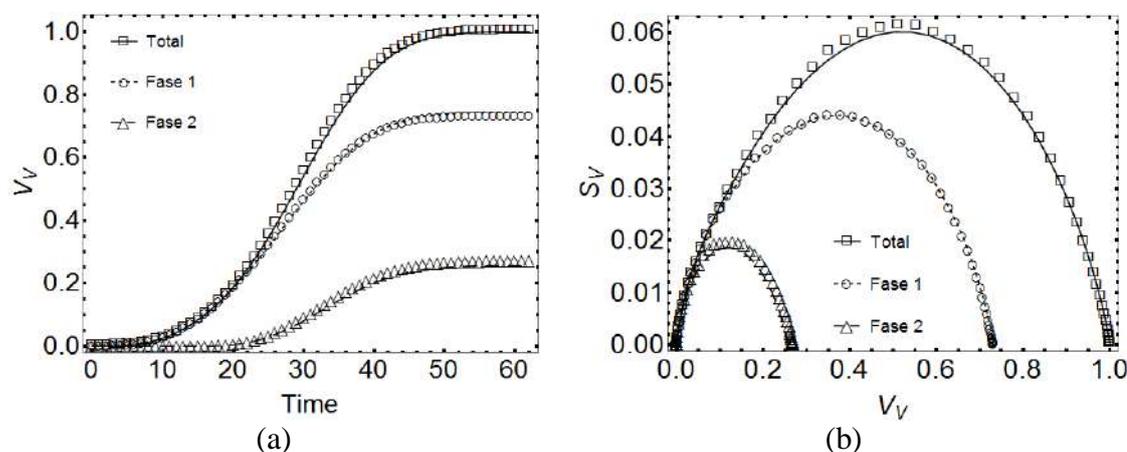
### 8.2.2.1. Transformações Sequenciais com $N_1 = N_2 = 254$ e $G_1 = G_2$

Considerou-se para esse caso uma transformação sequencial com número de núcleos  $N_1 = N_2 = 254$ , que representa 15% do número total de núcleos, vide Tabela 4, e velocidades de

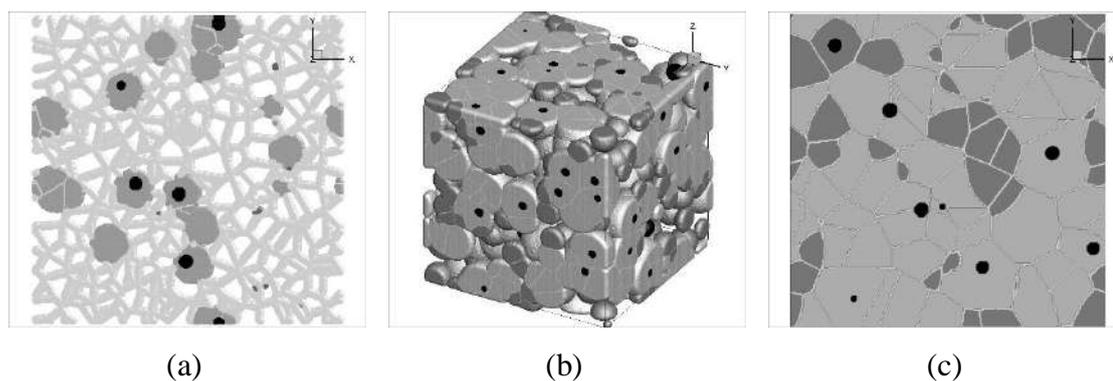
crescimento,  $G_1 = G_2$  com a nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,1$ . Na Figura 87, observa-se uma ótima concordância entre a simulação computacional e o modelo analítico proveniente das Equações (43-45) também para a transformação sequencial.

Na Figura 87 mostra-se um resultado semelhante ao da Figura 55, uma transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 64$ ,  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,1$ , porém nucleação uniformemente aleatória para ambas fases produto. No caso da Figura 87 a diferença crítica é que a fase 1 nucleou na interface matriz/partículas e a fase 2 nos contornos de grão. Ainda assim observa-se um predomínio da fase produto 1, muito embora a fase 1 esteja sujeita a influência do “*impingement*” com as partículas, como foi discutido na seção anterior. Novamente esse predomínio da fase 1 ocorreu devido ao tempo de incubação para a nucleação da fase 2, vide capítulo 7.

Na Figura 88 mostra-se a evolução microestrutural simulada desse caso. Na Figura 88-a se observa os grãos da fase 1 em torno das partículas, esses nuclearam primeiro, e a nucleação da fase 2 nos contornos de grão da matriz policristalina prévia, com isso evidencia-se a nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,1$ . Na Figura 88-c tem-se uma corroboração com o predomínio da fase 1, nota-se claramente um maior número de grãos da fase 1, região mais clara.



**Figura 87** – Resultados de transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 254$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



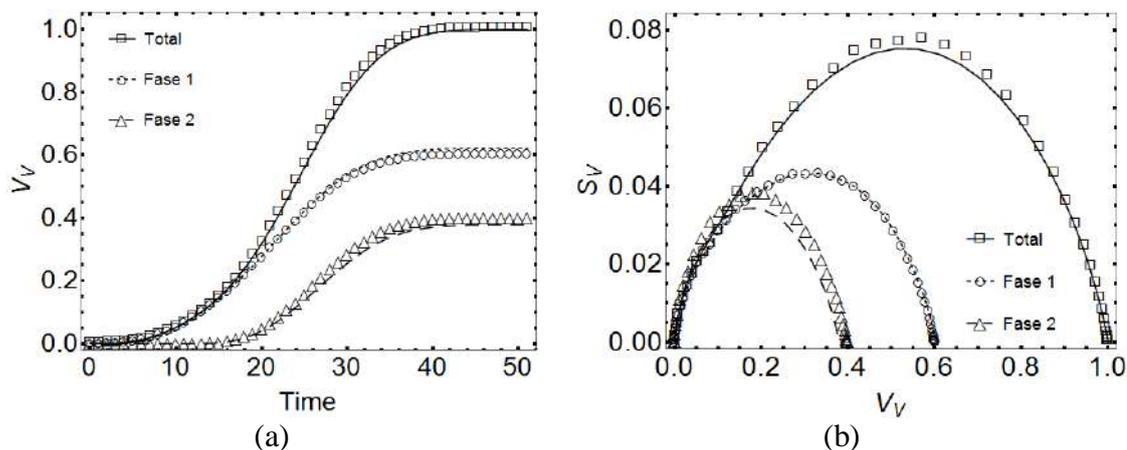
**Figura 88** – Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 254$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a)  $V_{V1} = 0,1$  mostrando a região de origem dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

#### 8.2.2.2. Transformações Sequenciais com $N_1 = N_2 = 676$ e $G_1 = G_2$

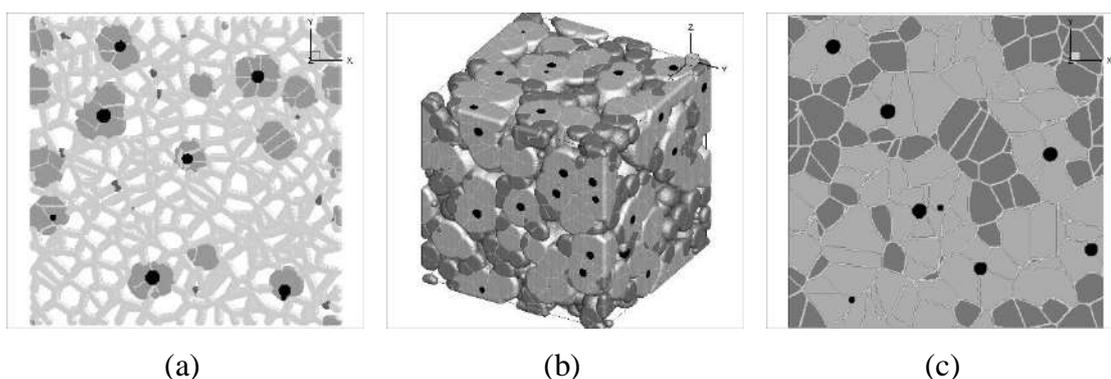
Considerou-se nesse caso uma transformação sequencial com número de núcleos  $N_1 = N_2 = 676$ , que representa 40% do número total de núcleos, vide Tabela 4, e velocidades de crescimento,  $G_1 = G_2$  com a nucleação da fase 2 também quando  $V_{V1} = 0,1$ . Na Figura 89, novamente observa-se uma boa concordância entre a simulação computacional e o modelo analítico.

Nesse caso nota-se que houve uma diminuição do predomínio da fase 1 sobre a transformação. As transformações simultâneas da seção anterior, mostrou que quanto maior o número de núcleos para cada fase, menor é a contribuição da fase 1 para a transformação. Como já discutido, essa menor contribuição da fase 1 se dá pelo “*impingement*” da fase 1 com as partículas e com os seus grãos vizinhos que também nuclearam na mesma partícula. Comparando-se a Figura 89 com o caso anterior em que  $N_1 = N_2 = 254$ , Figura 87, evidencia-se que com um pouco mais do dobro de núcleos o tempo de incubação para o surgimento da fase 2 passa a ter uma menor influência. Entretanto, mesmo que menor, ainda há o predomínio da fase 1 na transformação, ela ocupa cerca de 60% do volume disponível da matriz.

Na Figura 90, tem-se a evolução microestrutural desse caso. Na Figura 90-a, nota-se claramente a nucleação da fase 2 nos contornos de grão da matriz policristalina prévia quando  $V_{V1} = 0,1$ .



**Figura 89** – Resultados de transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 676$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



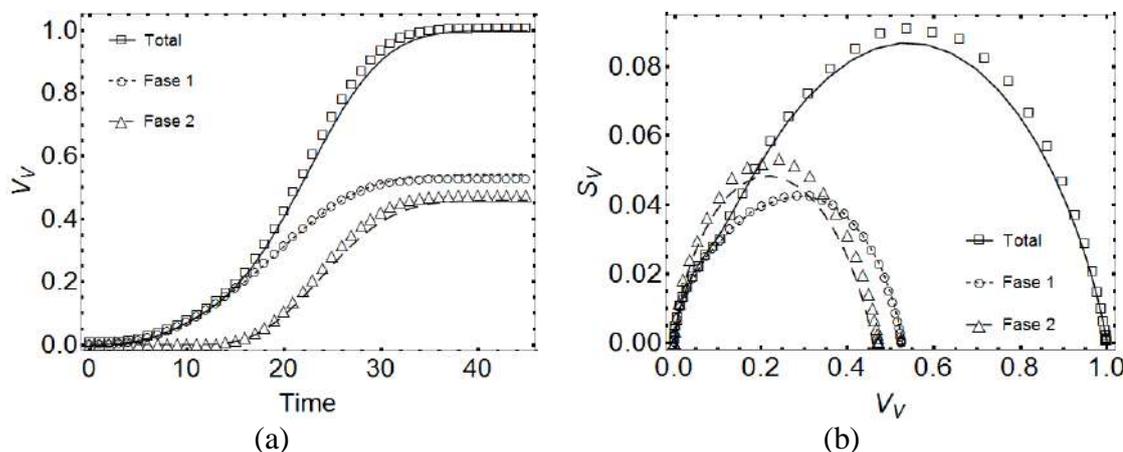
**Figura 90** – Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 676$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a)  $V_{V1} = 0,1$  mostrando a região de origem dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

### 8.2.2.3. Transformações Sequenciais com $N_1 = N_2 = 1182$ e $G_1 = G_2$

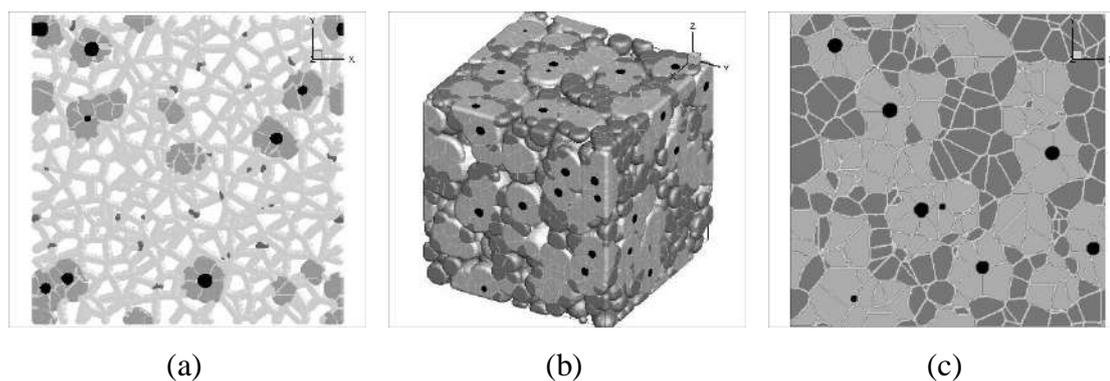
Para esse caso tem-se uma transformação sequencial com número de núcleos  $N_1 = N_2 = 1182$ , que representa 70% do número total de núcleos, vide Tabela 4, e velocidades de crescimento,  $G_1 = G_2$  com a nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,1$ . Na Figura 91 mostra-se mais uma vez que houve uma ótima concordância entre a simulação computacional e o modelo analítico.

Nota-se nesse caso um fenômeno interessante, apesar do tempo de incubação da fase 2 a transformação acaba com uma contribuição parecida de cada fase, ou seja, nesse caso pode-se considerar aproximadamente  $V_{V1} = V_{V2} = 0,5$  ao fim da transformação. Ao se comparar com casos anteriores, a transformação sequencial que possui os mesmos parâmetros para as fases produto, mostrada na Figura 55, mostra que um tempo de incubação de apenas  $V_{V1} = 0,1$  é suficiente para causar um predomínio de 80% da fase 1. Em contrapartida a transformação simultânea com os mesmos parâmetros do que a transformação sequencial dessa seção, ou seja, com  $N_1 = N_2 = 1182$  e  $G_1 = G_2$ , Figura 83, mostra que pelo fato da fase 1 nuclear na interface matriz/partículas e a fase 2 nuclear nos contornos de grão, há um predomínio de aproximadamente 80% da fase 2. Portanto, o fato da transformação sequencial dessa seção não apresentar uma disparidade muito grande entre as fases produto mesmo com a incidência do tempo de incubação da fase 2, condiz com as discussões anteriores. O fato de a fase 1 ter seu crescimento afetado pelo “*impingement*” permite que a fase 2 alcance a fase 1, mitigando o efeito do tempo de incubação.

Na Figura 92 mostra-se a microestrutura simulada, nota-se mais uma vez o surgimento da fase 2 nos contornos de grão, quando  $V_{V1} = 0,1$ . Também pode-se notar que há uma similaridade entre as proporções das fases produto, condizendo com as considerações anteriores.



**Figura 91** – Resultados de transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 1182$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.

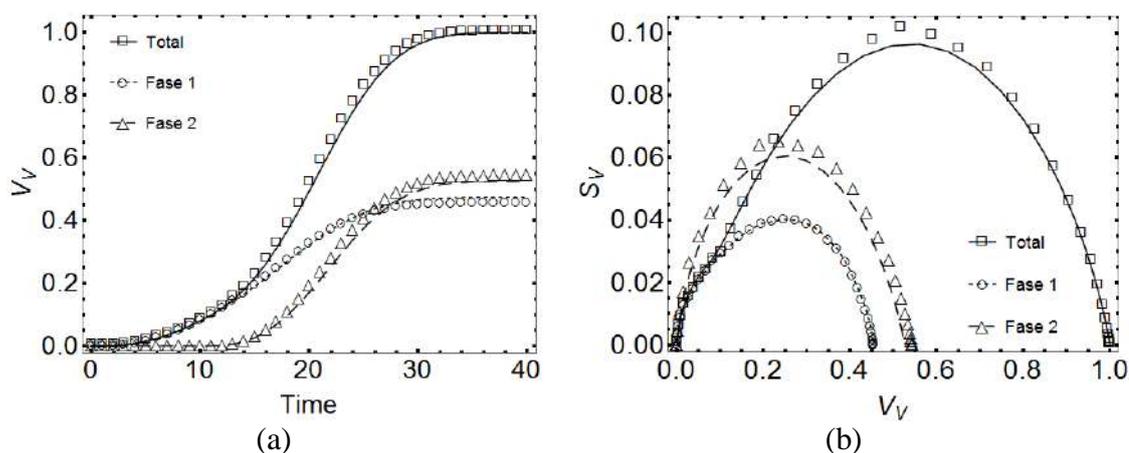


**Figura 92** – Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 1182$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a)  $V_{V1} = 0,1$  mostrando a região de origem dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

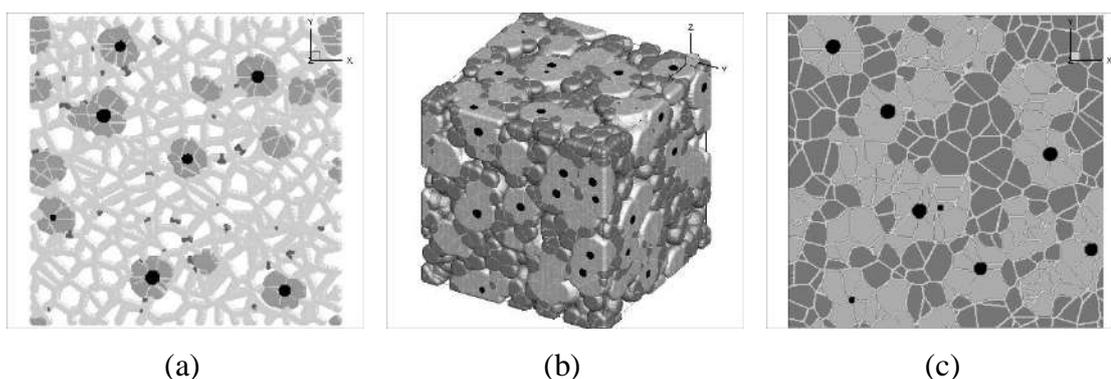
#### **8.2.2.4. Transformações Sequenciais com $N_1 = N_2 = 1688$ e $G_1 = G_2$**

Considerou-se para esse caso uma transformação sequencial com número de núcleos  $N_1 = N_2 = 1688$ , que representa 100% do número total de núcleos, vide Tabela 4, e novamente velocidades de crescimento  $G_1 = G_2$  com a nucleação da fase 2 quando  $V_{V1} = 0,1$ . Na Figura 93, também se observa uma ótima concordância entre a simulação computacional e o modelo analítico proveniente das Equações (43-45). Nesse caso, o aumento do número de núcleos permitiu que a fase 2 ultrapassasse a fase 1, mitigando mais uma vez o efeito do tempo de incubação para o surgimento da fase 2. Esse fato já era esperado, baseado nas discussões anteriores a fase 1 tem seu crescimento cada vez mais afetado pelo “*impingement*” a medida que se aumenta o número de núcleos.

Na Figura 94, tem-se a evolução microestrutural simulada desse caso. Nota-se uma microestrutura interessante onde aparecem ilhas de grãos da fase 1 em torno das partículas, e essas ilhas foram envolvidas pelos grãos da fase 2. Pela Figura 94-a se evidencia a presença dos grãos da fase 1 na interface matriz/partículas e a nucleação da fase 2 nos contornos de grão quando  $V_{V1} = 0,1$ .



**Figura 93** – Resultados de transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 1688$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a)  $V_V$  versus tempo, (b) caminho microestrutural.



**Figura 94** – Representação da microestrutura simulada de transformação sequencial com  $N_1 = N_2 = 1688$  e  $G_1 = G_2$  e nucleação da fase 1 na interface matriz/partículas e da fase 2 nos contornos de grão quando  $V_{V1} = 0,1$ : (a)  $V_{V1} = 0,1$  mostrando a região de origem dos núcleos, (b)  $V_V = 0,5$ , (c) Seção 2D da matriz totalmente transformada.

Cabe destacar que o formato e principalmente o tamanho de grão da matriz policristalina prévia, podem afetar as transformações nas quais a nucleação ocorre nos contornos de grão. Esse fato está fora do escopo desta tese, entretanto já foi estudado previamente [61].

Analisando-se os resultados exibidos nesse capítulo nota-se claramente que cada sítio preferencial teve um efeito muito distinto nas transformações. O fato de a fase produto 1 ter nucleado exclusivamente na interface matriz/partículas e a fase produto 2 nos contornos de grão fez com que as duas fases apresentassem um comportamento muito distinto. Desse modo pôde-se analisar bem as transformações simultâneas e sequenciais apenas analisando-se as curvas de

$V_V$  versus Tempo e a curva do caminho microestrutural, assim como as microestruturas simuladas. Entretanto, trata-se de transformações com certo grau de complexidade, deste modo é difícil se afirmar que a boa análise dessas transformações, analisando-se somente esses parâmetros, será possível para todos os casos que podem ocorrer. Por exemplo, quando se envolve a variação do tamanho de grão da matriz policristalina prévia, aumenta-se a complexidade do problema, e nesse caso recomenda-se a análise da contiguidade e dispersão [61]. Portanto, para casos mais complexos aconselha-se o uso dos parâmetros propostos no capítulo 7. A análise desses parâmetros adicionais pode ajudar o pesquisador a melhor compreender as características das transformações simultâneas e sequenciais em questão.

### 8.3. CONCLUSÕES

Um modelamento computacional e analítico foi empregado para investigar transformações simultâneas e sequenciais em que uma fase matriz policristalina que possui precipitados esféricos transforma-se em duas fases produto, 1 e 2. Nesse estudo a nucleação de ambas as fases ocorreu em sítios preferenciais, de modo que a fase produto 1 nucleou na interface matriz/partículas e a fase produto 2 nos contornos de grão. A partir dos resultados obtidos nesse capítulo conclui-se que:

- Todas as simulações computacionais mostraram uma ótima concordância com o modelo analítico proveniente das Equações (43-45). Destaca-se que nenhum ajuste de curva foi feito, o que reforça a solidez da metodologia de simulação.
- Através do princípio da superposição abordado por Rios e Villa[12] empregou-se as Equações (43-45) que foram desenvolvidas a partir dos modelos individuais, Equações (3-5).
- Obteve-se exemplos de microestruturas 3D, que podem ser produzidas por essas transformações simultâneas e sequencias particulares. Devido à nucleação das fases em sítios preferenciais as microestruturas tiveram características distintas.

- Esse capítulo unificou com sucesso a metodologia desenvolvida nos capítulos anteriores, onde tratou-se das transformações simultâneas e sequenciais, abordadas no capítulo 7, com a nucleação das fases produto em sítios preferenciais. Um desses sítios foi a superfície de partículas, situação abordada nos capítulos 5 e 6.
- A fase 1 que nucleou na interface matriz/partículas sofre imediatamente com o “*impingement*” com as partículas, e além disso, quanto maior o número de núcleos, maior o  $c$ , e como consequência aumenta-se a probabilidade de que os núcleos que surgiram nas partículas se encontrem, logo, a fase 1 tem seu crescimento ainda mais afetado pelo “*impingement*”. O fato de a fase 1 ter seu crescimento afetado permite um maior predomínio da fase 2 na transformação simultânea, e na transformação sequencial permite que a fase 2 alcance a fase 1, mitigando o efeito do tempo de incubação.
- Os grãos da fase 2, que surgiram nos contornos de grão, mantêm seu formato esférico desde o início, e apesar de ela também ter tido um aumento no número de núcleos, a área de contornos de grão, é evidentemente muito maior que a área de partículas, portanto a fase 2 tem menor probabilidade de encontrar um grão vizinho do que a fase 1, assim sofre menos com o “*impingement*”.

## 9. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Simulações computacionais e métodos analíticos foram empregados para o estudo de transformações de fase. A primeira transformação considerada foi a de uma matriz que contém precipitados transformando-se em uma outra fase, em que a nucleação dessa nova fase se deu na interface matriz/partículas. Como um segundo passo considerou-se as transformações simultâneas e sequenciais. A terceira transformação foi a unificação das duas transformações anteriores, onde desenvolveu-se todo o modelamento para as transformações simultâneas e sequenciais em que a nucleação das fases produto ocorreu em sítios preferenciais. A partir dos resultados obtidos nesta tese conclui-se que:

- Obteve-se um modelo computacional para as transformações de fase em que uma fase matriz, que possui partículas esféricas, se transforma em outra única fase produto onde a nucleação dessa fase produto ocorre com todos os núcleos situados na interface matriz/partículas. Esse código computacional se mostrou robusto e conseguiu simular com fidelidade diversas situações, inclusive casos que podem ser difíceis de se investigar em materiais reais;
- As simulações obtidas com o modelo do item anterior foram comparadas diretamente com o novo modelo analítico para nucleação em partículas proposto por Alves, Villa e Rios[11], vide capítulo 5. As simulações corroboraram muito bem com o modelo analítico para até uma fração volumétrica de partículas,  $V_{VP} = 0,1$ . Vale o destaque para as simulações computacionais que ajudaram a mostrar dentro de quais limites a solução analítica pode ser adotada.

- O novo modelo analítico para nucleação em partículas proposto por Alves, Villa e Rios[11], leva em conta partículas que possuem formato esférico, entretanto, em casos reais é de conhecimento que existem partículas de diversas geometrias. Assim, expandiu-se a metodologia computacional desenvolvida para partículas esféricas às transformações em que a nucleação da nova fase ocorreu na interface de inclusões não metálicas que são comumente encontradas em aços. Adotou-se os casos explícitos na norma ASTM-E45[16], portanto, as inclusões não metálicas consideradas foram: Tipo A (Sulfeto), Tipo B (Alumina), Tipo C (Silicato) e Tipo D (Óxido). Como foi visto no capítulo 6, o novo modelo de Alves, Villa e Rios[11] foi facilmente ajustado, fazendo-se necessário apenas o conhecimento da área superficial e do tamanho médio das inclusões não metálicas, o que pode ser facilmente medido pelo experimentalista.
- Como foi mostrado no capítulo 7, estudou-se em detalhes as transformações simultâneas e sequenciais. Para esse estudo detalhado introduziu-se parâmetros, calculados diretamente das microestruturas simuladas, que contribuíram para uma melhor compreensão qualitativa e quantitativa das microestruturas além dos tradicionais  $V_V$  e  $S_V$ . Três novos parâmetros descritores microestruturais para materiais multifásicos, contiguidade, dispersão e duplex, foram definidos. Embora nessa tese tenha se considerado a formação de apenas duas fases produto, esses parâmetros foram também generalizados para casos de transformações que contenham mais de duas fases produto.
- O capítulo 8, unificou as metodologias empregadas nos capítulos anteriores. Para tal, considerou-se a transformação de uma fase matriz policristalina que possui precipitados esféricos em duas fases produto, ocorrendo de maneira simultânea e sequencial, entretanto, buscou-se estudar qual a influência de dois sítios preferenciais. Esses dois sítios preferenciais foram a interface matriz/partículas, onde nucleou a fase produto 1, e os contornos de grão, onde nucleou a fase produto 2. Notou-se que a fase produto 1 teve seu crescimento precocemente afetado pelo “*impingement*” com as partículas e com os grãos vizinhos que também nuclearam na mesma partícula. Por outro lado, os grãos da fase 2, que surgiram nos contornos de grão tiveram uma menor influência do “*impingement*”. Essa diferença de “*impingement*” entre as fases produto, permite um maior predomínio da fase 2 na transformação simultânea, e na transformação sequencial permite que a fase 2 alcance a fase 1, mitigando o efeito do tempo de incubação.

## **10. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS**

- Sabe-se que nos materiais reais existem diversos tipos de partículas que se diferem em composição, propriedades mecânicas, formas geométricas e entre outros. Portanto, para um trabalho posterior sugere-se a aplicação dos modelos computacional e analítico de nucleação em partículas, para diferentes formas geométrica de partículas. Através desse estudo pode-se obter até que ponto o modelo analítico poderá ser generalizado e adotado com segurança nas transformações desse tipo.
- A nucleação é um fenômeno muito importante, muitos pesquisadores estudam esse fenômeno em detalhes. Pela teoria clássica da nucleação considera-se que há sítios preferenciais para que ela ocorra e nesta tese considerou-se dois desses sítios, os contornos de grão e as superfícies de partículas, entretanto, existem outros sítios preferenciais, a exemplo, os vértices e arestas dos grãos. Logo, como uma continuação desta tese pode-se considerar outros sítios preferenciais para a nucleação.
- Com o contínuo avanço dos materiais serão cada vez mais comuns transformações de fase com alto grau de complexidade. Um aumento de complexidade que pode ser considerado é a transformação da fase matriz em mais de duas fases produto. Assim sendo, justifica-se ir além do estudo abordado por esta tese e considerar casos em que há a formação de mais de duas fases produto ocorrendo de maneira simultânea ou sequencial.

## **11. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

- [1] JOHNSON, W. A. e MEHL, R. F. Reaction Kinetics in Processes of Nucleation and Growth. **Transactions Metallurgical Society**, A.I.M.E, v. 135, p. 416–441, 1939.
- [2] KOLMOGOROV, A. N. On the Statistical Theory of Metal Crystallization. **Isvetiia Akademii Nauk, SSSR-Seriia Matematicheskaiia**, v. 1, p. 335–359, 1937.
- [3] AVRAMI, M. Kinetics of Phase Change. I General Theory. **The Journal of Chemical Physics**, v. 7, n. 12, p. 1103, 1939.
- [4] AVRAMI, M. Kinetics of Phase Change II. Transformation – Time Relations for Random Distribution of Nuclei. **Journal of Chemical Physics**, v. 8, p. 212–224, 1940.
- [5] AVRAMI, M. Granulation, Phase Change, and Microstructure Kinetics of Phase Change. III. **The Journal of Chemical Physics**, v. 9, n. 2, p. 177, 1941.
- [6] CAHN, J. W. The kinetics of grain boundary nucleated reactions. **Acta Metallurgica**, v. 4, n. 5, p. 449–459, 1956.
- [7] DEHOFF, R. T. Annealing processes - Recovery, Recrystallization and Grain Growth. In: N. Hansen, D. Juul Jensen, T. Leffers, B. Ralph (Eds.), **Risø Natl. Lab.**, Roskilde, Denmark, 1986. p. 35–52.
- [8] GOKHALE, A. M. e ISWARAN, C. V. e DEHOFF, R. T. Use of the stereological counting measurements in testing theories of growth rates. **Metallurgical Transactions A**, v. 10, n. 9, p. 1239–1245, 1979.

- [9] VANDERMEER, R. A. e MASUMURA, R. A. e RATH, B. B. Microstructural paths of shape-preserved nucleation and growth transformations. **Acta Metallurgica et Materialia**, v. 39, n. 3, p. 383–389, 1991.
- [10] RIOS, P. R. e VILLA, E. Transformation kinetics for inhomogeneous nucleation. **Acta Materialia**, v. 57, n. 4, p. 1199–1208, 2009.
- [11] ALVES, A. L. M. e VILLA, E. e RIOS, P. R. Transformation kinetics for nucleation on second-phase particles: analytical solution and computer simulation. **Acta Materialia**, v. 131, p. 523–533, 2017.
- [12] RIOS, P. R. e VILLA, E. Simultaneous and sequential transformations. **Acta Materialia**, v. 59, n. 4, p. 1632–1643, 2011.
- [13] ALVES, A. L. M. *Simulação Computacional de Reações com Nucleação e Crescimento de Fases Simultâneas e Sequenciais pelo Método do Cone Causal*. 2015. 148f. Dissertação(Mestrado) - Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2015.
- [14] ALVES, A. L. M. e ASSIS, W. L. S. e RIOS, P. R. Computer simulation of sequential transformations. **Acta Materialia**, v. 126, p. 451–468, 2017.
- [15] GOETZ, R. L. Particle stimulated nucleation during dynamic recrystallization using a cellular automata model. **Scripta Materialia**, v. 52, n. 9, p. 851–856, 2005.
- [16] ASTM E45. Standard Test Methods for Determining the Inclusion Content of Steel. **Astm**, p. 1–19, 2007.
- [17] BURGER, M. e CAPASSO, V. e SALANI, C. Modelling multi-dimensional crystallization of polymers in interaction with heat transfer. **Nonlinear Analysis: Real World Applications**, v. 3, n. 1, p. 139–160, 2002.
- [18] VANDERMEER, R. A. e JUUL JENSEN, D. Microstructural path and temperature dependence of recrystallization in commercial aluminum. **Acta Materialia**, v. 49, n. 11, p. 2083–2094, 2001.
- [19] RIOS, P. R. e GUIMARÃES, J. R. C. Microstructural path analysis of athermal martensite. **Scripta Materialia**, v. 57, n. 12, p. 1105–1108, 2007.
- [20] RIOS, P. R. e GUIMARÃES, J. R. C. Formal analysis of isothermal martensite spread. **Materials Research**, v. 11, n. 1, p. 103–108, 2008.

- [21] RIOS, P. R. e colab. Abnormal grain growth kinetics of BaTiO<sub>3</sub> with an excess TiO<sub>2</sub>. **Acta Materialia**, v. 46, n. 5, p. 1617–1623, 1998.
- [22] YAMAMOTO, T. e SAKUMA, T. e RIOS, P. R. Application of microstructural path analysis to abnormal grain growth of BaTiO<sub>3</sub> with an excess TiO<sub>2</sub>. **Scripta Materialia**, v. 39, n. 12, p. 1713–1717, 1998.
- [23] BOTT, I. de S. e RIOS, P. R. On the Effectiveness of Inclusions as Nucleation Sites in Weld Deposits. **Scripta Materialia**, v. 38, n. 8, p. 1269–1274, 1998.
- [24] GAWNE, D. T. e HIGGINS, G. T. Associations Between Spherical Particles of Two Dissimilar Phases. **Journal of Materials Science**, v. 6, p. 403–412, 1971.
- [25] NES, E. The effect of a fine particle dispersion on heterogeneous recrystallization. **Acta Metallurgica**, v. 24, n. 5, p. 391–398, 1976.
- [26] HUMPHREYS, F. J. The nucleation of recrystallization at second phase particles in deformed aluminium. **Acta Metallurgica**, v. 25, n. 11, p. 1323–1344, 1977.
- [27] KOKEN, E. e colab. The role of particle distribution in recrystallization in two-phase alloys. **Materials Science and Engineering**, v. 104, n. C, p. 163–168, 1988.
- [28] NES, E. e ØRSUND, R. A model for the nucleation of recrystallization from particles: the texture aspect. **Scripta Metallurgica**, v. 22, p. 671–676, 1988.
- [29] ØRSUND, R. e NES, E. Effect of particles on recrystallization textures in aluminium-manganese alloys. **Scripta Metallurgica**, v. 22, n. 5, p. 665–669, 1988.
- [30] HABIBY, F. e HUMPHREYS, F. J. The effect of particle stimulated nucleation on the recrystallization texture of an AlSi alloy. **Scripta Metallurgica et Materialia**, v. 30, n. 6, p. 787–790, 1994.
- [31] HUMPHREYS, F. J. Particle stimulated nucleation of recrystallization at silica particles in nickel. **Scripta Materialia**, v. 43, n. 7, p. 591–596, 2000.
- [32] DE COCK, T. e colab. Global recrystallisation model of low carbon sheet steels with different cementite contents. **Materials Science and Engineering A**, v. 519, n. 1–2, p. 9–18, 2009.
- [33] ZHANG, Y. e colab. Three-dimensional investigation of recrystallization nucleation in a particle-containing Al alloy. **Scripta Materialia**, v. 67, n. 4, p. 320–323, 2012.

- [34] ZHANG, S. e colab. The particle stimulated nucleation in Ti-35V-15Cr-0.3Si-0.1C alloy. **Materials Letters**, v. 166, p. 317–320, 2016.
- [35] LIU, F. e colab. Analysis of solid state phase transformation kinetics : models and recipes. **International Materials Reviews**, v. 52, n. 4, p. 193–212, 2007.
- [36] CHIU, S. N. e colab. **Stochastic Geometry and Its Applications**. 3. ed. Chichester - United Kingdom: Wiley, 2013.
- [37] SEKIMOTO, K. Evolution of the domain structure during the nucleation-and-growth process with non-conserved order parameter. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 135, n. 2–3, p. 328–346, 1986.
- [38] RICKMAN, J. M. e TONG, W. S. e BARMAK, K. Impact of heterogeneous boundary nucleation on transformation kinetics and microstructure. **Acta Materialia**, v. 45, n. 3, p. 1153–1166, 1997.
- [39] RICKMAN, J. M. e BARMAK, K. Kinetics of first-order phase transitions with correlated nuclei. **Physical Review E**, v. 022121, p. 1–5, 2017.
- [40] TONG, W. S. e RICKMAN, J. M. e BARMAK, K. Impact of short-range repulsive interactions between nuclei on the evolution of a phase transformation. **Journal of Chemical Physics**, v. 114, n. 2, p. 915–922, 2001.
- [41] TOMELLINI, M. e FANFONI, M. e VOLPE, M. Phase transition kinetics in the case of nonrandom nucleation. **Physical Review B**, v. 65, 2002.
- [42] VILLA, E. e RIOS, P. R. Transformation kinetics for nucleus clusters. **Acta Materialia**, v. 57, n. 13, p. 3714–3724, 2009.
- [43] VILLA, E. e RIOS, P. R. Transformation kinetics for surface and bulk nucleation. **Acta Materialia**, v. 58, n. 7, p. 2752–2768, 2010.
- [44] VILLA, E. e RIOS, P. R. Transformation kinetics for nucleation on random planes and lines. **Image Analysis and Stereology**, v. 30, n. 3, p. 153–165, 2011.
- [45] RIOS, P. R. e VILLA, E. An analytical approach to the effect of a distribution of growth velocities on recrystallization kinetics. **Scripta Materialia**, v. 65, n. 11, p. 938–941, 2011.

- [46] RIOS, P. R. e VILLA, E. Application of Stochastic Geometry to Nucleation and Growth Transformations. In: MOLODOV, D. A. (Org.). **Microstructural Design of Advanced Engineering Materials**. 1. ed. Weinheim-Germany: Wiley-VCH, 2013. p. 119–159.
- [47] OLIVEIRA, S. C. De e colab. Computer simulation of simultaneous evolution of individual texture components during recrystallization of an IF steel. **Materials Research**, v. 16, n. 5, p. 1195–1202, 2013.
- [48] RIOS, P. R. e colab. Analytical Expressions for Formal Kinetics. **Materials Science Forum**, v. 715–716, p. 971–976, 2012.
- [49] RIOS, P. R. e colab. Kinetics of transformations nucleated on random parallel planes: analytical modelling and computer simulation. **Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering**, v. 20, n. 3, p. 035017, 2012.
- [50] JENSEN, D. J. e HANSEN, N. e HUMPHREYS, F. J. Texture development during recrystallization of aluminium containing large particles. **Acta Metallurgica**, v. 33, n. 12, p. 2155–2162, 1985.
- [51] DE SIQUEIRA, R. P. e SANDIM, H. R. Z. e RAABE, D. Particle stimulated nucleation in coarse-grained ferritic stainless steel. **Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science**, v. 44, n. 1, p. 469–478, 2013.
- [52] BARBARO, F. J. e KRAUKLIS, P. e EASTERLING, K. E. Formation of acicular ferrite at oxide particles in steels. **Materials Science and Technology**, v. 5, n. 11, p. 1057–1068, 1989.
- [53] BABU, S. S. The mechanism of acicular ferrite in weld deposits. **Current Opinion in Solid State and Materials Science**, v. 8, n. 3–4, p. 267–278, 2004.
- [54] HUMPHREYS, F. J. Modelling mechanisms and microstructures of recrystallisation. **Materials Science and Technology**, v. 8, n. 2, p. 135–144, 1992.
- [55] SCHÄFER, C. e GOTTSTEIN, G. Modeling Recrystallization of Aluminum Alloys: A Refined Approach to Particle Stimulated Nucleation. **Materials Science Forum**, v. 558–559, p. 1169–1175, 2007.
- [56] VANDERMEER, R. A. e JUUL JENSEN, D. Modeling Microstructural Evolution of Multiple Texture Components during Recrystallization. **Acta Metallurgica et Materialia**, v. 42, n. 7, p. 2427–2436, 1994.

- [57] VANDERMEER, R. A. e JUUL JENSEN, D. Quantifying recrystallization nucleation and growth kinetics of cold-worked copper by microstructural analysis. **Metallurgical and Materials Transactions A**, v. 26, n. 9, p. 2227–2235, 1995.
- [58] JONES, S. J. e BHADESHIA, H. K. D. H. Kinetics of the simultaneous decomposition of austenite into several transformation products. **Acta Materialia**, v. 45, n. 7, p. 2911–2920, 1997.
- [59] JONES, S. J. e BHADESHIA, H. K. D. H. Competitive Formation of Inter- and Intragranularly Nucleated Ferrite. **Metallurgical and Materials Transactions A**, v. 28, n. 10, p. 2005–2013, 1997.
- [60] CAHN, J. W. e HAGEL, W. C. Decomposition of Austenite by Diffusional Processes. In: ZACKAY, V. F.; AARONSON, H. I. (Org.). **Proceedings of a Symposium Held in Philadelphia, Pennsylvania, October 19, 1960, Under the Sponsorship of the Ferrous Metallurgy Committee of the Institute of Metals Division, the Metallurgical Society**. New York: Interscience Publishers, 1960. p. 131–196.
- [61] DA FONSECA, G. D. e colab. Microstructural descriptors to characterize computer simulated microstructures generated by nucleation on a Kelvin polyhedra network. **Journal of Materials Research and Technology**, v. 7, n. 3, p. 337–341, 2018.
- [62] HORNBOKEN, E. On the microstructure of alloys. **Acta Metallurgica**, v. 32, n. 5, p. 615–627, 1984.
- [63] VANDERMEER, R. A. Microstructural descriptors and the effects of nuclei clustering on recrystallization path kinetics. **Acta Materialia**, v. 53, n. 5, p. 1449–1457, 2005.
- [64] VENTURA, H. S. e colab. Influence of an exclusion radius around each nucleus on the microstructure and transformation kinetics. **Materialia**, v. 2, p. 167–175, 2018.
- [65] RIOS, P. R. e colab. Impingement function for nucleation on non-random sites. **Acta Materialia**, v. 55, n. 13, p. 4339–4348, 2007.
- [66] ASSIS, W. L. Da S. *Modelamento Numérico de Nucleação e Crescimento via Autômato Celular*. 2010. 169 f. Tese(Doutorado) - Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2010.

- [67] ASSIS, W. L. Da S. *Investigação do Efeito da Nucleação, da Velocidade de Crescimento e da Distribuição da Energia Armazenada na Recristalização pelo Método do Autômato Celular em Três Dimensões*. 2006. 128 f. Dissertação(Mestrado) - Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2006.
- [68] CAHN, J. W. The Time Cone Method for Nucleation and Growth Kinetics on a Finite Domain. **Materials Research Society Symposium - Proceedings**, v. 398, p. 425–437, 1996.
- [69] MAGNUSSON, H. e JUUL JENSEN, D. e HUTCHINSSON, B. Growth rates for different texture components during recrystallization of IF steel. **Scripta Materialia**, v. 44, n. 3, p. 435–441, 2001.
- [70] FROST, H. J. e THOMPSON, C. V. The effect of nucleation conditions on the topology and geometry of two-dimensional grain structures. **Acta Metallurgica**, v. 35, n. 2, p. 529–540, 1987.
- [71] FROST, H. J. e THOMPSON, C. V. Computer Simulation of Microstructural Evolution in Thin Films. **Journal of Electronic Materials**, v. 17, n. 5, p. 447–458, 1988.
- [72] FROST, H. J. Microstructural evolution in thin films. **Materials Characterization**, v. 32, n. 4, p. 257–273, 1994.

## 12. APÊNDICES

### 12.1. TRABALHOS PUBLICADOS DURANTE O DESENVOLVIMENTO DESTA TESE

#### 12.1.1. Artigos completos publicados em periódicos

1. VENTURA, H. S.; ALVES, A. L. M.; ASSIS, W. L. S.; VILLA, E.; RIOS, P. R. Influence of an exclusion radius around each nucleus on the microstructure and transformation kinetics. **Materialia**, v. 2, p. 167-175, 2018.
2. DA FONSECA, G. D.; ALVES, A. L. M.; DA COSTA, M. F. B.; LYRIO, M. S.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Modeling and Simulation of Nucleation and Growth Transformations with Nucleation on Interfaces of Kelvin Polihedra Network. **Materials Science Forum (online)**, v. 930, p. 299-304, 2018.
3. DA FONSECA, G. D.; SIQUEIRA, F. da S.; ALVES, A. L. M.; Assis, ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Microstructural descriptors to characterize computer simulated microstructures generated by nucleation on a Kelvin polyhedra network. **Journal of Materials Research and Technology-JMR&T**, v. 7, p. 337-341, 2018.

4. ALVES, A. L. M.; DA FONSECA, G. D.; DA COSTA, M. F. B.; Assis, ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Evolution of Individual Grains in 3d Microstructure Generated by Computational Simulation of Transformations Involving Two Phases. **Materials Science Forum (online)**, v. 930, p. 305-310, 2018.

5. ALVES, A. L. M.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Computer simulation of sequential transformations. **Acta Materialia**, v. 126, p. 451-468, 2017.

6. ALVES, A. L. M.; VILLA, E.; RIOS, P. R. Transformation kinetics for nucleation on second-phase particles: analytical solution and computer simulation. **Acta Materialia**, v. 131, p. 523-533, 2017.

#### **12.1.2. Trabalhos completos publicados em anais de congressos**

1. RIOS, P. R.; VENTURA H. S., ALVES, A. L. M.; ASSIS, W. L. S.; VILLA, E. Microstructural evolution of a transformation in which there is an exclusion zone around each nucleus. In: **148th Annual Meeting and Exhibition, TMS**, San Antonio, Texas, 2019.

2. SÁ, G. M. S.; ALVES, A. L. M.; FONSECA, G. D.; VENTURA, H. S.; SIQUEIRA, F. S.; SANTOS, J. M.; GARCIA, L. G. C.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Comparação entre os efeitos da nucleação não homogênea e da velocidade não homogênea via cone causal. In: **73º Congresso Anual da ABM Internacional**, São Paulo, 2018.

3. VENTURA, H. S.; DUARTE, A. C. L.; ALVES, A. L. M.; FONSECA, G. D.; SÁ, G. M. S.; SIQUEIRA, F. S.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Efeito da densidade de núcleos na microestrutura e na cinética de transformação de fase com zona de exclusão em 2D. In: **73º Congresso Anual da ABM Internacional**, São Paulo, 2018.

4. FONSECA, G. D.; ALVES, A. L. M.; VENTURA, H. S.; LYRIO, M. S.; TOLEDO, P. V. V.; SIQUEIRA, F. S.; SANTOS, J. M.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Simulação computacional da taxa constante de nucleação numa rede poliédrica de kelvin. In: **73º Congresso Anual da ABM Internacional**, São Paulo, 2018.

5. SIQUEIRA, F. S.; LYRIO, M. S.; MARTINS, L. R.; COTRIM, F. A. D.; SANTOS, J. M.; ALVES, A. L. M.; FONSECA, G. D.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Influência do tempo de incubação de segunda fase no tamanho de grão por meio de simulação computacional. In: **73º Congresso Anual da ABM Internacional**, São Paulo, 2018.
6. ALVES, A. L. M.; FONSECA, G. D.; SIQUEIRA, F. S.; DUARTE, A. C. L.; VENTURA, H. S.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Novo modelo de nucleação em partículas aplicado a inclusões não metálicas nos aços. In: **73º Congresso Anual da ABM Internacional**, São Paulo, 2018.
7. DUARTE, A. C. L.; VENTURA, H. S.; ALVES, A. L. M.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R.; SIQUEIRA, F. S. Cinética das transformações nucleadas em linhas aleatórias em 2-d: expressão analítica e simulação computacional. In: **IV Congresso Ibero-Americano de Empreendedorismo, Energia, Ambiente e Tecnologia (CIEEMAT)**, Angra dos Reis - RJ, 2018.
8. CLEMENTE, B. L.; COSTA, M. F. B.; FONSECA, G. D.; ALVES, A. L. M.; SIQUEIRA, F. S.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Simulação computacional de nucleação e crescimento de grãos. In: **72º Congresso Anual da ABM Internacional**, São Paulo, 2017.
9. FONSECA, G. D.; SIQUEIRA, F. S.; ALVES, A. L. M.; COSTA, M. F. B.; CLEMENTE, B. L.; SANTOS, J. M.; MOREIRA JÚNIOR, E. P.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Caracterização de uma microestrutura policristalina via descritores microestruturais obtidos por simulação. In: **72º Congresso Anual da ABM Internacional**, São Paulo, 2017.
10. KOPKE JÚNIOR, G. M.; ALVES, A. L. M.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Estudo de transformações simultâneas e sequenciais via cone causal. In: **72º Congresso Anual da ABM Internacional**, São Paulo, 2017. (*Trabalho vencedor do prêmio Villares Metals Bronze*).
11. SIQUEIRA, F. S.; LYRIO, M. S.; FONSECA, G. D.; ALVES, A. L. M.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Determinação das coordenadas dos contornos de grão do ortotetraedro via método cone causal. In: **Encontro Nacional de Modelagem Computacional - ENMC**, Nova Friburgo-RJ, 2017.

12. COSTA, M. F. B.; FONSECA, G. D.; ASSIS, W. L. S.; ALVES, A. L. M.; RIOS, P. R. Estudo do efeito da nucleação não homogênea na recristalização. In: **22° Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais**, Natal, 2016.

13. FONSECA, G. D.; COSTA, M. F. B.; ASSIS, W. L. S.; ALVES, A. L. M.; RIOS, P. R.; LYRIO, M. S. Modelamento e simulação da nucleação e crescimento nos contornos de grão de um ortotetraedraedro. In: **22° Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais**, Natal, 2016.

#### **12.1.3. Resumos expandidos publicados em anais de congressos**

1. COSTA, M. F. B.; FONSECA, G. D.; ALVES, A. L. M.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Importance of nucleation incubation time nucleation of the texture components during recrystallization. In: **XIV Brazilian MRS Meeting**, Rio de Janeiro, 2015.

2. FONSECA, G. D.; ALVES, A. L. M.; COSTA, M. F. B.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Modeling and computer simulation of sequential transformations without overlapping. In: **XIV Brazilian MRS Meeting**, Rio de Janeiro, 2015.

#### **12.1.4. Resumos publicados em anais de congressos**

1. ALVES, A. L. M.; DA FONSECA, G. D.; SIQUEIRA, F. S.; LYRIO, M. S.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Estudo do efeito da nucleação nos contornos de grão de transformações simultâneas via simulação computacional. In: **23° Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais**, Foz do Iguaçu, 2018.

2. SIQUEIRA, F. S.; SAMPAIO, C. H. G.; SANTOS, J. M.; FONSECA, G. D.; ALVES, A. L. M.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R.; FONSECA, G. S. Estudo do efeito da nucleação em cluster via simulação computacional. In: **23° Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais**, Foz do Iguaçu, 2018.

3. SÁ, G. M. S.; VENTURA, H. S.; SIQUEIRA, F. S.; FONSECA, G. D.; ALVES, A. L. M.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Simulação computacional de nucleação em planos paralelos. In: **23º Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais**, Foz do Iguaçu, 2018.
4. FONSECA, G. D.; ALVES, A. L. M.; TOLEDO, P. V. V.; SIQUEIRA, F. S.; LYRIO, M. S.; SÁ, G. M. S.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Comparação do modelo analítico de JMAK com a simulação da taxa constante de nucleação em uma matriz poliédrica. In: **23º Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais**, Foz do Iguaçu, 2018.
5. ALVES, A. L. M.; FONSECA, G. D.; COSTA, M. F. B.; ROCHA, M. A.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Phase transformations with nucleation on interfaces of voronoi cells. In: **XVI Brazil MRS Meeting**, Gramado-RS, 2017.
6. FONSECA, G. D.; ALVES, A. L. M.; COSTA, M. F. B.; FERREIRA, J. L. G.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Simulation versus analytical model in phase transformations by nucleation and growth. In: **XVI Brazil MRS Meeting**, Gramado-RS, 2017.
7. ASSIS, W. L. S.; PRAZERES, T. F.; ANDRADE, A. B. R.; OLIVEIRA, D.; COSTA, M. F. B.; FONSECA, G. D.; ALVES, A. L. M.; FERREIRA, J. L. G. Study of the influence of the distance between layers in the 3d reconstruction technique via serial section. In: **XVI Brazil MRS Meeting**, Gramado-RS, 2017.
8. ALVES, A. L. M.; FONSECA, G. D.; COSTA, M. F. B.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Estudo da evolução de grãos individuais na microestrutura 3D gerada por simulação computacional de transformações envolvendo duas fases. In: **22º Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais**, Natal, 2016.

## 12.2. DEFINIÇÃO DE MAIS PARÂMETROS MICROESTRUTURAIS PARA MATERIAIS MULTIFÁSICOS

Pode-se definir os parâmetros da contiguidade, da dispersão e do duplex, para o caso da transformação de uma fase matriz em duas fases produto de várias maneiras. No que se segue, as equações foram distinguidas pelos índices alfabéticos, omitiu-se as expressões similares para a fase 2 visando a economia de espaço.

Contiguidades:

$$C^{tot} = \frac{2S_V^{11} + 2S_V^{22} + 2S_V^{12}}{S_V^{tot}} \quad (A1);$$

$$C_B^1 = \frac{2S_V^{11}}{S_V^{tot}} \quad (A2);$$

$$C_B^{12} = \frac{2S_V^{12}}{S_V^{tot}} \quad (A3);$$

$$C^M = \frac{2S_V^{MM}}{2S_V^{MM} + S_V^{1M} + S_V^{2M}} \quad (A4);$$

$$C_C^1 = \frac{2S_V^{11}}{2S_V^{11} + 2S_V^{MM}} \quad (A5);$$

$$C_C^{12} = \frac{2S_V^{12}}{2S_V^{12} + 2S_V^{MM}} \quad (A6).$$

Dispersão:

$$\delta_A^{tot} = \frac{S_V^{1M} + S_V^{2M}}{S_V^{MM}} \quad (A7);$$

$$\delta_B^{tot} = \frac{S_V^{1M} + S_V^{2M} + S_V^{12}}{S_V^{MM} + S_V^{11} + S_V^{22}} \quad (A8);$$

$$\delta_B^1 = \frac{S_V^{1M} + S_V^{12}}{S_V^{MM} + S_V^{11} + S_V^{22}} \quad (A9);$$

$$\delta_C^1 = \frac{S_V^{12}}{S_V^{MM} + S_V^{11}} \quad (A10);$$

$$\delta_D^1 = \frac{S_V^{1M}}{S_V^{MM} + S_V^{11}} \quad (A11);$$

$$\delta_E^1 = \frac{S_V^{1M}}{S_V^{11}} \quad (A12);$$

$$\delta_F^1 = \frac{S_V^{12}}{S_V^{11}} \quad (A13);$$

$$\delta_G^1 = \frac{S_V^{12}}{S_V^{1M} + S_V^{11}} \quad (A14);$$

$$\delta_H^1 = \frac{S_V^{1M}}{S_V^{12}} \quad (A15);$$

$$\delta_I^1 = \frac{S_V^{1M}}{S_V^{MM} + S_V^{12}} \quad (A16);$$

$$\delta_J^{12} = \frac{2S_V^{12}}{2S_V^{MM}} \quad (A17);$$

$$\delta_K^1 = \frac{S_V^{12}}{S_V^{1M}} \quad (A18).$$

Duplex:

$$\Delta_A^{tot} = \frac{2S_V^{11} + 2S_V^{22}}{2S_V^{MM}} \quad (A19);$$

$$\Delta_B^1 = \frac{S_V^{11}}{S_V^{11} + S_V^{22} + S_V^{MM}} \quad (A20);$$

$$\Delta_C^1 = \frac{S_V^{11}}{S_V^{22} + S_V^{MM}} \quad (A21).$$

Os parâmetros que mostraram desempenho promissor estão em negrito. No entanto, ressalta-se que se testou todos esses parâmetros e concluiu-se que para os casos estudados nesta tese, os parâmetros utilizados no corpo do texto foram os mais adequados tanto pela simplicidade quanto pela capacidade de distinguir as microestruturas simuladas.