


PÓLO UNIVERSITÁRIO DE VOLTA REDONDA
ESCOLA DE ENGENHARIA INDUSTRIAL METALÚRGICA DE VOLTA
REDONDA

Dissertação de Mestrado

**SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL
DE TRANSFORMAÇÕES COM
NUCLEAÇÃO E VELOCIDADE
NÃO HOMOGÊNEAS**

UNIVERSIDADE
FEDERAL
FLUMINENSE



**ALUNO: MARIANA SIZENANDO
LYRIO**

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

**COORIENTADOR: PROF. D. SC.
WESLEY LUIZ DA SILVA ASSIS**

**Volta Redonda
2020**

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

**SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE TRANSFORMAÇÕES
COM NUCLEAÇÃO E VELOCIDADE NÃO HOMOGÊNEAS**

MARIANA SIZENANDO LYRIO

VOLTA REDONDA

2020

MARIANA SIZENANDO LYRIO

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE TRANSFORMAÇÕES COM NUCLEAÇÃO E VELOCIDADE NÃO HOMOGÊNEAS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica, da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para a obtenção do grau de mestre em Engenharia Metalúrgica e Materiais.

Área de Concentração: Modelamento e Simulação de Processos e Fenômenos.

Orientador:

Prof. Ph. D. Paulo Rangel Rios

Co-orientador:

Prof. D.Sc. Wesley Luiz da Silva Assis

VOLTA REDONDA

2020



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE
ESCOLA DE ENGENHARIA INDUSTRIAL METALÚRGICA DE VOLTA REDONDA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA METALÚRGICA

MARIANA SIZENANDO LYRIO

Dissertação

**“SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE TRANSFORMAÇÕES
COM NUCLEAÇÃO E VELOCIDADE NÃO HOMOGÊNEAS”**

Aprovada em 05 de maio de 2020.

Prof. Paulo Rangel Rios, Ph.D.- Orientador (UFF)

Prof. Wesley Luiz da Silva Assis, D.Sc. – Co-orientador (UFF)

Prof. Gláucio Soares da Fonseca, D.Sc. (UFF)

Prof. Mabelle Biancardi Oliveira de Medeiros, D.Sc. (CEFET-RJ)

Avenida dos Trabalhadores, 420 – Vila Santa Cecília – Volta Redonda / RJ - Brasil
CEP 27255-125 Tel/Fax.: +55 24 2107-3742

ppgem.vpm.vei@id.uff.br
www.ppgem.sites.uff.br

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus pela vida, sabedoria e por me guiar durante toda essa trajetória.

Aos meus pais Roselene Sizenando Teixeira e Ayrton Marreiro Lyrio e ao meu irmão Theodoro Alvim Lyrio Netto pelo amor, compreensão e apoio.

Agradeço ao Professor Paulo Rangel Rios, pela orientação neste trabalho, pela paciência, apoio, incentivo e por me acalmar sempre que eu precisava.

Ao Professor Wesley Luiz da Silva Assis por ser meu co-orientador, pela atenção, apoio e conhecimento compartilhado.

Aos colegas do mestrado, em especial, a Rafaela dos Santos Silva, Harison da Silva Ventura, Gabriella Maria Silveira de Sá e Ana Gabriella Conceição dos Santos pela ajuda e amizade.

Ao Centro de Ciência dos Materiais Computacionais, Instituto de Pesquisa de Materiais, Universidade Tohoku, pelo uso do MASAMUNE-IMR (Sistema de supercomputação da ciência dos materiais para simulações avançadas em várias escalas para o supercomputador da próxima geração do Instituto de Pesquisa de Materiais).

A Escola de Engenharia de Engenharia Industrial e Metalúrgica de Volta Redonda - EEIMVR/UFF, em especial ao Núcleo de Modelamento Microestrutural (NMM).

E a CAPES pela concessão da bolsa de Mestrado.

“A menos que modifiquemos à nossa maneira de pensar, não seremos capazes de resolver os problemas causados pela forma como nos acostumamos a ver o mundo”

(Albert Einstein)

RESUMO

A maior parte da modelagem de transformações em estado sólido concentrou-se nas transformações que ocorrem a partir de uma matriz homogênea, ou seja, a nucleação ocorre em sítios uniformemente aleatórios, descrito pela Teoria de Johnson, Mehl, Avrami e Komolgorov. Através da geometria estocástica, os sítios localizados no espaço podem ser aproximados pelo processo de ponto de Poisson homogêneo. No entanto, existem situações em que se encontra uma matriz não homogênea. Um exemplo é a recristalização de metais submetidos a uma deformação não homogênea. Se a recristalização ocorre nas regiões onde a energia armazenada do trabalho a frio é alta, há um número maior de núcleos e uma velocidade de crescimento mais rápida do que na região onde a energia armazenada é baixa. Neste trabalho foi realizado simulações computacionais para quando a nucleação ocorre de forma não homogênea com velocidade de crescimento constante, quando a nucleação ocorre de forma homogênea com velocidade de crescimento variável e quando a nucleação e a velocidade ocorrem de forma não homogênea. Foi empregado o método do Cone Causal (CC) para simular as reações de nucleação e crescimento não homogêneas. Os resultados das simulações foram comparados com a teoria analítica específica para cada caso, em particular desenvolvida por Villa e Rios, a fim de atestar que as simulações ocorrem da maneira esperada, além de gerar as microestruturas. A concordância entre simulação e teoria analítica foi boa para a maioria dos casos, exceto para quando há poucos núcleos distribuídos de maneira não homogênea e maiores gradientes de velocidade. A velocidade não homogênea tem um efeito substancial na cinética de transformação e na evolução microestrutural. A distribuição não homogênea dos núcleos tem um efeito mais substancial na microestrutura do que uma distribuição não homogênea de velocidade.

Palavras-Chave: Transformações de Fase, Recristalização, Simulação Computacional, Nucleação e crescimento não homogêneo, Evolução Microestrutural.

ABSTRACT

Most of the modeling of transformations in the solid state is concentrated in the transformations that occur from a homogeneous matrix, that is, a nucleation occurs at uniformly random sites, described by the Johnson, Mehl, Avrami and Komolgorov Theory. Through stochastic geometry, the sites located in space can be approximated by the homogeneous Poisson point process. However, there are situations in which you find an inhomogeneous matrix. An example is the recrystallization of metals used for inhomogeneous deformation. If recrystallization occurs in regions where the energy stored in cold working is high, there is a greater number of nuclei and a faster growth rate in the region where the stored energy is low. In this work, computer simulations were performed for when the nucleation occurs in an inhomogeneous manner with a constant growth rate, when the nucleation occurs homogeneously with a variable growth rate and when the nucleation and the velocity occur in an inhomogeneous manner. The Causal Cone (CC) method was used to simulate inhomogeneous nucleation and growth recovery. The results of the simulations were compared with an analytical theory specific to each case, in particular developed by Villa and Rios, in order to certify that simulations occurred in the expected way, in addition to generating as microstructures. A concordance between simulation and analytical theory was good for most cases, except when there are few nuclei distributed in an inhomogeneous way and higher velocity gradients. Inhomogeneous velocity has a substantial effect on transformation kinetics and microstructural evolution. The inhomogeneous distribution of the nuclei has a more substantial effect on the microstructure than an inhomogeneous distribution of velocity.

Keywords: Phase Transformations, Recrystallization, Computer Simulation, Non-homogeneous nucleation and growth, Microstructural Evolution.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	33
2 OBJETIVOS.....	35
2.1 OBJETIVO GERAL	35
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	35
3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	36
3.1 TRANSFORMAÇÕES DE FASE E RECRISTALIZAÇÃO	36
3.2 TEORIA DE JMAK.....	37
3.3 PROCESSO DE PONTO.....	38
3.3.1 Nucleação por Processo de Ponto de Poisson.....	39
3.4 GENERALIZAÇÃO DE JMAK	40
3.4.1 Nucleação homogênea.....	40
3.4.2 Nucleação não homogênea	41
3.4.2.1 Saturação de Sítios	41
3.4.2.2 Aplicação do modelo	42
3.4.2.3 Estudos relacionados	43
3.4.2.3.1 Gradiente de temperatura	43
3.4.2.3.2 Gradiente de deformação	45
3.4.3 Velocidade não homogênea.....	49
3.4.4 Nucleação e velocidade não homogêneas	50
4 METODOLOGIA.....	53
4.2 MODELO COMPUTACIONAL.....	57
4.2.1 Método do Cone Causal	60
4.2.2 Condição de Contorno.....	62
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	64
5.1 NUCLEAÇÃO HOMOGÊNEA COM VELOCIDADE NÃO HOMOGÊNEA	64
5.1.1 Velocidade não homogênea para 150 núcleos.....	65

5.1.2 Velocidade não homogênea para 300 núcleos.....	74
5.1.3 Velocidade não homogênea para 600 núcleos.....	83
5.1.4 Velocidade não homogênea para 1200 núcleos.....	92
5.2 NUCLEAÇÃO NÃO HOMOGÊNEA COM VELOCIDADE HOMOGÊNEA	101
5.2.1 Nucleação não homogênea para 1200 núcleos.....	101
5.2.2 Nucleação não homogênea para 4800 núcleos.....	109
5.2.3 Nucleação não homogênea para 19200 núcleos.....	118
5.3 NUCLEAÇÃO NÃO HOMOGÊNEA COM VELOCIDADE NÃO HOMOGÊNEA.....	128
5.3.1 Nucleação e velocidade não homogêneas para 1200 núcleos.....	129
5.3.2 Nucleação e velocidade não homogêneas para 4800 núcleos.....	138
5.3.3 Nucleação e velocidade não homogêneas para 19200 núcleos.....	147
5.4 COMPARAÇÃO ENTRE AS TRANSFORMAÇÕES COM NUCLEAÇÃO NÃO HOMOGÊNEA E VELOCIDADE NÃO HOMOGÊNEA COM NUCLEAÇÃO NÃO HOMOGÊNEA E VELOCIDADE HOMOGÊNEA.....	158
5.4.1 Microestrutura.....	158
5.4.2 Cinética de transformação total.....	164
5.4.3 Cinética de transformação dos planos 0,2 e 0,9.....	171
5.4.4 Caminho Microestrutural total.....	176
5.4.5 Contiguidade total.....	179
6 CONCLUSÕES.....	185
7 SUGESTÃO PARA TRABALHOS FUTUROS.....	187
8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	188

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 - Conjunto Número de pontos que pertence à A em um conjunto aleatório $N(A)=6.38$	
Figura 2 - Simulação computacional do processo de ponto em uma área quadrada com eixos horizontais $x_1 = 0$ para $x_1 = 1$ e vertical $x_2 = 0$ para $x_2 = 1$. (a) Processo de ponto de Poisson homogêneo com intensidade igual a 100. (b) Processo de ponto de Poisson não homogêneo com intensidade variando linearmente ao longo do eixo vertical $\lambda(x_2)=20+160x_2$	40
Figura 3 – Cinética de transformação. (a) A fração de volume, V_V , contra o tempo: simulação CA comparada com a expressão analítica. (b) Densidade volumétrica média, $V_V(t, x)$ em função do tempo nos planos $x_1 = 0,3, 0,5$ e $0,9$	43
Figura 4 – Representação em 3D da microestrutura simulada. (a) $V_V = 0$, (b) $V_V = 0,1$, (c) $V_V = 0,5$ e $V_V = 1$	43
Figura 5 - Evolução da microestrutura durante o crescimento de grãos calculados para $T_c = 1373K$ e $G = 5,0 \times 10^5 Km^{-1}$ e $\dot{T} = 0,0$	44
Figura 6 - Microestrutura de titânio grau 2 após trefilação a frio e recozimento por (a) 10, (b) 30 e (c) 120 min a $800^\circ C$	46
Figura 7 - Evolução da microestrutural durante a recristalização e subsequente crescimento de grãos, com a pré-formação local. As áreas verdes e vermelha representam a matriz e as zonas recristalizadas, respectivamente.	47
Figura 8 - Gráfico esquemático da ocorrência de ALGs na amostra após tratamento térmico por supersolvus por 5 min. (a) Configuração do experimento de indentação. (b) O grão de ALGs aparece de maneira semi-elíptica no plano de corte.	47
Figura 9 - Resultados da simulação de campo de fase (a) Configuração inicial com SE (energia armazenada) diferente adicionada separadamente na região 1: nenhum SE adicionado; região 2: $0,2085 \times 10^6 J/m^3$; região 3: $0,417 \times 10^6 J/m^3$ e região 4: $0,6255 \times 10^6 J/m^3$; fundo vermelho indica que não há SE residual (b) Não é permitida recristalização, e apenas grãos colunares aparecem nos limites da região com energia armazenada acentuada (c) É permitida recristalização e grãos muito grandes aparecem na região 3 com energia armazenada moderada. (d) Com o aumento das partículas de fixação, os grãos muito grossos aparecem na mesma região 3, mas o tamanho geral dos grãos é menor. (e) Depois de dobrar a energia armazenada em cada região, os grãos grossos aparecem na região 2.	48
Figura 10 - Fluxograma esquemático do algoritmo desenvolvido.	57

Figura 11 – Matriz com núcleos distribuídos de maneira aleatória na matriz, ou seja, de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo.....	59
Figura 12 – Exemplificação de quando um núcleo é aceito no plano. Quanto maior $P(pi)$ maior a chance de haver núcleos na parte superior da matriz.	59
Figura 13 - Matriz com núcleos distribuídos em uma direção preferencial na matriz, ou seja, de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo.....	59
Figura 14 - (a) Fig. 14a mostra um ponto x dentro de uma bola de raio $R = Gt$ centrado em x (linha sólida). Essa bola é chamada cone causal de x . Nenhum núcleo está dentro desta bola. Portanto, nenhuma região transformada pode ultrapassar x que permanece não transformado. (b) A Fig. 14b mostra uma bola centralizada em x com um núcleo dentro dela. No momento t , a região transformada originada no núcleo cresceu para uma bola de raio $R = Gt$ (linha tracejada) abrangendo o ponto x , de modo que x está dentro da região transformada. (c) A Fig. 14c mostra um ponto x que pode ser transformado por dois pontos x_1 ou x_2 . O ponto x é transformado pela região transformada que atinge x no tempo mínimo, t_1 ou t_2	61
Figura 15 - Representação esquemática das condições de contorno.	63
Figura 16 - Representação esquemática da evolução microestrutural em 3D sem condição de contorno no eixo x_3	63
Figura 17 – Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.....	65
Figura 18 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.	66
Figura 19 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.....	66
Figura 20 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.	67
Figura 21 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.....	68

Figura 22 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.	68
Figura 23 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.....	68
Figura 24 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.	69
Figura 25 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.....	70
Figura 26 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.	70
Figura 27 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.....	70
Figura 28 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.	71
Figura 29 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.....	72
Figura 30 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.	72
Figura 31 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.....	73
Figura 32 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.	73

Figura 33 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.....	74
Figura 34 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.	75
Figura 35 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.....	75
Figura 36 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.	76
Figura 37 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.....	77
Figura 38 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.	77
Figura 39 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.....	77
Figura 40 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.	78
Figura 41 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.....	79
Figura 42 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.	79
Figura 43 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.....	80

Figura 44 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.	80
Figura 45 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.....	81
Figura 46 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.	82
Figura 47 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.....	82
Figura 48 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.	83
Figura 49 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.....	84
Figura 50 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.	84
Figura 51 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.....	84
Figura 52 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.	85
Figura 53 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.....	86
Figura 54 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.	86

- Figura 55 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 86
- Figura 56 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos. 87
- Figura 57 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação..... 88
- Figura 58 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação. 88
- Figura 59 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 88
- Figura 60 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos. 89
- Figura 61 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação..... 90
- Figura 62 - Representação em 2D da microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação..... 90
- Figura 63 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (6a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 91
- Figura 64 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos. 91
- Figura 65 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação..... 92

- Figura 66 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação. 93
- Figura 67 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 93
- Figura 68 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos. 94
- Figura 69 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação..... 95
- Figura 70 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação. 95
- Figura 71 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 95
- Figura 72 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos. 96
- Figura 73 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação..... 97
- Figura 74 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação. 97
- Figura 75 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 97
- Figura 76 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos. 98

- Figura 77 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação..... 99
- Figura 78 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação. 99
- Figura 79 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 100
- Figura 80 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos. 100
- Figura 81 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,25$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação. 102
- Figura 82 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,25$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação..... 102
- Figura 83 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,25$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 103
- Figura 84 – Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,25$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos. 104
- Figura 85 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,35$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação. 105
- Figura 86 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,35$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação..... 105
- Figura 87 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,35$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 105

Figura 88 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,35$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos.	106
Figura 89 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,70$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.	107
Figura 90 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,70$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.	107
Figura 91 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,70$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.	108
Figura 92 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,70$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos.	109
Figura 93 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,25$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.	110
Figura 94 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,25$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.	110
Figura 95 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,25$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.	111
Figura 96 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,25$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos.	112
Figura 97 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,35$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.	113
Figura 98 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,35$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.	113

Figura 99 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,35$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.....	114
Figura 100 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,35$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos.	115
Figura 101 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,70$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.	116
Figura 102 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,70$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.....	116
Figura 103 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,70$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.....	117
Figura 104 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,70$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos.	118
Figura 105 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,25$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.	119
Figura 106 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,25$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.....	119
Figura 107 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,25$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.....	120
Figura 108 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,25$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos.	121
Figura 109 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,35$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.	122

- Figura 110 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,35$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação..... 122
- Figura 111 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,35$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 123
- Figura 112 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,35$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos. 124
- Figura 113 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,70$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação. 125
- Figura 114 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,70$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação..... 125
- Figura 115 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,70$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 126
- Figura 116 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,70$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos. 127
- Figura 117 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação..... 129
- Figura 118 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação. 130
- Figura 119 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 130
- Figura 120 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade dos planos. 132

- Figura 121 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação..... 133
- Figura 122 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G(x)=0,3x+0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação. 133
- Figura 123 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 134
- Figura 124 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade. 135
- Figura 125 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação..... 136
- Figura 126 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $Gx = 1,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação. 136
- Figura 127 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 137
- Figura 128 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade. 138
- Figura 129 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação..... 139
- Figura 130 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação. 139
- Figura 131 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 140

Figura 132 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade.	141
Figura 133 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.....	142
Figura 134 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.	142
Figura 135 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.....	143
Figura 136 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade.	144
Figura 137 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.....	145
Figura 138 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.	145
Figura 139 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.....	146
Figura 140 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade.	147
Figura 141 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.....	148
Figura 142 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.	148

- Figura 143 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 149
- Figura 144 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade..... 150
- Figura 145 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação..... 151
- Figura 146 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação. 151
- Figura 147 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 152
- Figura 148 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade..... 153
- Figura 149 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação..... 154
- Figura 150 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação. 154
- Figura 151 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9..... 155
- Figura 152 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade..... 156
- Figura 153 - Representação 2D que mostra a microestrutura simulada com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea. Velocidade constante e gradiente de

- velocidade foram comparados. (a) $G = 0,70$; (b) $G(x) = 1,0x + 0,2$ para 4800 núcleos. O tamanho final do grão é menor na parte superior do que na parte inferior nos dois casos. ... 159
- Figura 154 - Seção 2D mostrando a evolução microestrutural durante a transformação: esquerda $V_V(t) = 0,1$, meio $V_V(t) = 0,3$, direita $V_V(t) = 0,5$. A velocidade foi constante igual a 0,7 e o número de núcleos de 4800. 160
- Figura 155 - Seção 2D mostrando a evolução microestrutural durante a transformação: esquerda $V_V(t) = 0,1$, meio $V_V(t) = 0,3$, direita $V_V(t) = 0,5$. O gradiente de velocidade foi igual a $G(x) = 1,0x + 0,2$ e o número de núcleos de 4800. 161
- Figura 156 – Comparação dos tamanhos de grãos (comprimento médio de interceptação) medidos em cada plano entre os casos de nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea e nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 1200 núcleos. 162
- Figura 157 - Comparação dos tamanhos de grãos (comprimento médio de interceptação) medidos em cada plano entre os casos de nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea e nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 4800 núcleos. 163
- Figura 158 - Comparação dos tamanhos de grãos (comprimento médio de interceptação) medidos em cada plano entre os casos de nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea e nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 19200 núcleos. 164
- Figura 159 - Comparação da cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com a cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 1200 núcleos. 165
- Figura 160 - Comparação da cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com a cinética de transformação para nucleação não

- homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 4800 núcleos..... 166
- Figura 161 - Comparação da cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com a cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 19200 núcleos..... 167
- Figura 162 - Comparação do V_V total para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com o V_V total para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 1200 núcleos..... 169
- Figura 163 - Comparação do V_V total para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com o V_V total para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 4800 núcleos..... 170
- Figura 164 - Comparação do V_V total para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com o V_V total para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 19200 núcleos..... 171
- Figura 165 - Comparação da cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com nucleação não homogênea com velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 1200 núcleos para planos 0,2 e 0,9..... 173
- Figura 166 - Comparação da cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com nucleação não homogênea com velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 4800 núcleos para planos 0,2 e 0,9..... 174

- Figura 167 - Comparação da cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com nucleação não homogênea com velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 19200 núcleos para planos 0,2 e 0,9..... 175
- Figura 168 - Comparação do caminho microestrutural total para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com o caminho microestrutural total para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 1200 núcleos. 177
- Figura 169 - Comparação do caminho microestrutural total para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com o caminho microestrutural total para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 4800 núcleos. 178
- Figura 170 - Comparação do caminho microestrutural total para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com o caminho microestrutural total para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 19200 núcleos. 179
- Figura 171 - Comparação da Contiguidade total versus V_V para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea com nucleação não homogênea com velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 1200 núcleos..... 181
- Figura 172 - Comparação da Contiguidade total versus V_V para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea com nucleação não homogênea com velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 4800 núcleos..... 182
- Figura 173 - Comparação da Contiguidade total versus V_V para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea com nucleação não homogênea com velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes.

(a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$;
 $G = 0,70$ para 19200 núcleos..... 183

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1 - Número de núcleos e coeficientes a e b para o gradiente de velocidade.....	54
Tabela 2 – Número de núcleos com seus respectivos gradientes de núcleos e os diferentes gradientes de velocidade com suas respectivas velocidades média constantes.....	55
Tabela 3 –Valores de $\lambda(0,9)/\lambda(0,1)$ e $G(0,9)/G(0,1)$ correspondendo a $\lambda(x)$ e $G(x)$ mostrados na tabela 2.....	56

GLOSSÁRIO

JMAK / KJMA	Johnson, Mehl, Avrami e Kolmogorov
CC	Cone Causal
2D	Duas Dimensões
3D	Três Dimensões
4D	Quatro Dimensões
V	Volume
S	Área Interfacial
V_V	Densidade volumétrica média
V_V	Fração de volume transformada
V_{VE}	Volume Estendido
S_V	Densidade média da área interfacial
S_V	Área Interfacial por Unidade de Volume
t	Tempo
G	Velocidade de Crescimento
N_V	Número de Núcleos por Unidade de Volume
I_V	Taxa de nucleação constante por unidade de volume
R	Raio
Λ	Intensidade
\mathbb{R}^d	Subconjunto
\mathbb{R}^3	Conjunto dos Números Reais em Três Dimensões
\mathbb{R}_+	Conjunto dos Números Reais em Várias Dimensões
A_i	Subconjuntos Disjuntos e Compactos em \mathbb{R}^3
\mathbb{P}	Probabilidade
λ	Intensidade do Processo de Ponto de Poisson
Θ^t	Região Transformada
\mathcal{B}	Conjunto de Borel
X_i	Localização do núcleo
A	Volume do conjunto
m	constante
n	constante
a	constante
b	constante

$C_{\beta\beta}$	Contiguidade
$S_V^{\beta\beta}$	Densidade média da área interfacial dos limites entre as regiões da nova fase
$S_V^{\alpha\beta}$	Densidade média da área interfacial dos limites entre as regiões da nova fase e a matriz mãe
L_A	Comprimento de intercepto por unidade de área
p_i	Posição sorteada
$P(p_i)$	Densidade de probabilidade de aceitação
p	Posição sorteada pela segunda vez
$p_{m\acute{a}x}$	Posição na altura máxima
AC	Autômato Celular
x_1	Coordenada cartesiana
x_2	Coordenada cartesiana
x_3	Coordenada cartesiana
μm	Micrometro

1 INTRODUÇÃO

As transformações de nucleação e crescimento são predominantes entre as transformações em estado sólido. Uma maneira de modelar essas reações é usar a abordagem proposta por Johnson-Mehl [1], Avrami [2]–[4] e Kolmogorov [5], a chamada teoria JMAK. Em vez de modelar os detalhes do mecanismo de nucleação e crescimento, a teoria JMAK prescreveu a taxa de nucleação, a posição espacial dos núcleos e a velocidade de crescimento. No trabalho original, eles obtiveram duas expressões fundamentais e matematicamente exatas. Nos dois casos, os núcleos eram uniformes distribuídos aleatoriamente no espaço, e a velocidade era uma constante no tempo e no espaço. No primeiro caso, a nucleação prosseguiu com uma taxa de nucleação constante. No segundo caso, os locais de nucleação saturaram-se no início da transformação, de modo que todos os núcleos já estavam presentes no início da reação, para que somente o crescimento ocorresse. Esse segundo caso é chamado de "saturação de sítios" que é empregado neste trabalho.

Teoria de nucleação e crescimento que modela a evolução da microestrutura levando em conta a possibilidade de que núcleos não cumprem com a suposição de serem uniformemente localizados aleatoriamente no espaço são de especial interesse. Isso porque os núcleos se formam e crescem em locais específicos, isto é, “não aleatórios”. Cada sítio preferencial pode ser situado, por exemplo, em contornos de grão ou dentro de grãos altamente deformados ou bandas de deformação. Além do mais, esses sítios podem ser introduzidos no processo, por exemplo, quando há diferenças de temperatura [6], [7] ou gradiente de deformação [8]–[13]. Um exemplo do gradiente de deformação é no processo de Recristalização que é um fenômeno metalúrgico comum e de grande interesse, observado em muitos materiais metálicos depois da deformação plástica e recozimento. Na indústria, a recristalização não homogênea é frequentemente encontrada, especialmente em materiais contendo partículas finas como segunda fase reforçada [9]. Apesar da recristalização não ser propriamente uma transformação de fase, pode de uma maneira generalizada ser estudada e tratada como tal, utilizando-se a mesma conceituação de nucleação e crescimento.

Aplicando a teoria da cinética formal para transformações de fase desenvolvidas em sítios aleatórios de reações na qual nucleações por saturação de sítios são distribuídas não aleatoriamente pode resultar em valores errôneos calculados por quantidades microestruturais. Essas quantidades microestruturais incluem número de núcleos por unidade de volume como também quantidade da cinética tal como velocidade média de interface. Desta forma, é importante ampliar o alcance das teorias analíticas exatas e estender o tratamento de JMAK

para permitir que a nucleação aconteça de maneira diferente do trabalho original, suposto nucleação aleatoriamente uniforme.

Rios e Villa [14], [15] desenvolveram um método analítico novo e matematicamente exato para modelar reações com nucleação não homogênea, velocidades não homogênea e ambas nucleação e velocidade não homogêneas. Rios e Villa, usando conceitos modernos da geometria estocástica [16], reconheceram que os núcleos localizados “aleatoriamente uniformes” podem ser descritos com mais rigor por um processo homogêneo de pontos de Poisson. Para nucleação homogênea e não homogênea, os núcleos estão localizados de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo e não homogêneo, respectivamente. A situação se torna muito mais complicada se deseja generalizar a velocidade.

O estudo de nucleação não homogênea com uma velocidade constante e nucleação homogênea com velocidade não homogênea foram inicialmente analisados por Costa [17] e Lyrio et al. [11] em trabalhos recentes. Esse estudo de Lyrio et al. [11] é visto nesta dissertação. Além disso, um outro caso ainda mais complexo e de grande interesse é quando se estuda nucleação não homogênea com velocidade não homogênea.

Neste trabalho utiliza-se o método do Cone Causal (CC) para simular as reações de nucleação e crescimento não homogêneas. Assim comparam-se os resultados gerados pela simulação computacional com a solução analítica, a fim de atestar que as simulações ocorrem da maneira esperada. O modelamento microestrutural destas transformações permite variar grandezas tais como: distribuição espacial de núcleos (podendo variar quantidade de núcleos dependendo da posição na matriz), bem como a velocidade de crescimento.

A importância do desenvolvimento de modelos computacionais está relacionada à facilidade de prever e estudar fenômenos e processos que acarretariam muito tempo e elevado custo se fosse comparado a meios experimentais. Por mais importante que seja ter uma descrição analítica precisa da transformação, essas descrições analíticas têm limitações práticas. As deficiências mais flagrantes das descrições analíticas são que elas lidam com valores médios e, mais importante, não conseguem descrever a microestrutura. Portanto, a combinação de simulação computacional e descrição analítica pode ser uma ferramenta útil e poderosa para entender a evolução microestrutural.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

Propõe-se neste trabalho estudar as reações com nucleação e velocidade não homogêneas em 3D no estado sólido em materiais metálicos via simulação computacional pelo método do Cone Causal (CC).

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Comparar a simulação com o tratamento matemático analítico exato e, portanto, assegurar que as simulações estão de fato funcionando conforme o esperado;
- Obtenção de alguns exemplos preliminares das microestruturas para algumas seções em 2D e em 3D obtidas por nucleação e velocidade não homogêneas;
- Analisar a influência do gradiente de velocidade com núcleos distribuídos de maneira aleatória;
- Analisar a influência do gradiente de velocidade não homogênea com um gradiente de núcleos não homogêneo.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 TRANSFORMAÇÕES DE FASE E RECRISTALIZAÇÃO

As transformações de fase ocorrem na maioria dos materiais metálicos, na qual se dá mais comumente pelas transformações no estado sólido. A transformação de fase provoca uma mudança interna no material com o intuito de diminuir a sua energia interna, atingindo o estado de menor energia e conseqüentemente o maior equilíbrio termodinâmico. Grande parte dessas transformações sólido-sólido ocorre pelo fenômeno da nucleação e crescimento. Elas podem ou não ser difusionais.

A maior parte das transformações de interesse em sólidos é heterogênea. Para essa transformação entende como aquela em que há um nítido movimento de contorno de grão entre a região transformada e não transformada. Nas transformações de fase considera-se que essas transformações podem ocorrer em duas etapas [15]. A primeira etapa, o surgimento ou nucleação tem-se que uma nova região transformada é gerada a partir de sítios de nucleação. A segunda etapa, o crescimento, a nova fase cresce às expensas da antiga pela migração relativamente lenta das interfaces entre as fases, e o crescimento resulta da transferência dos átomos individuais através da interface. Os núcleos que inicialmente são pequenos na região transformada crescem consumindo a matriz original não transformada. A transformação de fase por nucleação e crescimento encontra-se aplicados em diversos campos do conhecimento como a separação de fases em ligas supercomponentes [18], processo de cristalização [19], nanopartículas em tubos de carbono [20], crescimento de filme em substrato [21], entre outros.

A recristalização é uma reação de nucleação e crescimento termicamente ativado. Apesar de não ser propriamente dita uma transformação de fase pode ser aproximada de uma transformação sólido-sólido, visto que a maioria dos conceitos de transformação deste tipo se aplicam a recristalização, logo neste trabalho também se considera a recristalização como uma reação por nucleação e crescimento.

Deformação plástica do metal resulta no aumento da energia livre [22]. Defeitos pontuais, lineares e planares contribuem para o armazenamento de energia. Aquecimento a uma temperatura adequada conduz a recuperação e recristalização. Durante a recristalização novos grãos livres de deformação recobrem a microestrutura que existia antes da deformação plástica. Possíveis mecanismos de nucleação são: deformação induzida pela migração dos contornos de grão (microestrutura presente antes de deformado), aumento de volume (defeito) e crescimento de subgrão. Nucleação na recristalização não ocorre por flutuações como na teoria clássica da

nucleação. A força motriz para crescimento é a diferença de energia livre entre região recristalizada e deformada.

3.2 TEORIA DE JMAK

A teoria inicial desenvolvida por Johnson and Mehl [1], Avrami [2]–[4] e Komolgorov [5], daqui para frente referenciado como “JMAK”, constitui a fundamentação da teoria cinética formal aplicada hoje. Essa teoria encontra-se amplamente aplicadas para transformações de ambos os materiais metálicos e não metálicos [14], [23]. Essas transformações estendem estritamente as transições de primeira ordem “nucleação e crescimento” para situações em que a nucleação e crescimento têm um significado puramente “operacional”. Além disso, exemplos modelados para cinética formal podem ser encontrados em uma diversidade de transformações como transformações austenita-perlita [1], recristalização [22][24], crescimento de grão anormal de BaTiO₃ [25], [26], “espalhamento de martensita” [27], [28] e cristalização de polímeros [29] e até pesquisas médicas para descrever o crescimento de tumores [30].

JMAK considera a transformação de uma fase mãe α , em uma nova fase β , por nucleação e crescimento, e obtém a cinética global medida da fração volumétrica transformada $V_V(t)$, como função do tempo de reação t . O crescimento irá cessar quando ocorrer o “*impingement*”, isto é, a interferência entre as regiões que crescem. Uma das principais contribuições dessa teoria foi para resolver o problema do “*impingement*”. O volume transformado obtido deste modo é obviamente muito maior do que o volume real transformado. Esse volume transformado recebe o nome especial de “volume estendido”, V_E [22], [31]. Essa quantidade é geralmente dividida pelo volume total resultando em uma “fração volumétrica estendida”, V_{VE} . V_{VE} , portanto, pode ser considerada a soma do volume de todos os grão individuais supondo que eles crescem sem “*impingement*” [31]. A expressão exata que associa V_V a fração de volume estendida V_E é dado por:

$$V_V = 1 - \exp^{-V_E} \quad (1)$$

Essa solução exata obtida para o problema de nucleação e crescimento de uma nova fase não é geral. Duas expressões analíticas são normalmente associadas com esse trabalho inicial. A nucleação uniformemente aleatória pode ser por saturação de sítios ou é realizada através de uma taxa de nucleação constante. A nucleação por saturação de sítios implica que todos os sítios

de nucleação são exauridos antes da transformação, ou seja, todos os núcleos já estão presentes no tempo inicial, $t=0$. Enquanto que a taxa de nucleação constante apresenta o número de núcleos novos por unidade de tempo por unidade de volume constante [31]. Além do mais, foi assumido que a transformação ocorre em meio infinito, a taxa de crescimento, G , é constante e as regiões crescem com o formato esférico.

Especificamente, a expressão analítica exata para saturação de sítios é dada pela expressão [14]:

$$V_V(t) = 1 - \exp\left(-\frac{4}{3}\pi N_V G^3 t^3\right) \quad (2)$$

Onde N_V é o número de núcleos por unidade de volume. Enquanto se houver uma taxa de nucleação constante por unidade de volume I_V , então obtém-se:

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

3.3 PROCESSO DE PONTO

Um processo de ponto [14] em \mathbb{R}^d é uma sequência de pontos $\{X_i\}_i$ localizadas aleatoriamente em \mathbb{R}^d de acordo com uma dada lei da probabilidade. Pode ser descrito pelo processo de Contagem, N , associado à sequência $\{X_i\}$, definido como sendo

$N(A) :=$ o número de X_i s que pertence a A , $\forall A \in \mathcal{B}_{\mathbb{R}^d}$

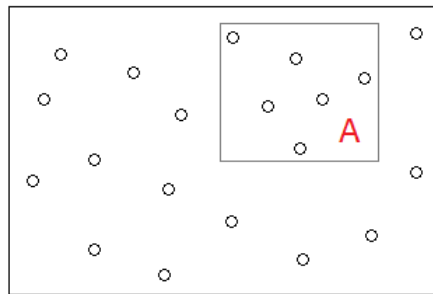


Figura 1 - Conjunto Número de pontos que pertence à A em um conjunto aleatório $N(A)=6$.

Para algum A fixo, $N(A)$ é uma variável aleatória e $\mathbb{E}[N(A)]$ denota a média do número de pontos X_i em A . A medida de Λ em \mathbb{R}^d definida como

$$\Lambda(A) := \mathbb{E}[N(A)], \quad \forall A \in \mathcal{B}_{\mathbb{R}^d} \quad (4)$$

Onde Λ é a intensidade de medida de N .

3.3.1 Nucleação por Processo de Ponto de Poisson

Se o processo de nucleação é assumido saturação de sítio, então pode ser modelado pelo processo de ponto em \mathbb{R}^d e, portanto os pontos X_i serão núcleos que nascem em $t=0$. Para núcleos que nascem independente um do outro, pode ser modelado pelo Processo de Ponto de Poisson [14][15]. Da sua definição matemática formal, segue-se que é exclusivamente determinado pela sua medida de intensidade. Em particular para o Processo de Ponto de Poisson N com intensidade de medida Λ , a probabilidade \mathbb{P} , que exatamente k núcleos são nascidos em um subconjunto A de \mathbb{R}^d é

$$\mathbb{P}(N(A)=k)=exp^{-\Lambda(A)}\frac{\Lambda(A)^k}{k!} \quad (5)$$

Cada vez que Λ admite densidade, ou seja, se existe uma função $\lambda: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}_+$, tal que:

$$\Lambda(a) = \int_A \lambda(x) dx \quad \forall A \in \mathcal{B}_{\mathbb{R}^d} \quad (6)$$

então N é dita ser um processo de ponto de Poisson com intensidade λ . Como consequência, λ é uma função não negativa em \mathbb{R}^d .

Para o caso em que λ é constante, N é chamado de processo de ponto de Poisson homogêneo e λ é igual ao número de núcleos por unidade de volume. Para o caso em que λ não é constante, N é chamado de processo de ponto de Poisson não homogêneo e $\lambda(x)dx$ é igual ao número de núcleos em uma região espacial infinitesimal dx .

Na Figura 2 é mostrado uma simulação computacional em 2D do processo de ponto de Poisson homogêneo e não homogêneo usando um pacote de software “R” [14]. Os núcleos são mostrados representados por pequenos círculos localizados de acordo com o processo de ponto de Poisson homogêneo e heterogêneo, respectivamente. Na Figura 2a a localização dos núcleos pode ser intuitivamente descrita como aleatória ou uniformemente aleatória. Enquanto que na Figura 2b o número de núcleos muda de $x_2 = 0$ a $x_2 = 1$, x_2 é o eixo vertical seguindo de $\lambda(x_2)=20+160x_2$. Logo, nesse caso, como x_2 muda de 0 para 1 o número de núcleos aumenta.

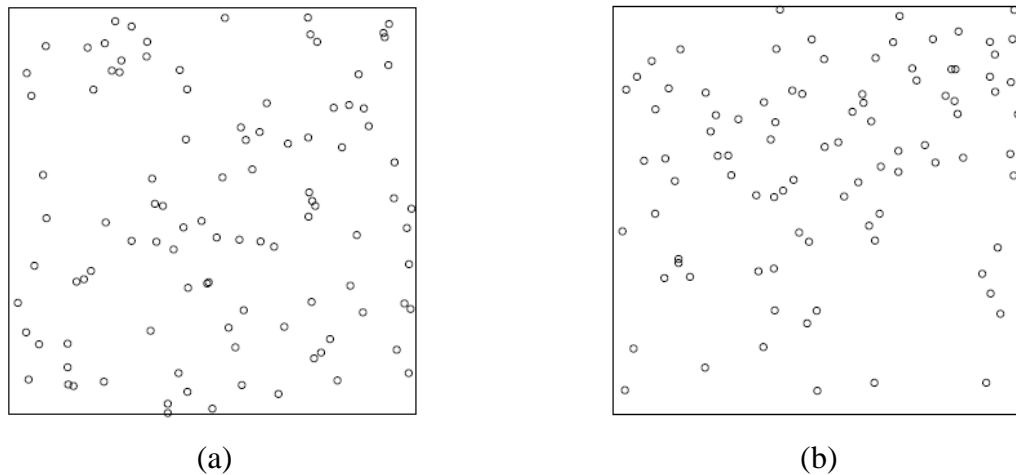


Figura 2 - Simulação computacional do processo de ponto em uma área quadrada com eixos horizontais $x_1 = 0$ para $x_1 = 1$ e vertical $x_2 = 0$ para $x_2 = 1$. (a) Processo de ponto de Poisson homogêneo com intensidade igual a 100. (b) Processo de ponto de Poisson não homogêneo com intensidade variando linearmente ao longo do eixo vertical $\lambda(x_2)=20+160x_2$.

3.4 GENERALIZAÇÃO DE JMAK

Rios e Villa recorreram ao recente desenvolvimento dos métodos de Geometria estocástica, tornando-se possível generalizar as equações de JMAK para situações bem além das suposições originais. Rios e Villa [14], [15] revistaram a teoria clássica de JMAK e generalizaram para situações em que a nucleação ocorre pelo Processo de Ponto de Poisson homogênea e não homogênea e velocidade não homogênea.

3.4.1 Nucleação homogênea

O conceito de processo pontual formaliza a ideia de “localização dos núcleos no espaço.” Assim, a ideia de que os núcleos são uniformemente localizados aleatoriamente no espaço equivale a dizer que os núcleos estão localizados de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo [32].

Uma fórmula particularmente simples [14] pode ser obtida se a grandeza estocástica de intensidade, $\lambda(x)$, é uma função harmônica, ou seja, é duas vezes continuamente diferenciável e satisfaz a equação de Laplace, $\Delta f = 0$. Para saturação do sítio, tem-se:

$$V_V(t, x) = 1 - \exp\left(-\frac{4\pi\lambda(x)G^3t^3}{3}\right) \quad (7)$$

Eq. 7 afirma que quando a nova fase é esférica, os núcleos estão localizados de acordo com um processo pontual de Poisson com intensidade $\lambda(x)$ e cresce com uma velocidade constante, G . Eq. 7 pode ser visto como uma generalização da Eq. 2 de JMAK. É possível generalizar essa expressão para velocidade dependente do tempo, $G(t)$ e nucleação dependente do tempo, $\lambda(x, t)$, desde que $\lambda(x, t)$ permaneça harmônico em relação a x [14].

3.4.2 Nucleação não homogênea

Na nucleação não homogênea há a influência da localização dos núcleos no espaço na cinética de transformação [14]. Especificamente, foi possível generalizar as expressões analíticas de JMAK para processo de ponto de Poisson não homogênea através da ajuda de técnicas matemáticas desenvolvidas recentemente. Desta forma, a análise foi limitada para o caso em que a velocidade radial pode ser como uma função do tempo, mas não como uma função da coordenada espacial, x . Um caso simples, mas importante em que pode ser aplicado esse caso é quando a intensidade de núcleos varia linearmente ao longo de uma direção preferencial, x_1 . De modo geral, os pontos podem ser localizados dentro do espécime e a variação da intensidade continua além desses pontos finais. Em alguns casos, por exemplo, folha metálica, na qual $x_1=0$ ou $x_1=1$ (ou ambos) coincide com a superfície externa do espécime.

A velocidade de crescimento, G é suposto que permanece constante durante a transformação. Além do mais, a intensidade no processo de ponto de Poisson não homogêneo ou o número médio de núcleos é suposto variar linearmente com x_1 . É tratado o caso de saturação de sítios.

Considere x um ponto em \mathbb{R}^3 com coordenadas (x_1, x_2, x_3) , além disso, a função f em \mathbb{R}^3 do tipo $f(x) = ax_1$ é uma função que varia linearmente ao longo da coordenada x_1 .

3.4.2.1 Saturação de Sítios

O número de núcleos é independente do tempo. A intensidade é dada por:

$$\lambda(x) = mx_1 + n \quad (8)$$

Assume-se que m e n são tal que λ é positivo na região espacial considerada. A densidade média do volume estendido para algum (t, x) tal que λ é positivo e harmônico, é

$$V_E(t, x) = \frac{4\pi}{3} G^3 t^3 \lambda(x) \quad (9)$$

E a densidade média de volume é

$$V_V(t, x) = 1 - \exp\left(-\frac{4\pi\lambda(x)G^3 t^3}{3}\right) \quad (10)$$

As expressões acima são formalmente muito semelhantes aos obtidos para os processos de Poisson espacialmente homogêneos. Portanto, eles permanecem válidos quando $\lambda(x)$ ou $\lambda(t, x)$ são funções harmônicas 3D independentes do tempo.

A situação se torna muito mais complicada se deseja generalizar a velocidade.

3.4.2.2 Aplicação do modelo

Um dos primeiros trabalhos realizados com simulação em computador, na qual os núcleos estão localizados no espaço, de acordo com um processo de Poisson não homogêneo foi feita por Rios et. al [23]. O objetivo deste trabalho foi simular transformações / recristalização de fases em autômatos celulares (CA), a fim de comparar a simulação com a solução analítica de Rios e Villa. A simulação é restrita à nucleação não homogênea do processo de ponto de Poisson saturada com a intensidade $\lambda(x)$, variando linearmente ao longo da coordenada x_1 , mas permanecendo constante para x_2 e x_3 . A Eq. 10 foi comparado com a simulação computacional usando autômatos celulares [23] e usando o método do cone causal [11]. A concordância entre o modelo analítico e as simulações por computador foi excelente como pode ser visto na Figura 3. Na Figura 4 é mostrado a microestrutura em 3D simulada.

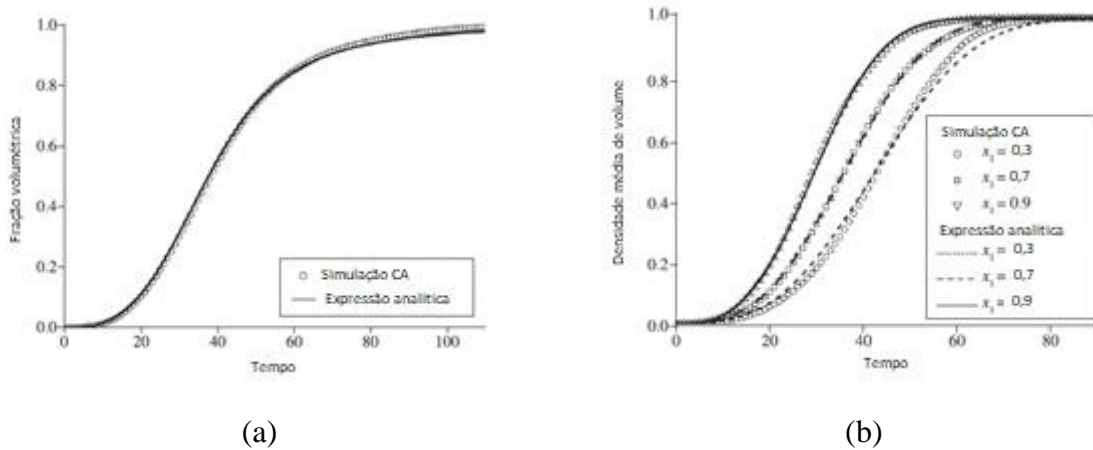


Figura 3 – Cinética de transformação. (a) A fração de volume, V_V , contra o tempo: simulação CA comparada com a expressão analítica. (b) Densidade volumétrica média, $V_V(t, x)$ em função do tempo nos planos $x_1 = 0,3, 0,7$ e $0,9$.

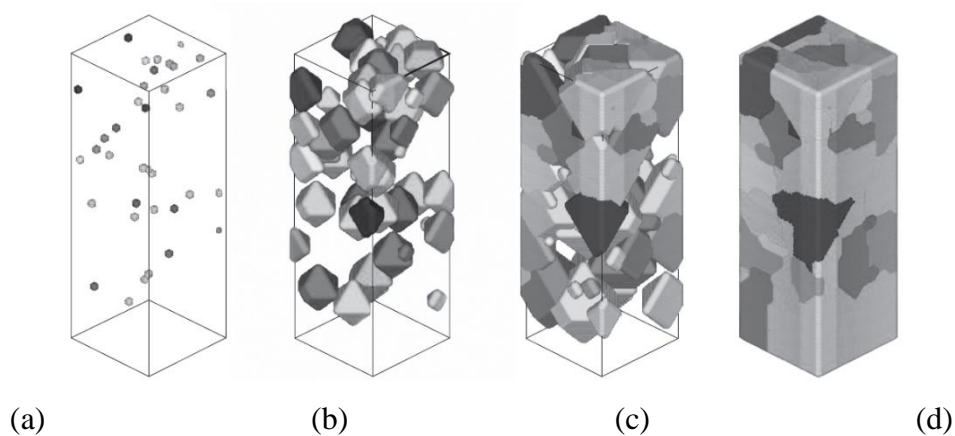


Figura 4 – Representação em 3D da microestrutura simulada. (a) $V_V = 0$, (b) $V_V = 0,1$, (c) $V_V = 0,5$ e $V_V = 1$.

3.4.2.3 Estudos relacionados

O interesse no estudo da não homogeneidade microestrutural, muitas vezes surgem na indústria durante o processo de produção. Estes podem ser, por exemplo, um gradiente de temperatura [6], [7] ou um gradiente de deformação [8]–[13].

3.4.2.3.1 Gradiente de temperatura

No estudo de Ohno M. et al. [7], os efeitos do gradiente de temperatura no crescimento de grãos são sistematicamente investigados por meio de simulações de campo de fase para elucidar a existência ou inexistência de fenômeno de fixação térmica. Em estudo anterior sobre a soldagem por fusão, verificou-se que o tamanho do grão próximo à linha de fusão no ZTA é menor do que o previsto para o mesmo ciclo térmico do ZTA, mas com menor gradiente de temperatura. Suponha-se que o crescimento dos grãos fosse inibido pelo acentuado gradiente de temperatura devido à baixa mobilidade dos limites de grãos na região de baixa temperatura. Esse fenômeno é chamado de fixação térmica. A dependência da temperatura da mobilidade dos contornos de grão é de importância primordial para a análise da fixação térmica.

Sob esse acentuado gradiente de temperatura, o tamanho do grão se torna mais grosseiro do que os outros casos analisados (temperatura e gradiente), o que é oposto ao esperado pelo efeito de fixação térmica. Na Figura 5 é mostrado a evolução da microestrutura calculados para $T_c = 1373K$ e $G = 5,0 \times 10^5 K m^{-1}$. Observa-se que o tamanho do grão no estágio inicial não é uniforme devido ao acentuado gradiente de temperatura.

À medida que o tempo de espera passa, os grãos grandes no lado de alta temperatura crescem em direção à parte central. Esses grãos grandes cultivados do lado da alta temperatura finalmente atingem a parte central em $t = 100$ s, o que resulta na aceleração aparente do crescimento de grãos. Esse fenômeno deve ser considerado como um caso excepcional, uma vez que esse não é o caso de crescimento normal dos grãos, ou seja, a competição de grãos na região central, mas o crescimento preferido e exclusivo dos grãos grandes a partir da borda da alta temperatura (crescimento anormal dos grãos).

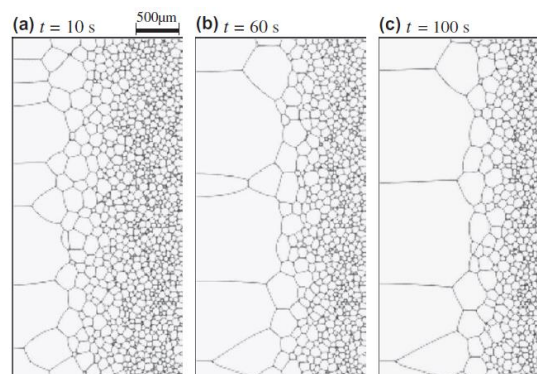


Figura 5 - Evolução da microestrutura durante o crescimento de grãos calculados para $T_c = 1373K$ e $G = 5,0 \times 10^5 K m^{-1}$ e $\dot{T} = 0.0$.

3.4.2.3.2 Gradiente de deformação

Vários trabalhos são sobre deformação não homogênea com consequente recristalização não homogênea. Dentre eles, tem-se Song X. et. al [8] que modela em Monte Carlo para prever a variedade de características microestruturais locais recristalizadas de materiais pré-deformados de maneira homogênea e não homogênea. Particularmente, além de um tamanho variável de grão, a forma do grão (proporção) dependerá das condições locais de nucleação e crescimento.

Um modelo analítico foi desenvolvido descrevendo a recristalização em uma microestrutura que foi pré-deformada de maneira não homogênea por trefilação a frio. Na Figura 6 é mostrado o material pré-deformado [8], [33]. O estiramento a frio de uma haste gera gradientes radiais de deformação e, portanto, de energia armazenada, com a maior deformação na superfície e a menor no centro. Como consequência da pré-deformação não homogênea, a cinética da nucleação e subsequente crescimento dos núcleos varia ao longo da direção radial da haste. Uma função determinística para a taxa de nucleação foi formulada, considerando que a energia armazenada atua como força motriz para a nucleação. Assim, a taxa de nucleação varia gradualmente com a distância da superfície da haste. A aplicação desses tipos de características de nucleação permite prever um gradiente de tamanho de grão na direção radial da haste.

Utilizando as características básicas da cinética de nucleação e a relação energia / tensão armazenada no modelo analítico, foi proposto um modelo de Monte Carlo. Várias condições de pré-deformação foram mapeadas na estrutura inicial do grão. O processo de recristalização e subsequente grão normal foi simulado e as morfologias calculadas (gradientes de tamanho de grão e gradientes de proporção de aspecto de grão) foram comparados com os resultados experimentais.

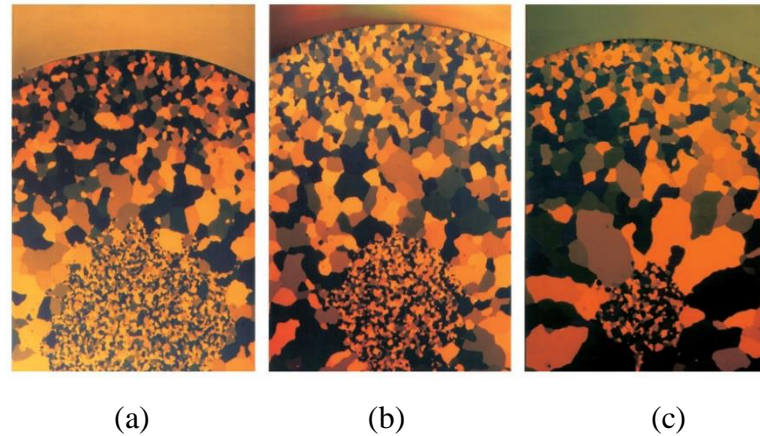


Figura 6 - Microestrutura de titânio grau 2 após trefilação a frio e recozimento por (a) 10, (b) 30 e (c) 120 min a 800°C.

Na Figura 7 é possível acompanhar o estágio de crescimento dos grãos, onde a simulação foi realizada por um longo tempo. Existem diferentes condições de crescimento para o crescimento de grãos, tanto na área completamente recristalizada quanto na frente de recristalização. Na área completamente recristalizada, a microestrutura evolui com as características do crescimento normal dos grãos, impulsionada pela redução da energia de contorno dos grãos. No entanto, na transição das zonas recristalizadas e não recristalizadas, devido aos grãos mais finos em contato com a frente recristalizada, uma quantidade maior de energia de contorno de grão é consumida à medida que a frente prossegue em direção ao centro. Além disso, o crescimento de grãos ocorre em uma região onde ainda há energia armazenada. A energia armazenada restante é um fator adicional importante para a força motriz do crescimento de grãos em direção ao centro. Portanto, o crescimento do grão ocorre a uma velocidade mais alta em direção ao centro da amostra do que nas outras direções, levando a um aumento acentuado da proporção de aspecto do grão.

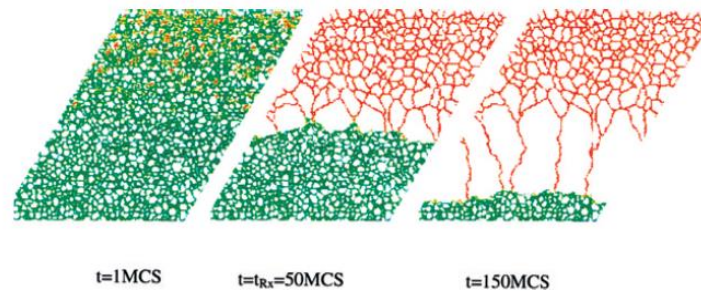


Figura 7 - Evolução da microestrutural durante a recristalização e subsequente crescimento de grãos, com a pré- formação local. As áreas verdes e vermelha representam a matriz e as zonas recristalizadas, respectivamente.

Em outro trabalho, Wang X. et. al. buscaram saber a quantidade de deformação que é necessária para desencadear a formação de ALGs (grãos anormalmente grandes) que é desconhecido em investigações anteriores. Neste artigo, foi usado um recuo esférico para gerar um gradiente de deformação à temperatura ambiente, assim, o comportamento do crescimento dos grãos dependentes da deformação poderia ser correlacionado com a quantidade de deformação aplicada.

Essa técnica antiga de endentação para gerar um gradiente de deformação já foi usada antes para estudar o fenômeno relacionado à tensão[34]. Ferramentas de experimentação e simulação foram empregadas para avaliar a extensão da deformação e a distribuição total da densidade de deslocamento após o recuo. As amostras recuadas foram submetidas a diferentes procedimentos de tratamento térmico e a condição de início para ALGs foi determinada. Os resultados demonstram claramente que a formação de ALGs é impulsionada pelo mecanismo relacionado à energia armazenada, como demonstrado também pela simulação do campo de fase.

Para investigar o efeito da deformação na evolução do tamanho dos grãos, o recuo esférico foi aplicado para gerar um gradiente de microestrutura deformado, Figura 8a. Devido à deformação diferente, a deformação plástica / energia armazenada / força motriz usada para a evolução dos grãos varia de local para local após tratamentos térmicos por super-solventes subsequentes. A Figura 8b mostra a estrutura do grão próxima à impressão de indentação após 5 min de tratamento térmico por super-solvente. Observando em direção à seção transversal, Figura 8b, a ocorrência de ALGs é confinada a uma banda estreita.

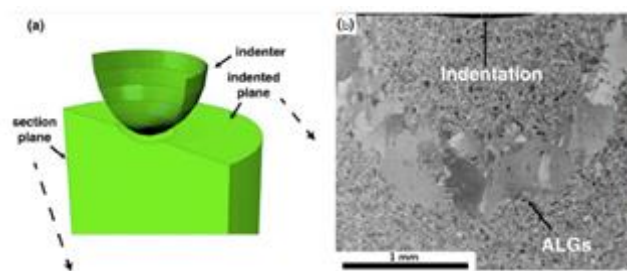


Figura 8 - Gráfico esquemático da ocorrência de ALGs na amostra após tratamento térmico por supersolvus por 5 min. (a) Configuração do experimento de indentação. (b) O grão de ALGs aparece de maneira semi-elíptica no plano de corte.

Para entender melhor o efeito da energia armazenada na formação de ALGs, foi realizada uma simulação de campo de fase para capturar o comportamento de crescimento de grãos no modelo policristalino com diferentes energias armazenadas.

Diferentes níveis de energia armazenada foram adicionados ao modelo, Figura 9, o quarto mais baixo (Região 1) não tinha energia armazenada, a Região 2 tinha energia armazenada: $0,2085 \times 10^6 J/m^3$, a Região 3: $0,417 \times 10^6 J/m^3$ (o dobro da região 2) e o mais alto, (Região 4): $0,6255 \times 10^6 J/m^3$ (o triplo da região 2). O contraste de cores na Figura 9 indica a quantidade de energia armazenada: vermelho sendo nenhuma energia armazenada, enquanto laranja para amarelo indica aumento da energia armazenada. Os resultados simulados são mostrados na Figura 9 para 4 regiões diferentes.

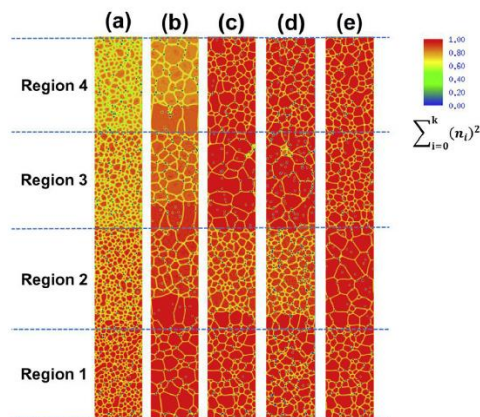


Figura 9 - Resultados da simulação de campo de fase (a) Configuração inicial com SE (energia armazenada) diferente adicionada separadamente na região 1: nenhum SE adicionado; região 2: $0,2085 \times 10^6 J/m^3$; região 3: $0,417 \times 10^6 J/m^3$ e região 4: $0,6255 \times 10^6 J/m^3$; fundo vermelho indica que não há SE residual (b) Não é permitida recristalização, e apenas grãos colunares aparecem nos limites da região com energia armazenada acentuada (c) É permitida recristalização e grãos muito grandes aparecem na região 3 com energia armazenada moderada. (d) Com o aumento das partículas de fixação, os grãos muito grossos aparecem na mesma região 3, mas o tamanho geral dos grãos é menor. (e) Depois de dobrar a energia armazenada em cada região, os grãos grossos aparecem na região 2.

Os ALGs ocorrem apenas em uma faixa crítica de energia armazenada. A formação de ALGs é impulsionada pela distribuição de energia armazenada, pois a energia armazenada e a densidade de deslocamento na microestrutura deformada podem ser positivamente

correlacionadas. Propõe-se que a formação de ALGs seja um processo de recristalização anormal com núcleos estáveis limitados, que provavelmente são nucleados pelo mecanismo de migração de limite induzido por tensão. Pensa-se que a distribuição heterogênea da energia armazenada através dos limites dos grãos nos locais de nucleação de ALGs tenha um grande impacto nesse processo de migração de limite induzido por tensão.

3.4.3 Velocidade não homogênea

Derivar uma expressão para a velocidade dependente da posição de uma velocidade não homogênea é muito mais complicado do que para a nucleação não homogênea.

O problema é que, quando a velocidade é independente da posição, o formato da região de crescimento é esférico. No entanto, por exemplo, se há um polímero cristalizando em um gradiente de temperatura íngreme, a forma da região de crescimento não permanece esférica. Uma boa ilustração está no trabalho de Capasso et al. [6].

No entanto, se o gradiente não for acentuado em comparação com o tamanho da região, é possível simplificar o problema. Por exemplo, suponha que uma chapa de metal com 1 mm de espessura tenha 90% de deformação na parte superior e 10% de deformação na parte inferior. Um tamanho de grão razoável após a recristalização pode estar em torno de 50 μm . O gradiente de deformação é $(90-10) / 1000 = 0,08\% / \mu\text{m}$. Para um grão de 50 μm , a mudança na deformação ao longo de seu diâmetro seria igual a 4%. Se o centro do grão for deformado em 50%, no topo, o grão terá uma deformação máxima de 52% e, no fundo, uma deformação máxima de 48%. Essa diferença de 4% será muito menor no início do crescimento quando a região ainda for pequena.

Sob essas circunstâncias, pode-se simplificar o problema. Supõe-se que o ponto em que o grão nucleado determina a velocidade, mas cada grão cresce com uma velocidade constante. Dessa maneira, tem-se uma velocidade não homogênea, mas uma solução analítica é viável.

Villa e Rios [15] propuseram uma abordagem simplificada. Nesta abordagem simplificada, supondo que cada grão cresce com velocidade constante, dependendo da localização espacial do núcleo correspondente, isto é, a velocidade G associada para um grão com núcleo em $y \in \mathbb{R}^d$ é igual para $G(y)$, onde G é uma dada função de \mathbb{R}^d a \mathbb{R}_+ . Segue que a região transformada θ^t no tempo t é a união de bolas com centros aleatórios do tipo:

$$\Theta^t := \bigcup_{y \in N} B_{G(y)t}(y), \quad (11)$$

Onde N é um processo de nucleação de Poisson em \mathbb{R}^d com intensidade λ .

Foi modelado analiticamente, portanto, uma velocidade de crescimento posição dependente / não homogênea, mas mantendo a nucleação homogênea. Mesmo com as simplificações, a expressão matemática dada por Villa e Rios [15] é mais complicada do que a de nucleação não homogênea:

$$V_E(t, x) = \int_{A(t,x)} \lambda(y) dy \quad (12)$$

$$V_V(t, x) = 1 - \exp\left\{- \int_{A(t,x)} \lambda(y) dy\right\} \quad (13)$$

Onde $A(t,x)$ é o volume de um conjunto A , o cone causal [14], [15], no caso 3D dado por:

$$A = \{(y_1, y_2, y_3) \in \mathbb{R}^3 := G(y)t \mid \geq \sqrt{(y_1 - x_1)^2 + (y_2 - x_2)^2 + (y_3 - x_3)^2}\} \quad (14)$$

Sendo para nucleação homogênea $\lambda(x) \equiv \lambda$, ou seja, igual ao número de núcleos por unidade de volume e $G(y)$ é a velocidade de crescimento de uma região nucleada em $y = (y_1, y_2, y_3)$. (x_1, x_2, x_3) são as coordenadas dos pontos no espaço que satisfazem a desigualdade acima. Detalhes podem ser encontrados em Villa e Rios [15].

Essa abordagem foi feita em trabalho recente [11]. Lyrio et al. [11] comparou simulações de computador usando nucleação não homogênea com velocidade constante com simulações de computador usando nucleação homogênea com velocidade não homogênea. Houve um bom acordo entre o modelo analítico e simulação como será visto na parte de resultados e discussão.

3.4.4 Nucleação e velocidade não homogêneas

É necessário considerar a nucleação não homogênea e a velocidade não homogênea para obter uma equação adequada para modelar a transformação em uma matriz não homogênea. Desta forma, nesta abordagem, Villa e Rios [15] propuseram que a velocidade de crescimento

de cada região também é constante, mas depende da coordenada dos núcleos a partir dos quais o crescimento começa. Isto é, $G(x)$ depende da posição dos núcleos no espaço, mas permanece constante após um crescimento adicional, para que a região em crescimento permaneça esférica para uma dada quantidade de núcleos no espaço. Assim, a velocidade varia ao longo de um gradiente, assim como os núcleos. Foi modelado analiticamente, portanto, uma velocidade de crescimento posição dependente / não homogênea e a nucleação não homogênea. A expressão matemática dada por Villa e Rios [15] é mais complicada do que a de nucleação não homogênea e velocidade não homogênea:

É sabido que $V_V(t, x)$ coincide com a probabilidade de que o ponto x pertença à região transformada no tempo t . O chamado cone causal de um ponto x no tempo t , aqui indicado por $A(t, x)$, desempenha um papel fundamental na avaliação de $V_V(t, x)$. É definida como a região (isto é, o subconjunto do espaço onde o processo de nucleação N recebe valores) em que pelo menos um evento de nucleação deve ocorrer para cobrir o ponto x no tempo t ; ou seja, denotando com a região transformada no tempo t , a seguinte equivalência entre eventos é válida:

$$\{x \in \Theta^t\} \Leftrightarrow \{N(A(t, x)) > 0\} \quad (15)$$

Consequentemente, se N é um processo de Poisson com intensidade $\lambda = \lambda(y)$, segue diretamente pela lei de probabilidade do processo que

$$V_V(t, x) = 1 - \exp\left\{-\int_{A(t, x)} \lambda(y) dy\right\} \quad (13)$$

Sob as premissas acima, a região transformada, Θ^t , no momento t é dada por

$$\Theta^t := \bigcup_{y \in N} B_{G(y)t}(y), \quad (11)$$

onde $B_{G(y)t}(y)$ é a bola centralizada no ponto y com raio $G(y)t$, sendo $G(y)$ a velocidade de crescimento de um grão nucleado em $y = (y_1, y_2, y_3)$. Portanto, pela simetria central dos grãos,

$$A(t, x) = \{y \in \mathbb{R}^3 : x \in B_{G(y)t}(y)\} = \{y \in \mathbb{R}^3 : y \in B_{G(y)t}(x)\} \quad (16)$$

$$= \{y \in \mathbb{R}^3 : G(y)t \geq \sqrt{(y_1 - x_1)^2 + (y_2 - x_2)^2 + (y_3 - x_3)^2}\}$$

Sendo λ para nucleação não homogênea é o número médio de núcleos na qual varia linearmente com x_1 sendo igual a $\lambda(x_1) = mx_1 + n$ e $G(y)$ a velocidade de crescimento de uma região nucleada para uma certa quantidade de núcleos no espaço. (x_1, x_2, x_3) são as coordenadas dos pontos no espaço que satisfazem a desigualdade acima. Quando a velocidade é constante, pode-se substituir $G(y)$ por G . Detalhes podem ser encontrados em Villa e Rios [15].

4 METODOLOGIA

Esta dissertação trata de simulação computacional e modelamento analítico. Através do modelo analítico é possível validar o código computacional. Foram analisados, portanto, três casos diferentes para nucleação e velocidade. Sendo eles: Nucleação homogênea e velocidade não homogênea, nucleação não homogênea e velocidade homogênea e nucleação não homogênea e velocidade não homogênea. Vale ressaltar que a parte de nucleação não homogênea e velocidade homogênea já foi analisado e validado em trabalho anterior [17]. Nesse trabalho, esta parte de nucleação não homogênea e velocidade homogênea foi revisitada com o intuito de comparar seus resultados com o caso de nucleação não homogênea e velocidade não homogênea. O estudo desta dissertação iniciou-se com o caso de nucleação homogênea e velocidade não homogênea.

O modelamento analítico para todos os casos foi baseado nos modelos de Rios e Villa [14], [15], como visto no item 3.4. O código computacional foi escrito em linguagem Fortran 2003 e compilado pelo *Microsoft Visual Studio 2012*[®] e paralelização em OpenMP. As simulações foram realizadas no NMM/UFF-EEIMVR e através do supercomputador MASAMUNE-IMR do Centro de Computação de Ciência dos Materiais da Universidade Tohoku, Japão. A visualização das microestruturas geradas foi obtida com o programa *Tecplot 360*[®] e os gráficos foram gerados com o auxílio do programa *Wolfram Mathematica 12*[®].

A simulação computacional em 3D de nucleação e crescimento foram realizadas através do método do Cone Causal [14], [15] que será visto no item 4.2.1. Em todos os casos, a nucleação foi por saturação de sítios. A matriz foi dimensionada em 300 x 300 x 300 células cúbicas para o caso de nucleação homogênea e velocidade não homogênea e 500 x 500 x 500 para os casos de nucleação não homogênea e velocidade homogênea e nucleação não homogênea e velocidade não homogênea. As dimensões do volume de simulação, denominadas “espécime”, foram consideradas de 1 mm de comprimento, altura e largura. Como resultado, o domínio simulado teve um volume igual a 1 mm³. Por conveniência, as unidades serão omitidas no texto. Portanto, um cubo de [0,1] x [0,1] x [0,1] correspondendo aos eixos (x_1 , x_2 , x_3). Na parte inferior do volume de simulação $x_3 = 0$ enquanto que na parte superior $x_3 = 1$. Condição de contorno periódica foram adotados ao longo das direções x_1 e x_2 . Por outro lado, nenhuma condição periódica foi aplicada ao eixo x_3 . Para nucleação não homogênea, a densidade de núcleos foi assumida variando linearmente ao longo da direção x_3 de acordo com $\lambda(x_3) = mx_3 + n$ onde m e n são constantes e variam de acordo com o número de núcleos, entretanto a

inclinação da reta é a mesma. Para o caso de velocidade de crescimento não homogênea foi assumida variando ao longo da direção x_3 de acordo com $G(x_3) = ax_3 + b$ onde a e b são constantes. A partir daqui, por questão de brevidade, é adotado x no lugar de x_3 .

O número de núcleos foi determinado a partir de trabalho anterior [17] para o caso de nucleação homogênea e velocidade não homogênea. E, através de, $V_V = \frac{1}{N_V}$, sendo V_V a fração volumétrica e N_V o número de núcleos por unidade de volume, determinou-se o tamanho de grão médio. Portanto, o número de núcleos empregado foi de 150, 300, 600 e 1200 com tamanhos de grão que variam de 35 a 70 μm . Já os coeficientes a e b , foram determinados a partir da ideia de que esses coeficientes proporcionassem através dessa equação da reta um gradiente de velocidade maior ou menor entre os planos superiores e planos inferiores. O valor de b é fixo e igual a 0,2, para que no plano inferior já apresente certa velocidade. Assim sendo, considerando m igual a 0,1 ou 3,0, $G(x) = 0,1x + 0,2$ e $G(x) = 3,0x + 0,2$ pode-se analisar essa diferença de velocidade entres os planos. Para $G(x) = 0,1x + 0,2$, no plano 0,1, $G(0,1) = 0,21$, enquanto que no plano 0,9, $G(0,9) = 0,29$, ou seja, a velocidade na parte superior é 28% maior. O gradiente de velocidade, portanto, é menos abrupto. Para $G(x) = 3,0x + 0,2$, no plano 0,1, $G(0,1) = 0,5$, enquanto que no plano 0,9, $G(0,9) = 2,9$, ou seja, a velocidade na parte superior é 83% maior. O gradiente de velocidade, portanto, é mais abrupto. A unidade de velocidade é célula/unidade de tempo. O tempo é o tempo discreto de cada interação. Na Tabela 1 é mostrado os coeficientes a e b empregados neste caso e o número de núcleos. Foram analisados quatros gradientes de velocidade para cada uma das quantidades de núcleos. Desta forma, foi possível aplicar o modelo para condições de mais e menos núcleos e maior e menor gradiente de velocidade.

Tabela 1 - Número de núcleos e coeficientes a e b para o gradiente de velocidade.

Número de núcleos	Gradiente de velocidade
150	$G(x) = 0,1x + 0,2$
300	$G(x) = 0,3x + 0,2$
600	$G(x) = 1,0x + 0,2$
1200	$G(x) = 3,0x + 0,2$

Para o caso de nucleação não homogênea e velocidade homogênea e nucleação não homogênea e velocidade não homogênea, os coeficientes m e n de $\lambda(x) = mx + n$ são

determinados através da integral dessa equação da reta por todo volume de simulação, ou seja, de 0 a 1. O coeficiente n é fixo e igual a 2, assim é determinado m para qualquer quantidade de núcleos. O número de núcleos foi 1200, 4800 e 19200, com tamanhos de grão que variam de 23 a 58 μm . Definindo o número de núcleos determinou-se os coeficientes de velocidade a partir do critério definido a seguir. Se observar a Eq. 10 o coeficiente de tempo é $\lambda(x)G^3$. As constantes foram escolhidas para que a razão de número de núcleos por unidade de volume, $\lambda(0,9)/\lambda(0,1)$ e $(G(0,9)/G(0,1))^3$ tivessem valores comparáveis. A Tabela 3 mostra que, para todos os casos, a razão de $\lambda(0,9)/\lambda(0,1)$ foi semelhante e igual a 9. Comparando $\lambda(0,9)/\lambda(0,1)$ com $(G(0,9)/G(0,1))^3$ para diferentes gradientes de velocidade, foi observada uma boa aproximação entre $\lambda(0,9)/\lambda(0,1)$ e $(G(0,9)/G(0,1))^3$ para o gradiente de $G(x) = 0,3x + 0,2$, como mostrada na Tabela 3. Assim, é observada uma relação entre o número de gradiente de núcleos e o gradiente de velocidade. Desse modo, foram analisados além do gradiente de $G(x) = 0,3x + 0,2$, dois outros gradientes $G(x) = 0,1x + 0,2$ e $G(x) = 1,0x + 0,2$, que apresentam uma diferença de velocidade entre os planos superior e inferior menor e maior, respectivamente. O modelo analítico foi aplicado também em condições de maior e menor quantidade de núcleos e gradientes de velocidade.

Para o caso de nucleação não homogênea e velocidade homogênea, os valores de G mostrados também na Tabela 2, correspondem a velocidade média do gradiente de velocidade, ou seja, integral de $G(x) = ax + b$ por todo volume de simulação de 0 a 1 para cada gradiente de velocidade a ser analisado.

É essencial ressaltar que os gradientes dos núcleos são os mesmos para os núcleos 1200, 4800 e 19200. Isso pode ser visto dividindo a inclinação de $\lambda(x)$ pelo número total de núcleos: $2396 / 1200 \cong 2$, $9596 / 4800 \cong 2$ e $38396 / 19200 \cong 2$.

Tabela 2 – Número de núcleos com seus respectivos gradientes de núcleos e os diferentes gradientes de velocidade com suas respectivas velocidades média constantes.

Número de núcleos	Gradiente de núcleos	Gradiente de velocidade	Velocidade constante
1200	$\lambda(x) = 2396x + 2$	$G(x) = 0,1x + 0,2$	$G = 0,25$
4800	$\lambda(x) = 9596x + 2$	$G(x) = 0,3x + 0,2$	$G = 0,35$
19200	$\lambda(x) = 38396x + 2$	$G(x) = 1,0x + 0,2$	$G = 0,70$

Tabela 3 –Valores de $\lambda(0,9)/\lambda(0,1)$ e $(G(0,9)/G(0,1))^3$ correspondendo a $\lambda(x)$ e $G(x)$ mostrados na tabela 2.

$\lambda(0,9)/\lambda(0,1)$	$(G(0,9)/G(0,1))^3$
9 (1200 núcleos)	2,6
9 (4800 núcleos)	8,5
9 (19200 núcleos)	49,3

O tamanho da matriz de 500 x 500 x 500 para os casos de nucleação não homogênea e velocidade homogênea e nucleação não homogênea e velocidade não homogênea foi feita para melhorar o efeito de borda, ou seja, o efeito da simulação no meio infinito (condição de contorno periódica) e refinamento da matriz.

Todas as simulações para cada condição específica foram repetidas 50 vezes. Por exemplo, a densidade de volume média exibida nas plotagens é a média dos valores obtidos em 50 simulações. Obviamente, as microestruturas descritas só podem ser obtidas a partir de uma simulação.

Para conveniência dos leitores, pode-se resumir os descritores microestruturais usados aqui:

a) A densidade volumétrica média, $V_V(t, x)$, da nova fase; a densidade média da área interfacial, $S_V(t, x)$, entre a nova fase e a matriz.

b) A fração de volume transformada, $V_V(t)$, é a integral da densidade de volume média da nova fase em todo o volume de simulação, $\int_{[0,1]^3} V(t, x) dx$. Analogamente, a área interfacial por unidade de volume transformado, $S_V(t)$, é a integral da densidade média da área interfacial entre a nova fase e a matriz em todo o volume de simulação.

c) N_V é o número de grãos por unidade de volume.

d) A contiguidade, $C_{\beta\beta}$, é definida como $C_{\beta\beta} = \frac{2S_V^{\beta\beta}}{S_V^{\alpha\beta} + 2S_V^{\beta\beta}}$, onde β é uma nova fase e α é a fase mãe. $S_V^{\beta\beta}$ é a densidade média da área interfacial dos limites entre as regiões da nova fase e $S_V^{\alpha\beta}$ é a densidade média da área interfacial dos limites entre as regiões da nova fase e a matriz mãe. Enquanto em (a) e (b) omitiu-se os sobrescritos, aqui eles foram incluídos para maior clareza. Pode-se também definir a contiguidade em termos de área por unidade de volume

$C_{\beta\beta} = \frac{2S_V^{\beta\beta}}{S_V^{\alpha\beta} + 2S_V^{\beta\beta}}$. A contiguidade $C_{\beta\beta}$ é plotada como uma função da densidade de volume média, $V_V(t, x)$. A contiguidade $C_{\beta\beta}$ é plotada como uma função da fração de volume, $V_V(x)$.

e) Na sequência, os termos "velocidade constante" e "velocidade homogênea", bem como "gradiente de velocidade" e "velocidade não homogênea" são usados como sinônimos.

4.2 MODELO COMPUTACIONAL

Para esse trabalho realizou-se melhorias no código, e implementação de novas rotinas com o intuito de representar da melhor maneira o fenômeno estudado e consequentemente ser validado pelos modelos analíticos. No fluxograma da Figura 10 é apresentado esquematicamente o algoritmo desenvolvido.

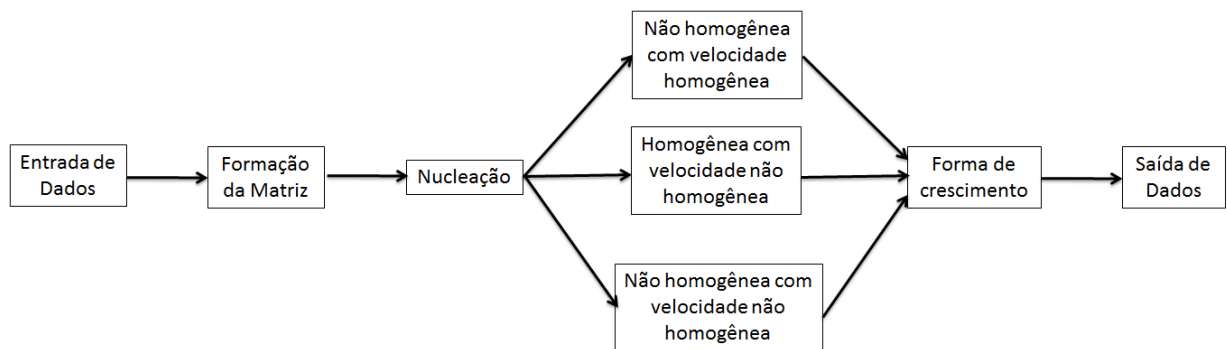


Figura 10 - Fluxograma esquemático do algoritmo desenvolvido.

Na entrada de dados do programa são inseridos todos os parâmetros que serão considerados na simulação como: o tamanho da matriz, quantidade de núcleos, coeficientes dos gradientes de número de núcleos e velocidade, tipo de nucleação (aleatória ou não homogênea), fração de plotagem em 3D e 2D, assim como matriz inicial e final e a quantidade de simulações.

Logo após a inicialização do programa com os dados de entrada, é construída a matriz de transformação com as dimensões escolhidas pelo usuário. Esta matriz é alocada na memória do computador, e todas as suas posições recebem valores iguais a zero. Subsequente à construção da matriz ocorre o processo simulado de nucleação dentro desse domínio discreto. A nucleação, pode ocorrer por saturação de sítios, podendo ser: homogênea (aleatória) seguindo uma distribuição de ponto de Poisson ou não homogênea seguindo um perfil de gradiente de núcleos em relação à altura do domínio.

No programa foi implementado um gerador de números aleatórios (“Mersenne Twister”) [35], que define a posição dos núcleos na matriz aleatoriamente de forma homogênea. Na Figura 11 é mostrado os núcleos distribuídos na matriz de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Para o caso de nucleação não homogênea, ou seja, núcleos distribuídos na matriz segundo um gradiente linear, o gerador de núcleos aleatórios sorteia no eixo x_3 a posição entre os extremos da matriz nesta direção, no caso de 1 a 500. Dividindo-se o lado da matriz pelo próprio tamanho da matriz, 500, realiza-se a normalização, fazendo com que seus limites variem entre [0,002, 1]. A quantidade de sorteios depende do número de núcleos, e das regras de nucleação impostas para este modelo. O sorteio ocorre até que todos os núcleos estejam posicionados na matriz. Entretanto, essa posição vai depender da probabilidade de o núcleo permanecer aquela posição. É utilizado a seguinte equação para gerar uma densidade de probabilidade de aceitação do núcleo em um determinado plano:

$$P(p_i) = \frac{mp_i + n}{mp_{máx} + n} \quad (17)$$

Onde p_i é a posição sorteada pelo gerador de números aleatórios e pode variar entre [0,1] e $p_{máx}$ é a posição na altura máxima, ou seja, em 1 na matriz. Essa equação é usada, uma vez que, o número de núcleos depende do m e n da equação. Primeiramente é sorteada a partir do gerador de números aleatórios o plano no eixo x_3 que o núcleo vai surgir. Esse valor é usado na variável p_i para calcular a probabilidade de aceitação de um núcleo. Logo após o sorteio é realizada a verificação da permanência do núcleo naquela posição a partir da regra de aceitação. Um novo sorteio é realizado para gerar um segundo número aleatório, p, para análise da permanência ou não do grão nucleado. Se $P(p_i)=1$ significa que esta igualdade representa 100% de chance de aceitação de um núcleo naquela posição. Se $P(p_i)<1$, menor é a chance do núcleo está posicionado na parte superior da matriz. Se $p < P(p_i)$, o núcleo fica nesse plano da matriz em uma posição aleatória, caso contrário, não é aceito e um novo sorteio é realizado. A Figura 12 exemplifica essa situação.

Posicionando todos os núcleos na matriz, os núcleos ficam distribuídos na matriz de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo, com é mostrado na Figura 13.

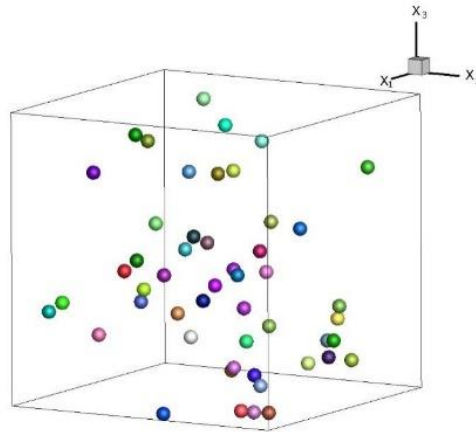


Figura 11 – Matriz com núcleos distribuídos de maneira aleatória na matriz, ou seja, de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo.

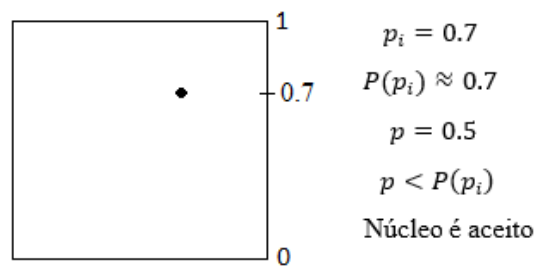


Figura 12 – Exemplificação de quando um núcleo é aceito no plano. Quanto maior $P(p_i)$ maior a chance de haver núcleos na parte superior da matriz.

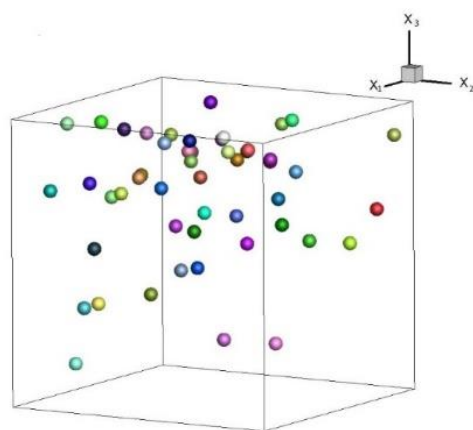


Figura 13 - Matriz com núcleos distribuídos segundo uma direção preferencial na matriz, ou seja, de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo.

Finalizada a nucleação, é iniciado o crescimento das fases pelo método do Cone Causal [14], [15] que ocorre até que toda a matriz tenha se transformado. Para o caso de velocidade não homogênea, a velocidade vai depender da posição na matriz. O incremento do plano é dado pela equação linear da velocidade em função de p_i , posição sorteada pelo gerador de números aleatórios, Eq.18.

$$\text{Incremento do plano} = ap_i + b \quad (18)$$

E a velocidade é, portanto, dada por:

$$\text{velocidade do CC} = \frac{\text{incremento do plano}}{\text{tempo de simulação}} \quad (19)$$

Ao fim das transformações, tem-se a geração dos dados que ocorre na Saída de dados, sendo esses: tempo de reação, fração volumétrica transformada (\mathbf{V}_V), fração volumétrica transformada por plano (V_V), área por unidade de volume entre a nova fase e a matriz (\mathbf{S}_V), comprimento por unidade de área entre a nova fase e a matriz dos planos (L_A), caminho microestrutural ($L_A \times A_A$) e ($\mathbf{S}_V \times \mathbf{V}_V$) e contiguidade. É gerado também os dados que são utilizados para a visualização das microestruturas e sua evolução em 3D e 2D.

4.2.1 Método do Cone Causal

O processo de nucleação é por saturação de sítios. Após a formação dos núcleos gerados inicia-se o processo de crescimento desses núcleos até que ocorra a completa transformação na matriz. Para uma velocidade constante, a simulação empregou o método do cone causal. Este método foi empregado em trabalhos anteriores [36]–[39]. A Figura 14 ilustra o método do cone causal para uma transformação saturada no local. Na Figura 14a é mostrado um ponto "x" dentro de uma bola de raio $R = Gt$ centrado em x (linha sólida). A bola na Figura 14a é o cone causal do ponto x no tempo t. A expressão "Cone Causal" é usada porque, quando se considera o tempo, se tem um "cone" 4-D que tem a bola da Figura 14a como a "base" e o tempo como a "altura". Sempre que um núcleo é "capturado" por esse cone, o ponto x se transforma. A bola na Figura 14a não contém núcleos. Portanto, nenhuma região em crescimento pode ultrapassar x dentro do tempo t. Como resultado, x permanece não transformado. Em contraste, a Figura

14b mostra uma bola idêntica, mas contendo um núcleo. Em um momento específico, t , a nova região originada no núcleo (linha tracejada) contida na bola pode crescer e atingir um raio $R = Gt$. Essa bola de região transformada ultrapassa e transforma o ponto x . Em resumo, para transformar o ponto x , pelo menos um núcleo deve estar presente na bola centralizada em x . Obviamente, essa bola pode conter mais de um núcleo.

A evolução da simulação se dá através das interações ao longo do tempo. Para cada interação o programa analisa todos os pontos da matriz para a verificação de quais serão transformados.

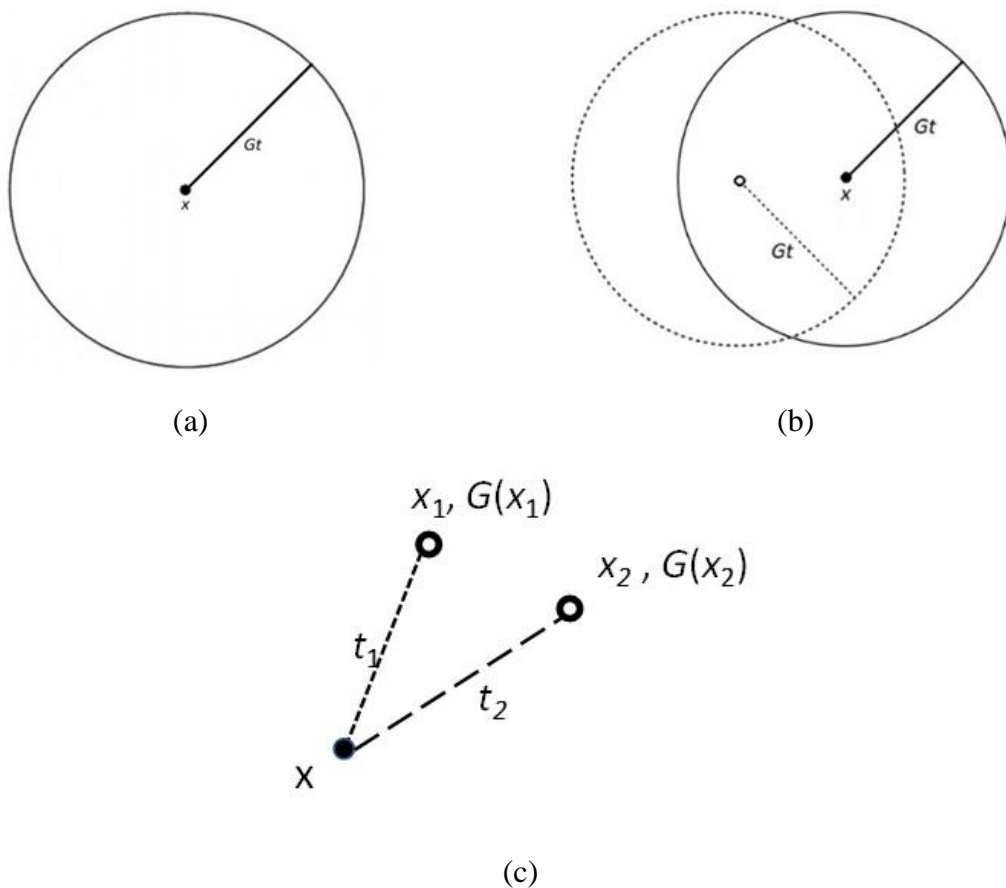


Figura 14 - (a) Fig. 14a mostra um ponto x dentro de uma bola de raio $R = Gt$ centrado em x (linha sólida). Essa bola é chamada cone causal de x . Nenhum núcleo está dentro desta bola. Portanto, nenhuma região transformada pode ultrapassar x que permanece não transformado. (b) A Fig. 14b mostra uma bola centralizada em x com um núcleo dentro dela. No momento t , a região transformada originada no núcleo cresceu para uma bola de raio $R = Gt$ (linha tracejada) abrangendo o ponto x , de modo que x está dentro da região transformada. (c) A Fig. 14c mostra um ponto x que pode ser transformado por dois pontos x_1 ou x_2 . O ponto x é transformado pela região transformada que atinge x no tempo mínimo, t_1 ou t_2 .

Infelizmente, o método do cone causal, como descrito acima, não é conveniente quando há um gradiente de velocidade. Isso ocorre porque a forma do cone causal, "A", descrita na Eq. 16, pode ser complicado. Quer-se manter a simulação por computador o mais simples possível. Por esse motivo, é proposto uma técnica, método do menor tempo, semelhante ao cone causal. É proposto que, se duas regiões com velocidades diferentes que crescem dos núcleos localizados em X_1 e X_2 podem transformar um determinado ponto X, então os núcleos que podem atingir X no menor tempo são escolhidos, Figura 14c. Mais explicitamente, se $\frac{X_1 - X}{G(X_1)} = t_1 < \frac{X_2 - X}{G(X_2)} = t_2$, o núcleo X_1 transformará o ponto X. O método de tempo menor resulta em regiões esféricas crescendo a uma velocidade constante igual à posição do núcleo que o originou, $G(X_1)$. Este método garante que as regiões individuais cresçam como esferas com velocidade constante. Portanto, seu crescimento coincide com as suposições feitas na derivação da solução analítica, veja acima.

Uma limitação da solução analítica é que ela fornece apenas a fração transformada. Em uma simulação por computador, é interessante gerar a microestrutura. A simulação deve ter uma maneira de distinguir as regiões em crescimento ou grãos individuais. Para velocidade constante, isso não é um problema, pois pode-se associar um núcleo à região transformada. O método de tempo menor também permite fazer isso.

O problema com o método do tempo menor é que, ao contrário do método do cone causal empregado para simular uma velocidade constante, ele não possui uma base matemática sólida. É um método proposto com base em experiências do grupo em simular esse tipo de problema. Portanto, seria desejável ter um critério para garantir que uma determinada simulação de computador seja precisa. O critério é de que a solução analítica é exata. Portanto, quando a solução analítica coincide com o resultado da simulação, é uma indicação certa de que a simulação está correta. Este ponto será abordado mais adiante neste trabalho.

4.2.2 Condição de Contorno

Para as simulações foi utilizada às condições de contorno periódicas, pois a matriz simulada é de tamanho limitado [40]. Na Figura 15 é mostrado as condições adotadas.

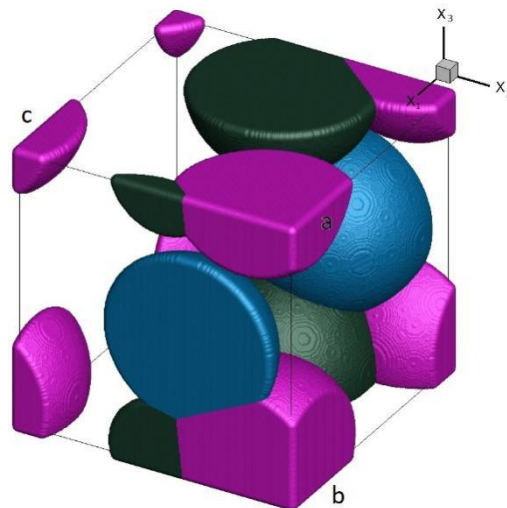


Figura 15 - Representação esquemática das condições de contorno.

Um núcleo quando atinge uma face continua crescendo na face contrária, assim como, quando o núcleo atinge uma aresta, por exemplo, a aresta “a”, ele continua crescendo nas arestas “b” e “c”. Por sua vez, quando um núcleo atinge um vértice, o seu crescimento, continua em todos os outros vértices à medida que ocorre a evolução do tempo.

Desta forma, a matriz gerada é considerada infinita. Entretanto neste trabalho, não foram consideradas as condições de contorno no eixo x_3 . Isso foi feito porque para nucleação não homogênea os núcleos estavam localizados dentro da matriz de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo com uma intensidade $\lambda(x)$, variando ao longo da direção x_3 , assim como para quando a velocidade $G(x)$ era não homogênea. A Figura 16 exemplifica essa condição.

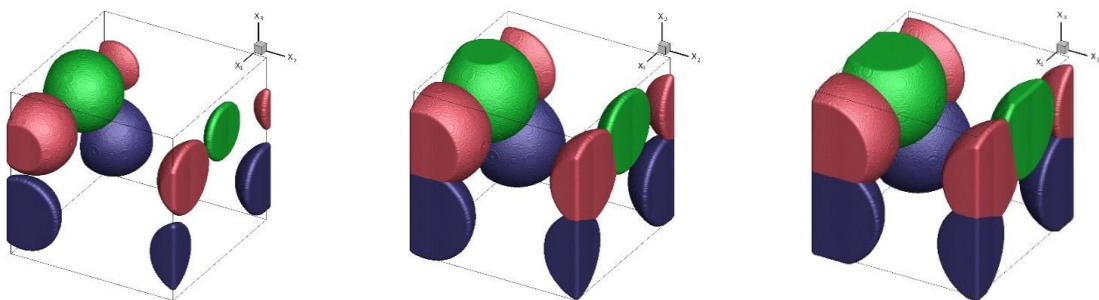


Figura 16 - Representação esquemática da evolução microestrutural em 3D sem condição de contorno no eixo x_3 .

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nessa seção são apresentados os resultados. Esta foi dividida em quatro partes:

- Nucleação homogênea e velocidade não homogênea;
- Nucleação não homogênea e velocidade homogênea;
- Nucleação não homogênea e velocidade não homogênea e
- Comparação entre a nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea.

Para todos os casos analisados foram mostrados a evolução microestrutural em 3D e 2D, a seção em 2D dos planos 0.1 e 0.9 e os gráficos de cinética dos planos (V_V versus tempo). O gráfico de cinética total (V_V versus tempo) foi plotado para os casos de nucleação homogênea e velocidade não homogênea e nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Os gráficos foram construídos através dos dados da simulação e representados por pontos e comparados com as equações analíticas, visto no item 3.4, representados por linhas. Para evitar sobrecarregar os gráficos, alguns pontos não foram representados.

Para nucleação não homogênea e velocidade homogênea e não homogênea foram plotados os gráficos de contiguidade versus V_V . A equação de contiguidade vista no item 4, fornece o quão próximos os grãos estão um dos outros e foi plotada comparando a curva teórica de aleatoriedade com a contiguidade dos planos.

Para nucleação não homogênea e velocidade não homogênea também foi plotado o gráfico de caminho microestrutural dos planos. O caminho microestrutural evidencia se as formas geométricas foram mantidas ao longo da transformação. Para esse gráfico plotou-se L_A versus A_A , gerado pela simulação.

Já na comparação entre as nucleações não homogênea e velocidade homogênea e não homogênea foram comparadas as cinéticas totais geradas pela simulação. Dentre alguns gráficos analisados tem-se o de V_V versus tempo, Contiguidade versus V_V e caminho microestrutural S_V versus V_V .

5.1 NUCLEAÇÃO HOMOGÊNEA COM VELOCIDADE NÃO HOMOGÊNEA

Na sequência é apresentado o estudo da nucleação homogênea para 150, 300, 600 e 1200 núcleos e velocidade não homogênea com $G(x) = 0,1 + 0,2x$, $G(x) = 0,3x + 0,2$, $G(x) = 1,0x + 0,2$ e $G(x) = 3,0x + 0,2$.

5.1.1 Velocidade não homogênea para 150 núcleos

Nas Figura 17 e Figura 18 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para velocidade não homogênea com $G(x) = 0,1x + 0,2$ e nucleação homogênea para 150 núcleos. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira aleatória e ao final da transformação os grãos apresentam tamanhos heterogêneos por toda a matriz. Por apresentar um gradiente de velocidade com uma diferença de velocidade pequena entre o plano superior e inferior, não há diferenças significativas durante a transformação entre os planos, apenas a completa transformação na parte superior da matriz antes da transformação total. Além disso, na Figura 19, que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9, observa-se uma mínima evidência de curvatura entre as interfaces, uma vez que, há uma diferença de velocidade entre os planos, porém pequena.

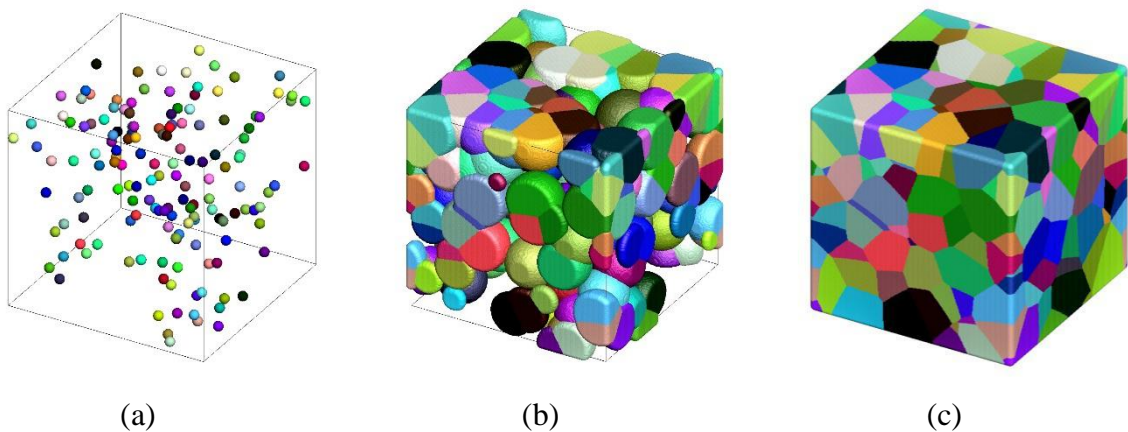


Figura 17 – Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

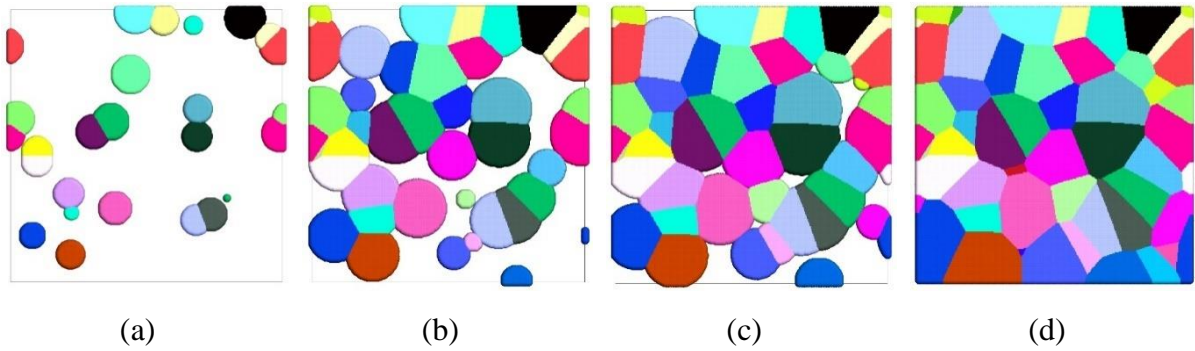


Figura 18 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.



Figura 19 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 20 é mostrado a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. A coordenada $x_3 = 0$ corresponde a parte inferior do volume da simulação, i. e o “espécime”, enquanto $x_3 = 1$ corresponde à parte superior do espécime. Cada curva corresponde à cinética em um determinado ponto da amostra entre $x_3 = 0$ e $x_3 = 1$. Portanto, um plano com $x_3 = 0,9$ está próximo a parte superior, enquanto um plano com $x_3 = 0,1$ está próximo a parte inferior. Há um bom acordo com as equações analíticas. As curvas para os planos são próximas, entretanto, a cinética é mais lenta no plano inferior como consequência do gradiente de velocidade.

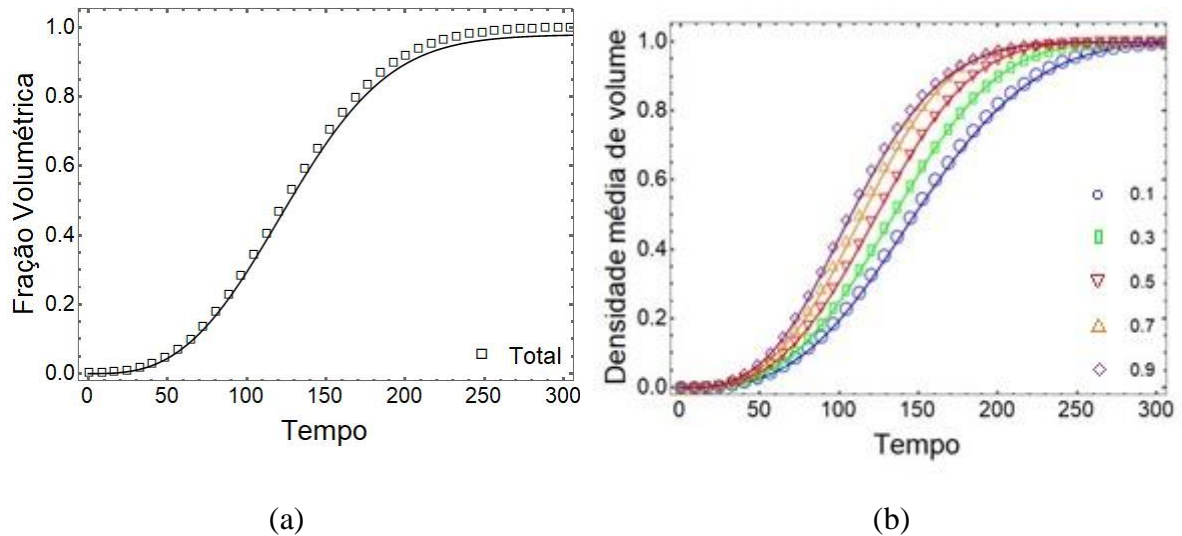


Figura 20 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.

Nas Figura 21 e Figura 22 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para velocidade não homogênea com $G(x) = 0,3x + 0,2$ e nucleação homogênea para 150 núcleos. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira aleatória e ao final da transformação os grãos apresentam tamanhos heterogêneos por toda a matriz. Entretanto, a transformação cessa na parte superior bem antes do que a parte inferior. O gradiente de velocidade, desta forma, por apresentar uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior que o caso anterior de $G(x) = 0,1x + 0,2$, já mostra uma diferença durante a evolução da transformação. O tamanho do grão ao longo da direção do gradiente continua heterogêneo por toda a matriz. Na Figura 23, que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9, por sua vez, é evidenciado alguns grãos curvos no plano 0,1, como consequência da velocidade não homogênea.

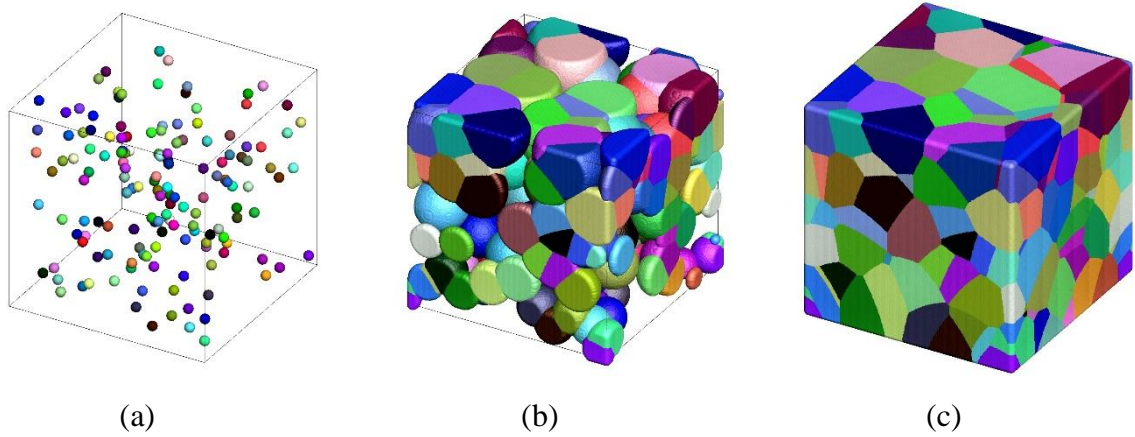


Figura 21 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

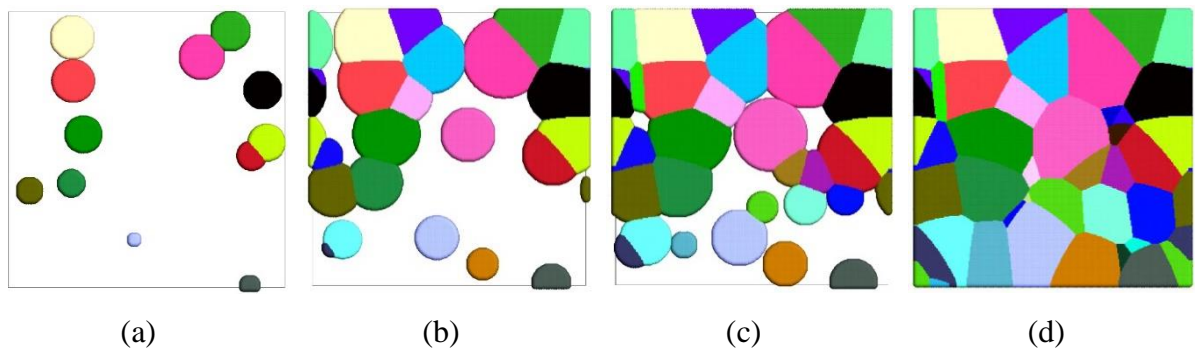


Figura 22 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

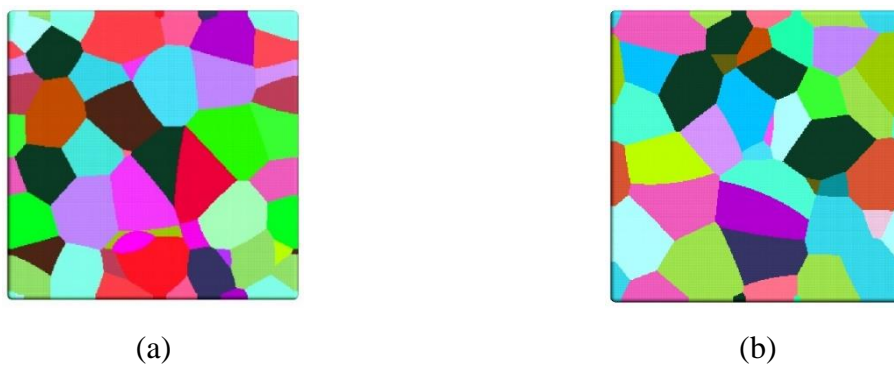


Figura 23 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 24 é mostrado a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. As curvas estão se afastando, principalmente para os planos mais próximos a parte inferior. A cinética é ainda mais lenta no plano inferior se comparado aos planos superiores como consequência do aumento do gradiente de velocidade.

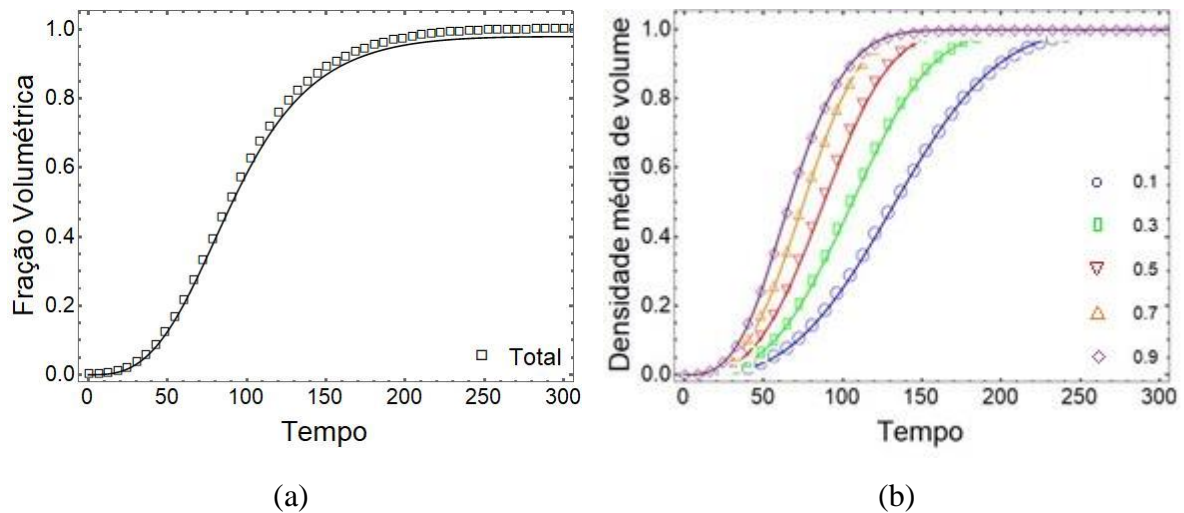


Figura 24 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.

Nas Figura 25 e Figura 26 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para velocidade não homogênea com $G(x) = 1,0x + 0,2$ e nucleação homogênea para 150 núcleos. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira aleatória e ao final da transformação apresentam-se “alongados” do meio da matriz para o final na direção do gradiente. O gradiente de velocidade apresenta uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior que o caso anterior de $G(x) = 0,3x + 0,2$. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. Ao final da transformação os grãos de planos superiores crescem em direção a região de menor velocidade. O tamanho do grão ao longo da direção do gradiente continua sendo heterogêneo, porém com diferenças evidentes nas interfaces. Na Figura 27, que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9, é evidenciado alguns grãos curvos no plano 0,1, como consequência da velocidade não homogênea. Nesse caso, um grão de crescimento rápido tende a "dar a volta" ou “envolver” um grão de crescimento mais lento. Como resultado, a fronteira dos grãos rápidos é côncava, enquanto a fronteira dos grãos mais lentos é convexa [36].

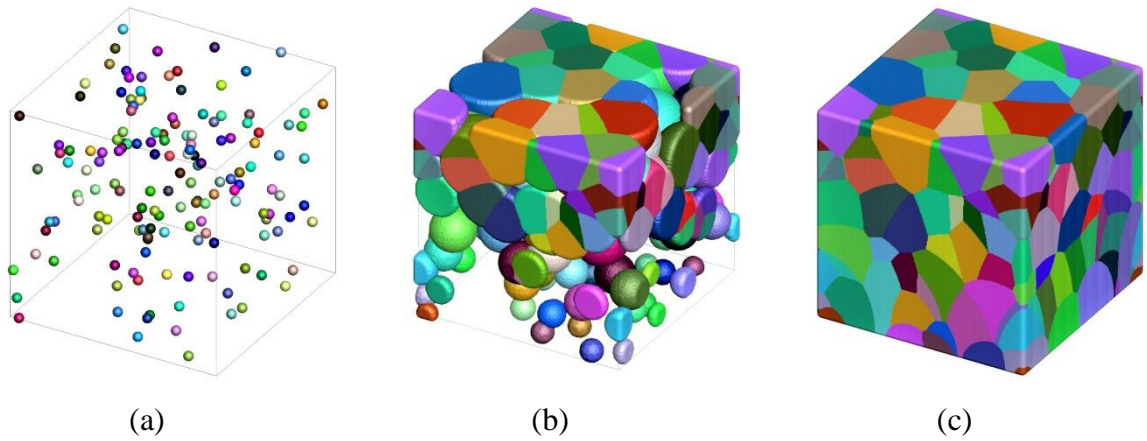


Figura 25 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

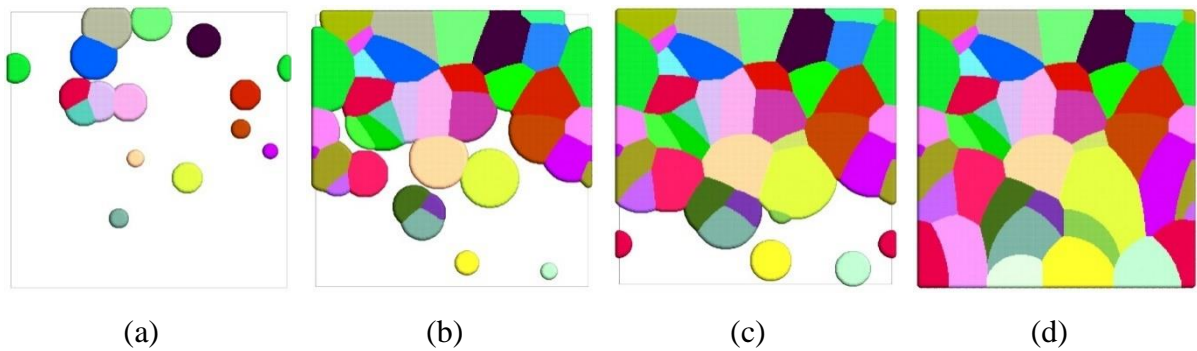


Figura 26 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.



Figura 27 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 28 é mostrado a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. A curva sigmoidal da cinética total, apresenta um aspecto característico para uma transformação em que há uma rápida transformação em um tempo curto e uma cinética mais lenta ao final. Em cerca de um terço do tempo total de transformação, a transformação já atingiu 50%. Isso é consequência do afastamento ainda maior das curvas dos planos, principalmente para os planos mais próximos a parte inferior. A cinética é ainda mais lenta no plano 0,1 se comparado aos planos superiores como resultado do aumento do gradiente de velocidade.

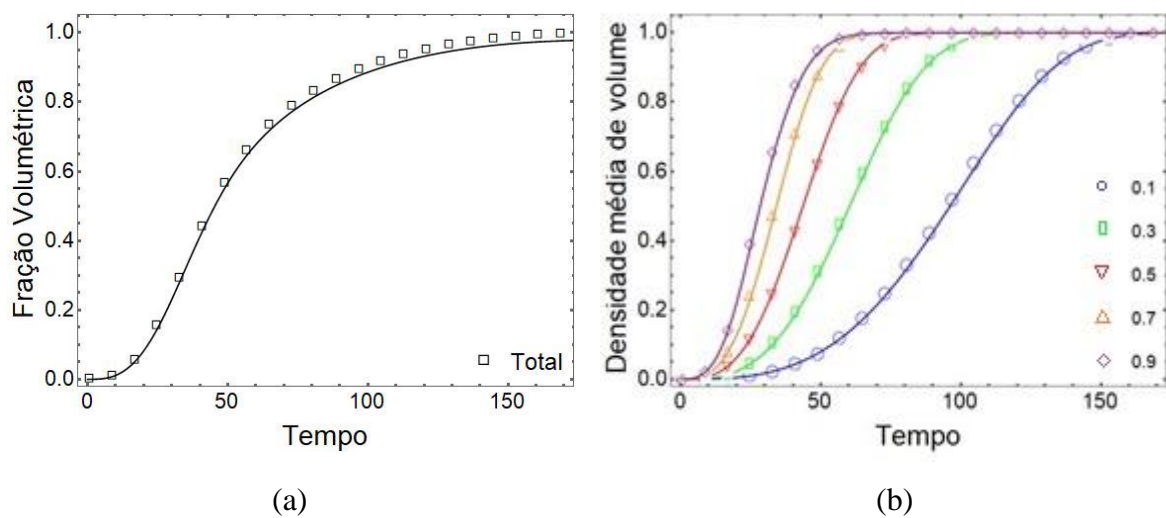


Figura 28 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.

Nas Figura 29 e Figura 30 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para velocidade não homogênea com $G(x) = 3,0x + 0,2$ e nucleação homogênea para 150 núcleos. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira aleatória e ao final da transformação apresentam-se “alongados” do meio da matriz para o final na direção do gradiente. O gradiente de velocidade apresenta uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior que o caso anterior de $G(x) = 1,0x + 0,2$. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. Ao final da transformação os grãos de planos superiores crescem em direção a região de menor velocidade, entretanto os grãos da parte inferior não conseguem crescer como visto no caso anterior, Figura 30e. A matriz inferior é praticamente toda preenchida pelos grãos que crescem dos planos superiores. O tamanho do grão ao longo da direção do gradiente continua

sendo heterogêneo, ou seja, com grãos maiores e menores por toda matriz, porém com diferenças evidentes nas interfaces. Na Figura 31, que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9, é evidenciado vários grãos curvos no plano 0,1, como consequência da velocidade não homogênea. É possível observar grãos “envolvidos” e a curvatura côncava de grãos rápidos e convexa de grãos lentos.

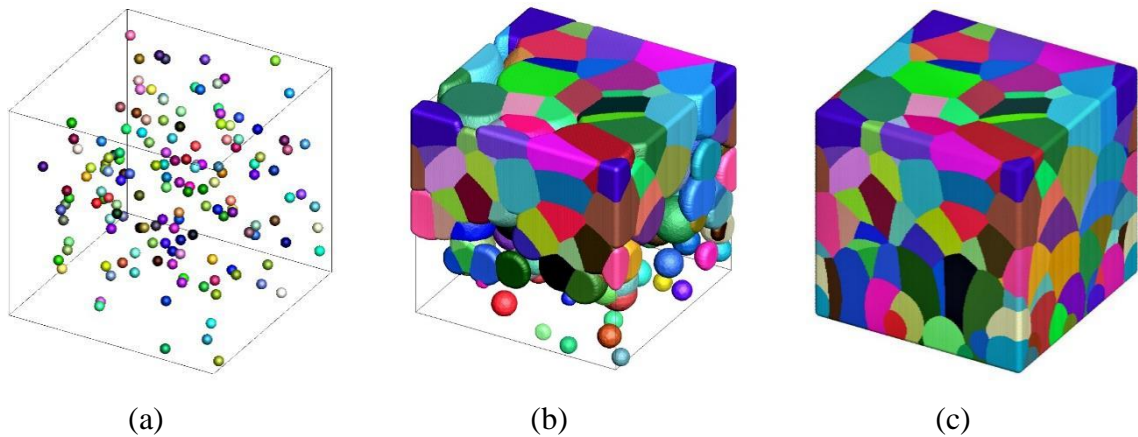


Figura 29 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

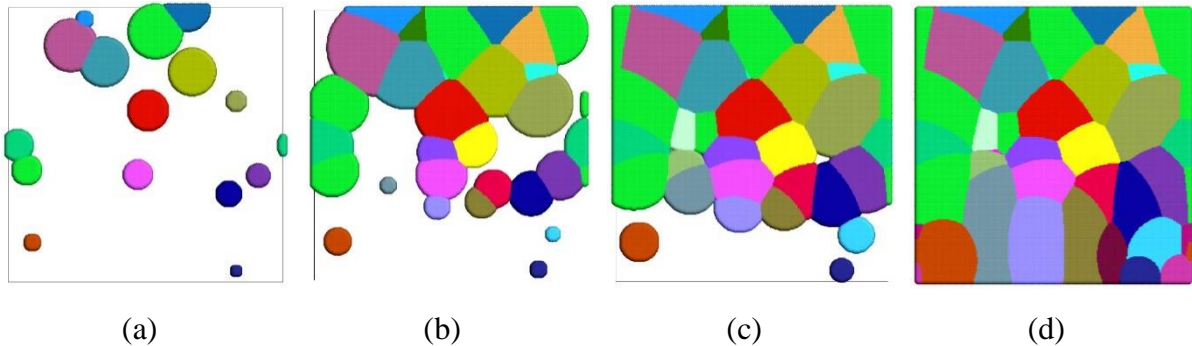


Figura 30 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

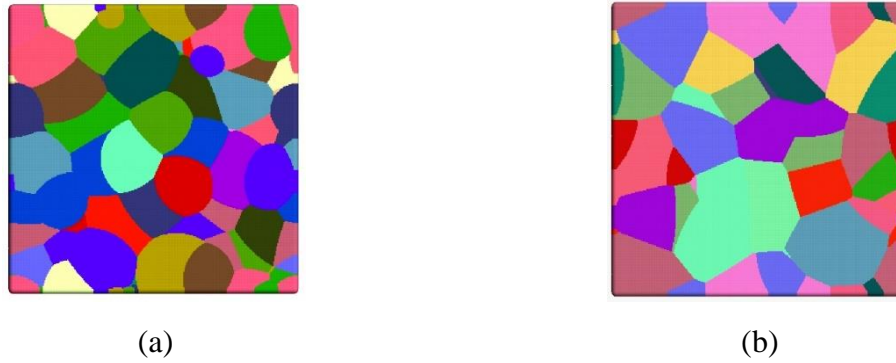


Figura 31 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 32 é mostrado a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. Na curva sigmoidal da cinética total, a transformação é ainda mais rápida. Nesse caso, em cerca de um quarto do tempo total de transformação, a transformação já atingiu 50%. O afastamento da curva do plano 0,1 é ainda maior se comparado aos planos superiores como resultado do aumento do gradiente de velocidade. Por ter a cinética mais lenta, a cinética do plano 0,1 é que controla a cinética de transformação.

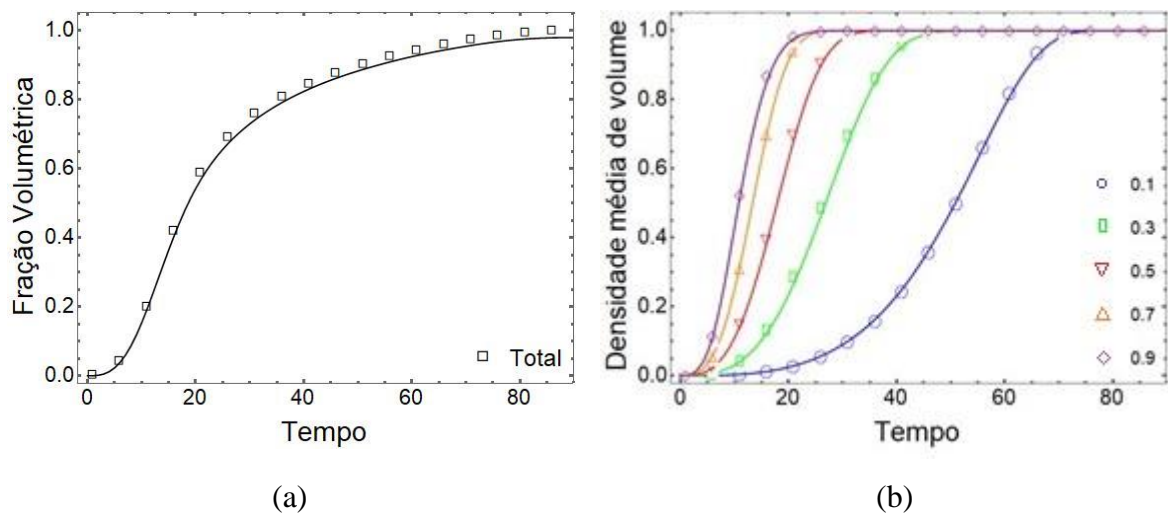


Figura 32 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 150 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.

5.1.2 Velocidade não homogênea para 300 núcleos

Nas Figura 33 e Figura 34 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para velocidade não homogênea com $G(x) = 0,1x + 0,2$ e nucleação homogênea para 300 núcleos. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira aleatória e ao final da transformação os grãos apresentam-se com tamanhos heterogêneos por toda matriz. Durante a transformação, apesar da diferença de gradiente de velocidade, a transformação pareceu ocorrer de maneira semelhante na parte superior e inferior. Como o gradiente de velocidade apresenta uma diferença de velocidade pequena entre o plano superior e inferior, os grãos se mostram distribuídos com tamanhos diferentes ao longo da direção do gradiente e com uma mínima percepção de curvatura nas interfaces. Isso também pode ser visto na Figura 35 que apresenta a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9. As interfaces curvas no plano 0,1 são modestas, uma vez que, há uma diferença de velocidade entre os planos, porém pequena.

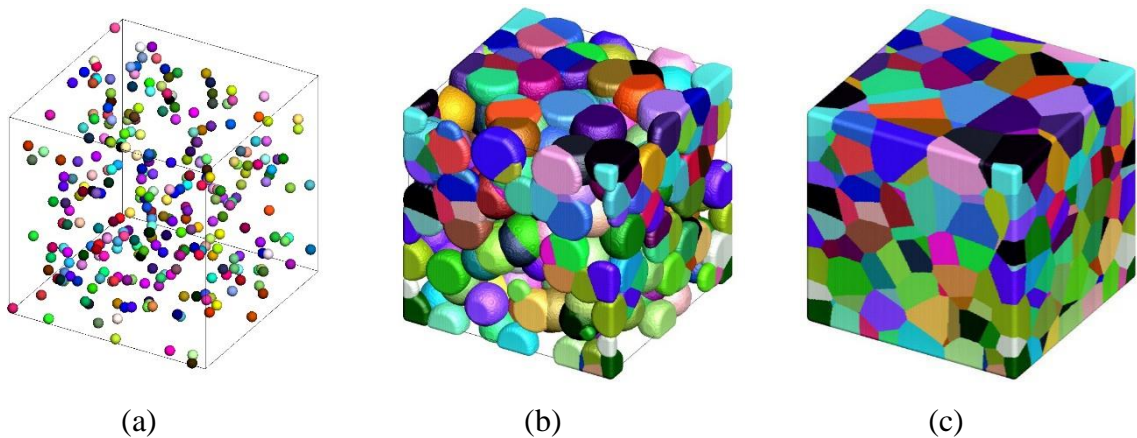


Figura 33 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

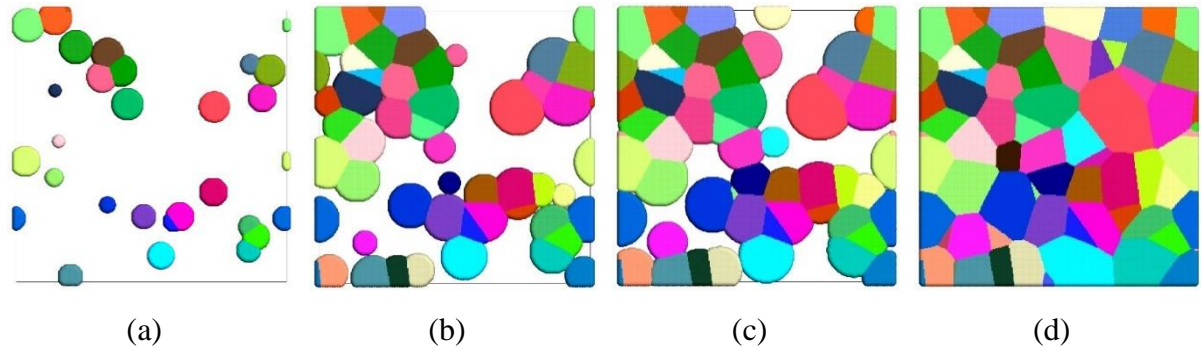


Figura 34 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

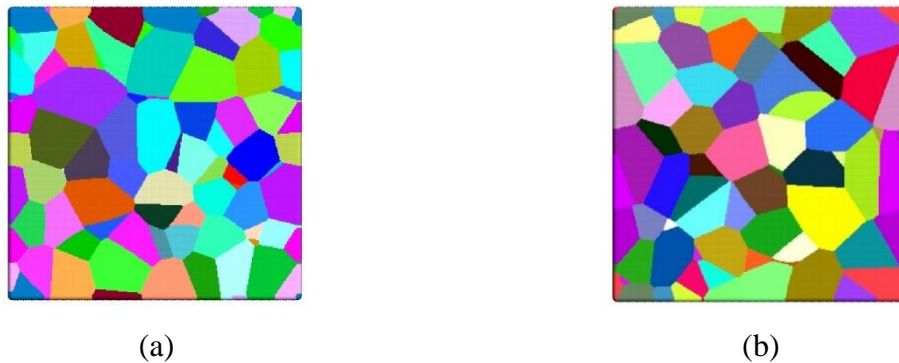


Figura 35 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 36 é mostrado a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. As curvas para os planos são próximas, entretanto, a cinética é mais lenta no plano inferior como consequência do gradiente de velocidade.

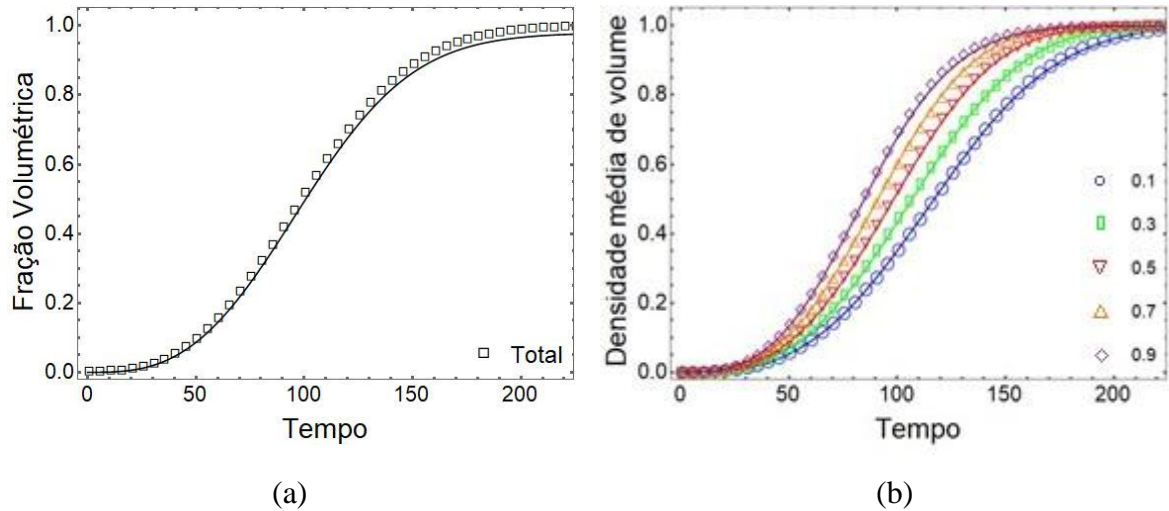


Figura 36 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.

Nas Figura 37 e Figura 38 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para velocidade não homogênea com $G(x) = 0,3x + 0,2$ e nucleação homogênea para 300 núcleos. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira aleatória e ao final da transformação os grãos apresentam-se com tamanhos desiguais por toda matriz. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. O gradiente de velocidade, desta forma, por apresentar uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior que o caso anterior de $G(x) = 0,1x + 0,2$, já mostra uma diferença durante a evolução da transformação. O tamanho do grão ao longo da direção do gradiente continua sendo heterogêneo, ou seja, com tamanho de grão maiores e menores por toda a matriz e com pouca percepção de curvatura nas interfaces. Na Figura 39 é mostrado a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

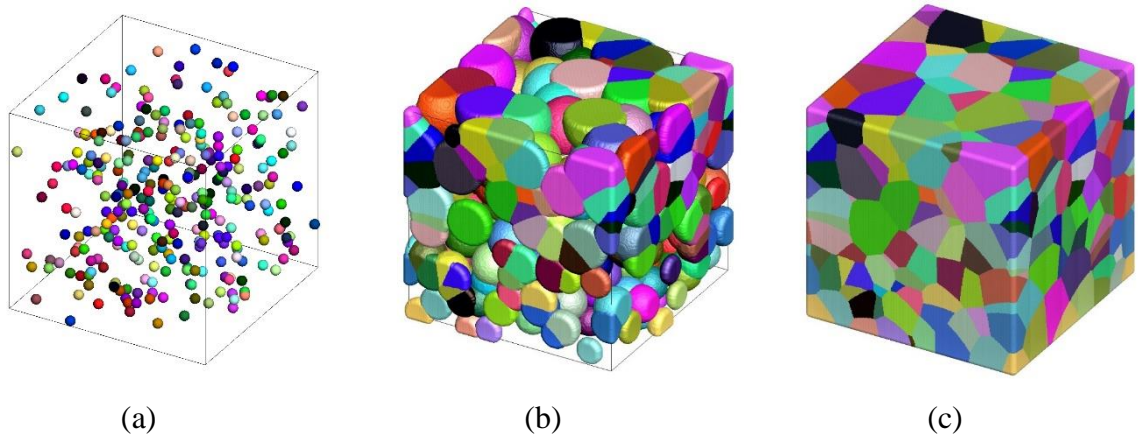


Figura 37 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

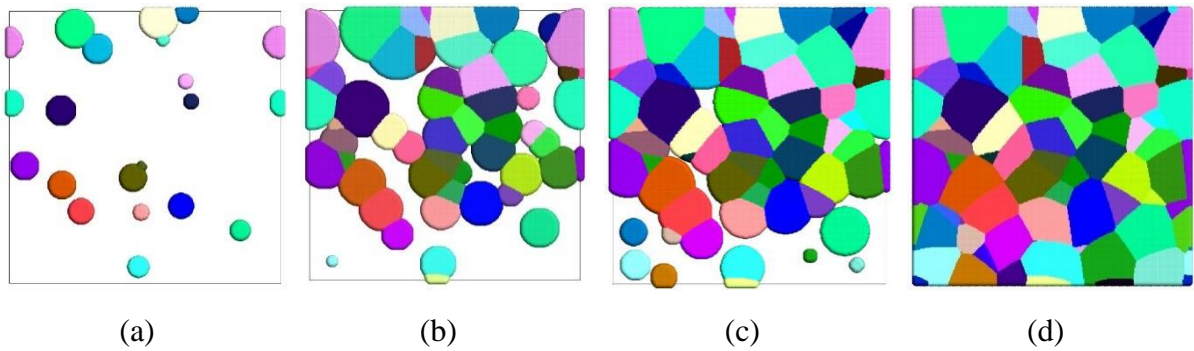


Figura 38 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

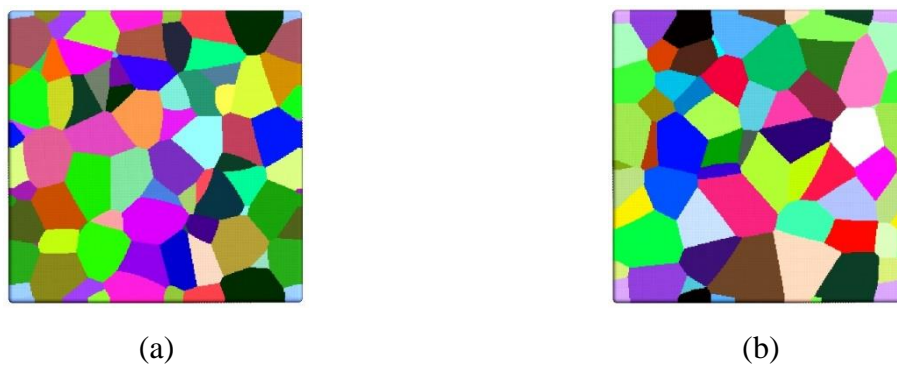


Figura 39 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 40 é mostrado a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. As curvas estão se afastando, principalmente para os planos mais próximos a parte inferior. A cinética é ainda mais lenta no plano inferior se comparado aos planos superiores como consequência do aumento do gradiente de velocidade.

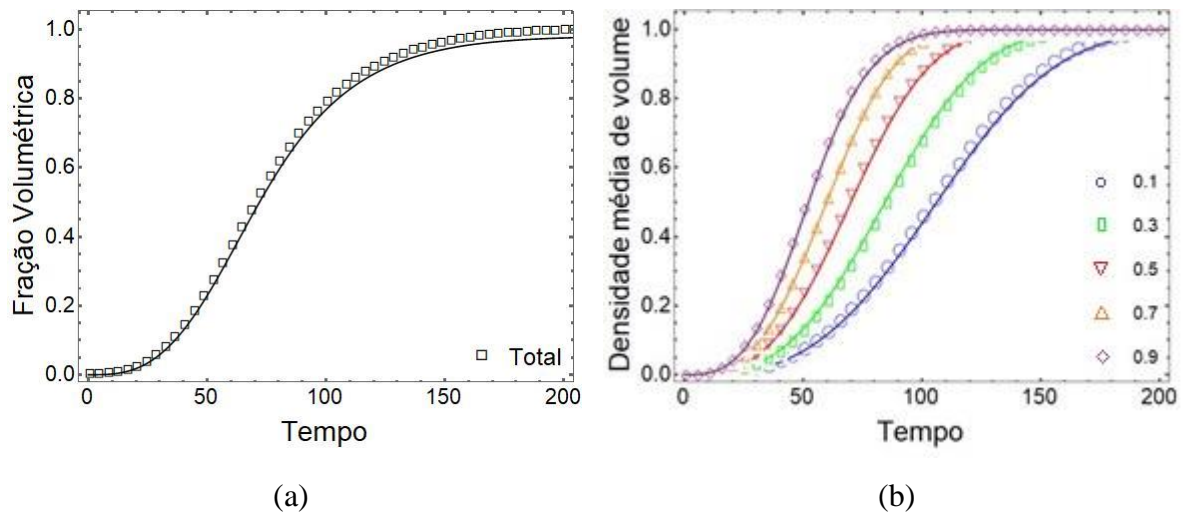


Figura 40 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.

Nas Figura 41 e Figura 42 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para velocidade não homogênea com $G(x) = 1,0x + 0,2$ e nucleação homogênea para 300 núcleos. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira aleatória e ao final da transformação apresentam-se “alongados” nos planos inferiores da matriz. Para o mesmo gradiente de velocidade, esses grãos alongados são evidentes mais próximos aos planos inferiores, 0,3 e 0,1, que para o caso de 150 núcleos, justamente devido a maior quantidade de grãos que se tem agora. O gradiente de velocidade apresenta uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior que o caso anterior de $G(x) = 0,3x + 0,2$. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. Ao final da transformação os grãos de planos superiores crescem em direção a região de menor velocidade. O tamanho do grão varia por toda a matriz, porém com diferenças evidentes nas interfaces. Na Figura 43, que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9, é evidenciado alguns grãos curvos no plano 0,1, como consequência da velocidade não

homogênea. Nesse caso, é notável grãos mais rápidos, côncavos que tendem a “envolver” um grão de crescimento mais lentos, convexos.

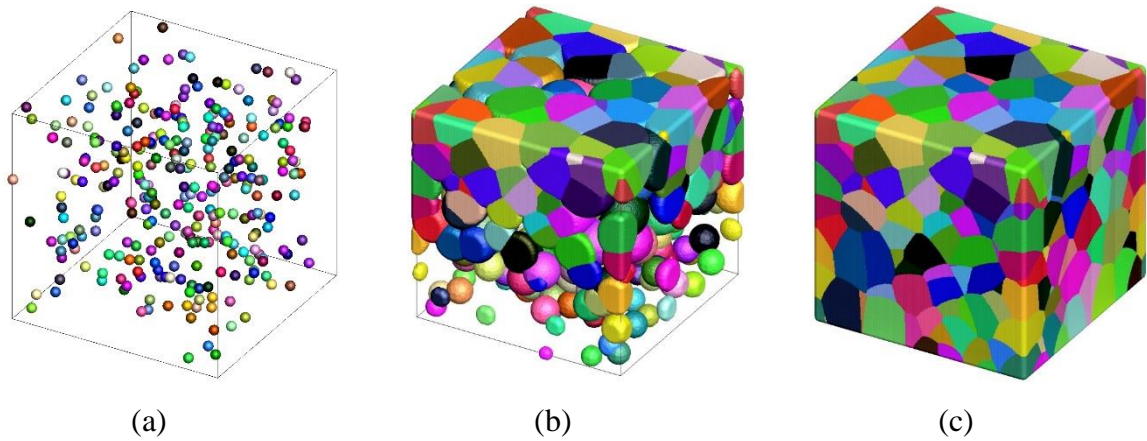


Figura 41 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

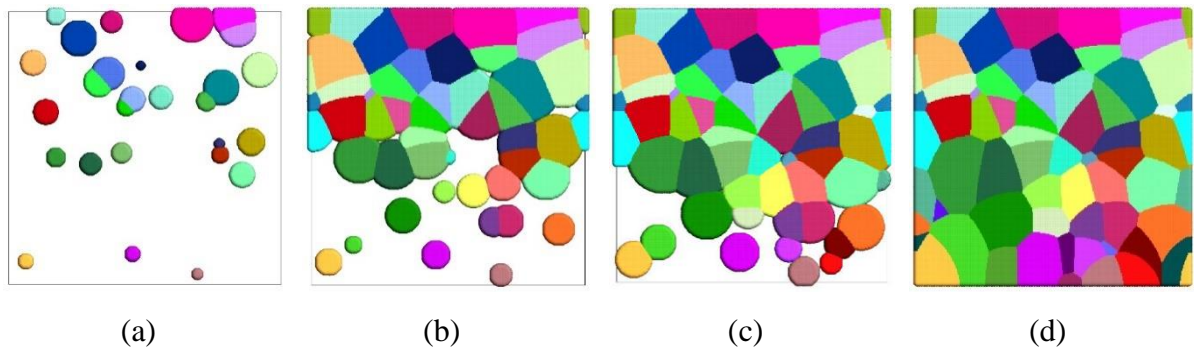


Figura 42 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

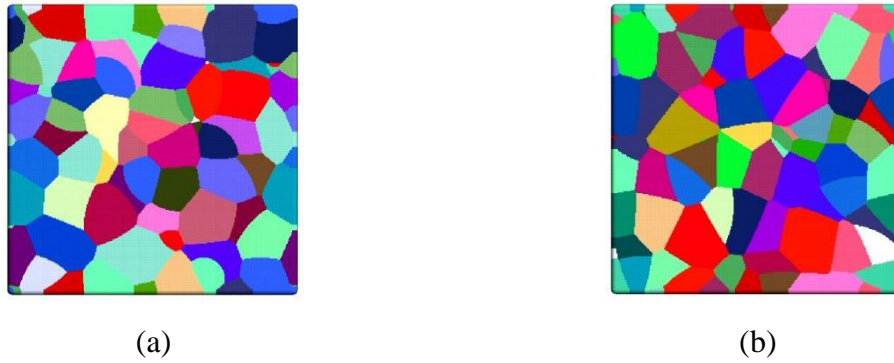


Figura 43 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 44 é mostrado a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. A curva sigmoide da cinética total, apresenta um aspecto característico para uma transformação em que há uma rápida transformação em um tempo curto e uma cinética mais lenta ao final. Em cerca de um quarto do tempo total de transformação, a transformação já atingiu 50%. Isso é consequência do afastamento ainda maior das curvas dos planos, principalmente para os planos mais próximos a parte inferior. A cinética é ainda mais lenta no plano 0,1 se comparado aos planos superiores como resultado do aumento do gradiente de velocidade.

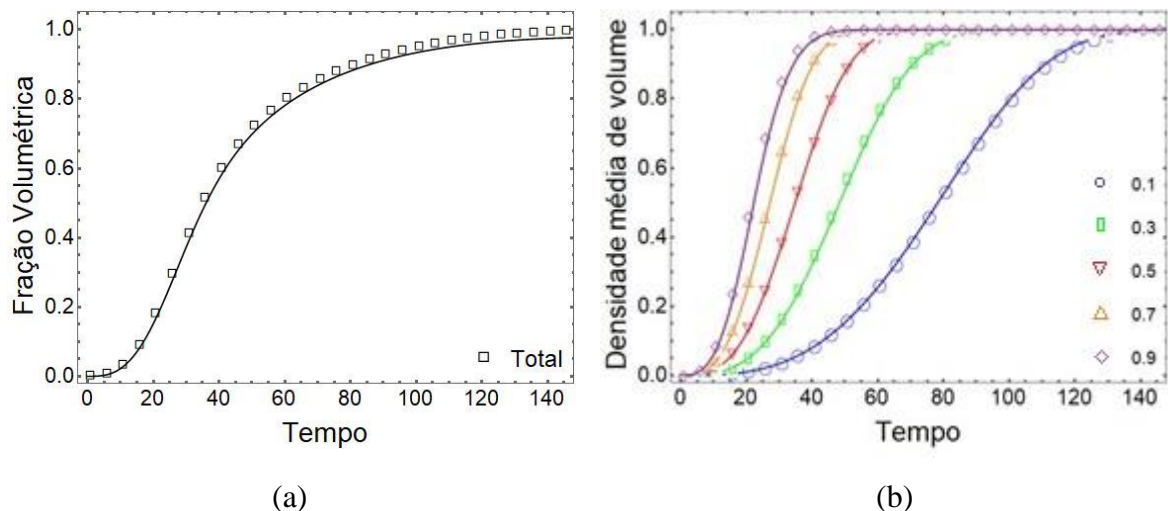


Figura 44 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.

Nas Figura 45 e Figura 46 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para velocidade não homogênea com $G(x) = 3,0x + 0,2$ e nucleação homogênea para 300 núcleos. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira aleatória e ao final da transformação apresentam-se “alongados” do meio da matriz para o final na direção do gradiente. O gradiente de velocidade apresenta uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior que o caso anterior de $G(x) = 1,0x + 0,2$. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. A matriz inferior é preenchida pelos grãos que crescem dos planos superiores, uma vez que, no final da transformação, os grãos de planos superiores crescem em direção a região de menor velocidade. Entretanto os grãos da parte inferior não conseguem crescer como visto no caso anterior, Figura 46e. A matriz continua apresentando uma heterogeneidade de tamanhos de grão, porém com diferenças evidentes nas interfaces. Na Figura 47, que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9, é evidenciado vários grãos curvos no plano 0,1, como consequência da velocidade não homogênea. É possível observar grãos “envolvidos” e a curvatura côncava de grãos rápidos e convexa de grãos lentos.

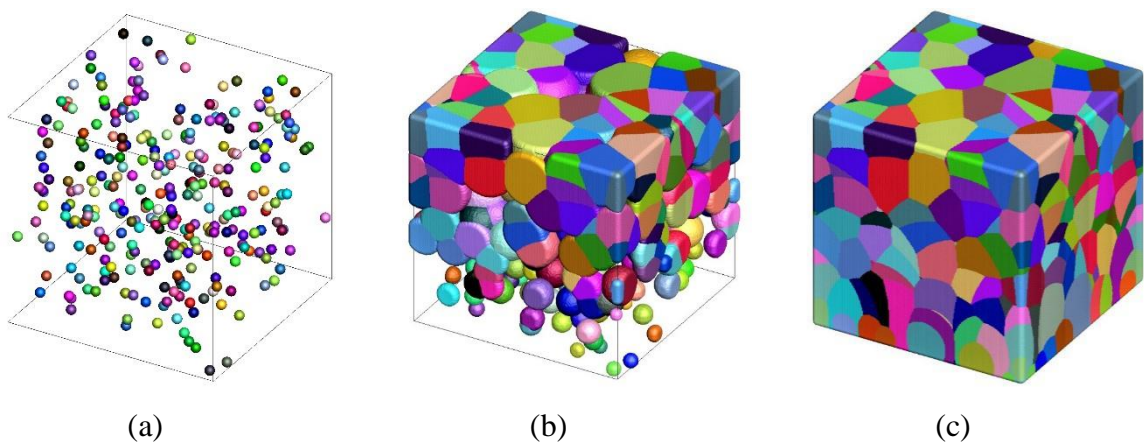


Figura 45 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

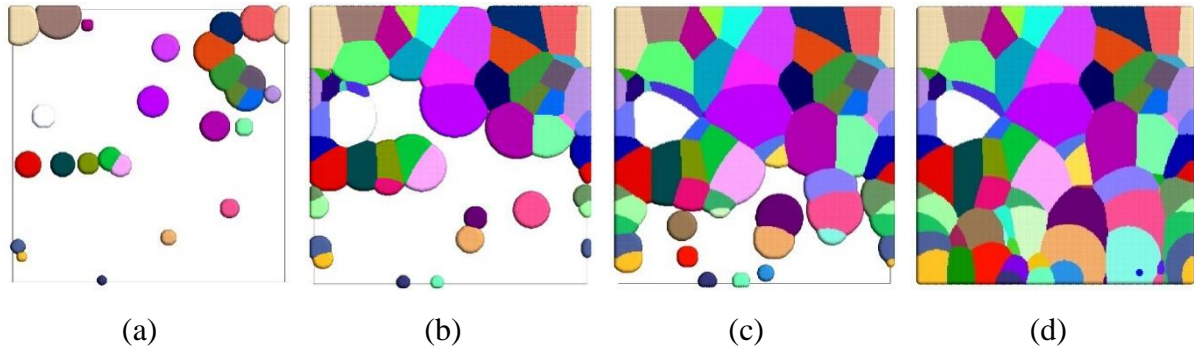


Figura 46 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

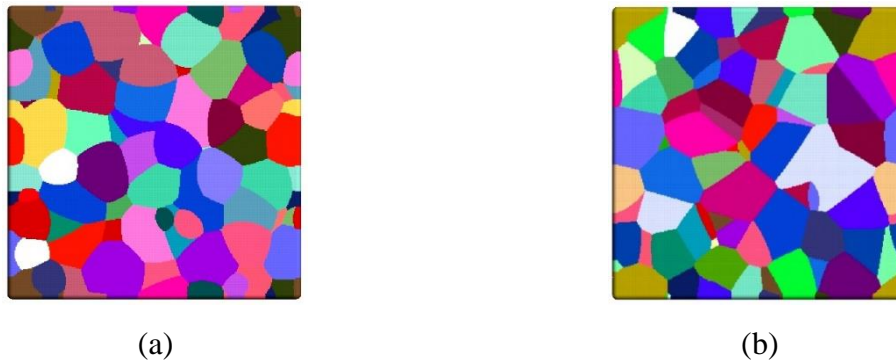


Figura 47 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 48 é mostrado a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. Na curva sigmoideal da cinética total, a transformação é ainda mais rápida. Nesse caso, 50% de transformação já ocorreu em apenas 22% do tempo total de transformação. O afastamento da curva do plano 0,1 é ainda maior se comparado aos planos superiores como resultado do aumento do gradiente de velocidade. Por ter a cinética mais lenta, a cinética do plano 0,1 é que controla a cinética de transformação.

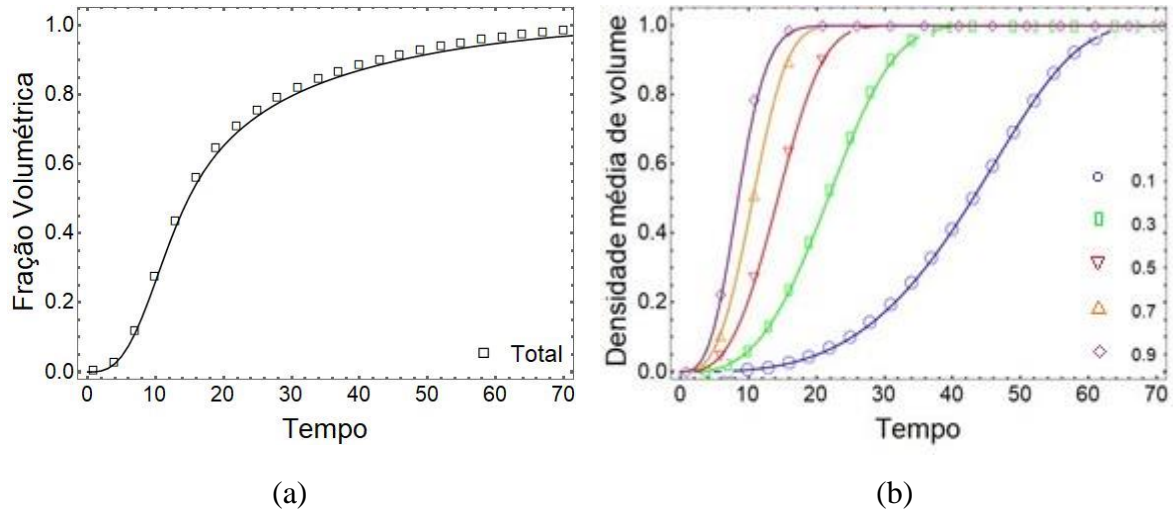


Figura 48 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 300 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.

5.1.3 Velocidade não homogênea para 600 núcleos

Nas Figura 49 e Figura 50 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para velocidade não homogênea com $G(x) = 0,1x + 0,2$ e nucleação homogênea para 600 núcleos. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira aleatória e ao final da transformação os grãos apresentam tamanhos de grão diferentes, porém mais refinados devido ao aumento do número de núcleos. Durante a transformação, apesar da diferença de gradiente de velocidade, a transformação pareceu ocorrer de maneira semelhante na parte superior e inferior. Como o gradiente de velocidade apresenta uma diferença de velocidade pequena entre o plano superior e inferior, os grãos se mostram distribuídos com tamanhos heterogêneos ao longo da direção do gradiente e com uma mínima percepção de curvatura nas interfaces. Isso também pode ser visto na Figura 51 que apresenta a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

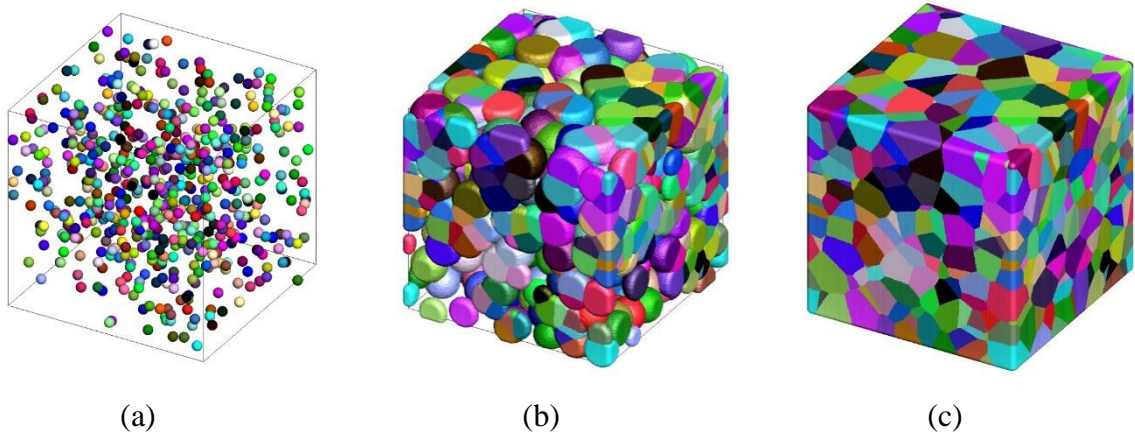


Figura 49 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

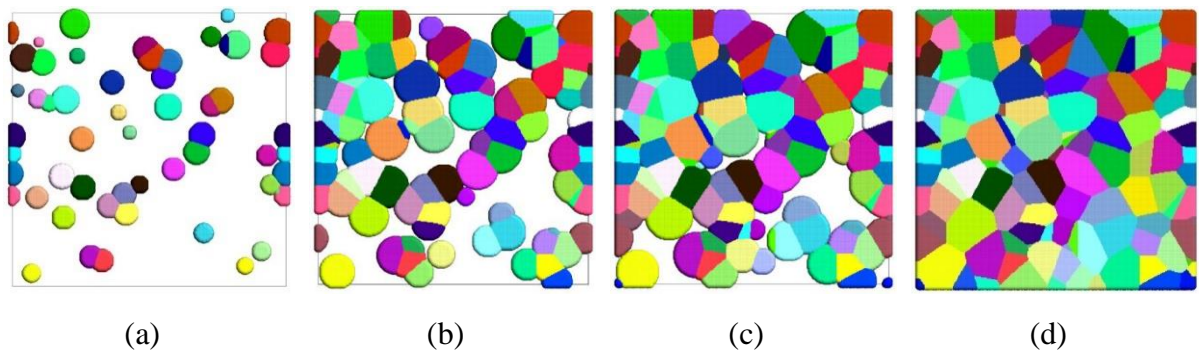


Figura 50 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

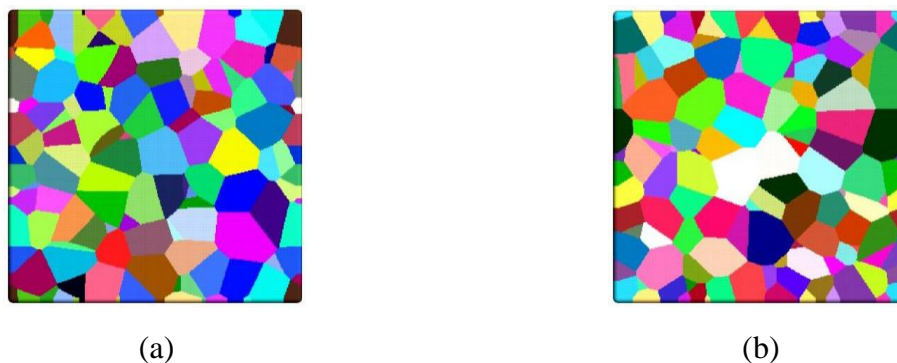


Figura 51 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 52 é mostrado a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. As curvas para os planos são próximas, entretanto, a cinética é mais lenta no plano inferior como consequência do gradiente de velocidade.

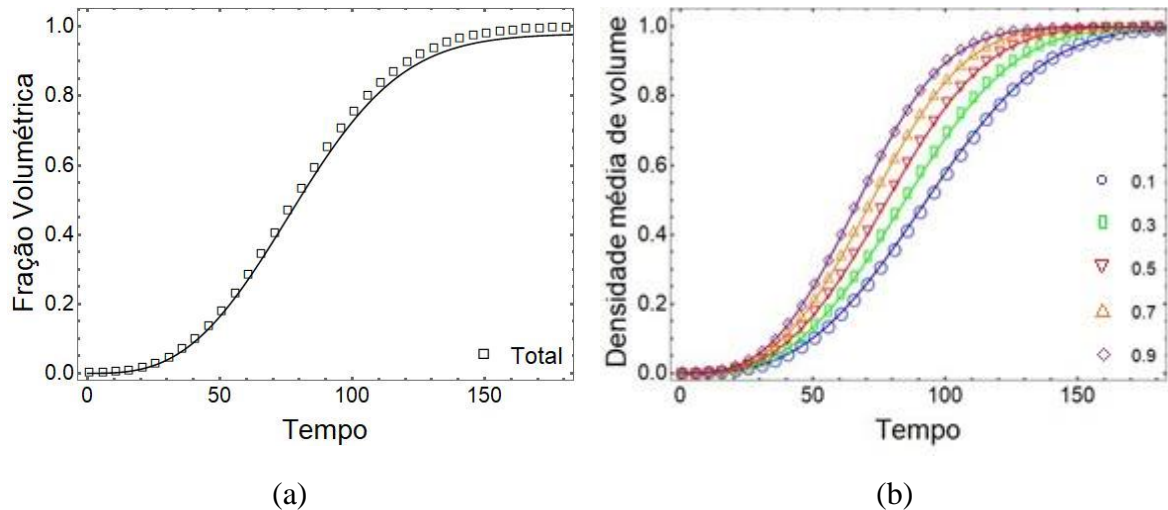


Figura 52 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.

Nas Figura 53 e Figura 54 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para velocidade não homogênea com $G(x) = 0,3x + 0,2$ e nucleação homogênea para 600 núcleos. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira aleatória e ao final da transformação os grãos apresentam tamanhos de grão heterogêneos. Entretanto, a transformação cessa na parte superior antes que a parte inferior. O gradiente de velocidade, desta forma, por apresentar uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior que o caso anterior de $G(x) = 0,1x + 0,2$, já mostra uma diferença durante a evolução da transformação. O tamanho do grão ao longo da direção do gradiente continua sendo heterogêneo, ou seja, com tamanho de grão maiores e menores por toda a matriz e com uma maior percepção de curvatura nas interfaces. Na Figura 55 é mostrado a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

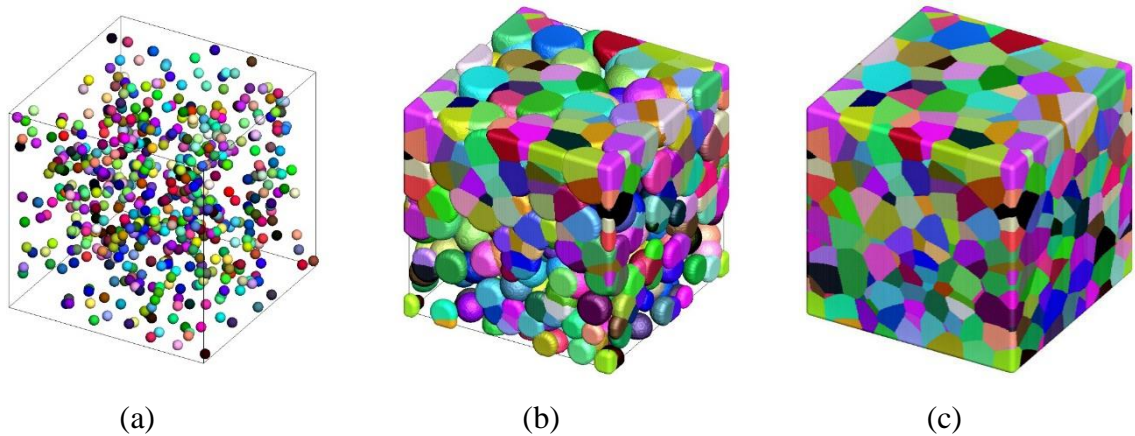


Figura 53 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

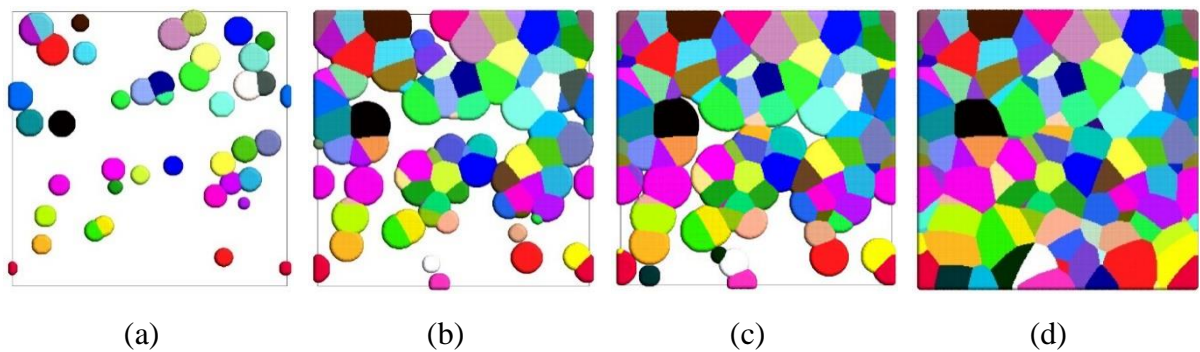


Figura 54 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

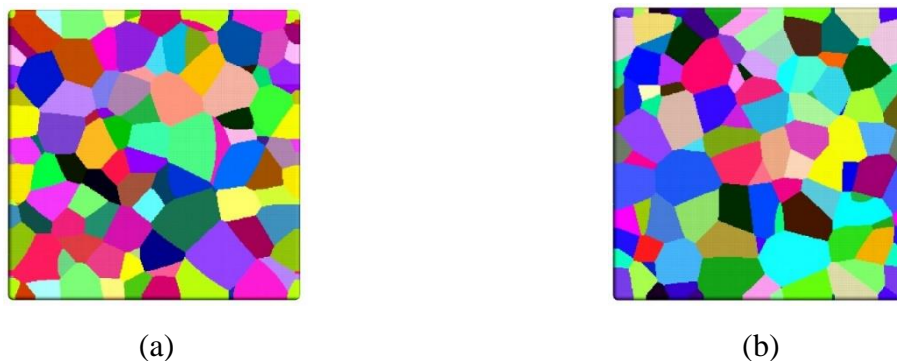


Figura 55 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 56 é mostrado a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. As curvas estão se afastando, principalmente para os planos mais próximos a parte inferior. A cinética é ainda mais lenta no plano inferior se comparado aos planos superiores como consequência do aumento do gradiente de velocidade.

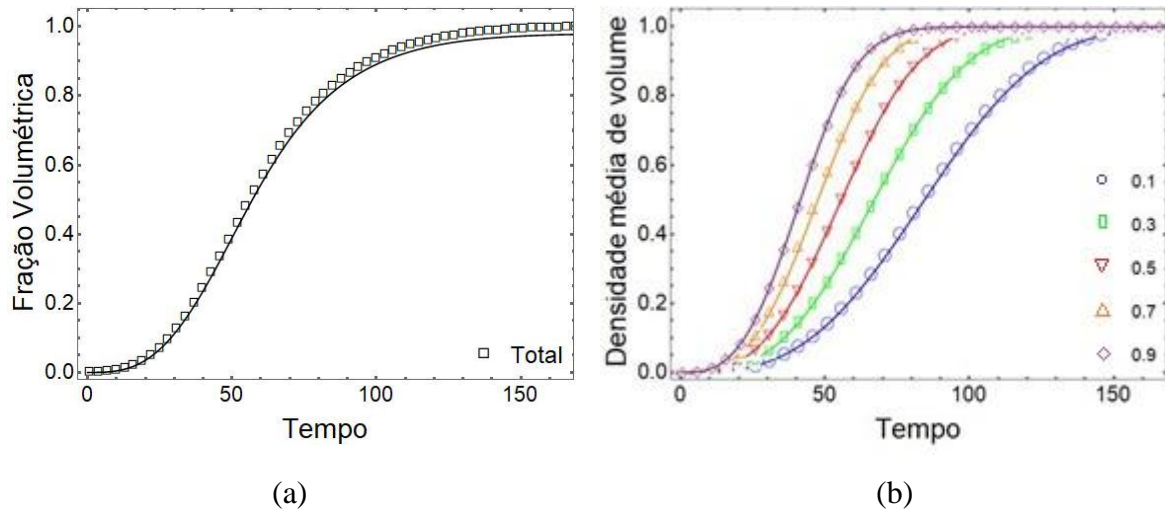


Figura 56 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.

Nas Figura 57 e Figura 58 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para velocidade não homogênea com $G(x) = 1,0x + 0,2$ e nucleação homogênea para 600 núcleos. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira aleatória e ao final da transformação apresentam-se “alongados” nos planos inferiores da matriz. Esse alongamento dos grãos inicia-se entre os planos 0,5 e 0,3, porém estão mais refinados devido a maior quantidade de núcleos. O gradiente de velocidade apresenta uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior que o caso anterior de $G(x) = 0,3x + 0,2$. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. Ao final da transformação os grãos de planos superiores crescem em direção a região de menor velocidade. O tamanho do grão varia por toda a matriz, porém com diferenças evidentes nas interfaces. Na Figura 59, que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9, é evidenciado vários grãos curvos no plano 0,1, como consequência da velocidade não homogênea e do aumento da quantidade de núcleos. Há mais grãos com velocidade mais alta, côncavos, “envolvendo” mais grãos com velocidade mais baixa, convexo.

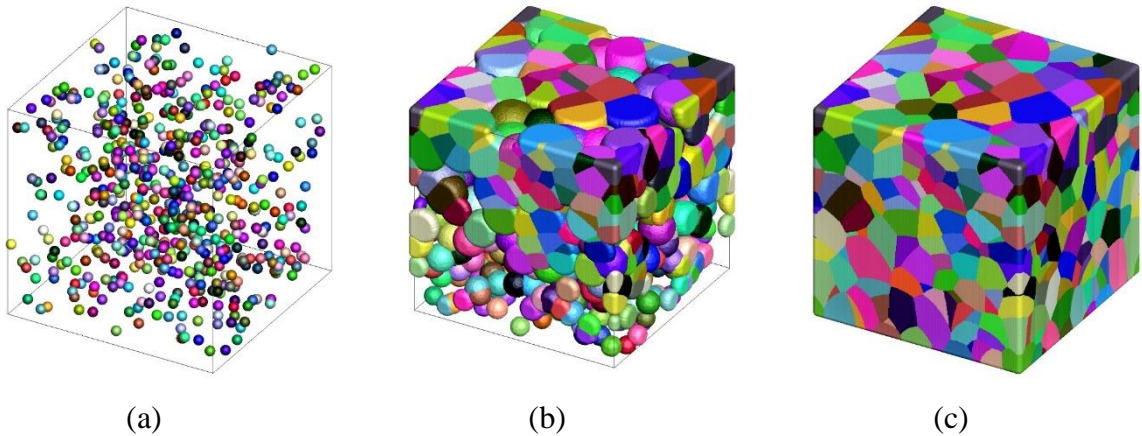


Figura 57 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

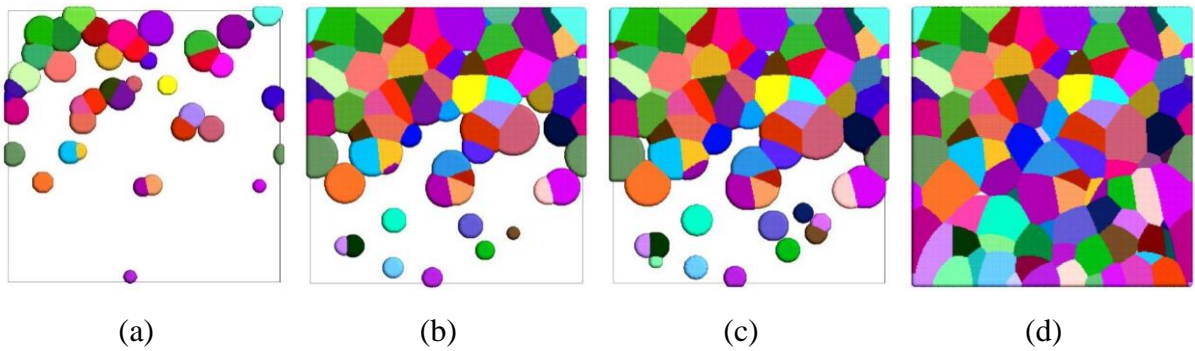


Figura 58 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.



Figura 59 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 60 é mostrado a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. A curva sigmoidal da cinética total, apresenta um aspecto característico para uma transformação em que há uma rápida transformação em um tempo curto e uma cinética mais lenta ao final. Isso é consequência do afastamento ainda maior das curvas dos planos, principalmente para os planos mais próximos a parte inferior. A cinética é ainda mais lenta no plano 0,1 se comparado aos planos superiores como resultado do aumento do gradiente de velocidade.

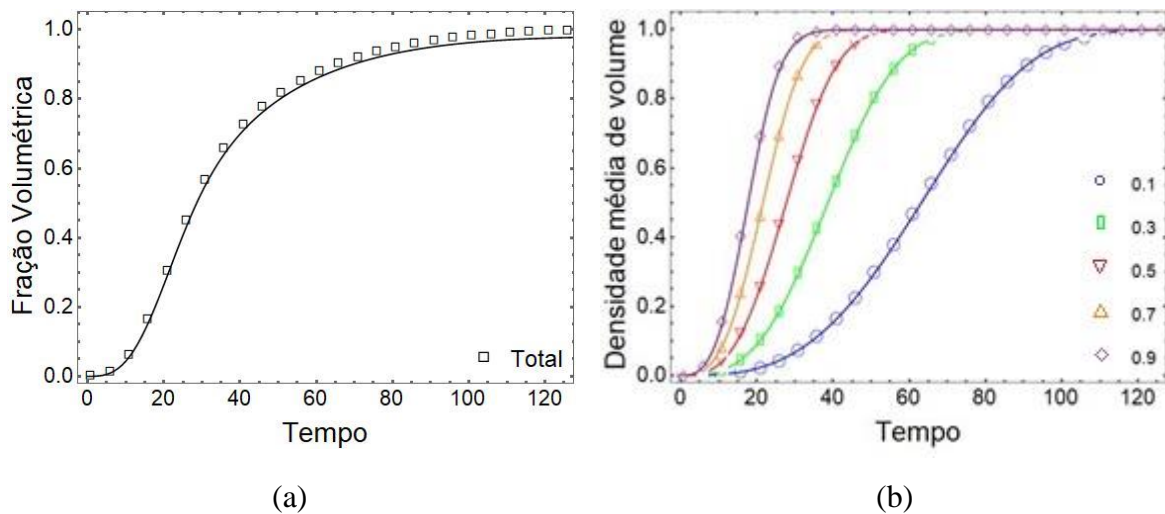


Figura 60 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.

Nas Figura 61 e Figura 62 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para velocidade não homogênea com $G(x) = 3,0x + 0,2$ e nucleação homogênea para 600 núcleos. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira aleatória e ao final da transformação apresentam-se “alongados” do meio da matriz para o final na direção do gradiente. O gradiente de velocidade apresenta uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior que o caso anterior de $G(x) = 1,0x + 0,2$. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. Os grãos de planos superiores crescem em direção a região de menor velocidade. Entretanto, esses grãos na parte superior ao tentar preencher os planos inferiores encontram mais grãos que tentam impedir sua passagem. Os grãos da parte inferior acabam ficando englobados e impedidos de crescer como visto na Figura 62e. A matriz apresenta-se mais refinada de grãos de tamanhos heterogêneos e alongados na parte inferior evidenciando as

interfaces curvas. Na Figura 63, que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9, é notório vários grãos curvos no plano 0,1, como consequência da velocidade não homogênea e do aumento da quantidade de núcleos. Como para o caso com $G(x) = 1,0x + 0,2$, há mais grãos com velocidade mais alta, côncavos, “envolvendo” mais grãos com velocidade mais baixa, convexo.

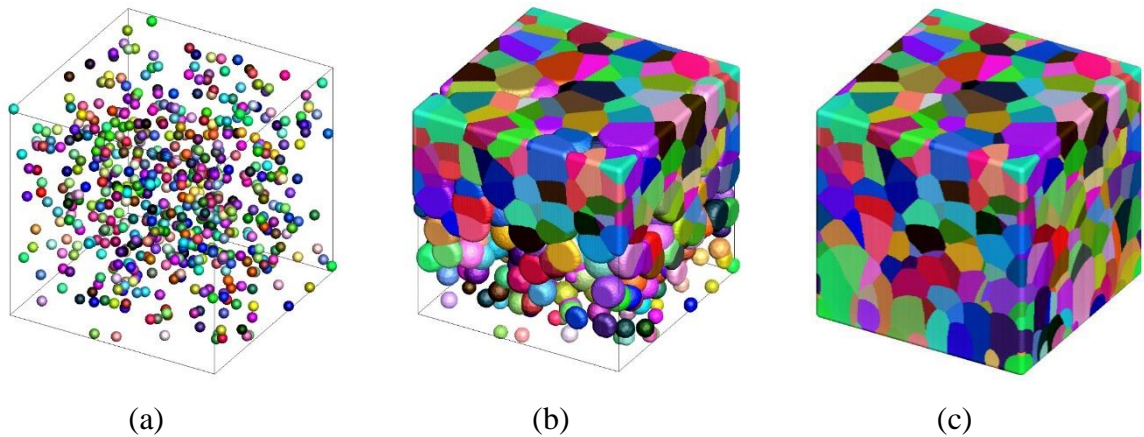


Figura 61 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

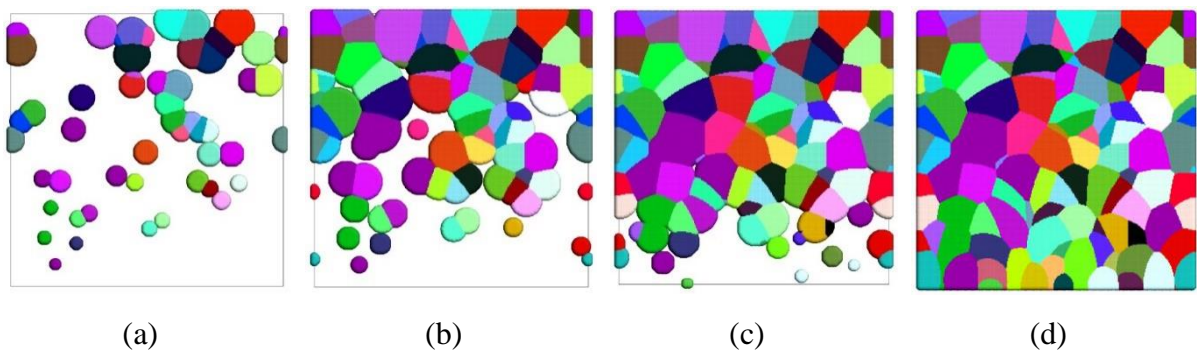


Figura 62 - Representação em 2D da microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.



Figura 63 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (6a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 64 é mostrado a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. Na curva sigmoidal da cinética total, a transformação é ainda mais rápida. Nesse caso, 50% de transformação já ocorreu em torno de 20% do tempo total de transformação. O afastamento da curva do plano 0,1 é ainda maior se comparado aos planos superiores como resultado do aumento do gradiente de velocidade. Por ter a cinética mais lenta, a cinética do plano 0,1 é que controla a cinética de transformação.

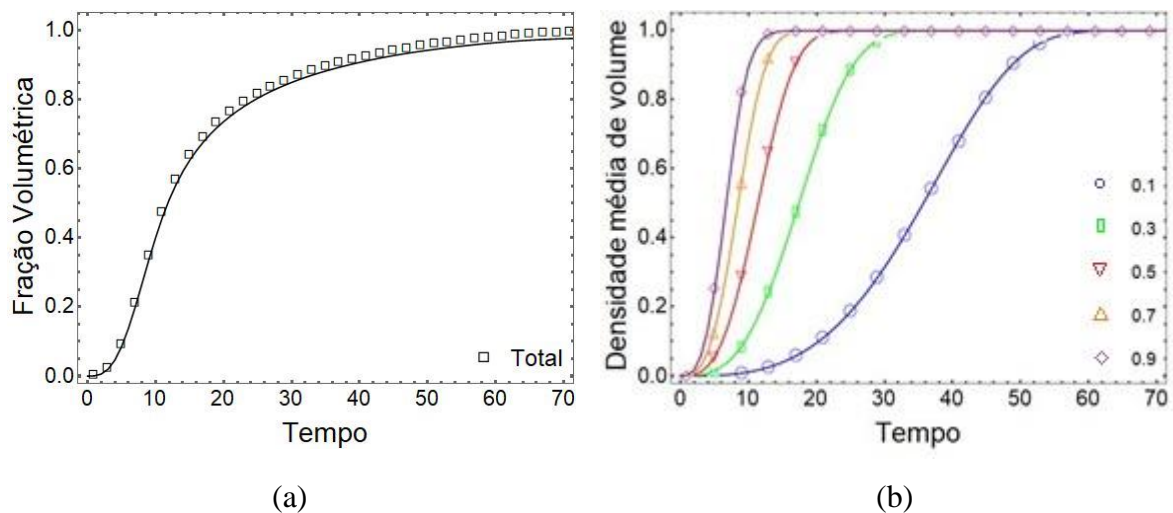


Figura 64 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 600 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.

5.1.4 Velocidade não homogênea para 1200 núcleos

Nas Figura 65 e Figura 66 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para velocidade não homogênea com $G(x) = 0,1x + 0,2$ e nucleação homogênea para 1200 núcleos. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira aleatória e ao final da transformação os grãos apresentam tamanhos de grão diferentes, porém mais refinados devido ao aumento do número de grãos. Durante a transformação, apesar da diferença de gradiente de velocidade, a transformação pareceu ocorrer de maneira semelhante na parte superior e inferior. Como o gradiente de velocidade apresenta uma diferença de velocidade pequena entre o plano superior e inferior, os grãos se mostram distribuídos com tamanhos heterogêneos ao longo da direção do gradiente e com uma mínima percepção de curvatura nas interfaces. A Figura 67 apresenta a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

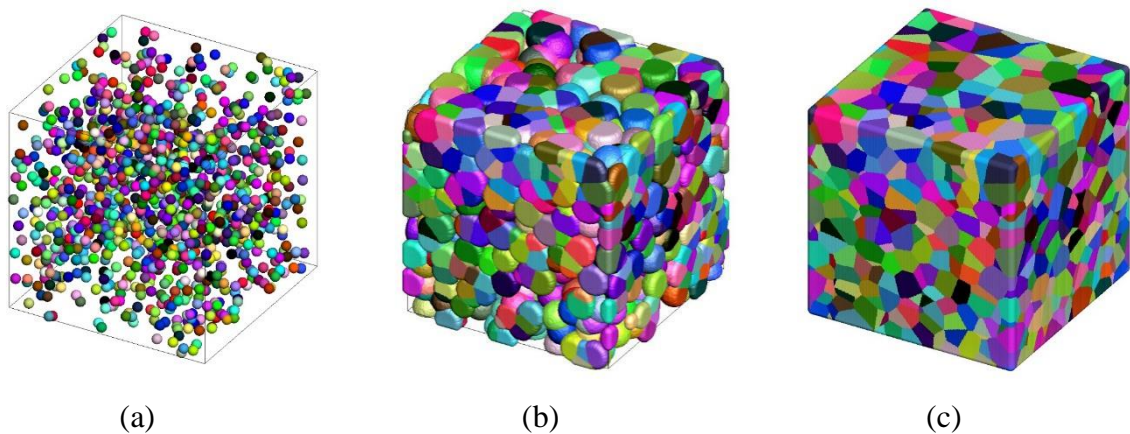


Figura 65 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

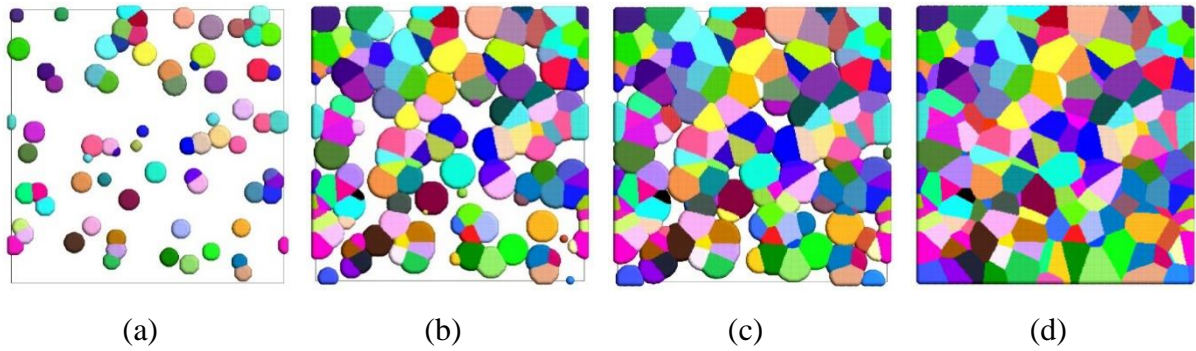


Figura 66 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

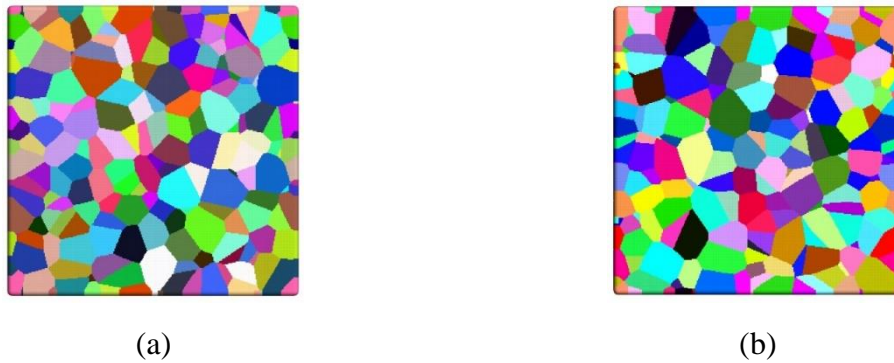


Figura 67 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 68 é mostrado a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. As curvas para os planos são próximas, entretanto, a cinética é mais lenta no plano inferior como consequência do gradiente de velocidade.

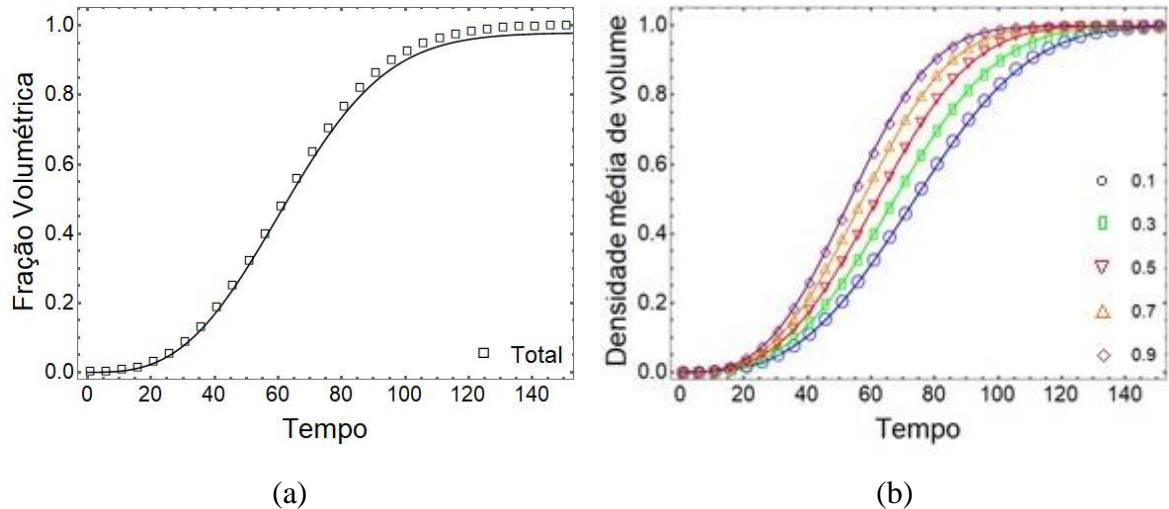


Figura 68 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.

Nas Figura 69 e Figura 70 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para velocidade não homogênea com $G(x) = 0,3x + 0,2$ e nucleação homogênea para 1200 núcleos. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira aleatória e ao final da transformação os grãos apresentam tamanhos heterogêneos. Entretanto, a transformação cessa na parte superior antes que a parte inferior. O gradiente de velocidade, por apresentar uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior que o caso anterior de $G(x) = 0,1x + 0,2$, já mostra uma diferença durante a evolução da transformação. O tamanho do grão ao longo da direção do gradiente continua sendo heterogêneo, ou seja, com tamanho de grão maiores e menores por toda a matriz e com uma maior percepção de curvatura nas interfaces. Na Figura 71 é mostrado a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9. Apesar da diferença de velocidade entre os planos inferiores e superior ser pequena, já há uma maior percepção de curvatura no plano 0,1, devido também a maior quantidade de núcleos. Há mais grãos com maior velocidade nos planos superiores. O “*impingement*” com os grãos de menor velocidade provoca essa curvatura entre os grãos.

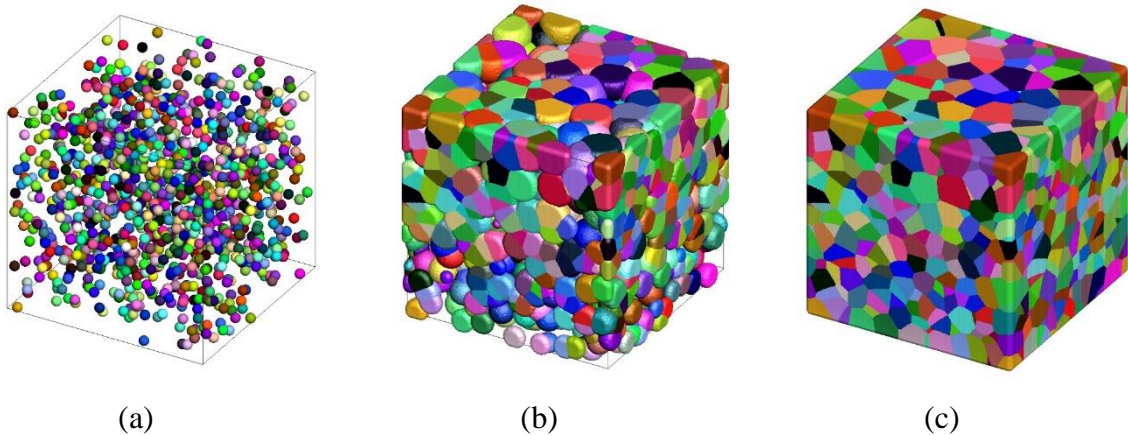


Figura 69 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

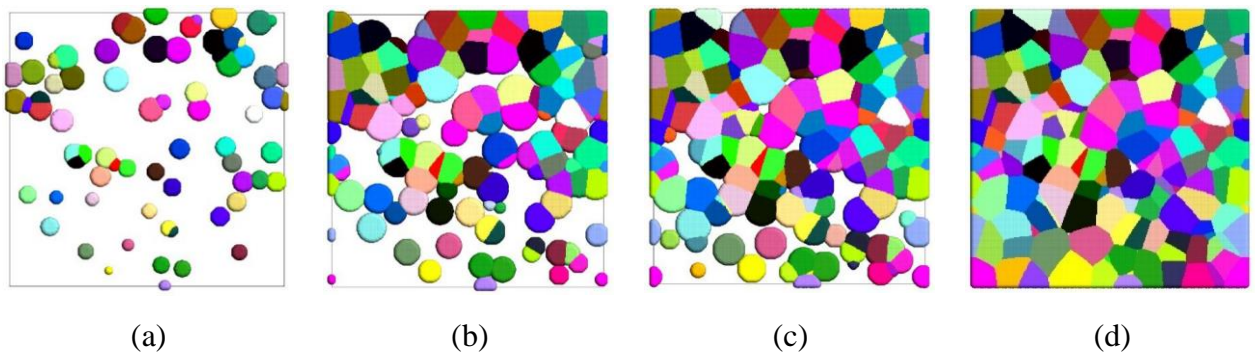


Figura 70 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

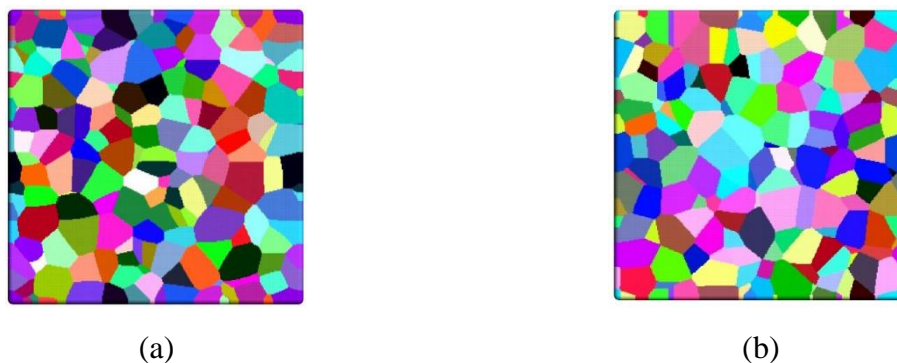


Figura 71 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 72 é mostrado a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. As curvas estão se afastando, principalmente para os planos mais próximos a parte inferior. A cinética é ainda mais lenta no plano inferior se comparado aos planos superiores como consequência do aumento do gradiente de velocidade.

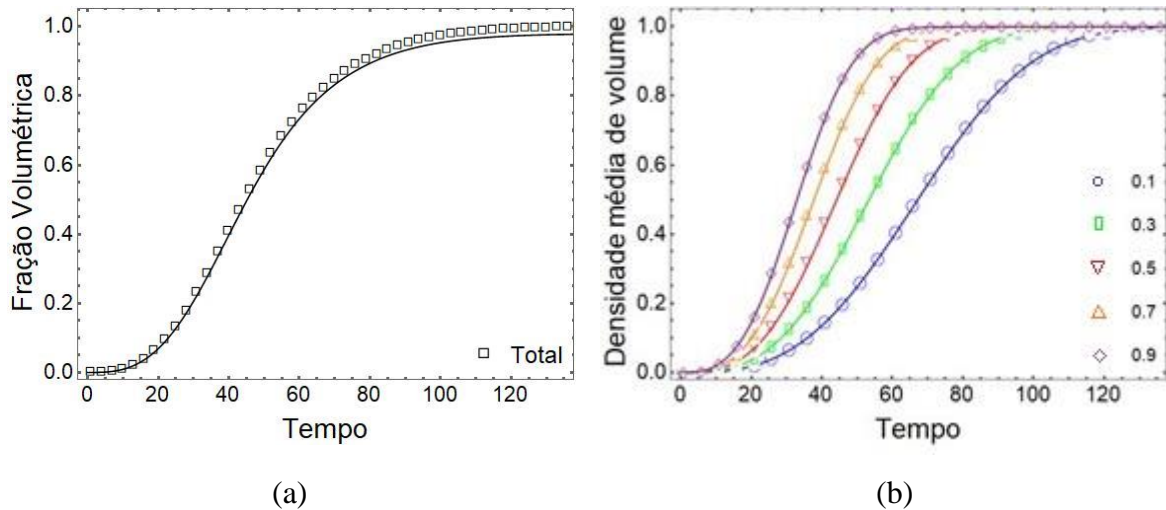


Figura 72 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.

Nas Figura 73 e Figura 74 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para velocidade não homogênea com $G(x) = 1,0x + 0,2$ e nucleação homogênea para 1200 núcleos. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira aleatória e ao final da transformação apresentam-se “alongados” nos planos inferiores da matriz. Esses grãos alongados em direção aos planos inferiores são mais refinados devido a maior quantidade de grãos. O gradiente de velocidade apresenta uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior que o caso anterior de $G(x) = 0,3x + 0,2$. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. Ao final da transformação os grãos de planos superiores crescem em direção a região de menor velocidade. O tamanho do grão varia por toda a matriz, porém com diferenças evidentes nas interfaces. Na Figura 75, que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9, é evidenciado vários grãos curvos no plano 0,1, como consequência da velocidade não homogênea e do aumento da quantidade de núcleos. Há mais grãos com velocidade mais alta, côncavos, “envolvendo” mais grãos com velocidade mais baixa, convexo.

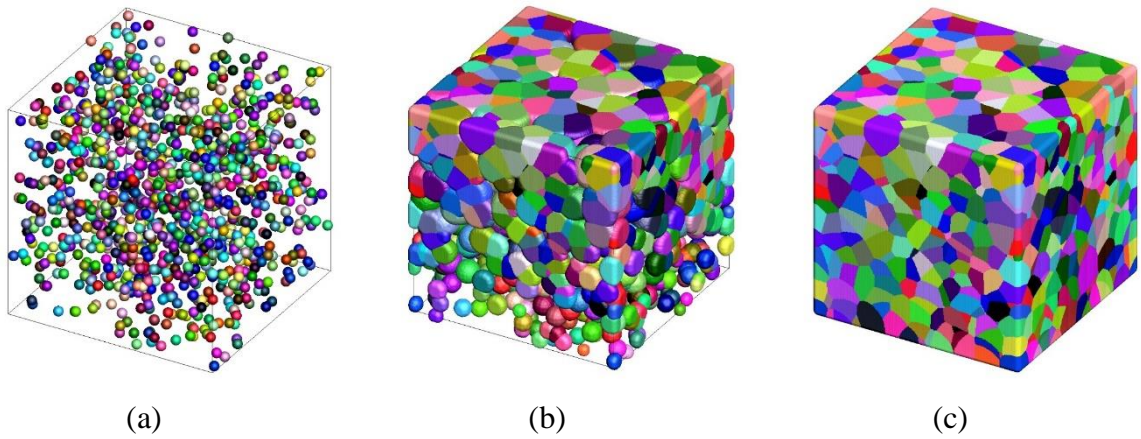


Figura 73 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

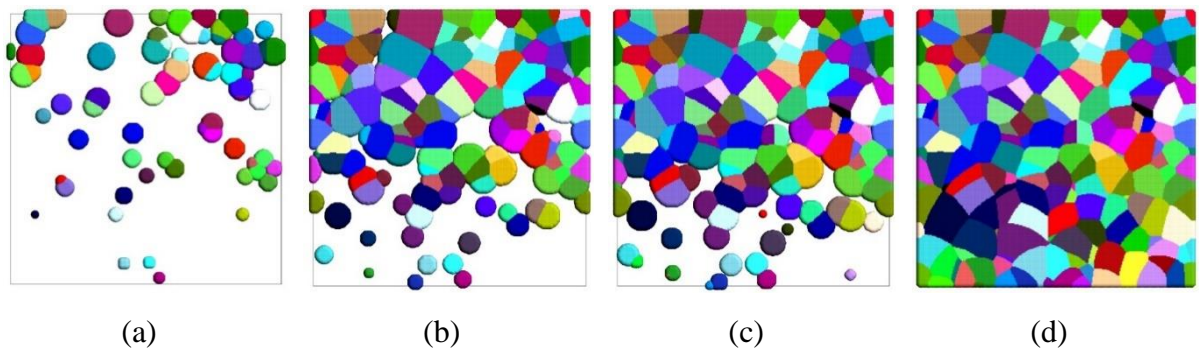


Figura 74 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.



Figura 75 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 76 é mostrado a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. A curva sigmoidal da cinética total, apresenta um aspecto característico para uma transformação em que há uma rápida transformação em um tempo curto e uma cinética mais lenta ao final. Isso é consequência do afastamento ainda maior das curvas dos planos, principalmente para os planos mais próximos a parte inferior. A cinética é ainda mais lenta no plano 0,1 se comparado aos planos superiores como resultado do aumento do gradiente de velocidade.

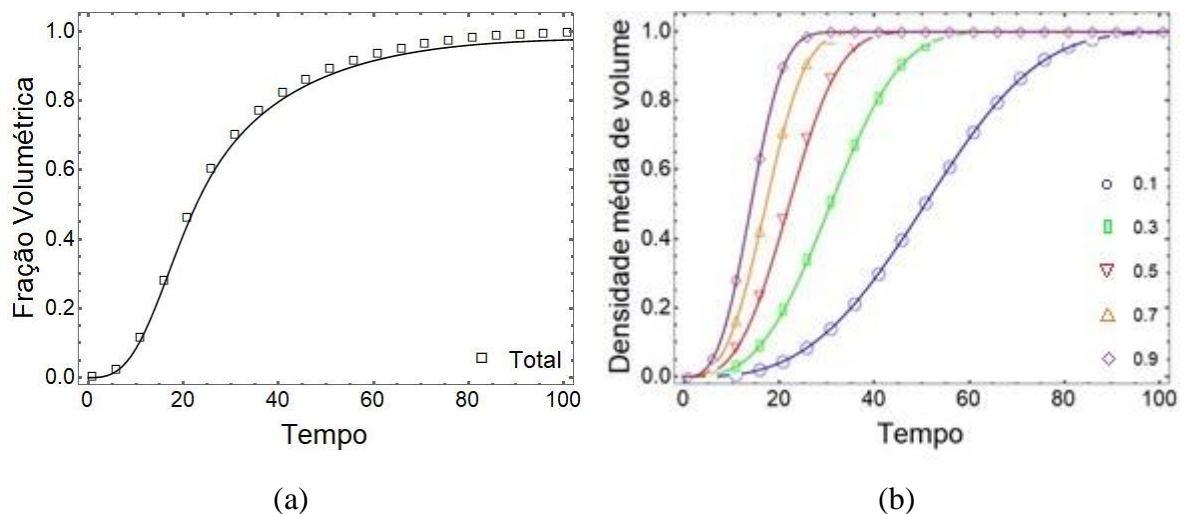


Figura 76 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.

Nas Figura 77 e Figura 78 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para velocidade não homogênea com $G(x) = 3,0x + 0,2$ e nucleação homogênea para 1200 núcleos. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira aleatória e ao final da transformação apresentam-se “alongados” nos planos inferiores. Esses grãos dos planos inferiores se mostram mais alongados que para o caso anterior de $G(x) = 1,0x + 0,2$, justamente pelo gradiente de velocidade apresentar uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. Os grãos de planos superiores crescem em direção a região de menor velocidade. Entretanto, esses grãos na parte superior ao tentar preencher os planos inferiores acabam sendo impedidos devido ao aumento de núcleos. Desta forma, os grãos de alta velocidade acabam englobando e impedindo o crescimento dos grãos da parte inferior como visto na Figura 78e. A matriz apresenta-se mais refinada de grãos de

tamanhos heterogêneos e alongados na parte inferior evidenciando as interfaces curvas. Na Figura 79, que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9, é evidenciado vários grãos curvos no plano 0,1, como consequência da velocidade não homogênea e do aumento da quantidade de núcleos. Como para o caso com $G(x) = 1,0x + 0,2$, há mais grãos com velocidade mais alta, côncavos, “envolvendo” mais grãos com velocidade mais baixa, convexo.

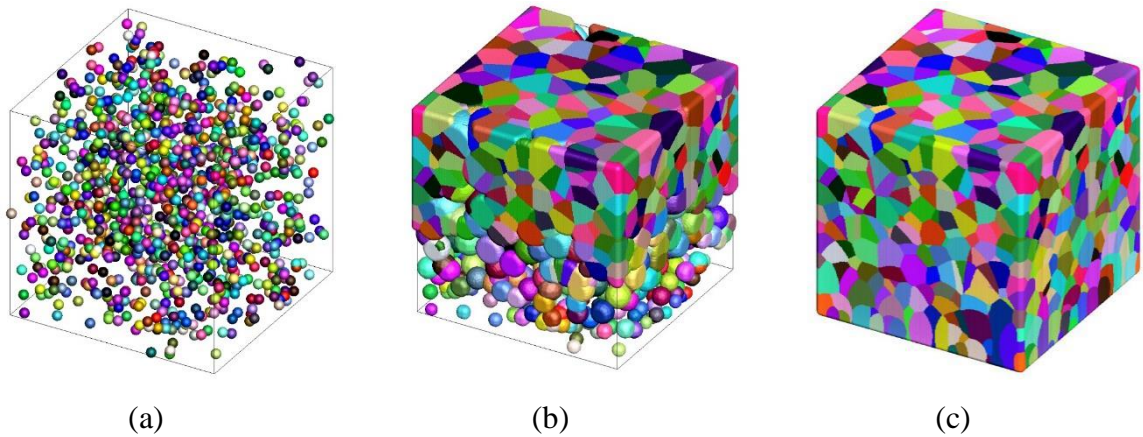


Figura 77 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

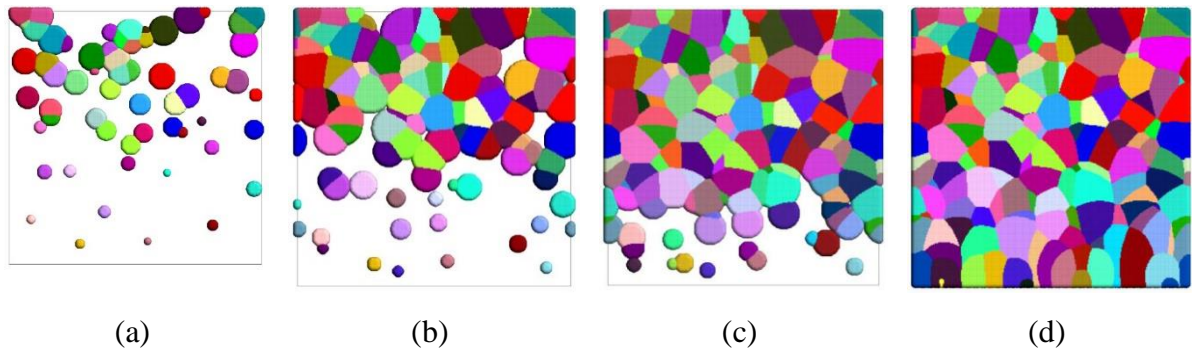


Figura 78 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

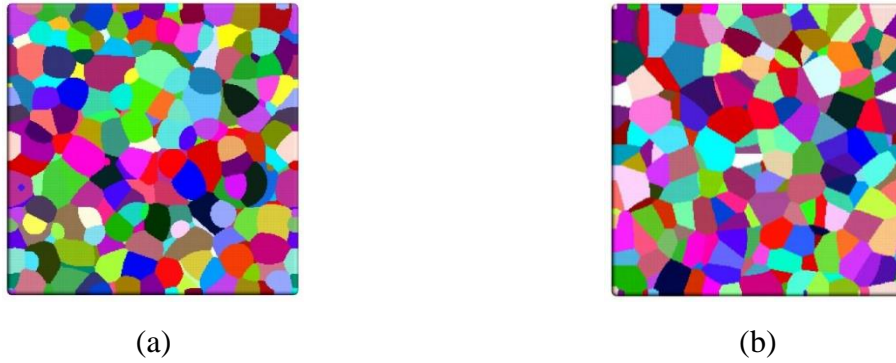


Figura 79 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 80 é mostrado a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. Na curva sigmoidal da cinética total, a transformação é ainda mais rápida. Nesse caso, 50% de transformação já ocorreu em menos de 20% do tempo total de transformação. O afastamento da curva do plano 0,1 é ainda maior se comparado aos planos superiores como resultado do aumento do gradiente de velocidade. Por ter a cinética mais lenta, a cinética do plano 0,1 é que controla a cinética de transformação.

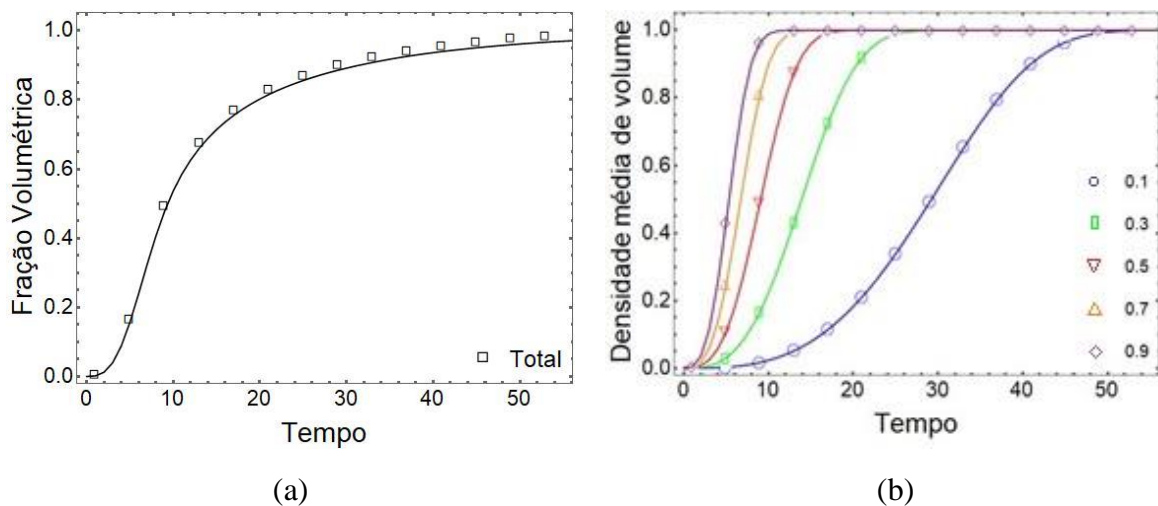


Figura 80 - Cinética de transformação para nucleação homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 3,0x + 0,2$: (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos.

O gradiente de velocidade influencia na evolução e aspecto final da microestrutura. Para menos ou mais núcleos, 150 a 1200, as características eram similares para o correspondente gradiente de velocidade. O aumento do número de núcleos influenciou na maior evidência de curvaturas, uma vez que, mais núcleos com velocidade alta tendiam a regiões de menor velocidade. Esses grãos dos planos inferiores tentavam crescer e impedir o crescimento dos grãos de maior velocidade, porém acabavam sendo englobados e a microestrutura apresentava aquele aspecto de grãos alongados nos planos inferiores. A cinética dos planos inferiores determinava a cinética da transformação principalmente para maiores gradientes de velocidade.

O problema da velocidade não homogênea é complicado de ser modelado, uma vez que, é preciso controlar a cada passo se um certo ponto está sendo transformado por grãos de crescimento afastado, ou seja, que estão mais distantes desse ponto ou por um grão de crescimento lento mais próximo. Mesmo que a região de alta velocidade tivesse um tempo menor, devido à necessidade de ignorar uma região transformada à sua frente, o tempo poderia ser maior para chegar aos núcleos dos planos inferiores. Entretanto, nesse caso, como os núcleos estavam distribuídos aleatoriamente no espaço, os núcleos da parte inferior cresciam ocupando a matriz e desta forma, influenciando na cinética da transformação.

5.2 NUCLEAÇÃO NÃO HOMOGÊNEA COM VELOCIDADE HOMOGÊNEA

Nessa parte, é feito o estudo da nucleação não homogênea para 1200, 4800 e 19200 núcleos e velocidade homogênea com $G = 0,25$, $G = 0,35$ e $G = 0,70$.

5.2.1 Nucleação não homogênea para 1200 núcleos

Nas Figura 81 e Figura 82 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 1200 núcleos e velocidade homogênea com $G = 0,25$. A inspeção visual mostra que nos grãos superiores há pequenos grãos em comparação aos grãos inferiores. Esse gradiente microestrutural é uma consequência do gradiente de núcleos: mais núcleos na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos na parte inferior resultam em grãos maiores. Esse resultado é semelhante ao obtido anteriormente por Rios et al. usando autômatos celulares [23]. Essa diferença no

tamanho de grão pode ser vista a partir do plano 0,5 na direção do gradiente aos planos inferiores. Portanto, neste caso, a interpretação da microestrutura é direta e relativamente fácil de entender. Isso fica ainda mais claro quando é visto a Figura 83 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

Outro ponto interessante é que as interfaces entre os grãos na microestrutura totalmente transformada são retas em 2D e planas em 3D. É sabido que, para nucleação não homogênea saturada no local e velocidade constante, os limites dos grãos são planos. Os grãos resultantes formam o mosaico de Poisson-Voronoi. Os limites retos também são vistos aqui, mostrando que, mesmo para a nucleação não homogênea saturada no local, a característica da nucleação homogênea persiste.

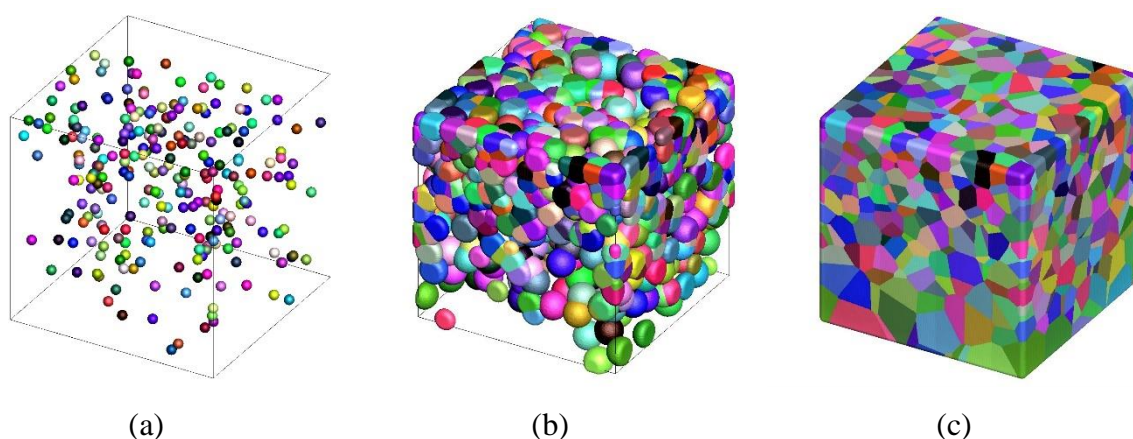


Figura 81 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,25$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

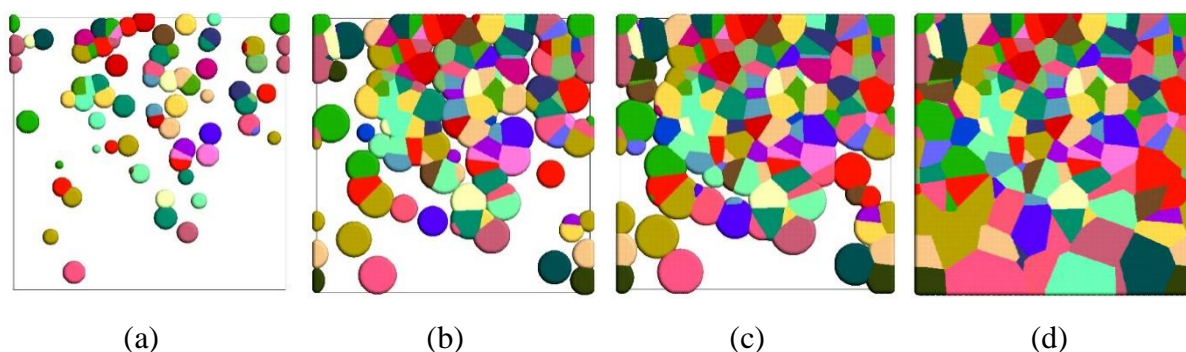


Figura 82 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,25$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.



Figura 83 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,25$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Nas Figura 84a e Figura 84b são mostradas a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. A coordenada $x_3 = 0$ corresponde a parte inferior do volume da simulação, i. e o “espécime” enquanto $x_3 = 1$ corresponde à parte superior do espécime. Cada curva corresponde à cinética em um determinado ponto da amostra entre $x_3 = 0$ e $x_3 = 1$. Portanto, um plano com $x_3 = 0,9$ está próximo a parte superior, enquanto um plano com $x_3 = 0,1$ está próximo a parte inferior. Há um bom acordo com as equações analíticas. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

A contiguidade caracteriza o arranjo espacial de duas fases. Uma fase, a nova fase, nucleia dentro de outra fase, a matriz mãe. Quando os núcleos são uniformemente localizados aleatoriamente na fase mãe, ou seja, quando os núcleos estão localizados na fase mãe de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson, existe uma expressão analítica para a contiguidade em função do volume transformado [41], [42]. A linha analítica é útil como uma linha de referência [43]. No presente caso, quando se mede a contiguidade em um plano de $x_3 = \text{constante}$, a contiguidade cai nessa linha de referência. Este resultado é independente do plano em x_3 . Na Figura 84c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . Este resultado, como será visto é independente da quantidade de núcleos e se a velocidade é constante ou se existe um gradiente de velocidade.

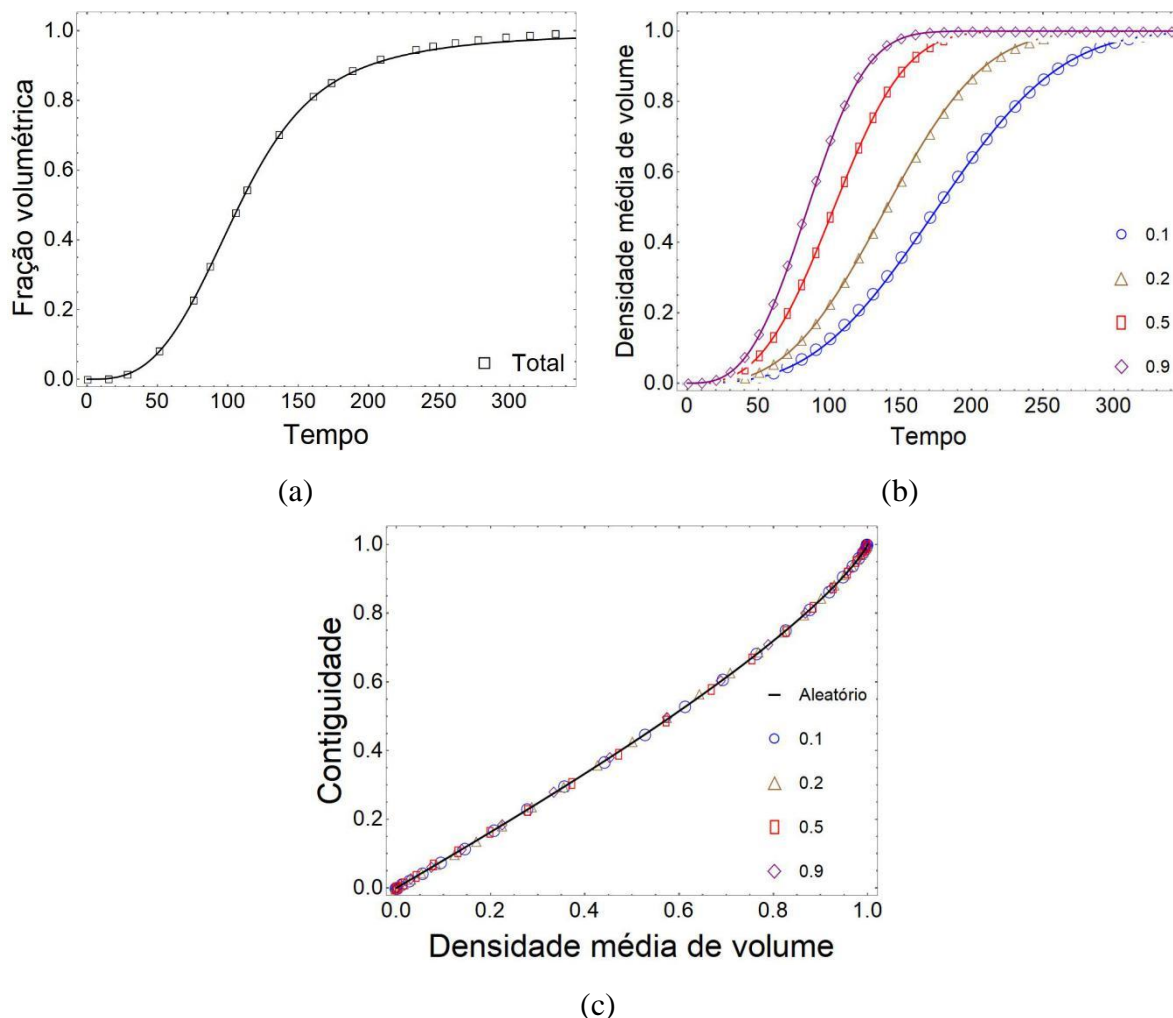


Figura 84 – Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,25$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos.

Nas Figura 85 e Figura 86 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 1200 núcleos e velocidade homogênea com $G=0,35$. A inspeção visual mostra que nos grãos superiores há pequenos grãos em comparação aos grãos inferiores. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior como consequência do gradiente de núcleos: mais núcleos na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos na parte inferior resultam em grãos maiores. Essa diferença no tamanho de grão pode ser vista a partir do plano 0.5 na direção do gradiente aos planos inferiores. Isso fica ainda mais claro quando é visto a Figura 87 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9. Outro ponto a ser abordado é que as interfaces entre os grãos na microestrutura totalmente transformada são retas em 2D e planas em 3D.

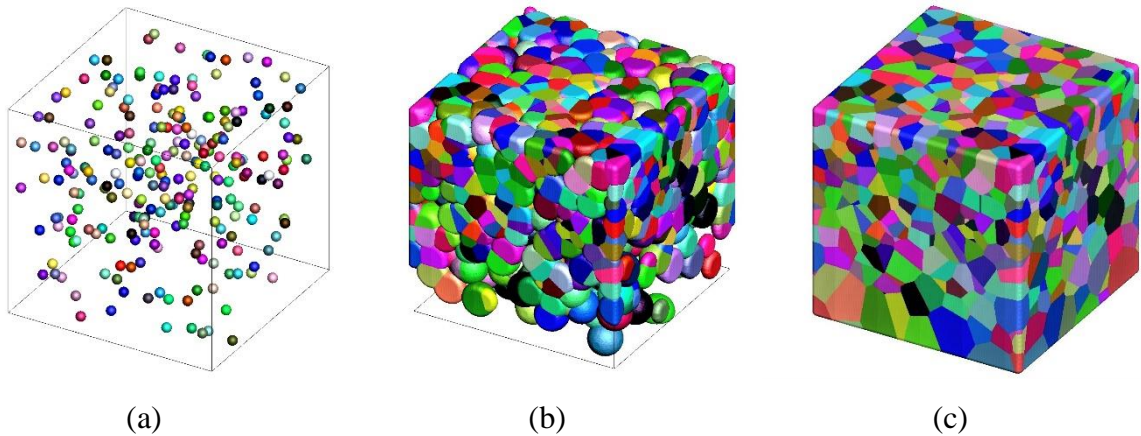


Figura 85 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,35$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

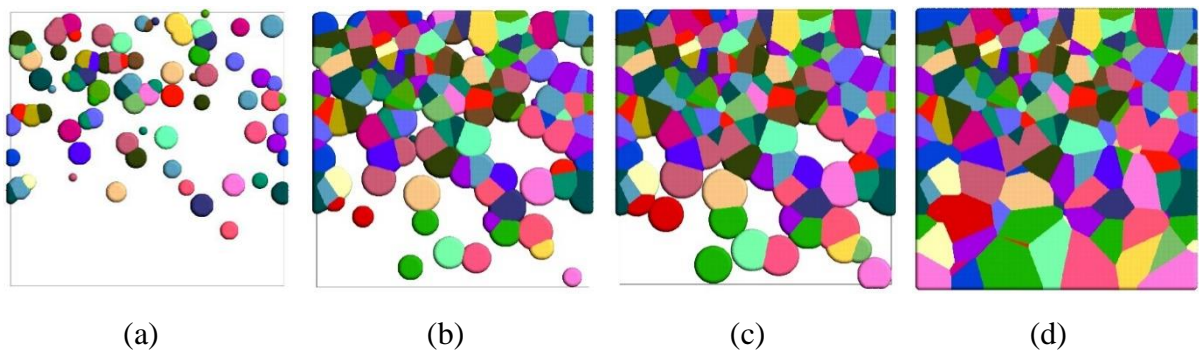


Figura 86 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,35$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

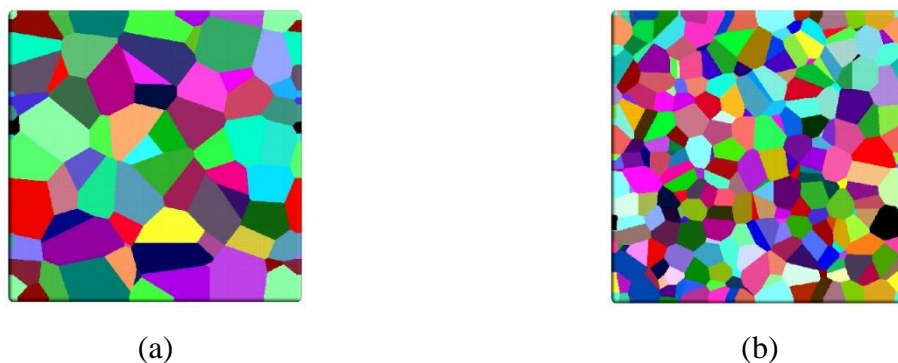


Figura 87 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,35$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Nas Figura 88a e Figura 88b são mostradas a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 88c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . A contiguidade ajusta-se nessa linha de referência, ou seja, os núcleos estão localizados na fase matriz de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson. Este resultado é independente do plano em x_3 .

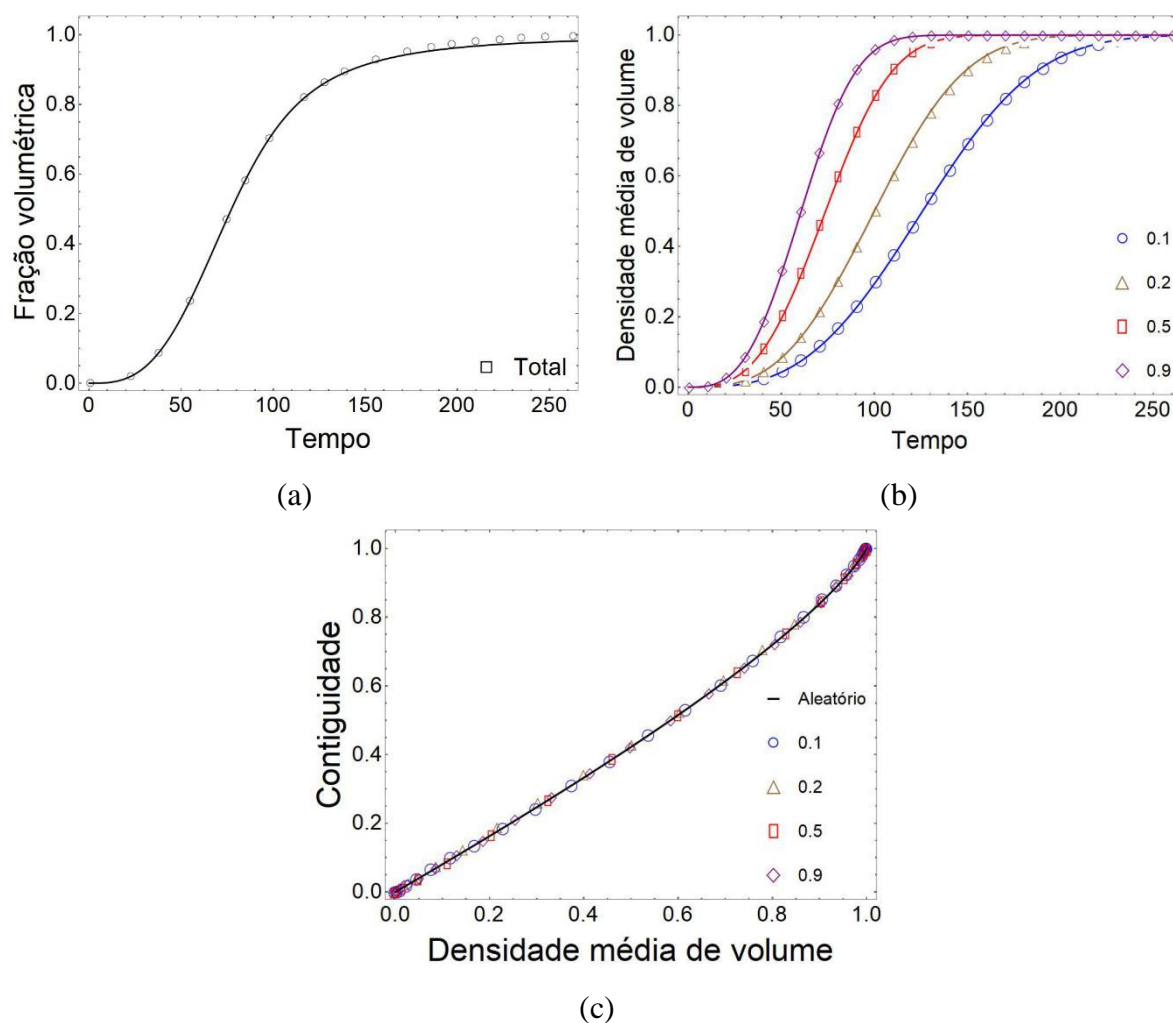


Figura 88 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,35$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos.

Nas Figura 89 e Figura 90 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 1200 núcleos e velocidade homogênea com $G = 0,70$. A inspeção visual mostra que nos grãos superiores há pequenos

grãos em comparação aos grãos inferiores. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior como consequência do gradiente de núcleos: mais núcleos na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos na parte inferior resultam em grãos maiores. Essa diferença no tamanho de grão pode ser vista a partir do plano 0.5 na direção do gradiente aos planos inferiores. Isso fica ainda mais claro quando é visto a Figura 91 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9. Outro ponto a ser abordado é que as interfaces entre os grãos na microestrutura totalmente transformada são retas em 2D e planas em 3D.

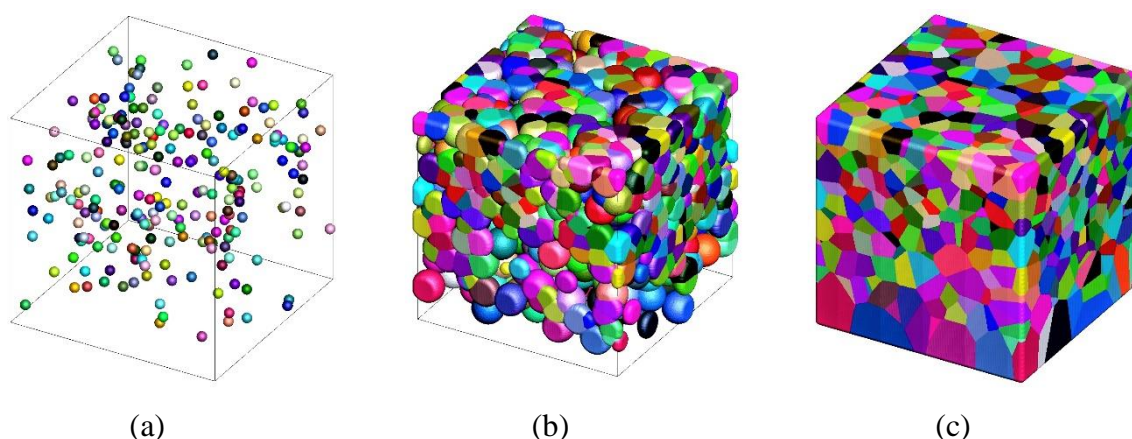


Figura 89 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,70$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

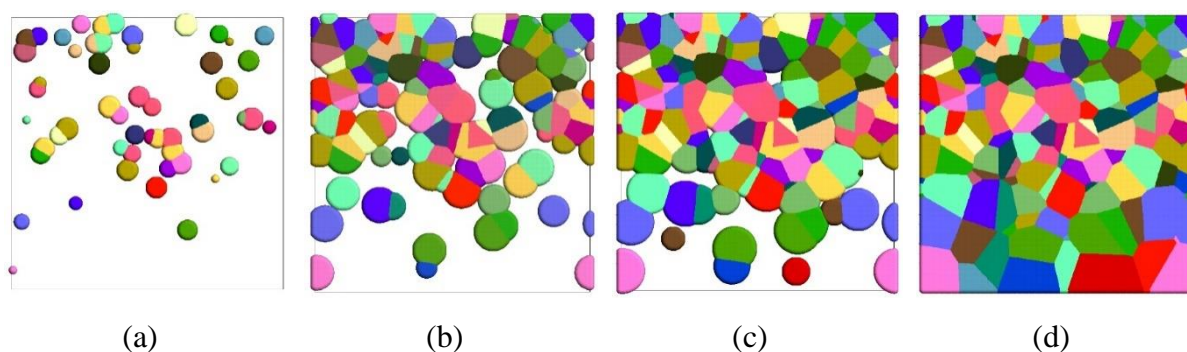


Figura 90 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,70$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

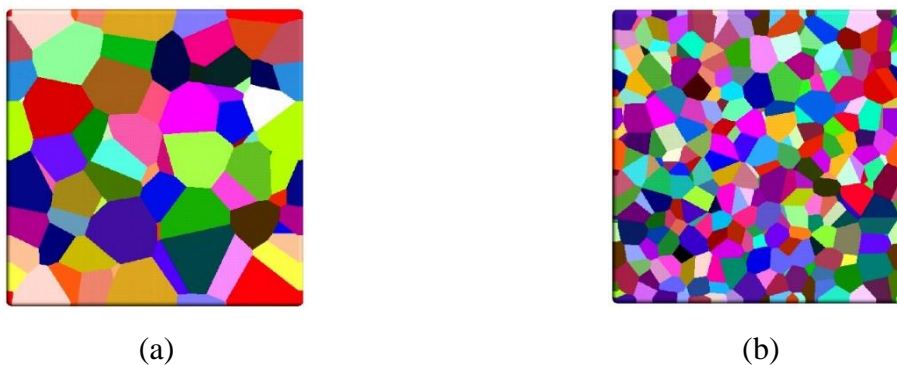


Figura 91 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,70$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Nas Figura 92a e Figura 92b são mostradas a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 92c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . A contiguidade ajusta-se nessa linha de referência, ou seja, os núcleos estão localizados na fase matriz de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson. Este resultado é independente do plano em x_3 .

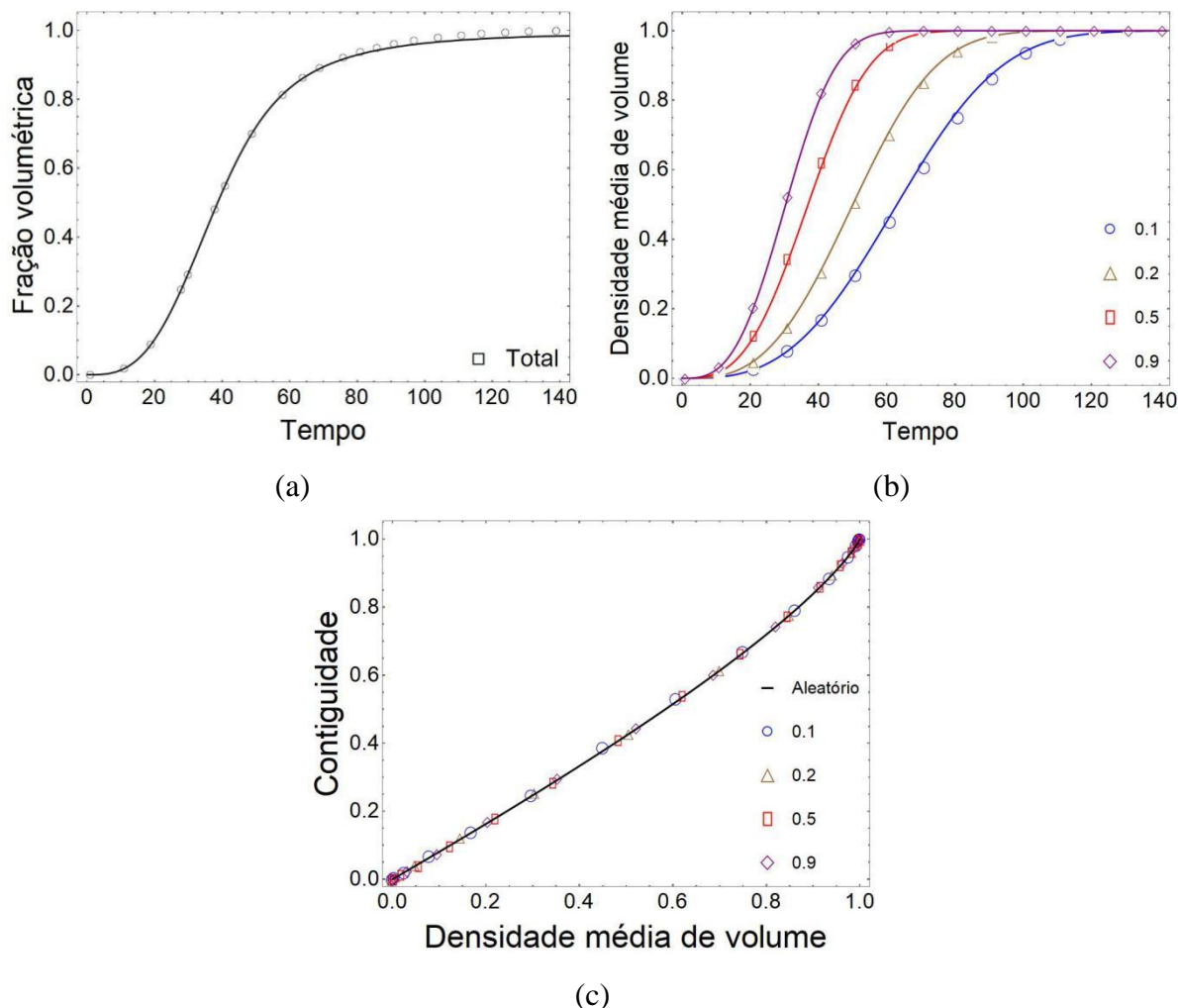


Figura 92 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G = 0,70$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos.

5.2.2 Nucleação não homogênea para 4800 núcleos

Nas Figura 93 e Figura 94 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 4800 núcleos e velocidade homogênea com $G = 0,25$. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira não homogênea e ao final da transformação apresenta-se com grãos superiores pequenos e grãos inferiores maiores. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior como consequência do gradiente de núcleos: mais núcleos na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos na parte inferior resultam em grãos maiores. Essa diferença no tamanho de grão pode ser vista a partir do plano 0,3 na direção

do gradiente aos planos inferiores. Isso fica ainda mais claro quando é visto a Figura 95 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9. Observa-se o maior refinamento dos grãos, principalmente na parte superior, devido ao aumento de núcleos e conseqüentemente do seu gradiente. Outro ponto interessante é que as interfaces entre os grãos na microestrutura totalmente transformada são retas em 2D e planas em 3D.

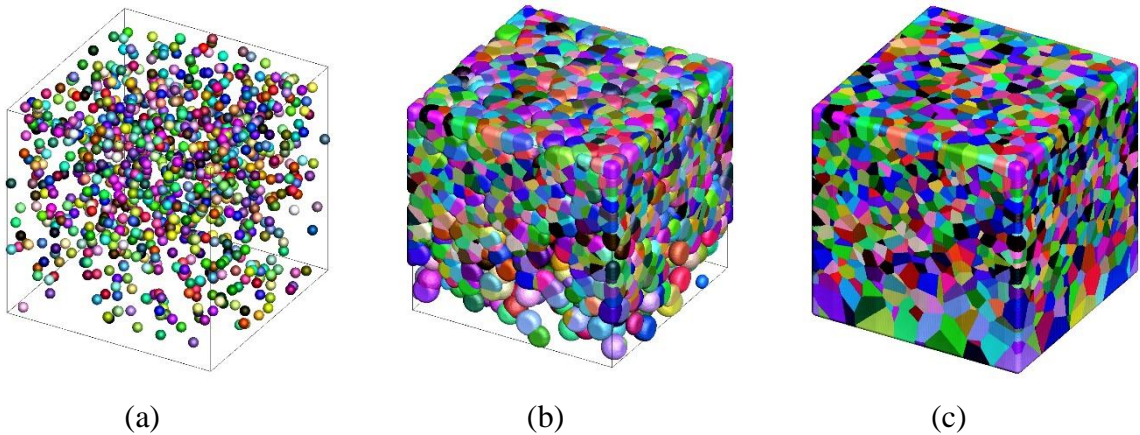


Figura 93 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,25$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

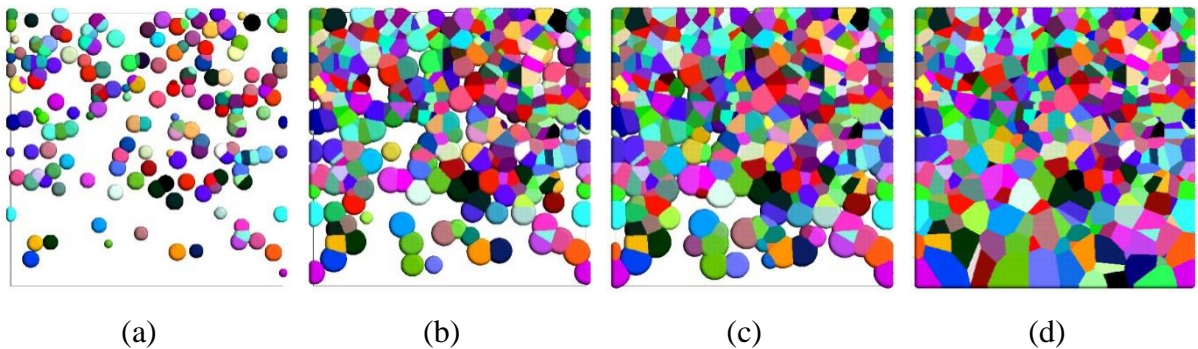


Figura 94 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,25$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

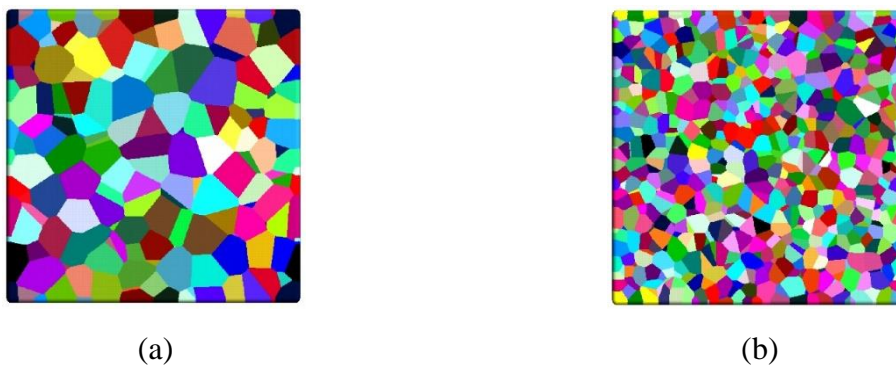


Figura 95 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,25$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Nas Figura 96a e Figura 96b são mostradas a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 96c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . A contiguidade ajusta-se nessa linha de referência, ou seja, os núcleos estão localizados na fase matriz de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson. Este resultado é independente do plano em x_3 .

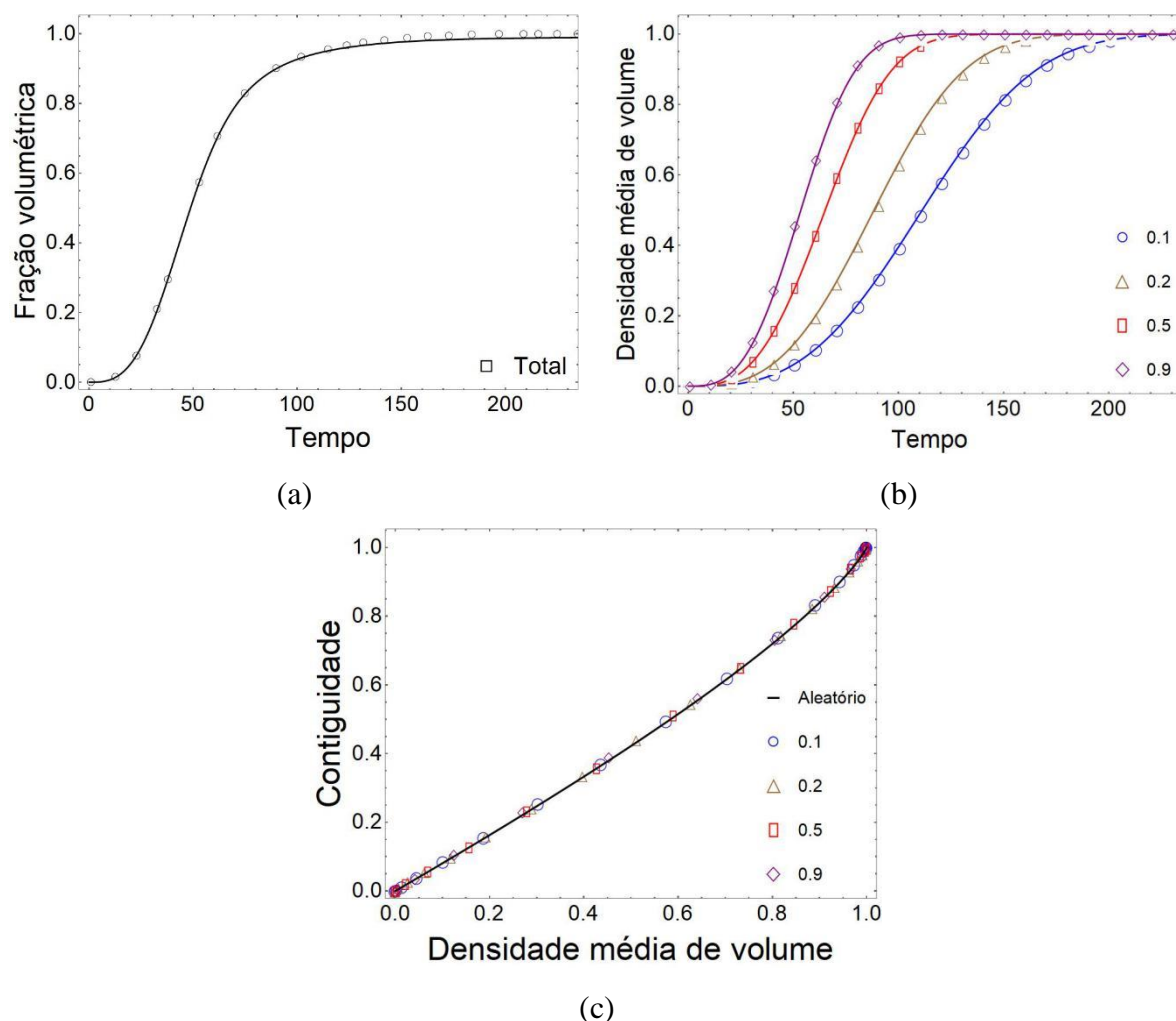


Figura 96 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,25$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos.

Nas Figura 97 e Figura 98 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 4800 núcleos e velocidade homogênea com $G = 0,35$. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira não homogênea e ao final da transformação apresenta-se com grãos superiores pequenos e grãos inferiores maiores. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior como consequência do gradiente de núcleos: mais núcleos na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos na parte inferior resultam em grãos maiores. Essa diferença no tamanho de grão pode ser vista a partir do plano 0.3 na direção do gradiente aos planos inferiores. Isso fica ainda mais claro quando é visto a Figura 99 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9. Observa-se o maior refinamento dos grãos, principalmente na parte superior, devido ao aumento de núcleos e consequentemente do seu

gradiente. Outro ponto a ser abordado é que as interfaces entre os grãos na microestrutura totalmente transformada são retas em 2D e planas em 3D.

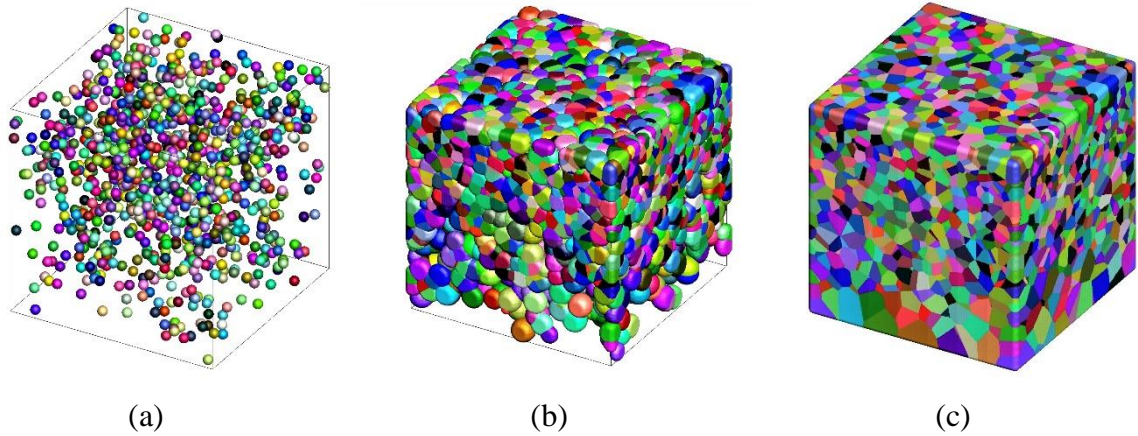


Figura 97 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,35$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

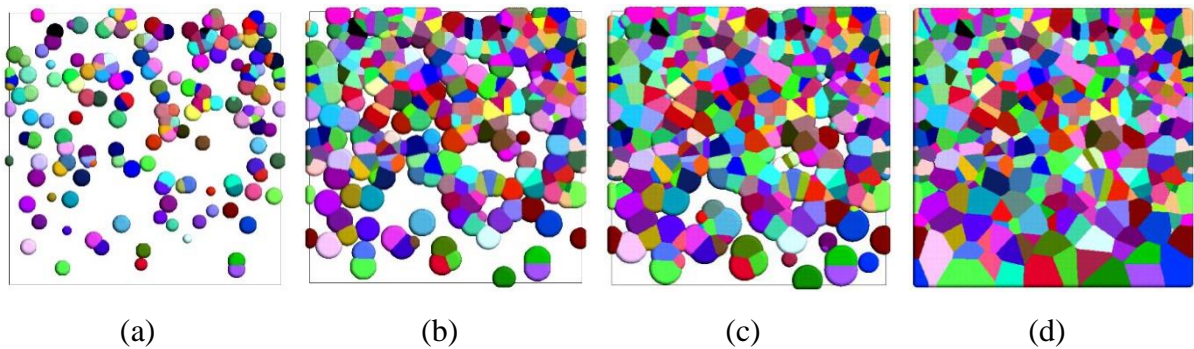


Figura 98 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,35$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.



Figura 99 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,35$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Nas Figura 100a e Figura 100b são mostradas a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 100c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . A contiguidade ajusta-se nessa linha de referência, ou seja, os núcleos estão localizados na fase matriz de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson. Este resultado é independente do plano em x_3 .

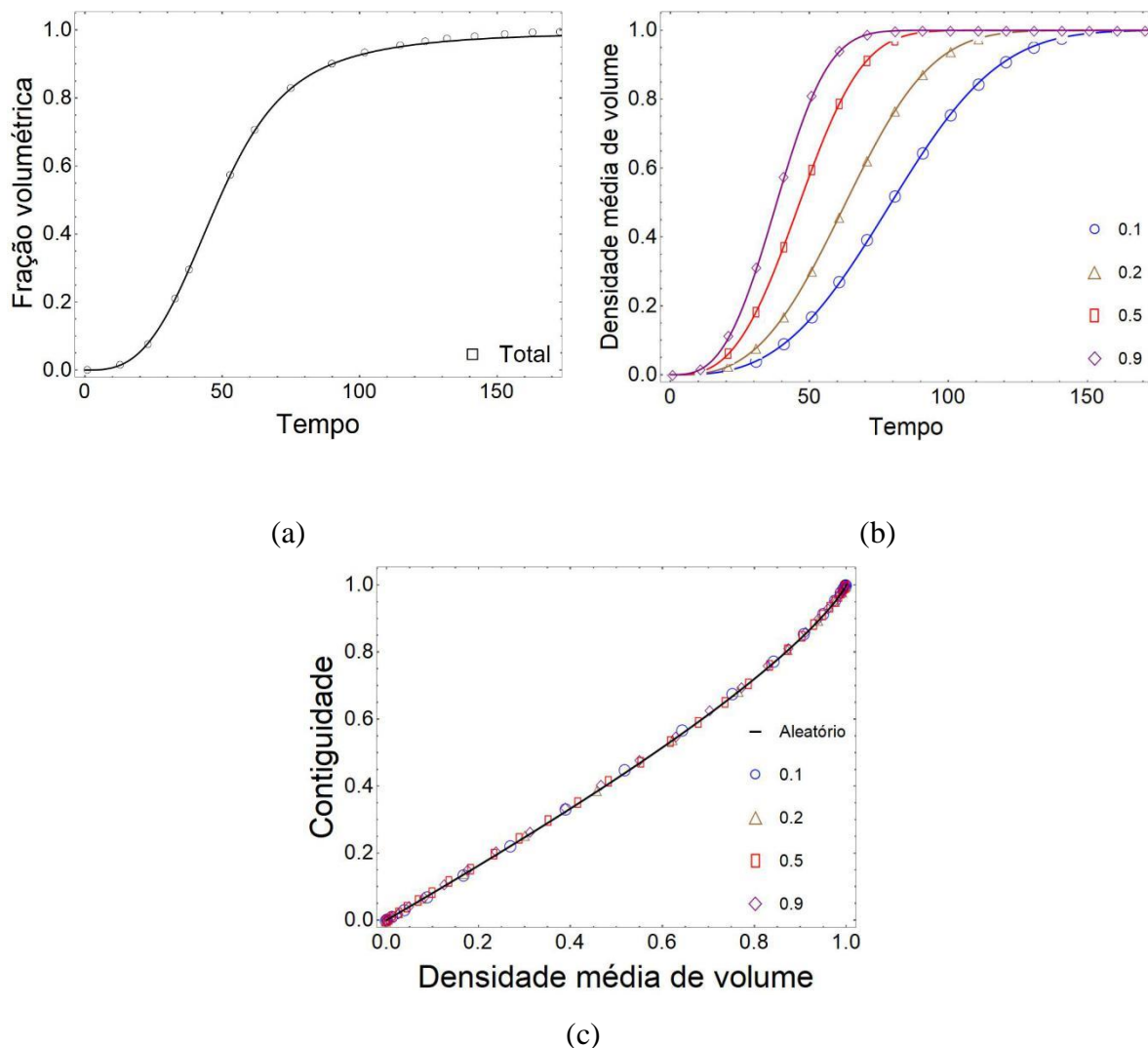


Figura 100 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,35$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos.

Nas Figura 101 e Figura 102 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 4800 núcleos e velocidade homogênea com $G = 0,70$. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira não homogênea e ao final da transformação apresenta-se com grãos superiores pequenos e grãos inferiores maiores. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior como consequência do gradiente de núcleos: mais núcleos na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos na parte inferior resultam em grãos maiores. Essa diferença no tamanho de grão pode ser vista a partir do plano 0,3 na direção do gradiente aos planos inferiores. Isso fica ainda mais claro quando é visto a Figura 103 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9. Observa-se o maior

refinamento dos grãos, principalmente na parte superior, devido ao aumento de núcleos e consequentemente do seu gradiente. Outro ponto a ser abordado é que as interfaces entre os grãos na microestrutura totalmente transformada são retas em 2D e planas em 3D.

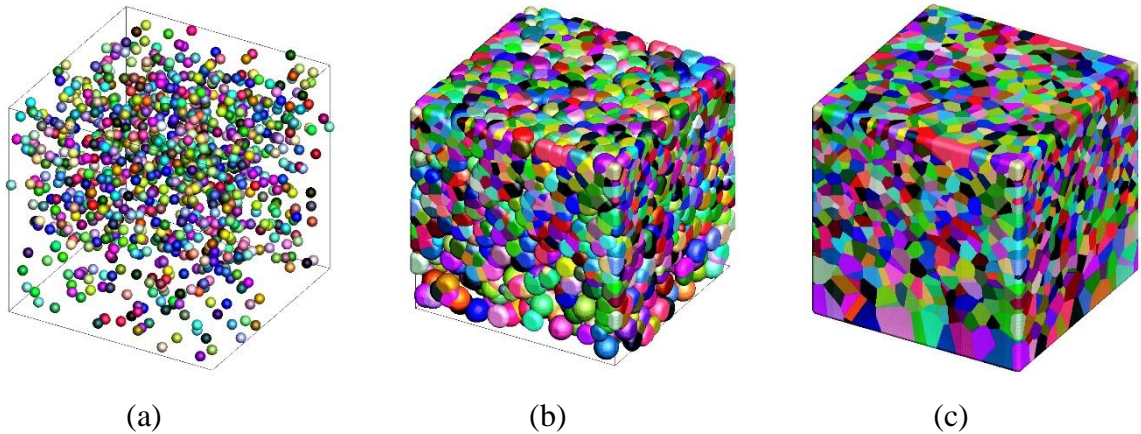


Figura 101 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,70$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

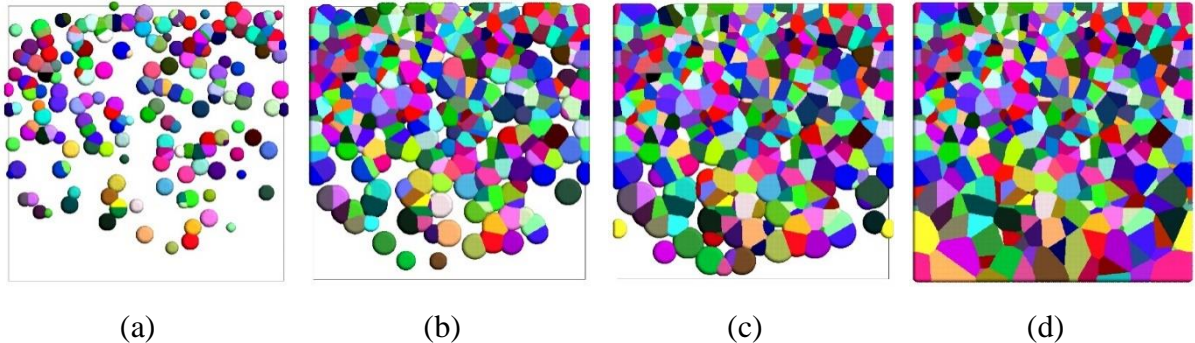


Figura 102 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,70$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.



Figura 103 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,70$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Nas Figura 104a e Figura 104b são mostradas a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 104c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . A contiguidade ajusta-se nessa linha de referência, ou seja, os núcleos estão localizados na fase matriz de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson. Este resultado é independente do plano em x_3 .

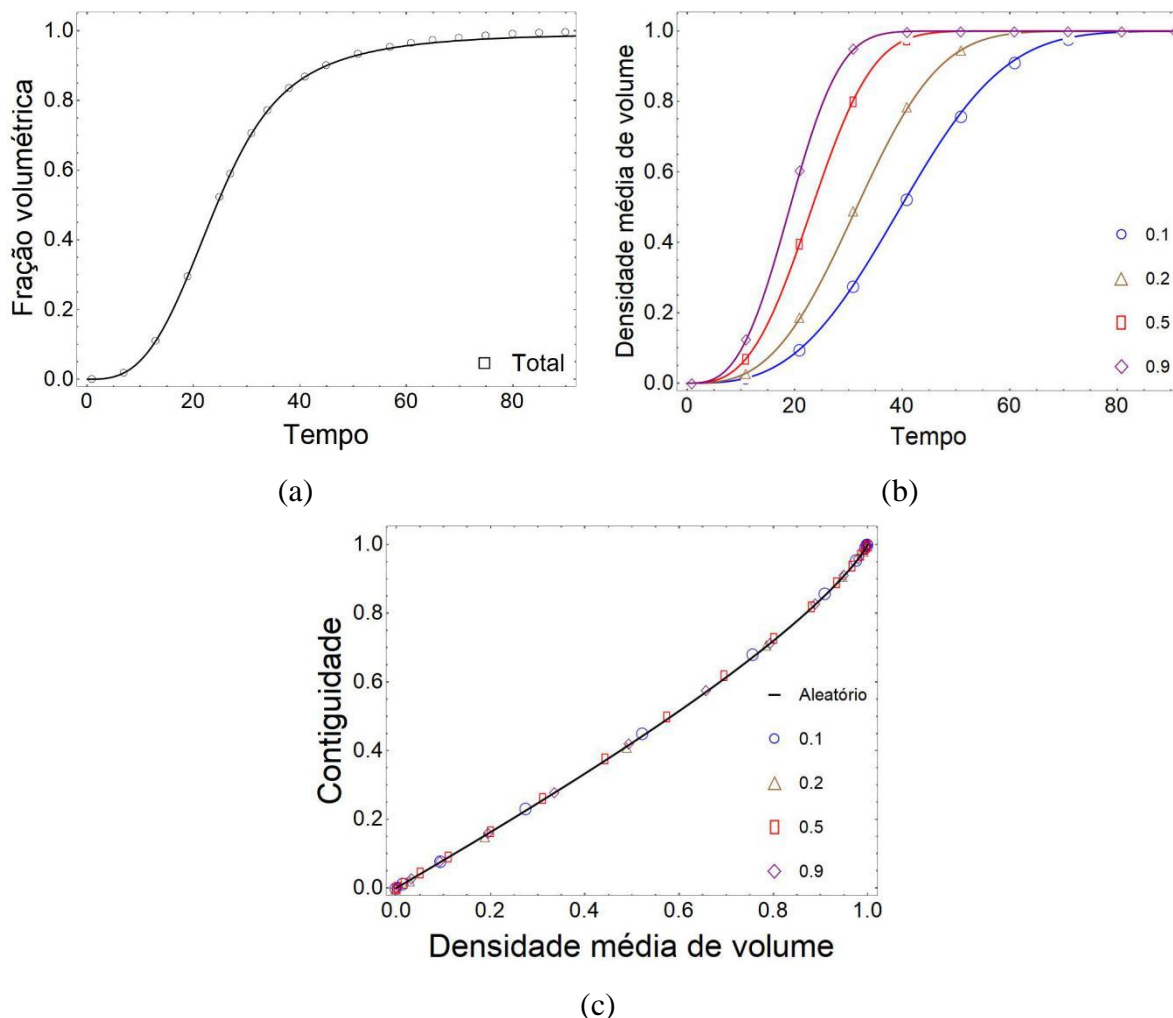


Figura 104 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G = 0,70$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos.

5.2.3 Nucleação não homogênea para 19200 núcleos

Nas Figura 105 e Figura 106 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 19200 núcleos e velocidade homogênea com $G = 0,25$. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira não homogênea e ao final da transformação apresenta-se com grãos superiores pequenos e grãos inferiores maiores. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior como consequência do gradiente de núcleos: mais núcleos na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos na parte inferior resultam em grãos maiores. Nesse caso, essa diferença no tamanho de grão pode ser

vista na parte inferior da matriz, próxima ao plano 0,1. Com o aumento do número de núcleos e seu gradiente na matriz, enquanto há um maior refinamento dos grãos na parte superior, os grãos conseguem crescer na região que tem menos núcleos que fica cada vez mais próximo ao plano 0,1. Isso fica ainda mais claro quando é visto a Figura 107 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9. Outro ponto interessante é que as interfaces entre os grãos na microestrutura totalmente transformada são retas em 2D e planas em 3D.

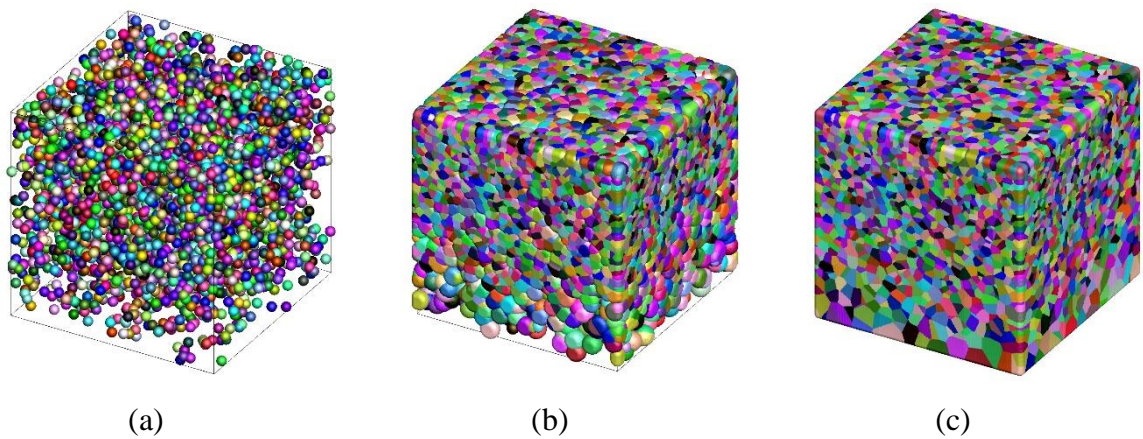


Figura 105 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,25$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

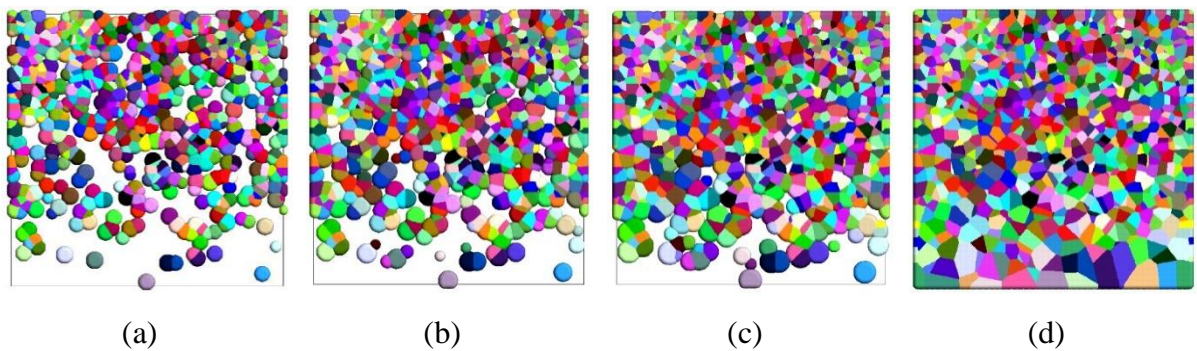


Figura 106 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,25$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.



Figura 107 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,25$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Nas Figura 108a e Figura 108b são mostradas a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 108c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . A contiguidade ajusta-se nessa linha de referência, ou seja, os núcleos estão localizados na fase matriz de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson. Este resultado é independente do plano em x_3 .

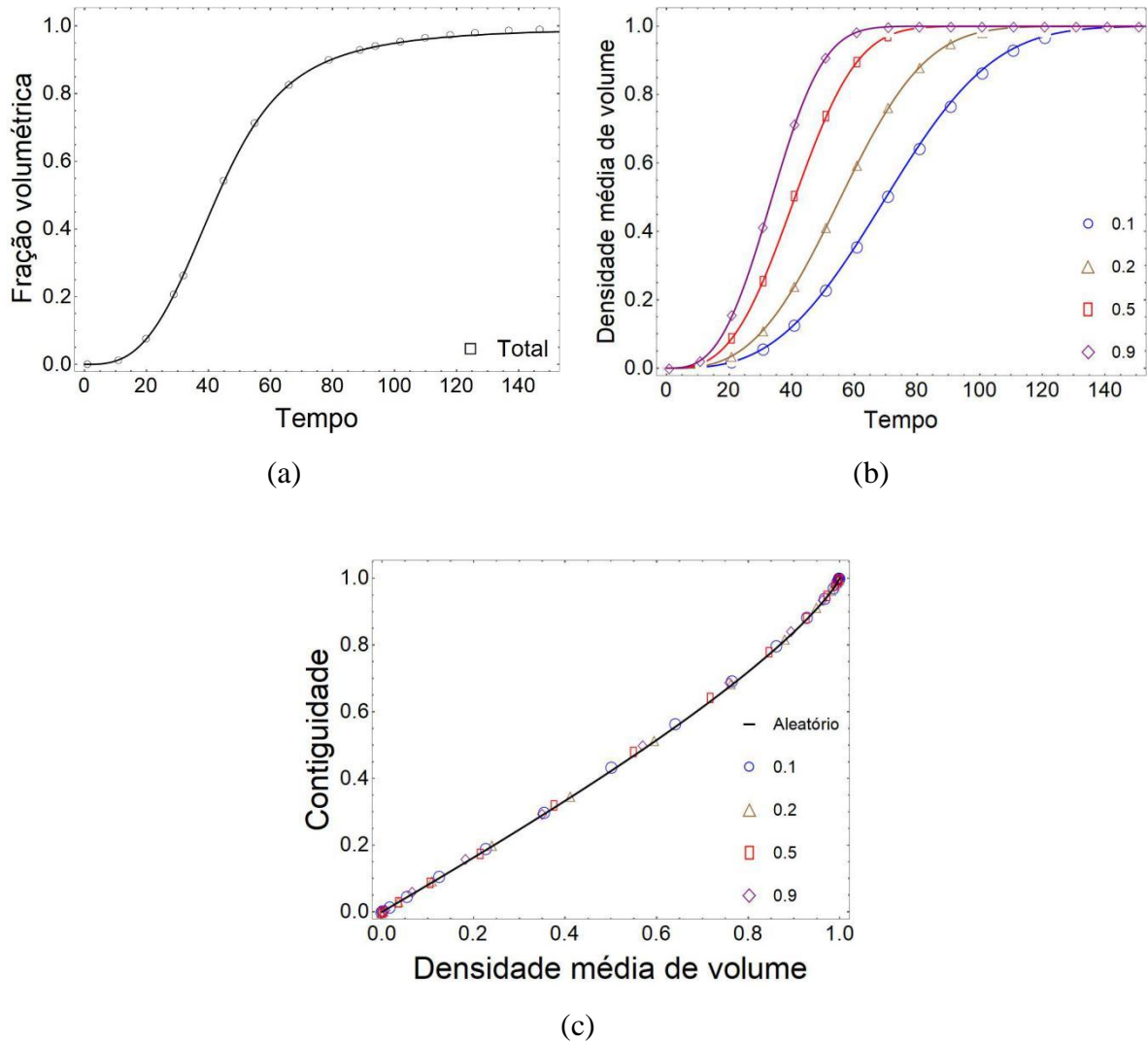


Figura 108 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,25$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos.

Nas Figura 109 e Figura 110 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 19200 núcleos e velocidade homogênea com $G = 0,35$. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira não homogênea e ao final da transformação apresenta-se com grãos superiores pequenos e grãos inferiores maiores. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior como consequência do gradiente de núcleos: mais núcleos na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos na parte inferior resultam em grãos maiores. Nesse caso, essa diferença no tamanho de grão pode ser vista na parte inferior da matriz, próxima ao plano 0,1. Isso fica ainda mais claro quando é visto a Figura 111 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9. Observa-se um refinamento ainda

maior dos grãos, principalmente na parte superior, devido ao aumento de núcleos e consequentemente do seu gradiente. Outro ponto interessante é que as interfaces entre os grãos na microestrutura totalmente transformada são retas em 2D e planas em 3D.

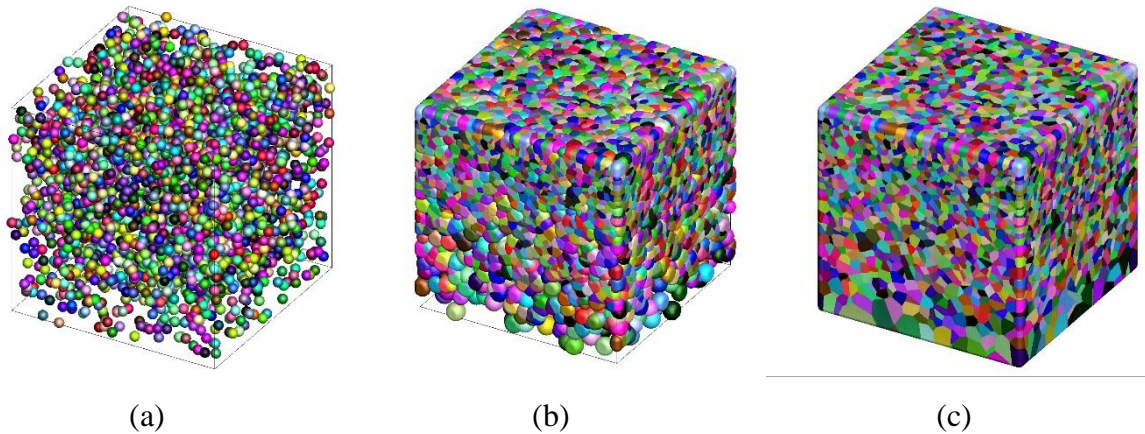


Figura 109 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,35$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

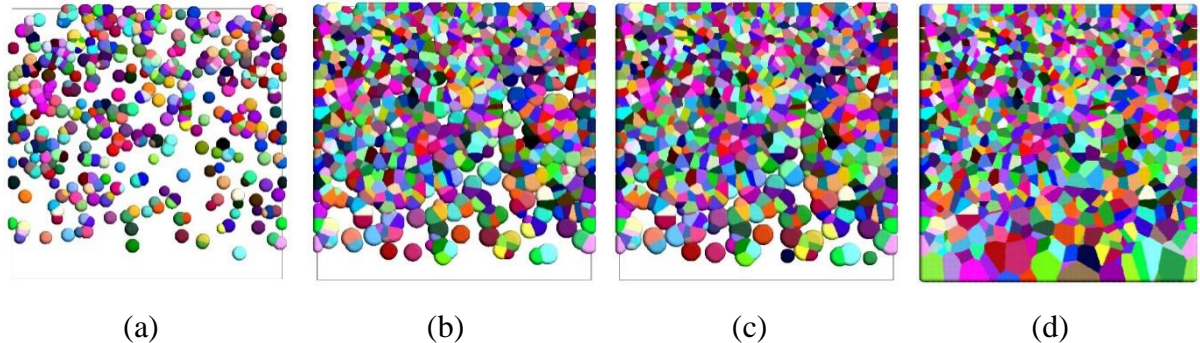


Figura 110 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,35$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.



Figura 111 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,35$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Nas Figura 112a e Figura 112b são mostradas a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 112c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . A contiguidade ajusta-se nessa linha de referência, ou seja, os núcleos estão localizados na fase matriz de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson. Este resultado é independente do plano em x_3 .

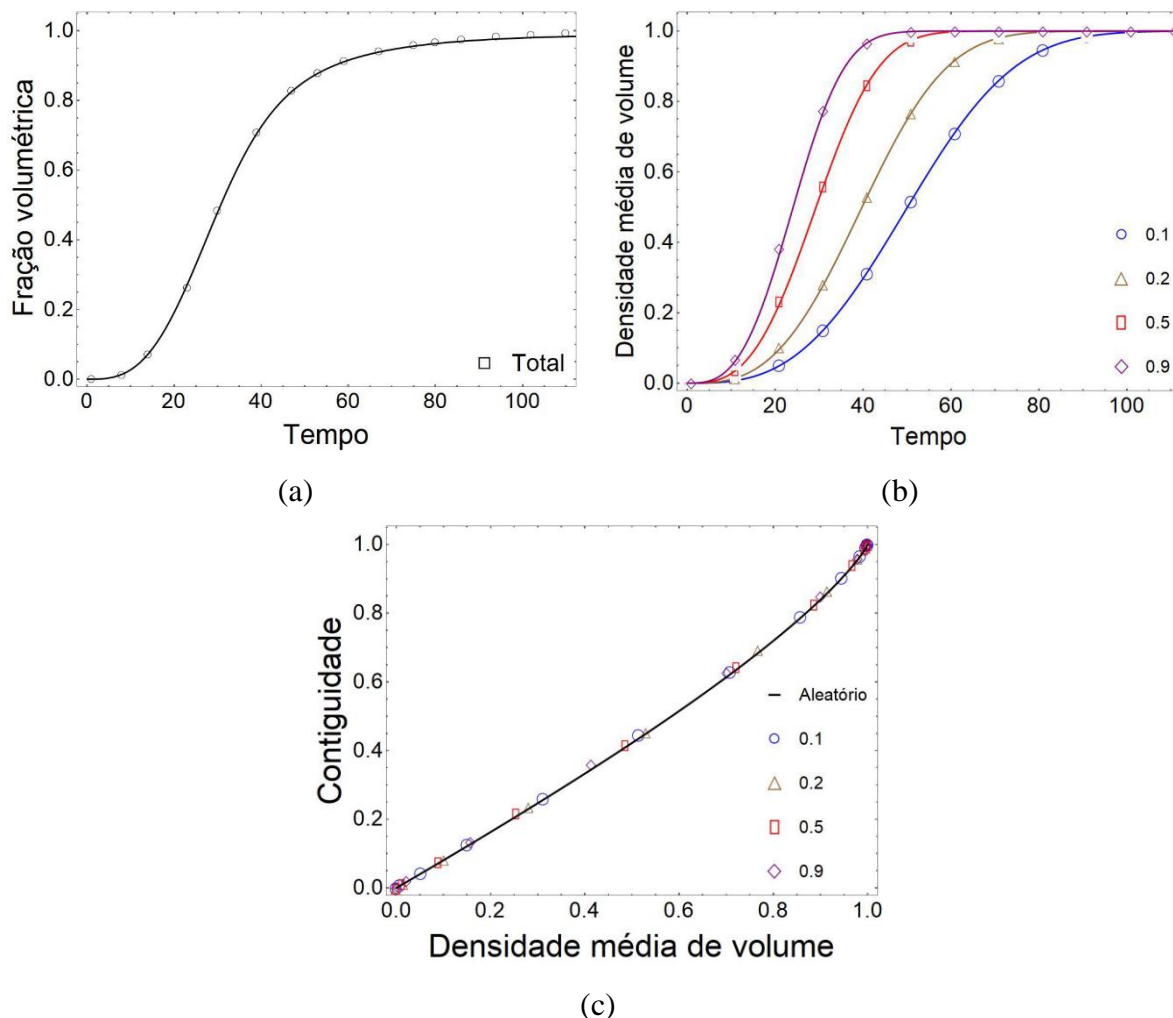


Figura 112 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,35$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos.

Nas Figura 113 e Figura 114 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 19200 núcleos e velocidade homogênea com $G = 0,70$. A inspeção visual mostra que os núcleos estão distribuídos inicialmente de maneira não homogênea e ao final da transformação apresenta-se com grãos superiores pequenos e grãos inferiores maiores. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior como consequência do gradiente de núcleos: mais núcleos na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos na parte inferior resultam em grãos maiores. Nesse caso, essa diferença no tamanho de grão pode ser vista na parte inferior da matriz, próxima ao plano 0,1. Isso fica ainda mais claro quando é visto a Figura 115 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9. Observa-se um refinamento ainda maior dos grãos, principalmente na parte superior, devido ao aumento de núcleos e

consequentemente do seu gradiente. Outro ponto interessante é que as interfaces entre os grãos na microestrutura totalmente transformada são retas em 2D e planas em 3D.

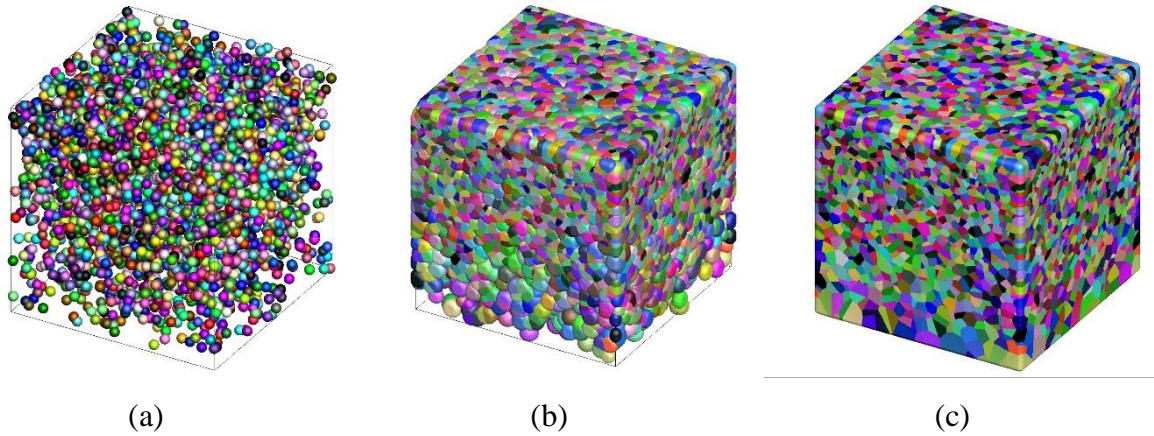


Figura 113 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,70$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

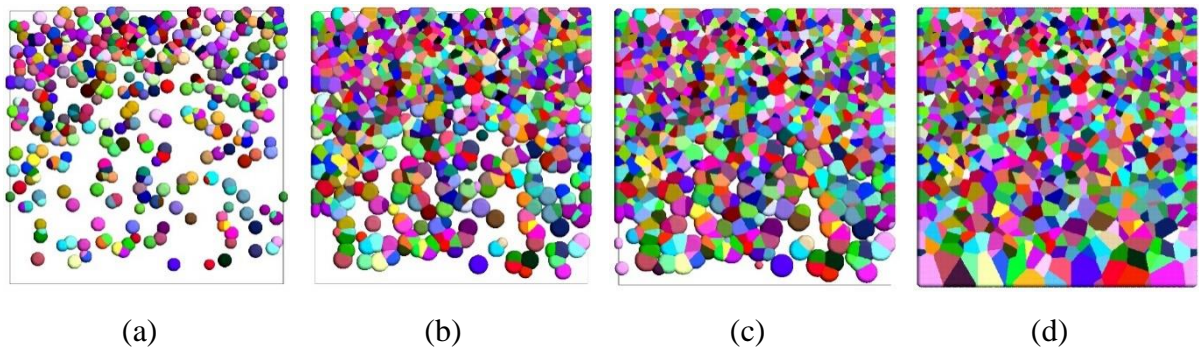


Figura 114 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,70$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.



Figura 115 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,70$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Nas Figura 116a e Figura 116b são mostradas a cinética de transformação total e dos planos, densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 116c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . A contiguidade ajusta-se nessa linha de referência, ou seja, os núcleos estão localizados na fase matriz de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson. Este resultado é independente do plano em x_3 .

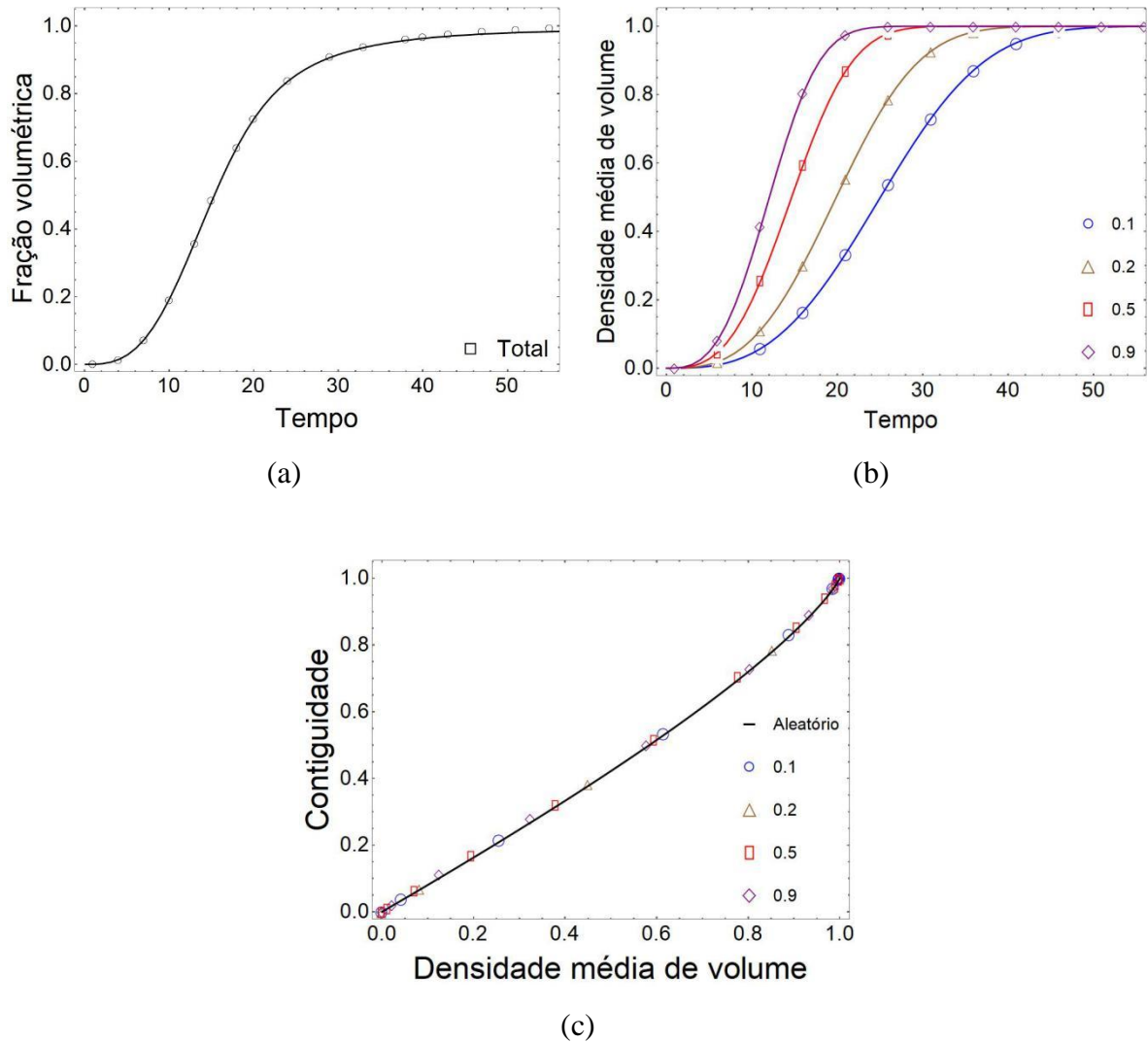


Figura 116 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G = 0,70$. (a) V_V versus tempo, (b) V_V versus tempo dos planos, (c) Contiguidade dos planos.

Este caso de nucleação não homogênea e velocidade homogênea foi revisitado de Costa M.F.B. [17], porém com outras quantidades de núcleos e velocidades constantes. Como já observado em Costa M.F.B. [17] e Lyrio et. al [11], a microestrutura apresenta esse gradiente de grãos menores na parte superior e grãos maiores na parte inferior, independentemente da quantidade de núcleos e da velocidade. Aqui, é visto que o aumento do número de núcleos, mostra um gradiente microestrutural com grãos maiores cada vez mais próximos aos planos inferiores. Esse gradiente microestrutural também pode ser observado na seção anterior de nucleação homogênea e velocidade não homogênea para quando havia maior gradiente de velocidade como $G(x) = 3,0x + 0,2$, independente da quantidade de núcleos, como nas Figura 30e (p. 72), Figura 46e (p.82), Figura 62e (p.90) e Figura 78e (p.99). Esta diferença abrupta de

velocidade ao longo dos planos fazia com que grãos superiores de alta velocidade crescessem na direção de baixa velocidade, assim os grãos ficavam alongados na parte inferior da matriz e dando essa “impressão” de grãos menores na parte superior e maiores na parte inferior. Esse tipo de comportamento é a base do gradiente de velocidade, produzindo uma microestrutura não homogênea. A não homogeneidade microestrutural poderia ser mais ou menos acentuada dependendo da quantidade de núcleos. Para outros gradientes de velocidade, menores, essa não homogeneidade microestrutural produzida pela velocidade não homogênea não foi observada. É difícil comparar o efeito de um gradiente de núcleo com o de um gradiente de velocidade na não homogeneidade microestrutural. Essa comparação é difícil porque a comparação é de efeitos diferentes. Entretanto, é permitido dizer timidamente que a velocidade não homogênea é menos eficaz na produção de um gradiente microestrutural do que na nucleação não homogênea.

Em relação a cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo, é mais lenta na parte inferior do que na parte superior. Portanto, um gradiente de densidade de núcleos e uma velocidade de crescimento têm cinética semelhante. Para nucleação não homogênea e velocidade homogênea é interessante perceber que as curvas são parecidas, uma vez que, a velocidade é constante. É perceptível apenas a mudança no tempo de transformação. Diferente do caso para nucleação homogênea e velocidade não homogênea em que à medida que aumentava o gradiente de velocidade, não apenas o tempo de transformação diminuía, mas a cinética do plano 0,1 era menor. Além da cinética total que já apresentava 50% de transformação em cerca de 20% do tempo de transformação.

A respeito da contiguidade da transformação de velocidade constante, vista nesta seção, a linha sólida representa o resultado analítico para a situação em que os núcleos são uniformes localizados aleatoriamente no espaço, i. e., processo de ponto de Poisson homogêneo. Nos gráficos, independentemente da quantidade do gradiente de núcleos e da velocidade, os planos 0,1, 0,3, 0,5, 0,9 concordam com a curva de contiguidade teórica (linha sólida). Os pontos representam os dados simulados. Isso significa que, em cada plano, os núcleos são localizados aleatoriamente, como esperado de um processo de ponto de Poisson homogêneo.

5.3 NUCLEAÇÃO NÃO HOMOGÊNEA COM VELOCIDADE NÃO HOMOGÊNEA

5.3.1 Nucleação e velocidade não homogêneas para 1200 núcleos

Nas Figura 117 e Figura 118 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 1200 núcleos e velocidade não homogênea com $G(x) = 0,1x + 0,2$. A inspeção visual mostra que nos grãos superiores são menores quando comparados aos grãos inferiores. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. O gradiente microestrutural é uma consequência do gradiente de núcleos e de velocidade: mais núcleos e maior velocidade na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos e menor velocidade na parte inferior resultam em grãos maiores. Essa diferença no tamanho de grão pode ser vista a partir do plano 0,5 na direção do gradiente aos planos inferiores. Portanto, neste caso, a interpretação da microestrutura também é direta e relativamente fácil de entender. Como o gradiente de velocidade apresenta uma diferença de velocidade pequena entre o plano superior e inferior, os grãos mostram pouca percepção de curvatura nas interfaces. Isso fica ainda mais claro quando é visto a Figura 119 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

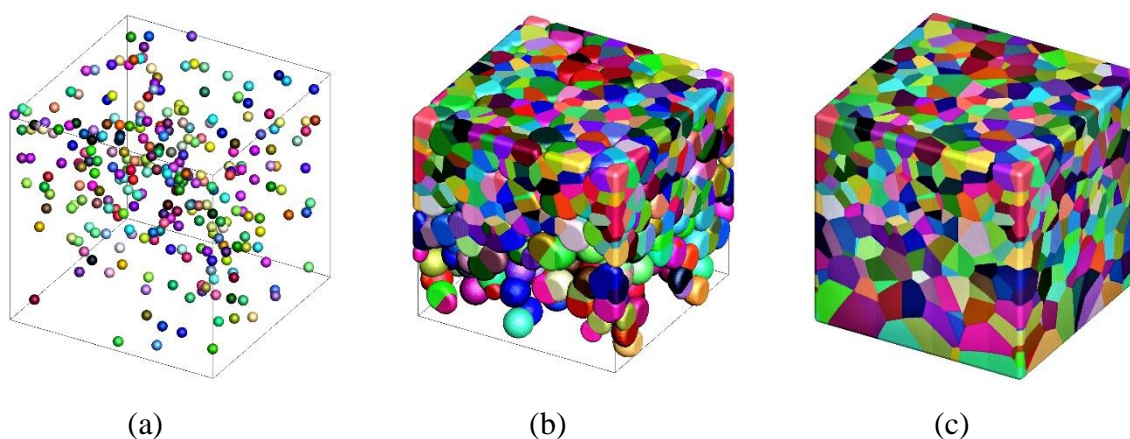


Figura 117 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

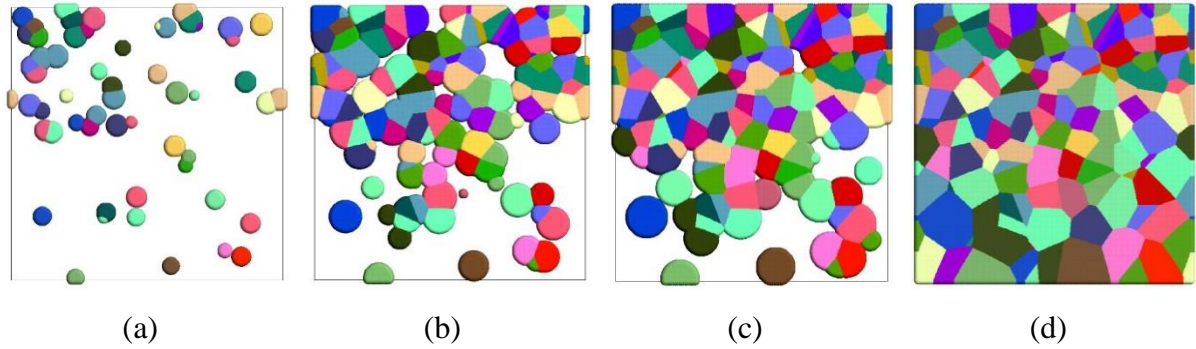


Figura 118 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.



Figura 119 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 120a é mostrada a cinética de transformação dos planos, i.e densidade média do volume versus tempo. A coordenada $x_3 = 0$ corresponde a parte inferior do volume da simulação, i. e o “espécime” enquanto $x_3 = 1$ corresponde à parte superior do espécime. Cada curva corresponde à cinética em um determinado ponto da amostra entre $x_3 = 0$ e $x_3 = 1$. Portanto, um plano com $x_3 = 0,9$ está próximo a parte superior, enquanto um plano com $x_3 = 0,1$ está próximo a parte inferior. Há um bom acordo com as equações analíticas. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 120b é apresentado o caminho microestrutural simulado dos planos, ou seja, L_A versus A_A . Através do caminho microestrutural [44] é possível perceber como ocorreu a evolução na formação das interfaces ao longo da transformação. O pico da curva indica a ocorrência do “*impingement*”, por isso que em seguida há uma redução de L_A . Neste caso,

apesar de haver um gradiente de velocidade ao longo de x_3 , se observa que a velocidade de crescimento não interfere no caminho percorrido pelas interfaces durante a evolução microestrutural. Os núcleos surgiram por saturação de sítios e a velocidade é constante no plano. As curvas dos planos de x_3 se mostraram simétricas, independente do plano em x_3 . Nesta figura, é possível ainda afirmar que o L_A máximo para cada plano em x_3 , aumenta de acordo com o aumento do N_V [45]. Esse fenômeno ocorre, devido a uma maior quantidade de áreas superficiais iniciais, quando se possui uma matriz com N_V maior em relação às demais. Como visto, os planos da parte superior como o plano 0,9 possui uma área superficial por unidade de área maior do que os planos da parte inferior como o plano 0,1. Isso também pode ser observado na Figura 119 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

Assim como na seção anterior de nucleação não homogênea e velocidade homogênea, é mostrado a contiguidade para o caso de nucleação não homogênea e velocidade não homogênea. A contiguidade caracteriza o arranjo espacial de duas fases, ou seja, mede diretamente a razão entre a densidade de comprimento interfacial entre as regiões transformadas e a densidade de comprimento interfacial total. Quando os núcleos estão de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson, existe uma expressão analítica para a contiguidade em função do volume transformado [41], [42]. A linha analítica é útil como uma linha de referência [43]. Através dessa linha, é possível mostrar os desvios da aleatoriedade dos núcleos dentro da matriz. No presente caso, quando se mede a contiguidade em um plano de x_3 , a contiguidade ajusta-se nessa linha de referência. Este resultado é independente do plano em x_3 . Na Figura 120c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . Este resultado, como será visto é independente da quantidade de núcleos e do gradiente de velocidade.

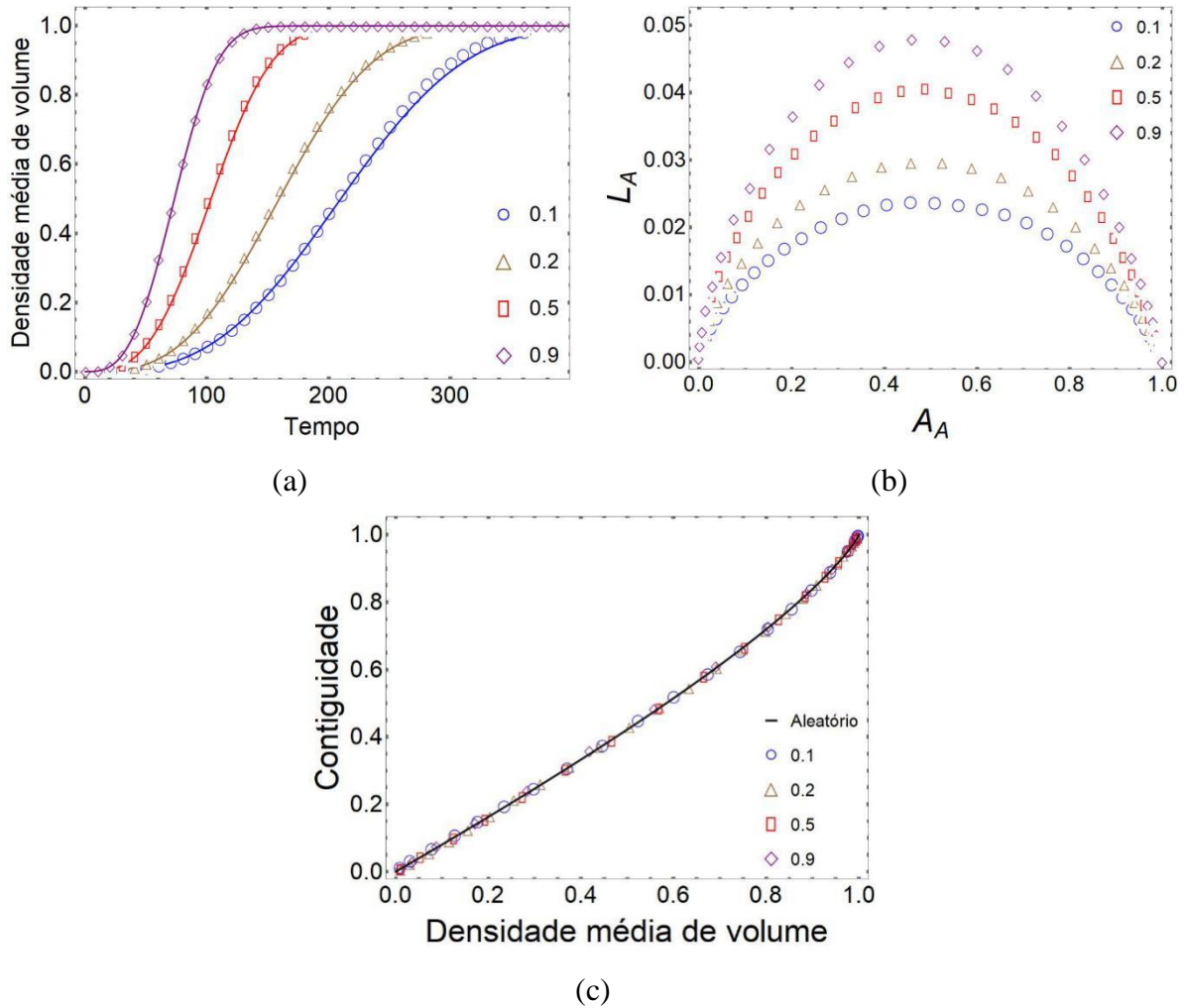


Figura 120 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade dos planos.

Nas Figura 121 e Figura 122 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 1200 núcleos e velocidade não homogênea com $G(x) = 0,3x + 0,2$. A inspeção visual mostra que nos grãos superiores são menores quando comparados aos grãos inferiores. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. O gradiente microestrutural é uma consequência do gradiente de núcleos e de velocidade: mais núcleos e maior velocidade na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos e menor velocidade na parte inferior resultam em grãos maiores. Essa diferença no tamanho de grão pode ser vista a partir do plano 0,5 na direção do gradiente aos planos inferiores. O gradiente de velocidade, por apresentar uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior que o caso anterior de $G(x) = 0,1x + 0,2$, já mostra uma maior percepção de curvatura nas interfaces. Isso

fica ainda mais claro quando é visto a Figura 123 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

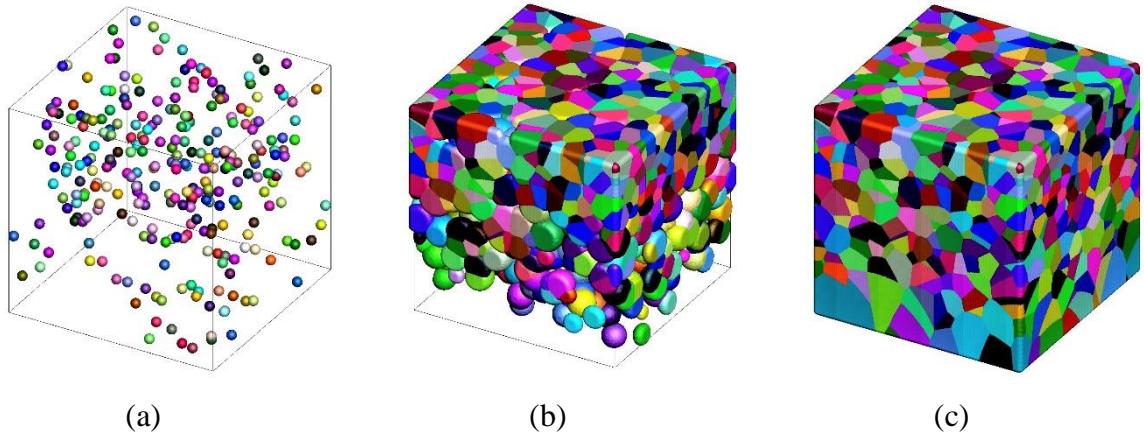


Figura 121 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

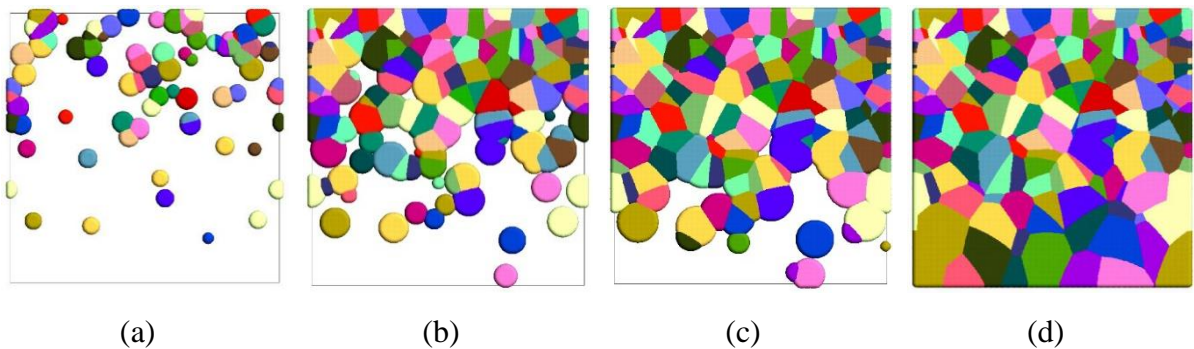


Figura 122 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G(x)=0,3x+0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.



Figura 123 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 124a é mostrada a cinética de transformação dos planos, i.e densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 124b é apresentado o caminho microestrutural simulado dos planos, ou seja, L_A versus A_A . Neste caso, apesar de haver um gradiente de velocidade ao longo de x_3 , se observa que a velocidade de crescimento não interfere no caminho percorrido pelas interfaces durante a evolução microestrutural. As curvas dos planos de x_3 se mostraram simétricas, independente do plano em x_3 . Nesta figura, é possível ainda afirmar que o L_A máximo para cada plano em x_3 , aumenta de acordo com o aumento do N_V . Como visto, os planos da parte superior como o plano 0,9 possui uma área superficial por unidade de área maior do que os planos da parte inferior como o plano 0,1. Isso também pode ser observado na Figura 123 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

Na Figura 124c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . Através da linha analítica determina-se os desvios da aleatoriedade dos núcleos dentro da matriz, ou seja, se os núcleos estão localizados na fase matriz de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson. No presente caso, quando se mede a contiguidade em um plano de x_3 , a contiguidade ajusta-se nessa linha de referência. Este resultado é independente do plano em x_3 .

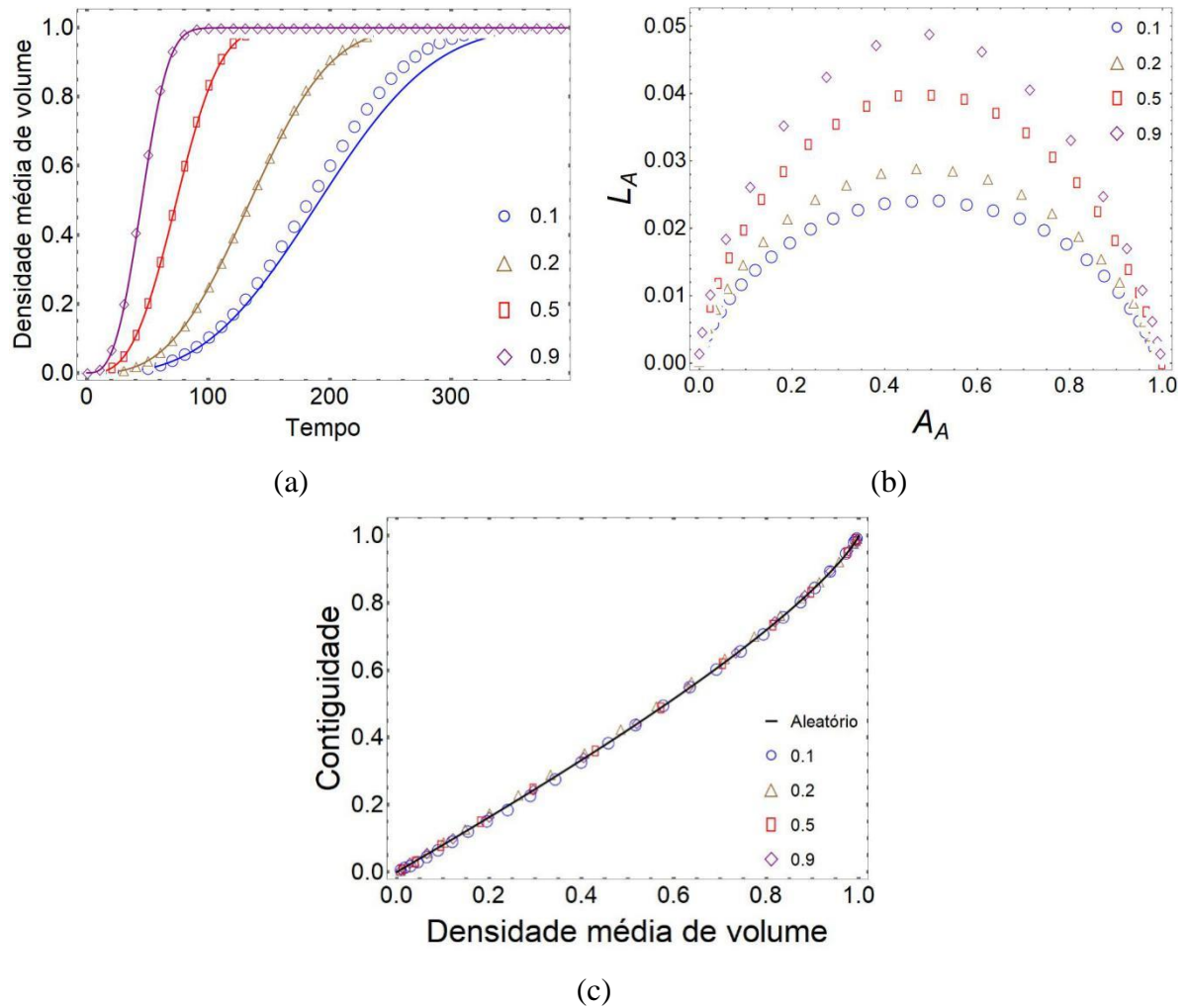


Figura 124 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade.

Nas Figura 125 e Figura 126 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 1200 núcleos e velocidade não homogênea com $G(x) = 1,0x + 0,2$. A inspeção visual mostra que nos grãos superiores são menores quando comparados aos grãos inferiores. O gradiente microestrutural é uma consequência do gradiente de núcleos e de velocidade: mais núcleos e maior velocidade na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos e menor velocidade na parte inferior resultam em grãos maiores. Entretanto, ao final da transformação os grãos apresentam-se “alongados” nos planos inferiores da matriz. Essa diferença no tamanho de grão pode ser vista entre os planos 0,5 e 0,3 na direção do gradiente aos planos inferiores. O gradiente de velocidade apresenta uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior que o caso anterior de $G(x) = 0,3x + 0,2$. A transformação

cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. Ao final da transformação os grãos de planos superiores crescem em direção a região de menor velocidade. Os grãos com velocidade mais alta, côncavos, tendem a “envolver” grãos com velocidade mais baixa, convexo, como é mostrado pelas diferenças evidentes nas interfaces. Isso fica ainda mais claro quando é visto a Figura 127 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

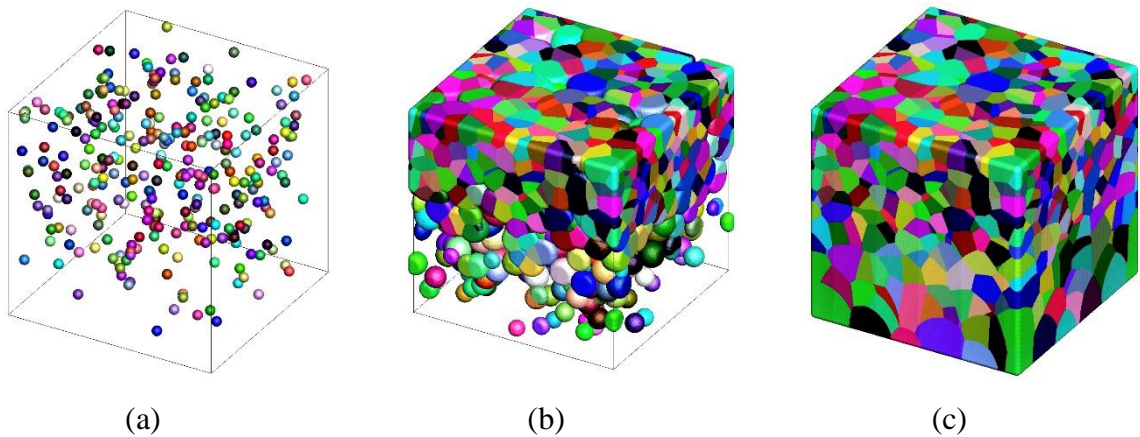


Figura 125 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

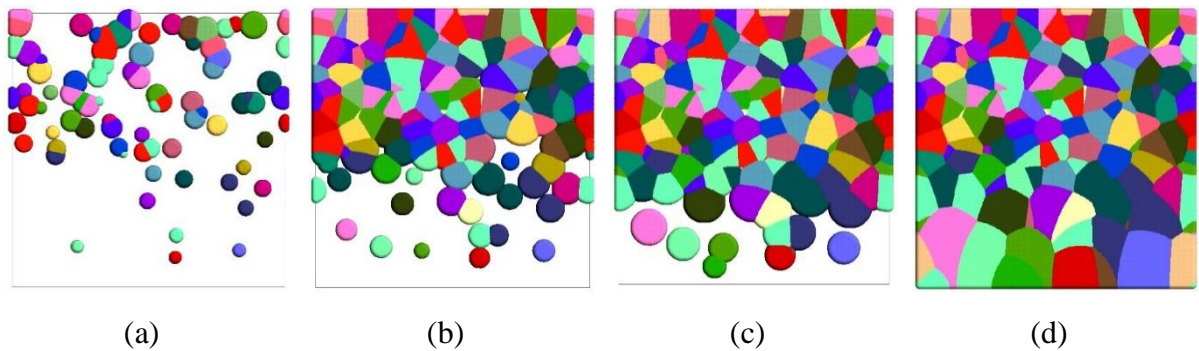


Figura 126 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

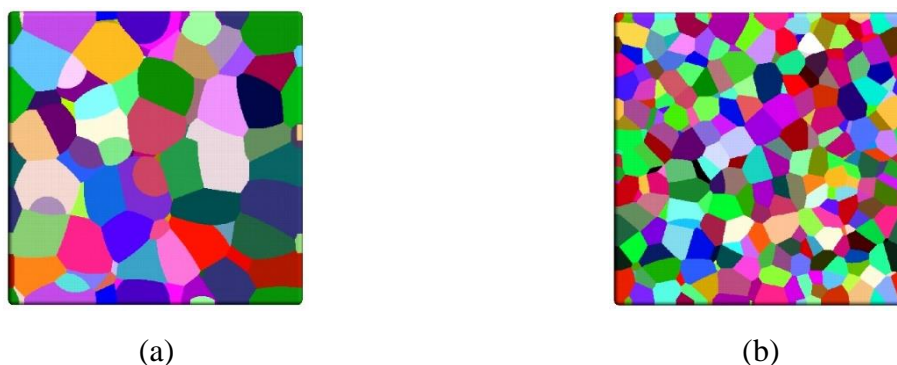


Figura 127 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 128a é mostrada a cinética de transformação dos planos, i.e densidade média do volume versus tempo. A figura mostra um desvio perceptível entre a simulação e o resultado analítico para o plano mais próximo de $x_3 = 0$, plano $x_3 = 0,1$. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 128b é apresentado o caminho microestrutural simulado dos planos, ou seja, L_A versus A_A . Neste caso, apesar de haver um gradiente de velocidade ao longo de x_3 , se observa que a velocidade de crescimento não interfere no caminho percorrido pelas interfaces durante a evolução microestrutural. As curvas dos planos de x_3 se mostraram simétricas, independente do plano em x_3 . Nesta figura, é possível ainda afirmar que o L_A máximo para cada plano em x_3 , aumenta de acordo com o aumento do N_V . Como visto, os planos da parte superior como o plano 0,9 possui uma área superficial por unidade de área maior do que os planos da parte inferior como o plano 0,1. Isso também pode ser observado na Figura 127 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

Na Figura 128c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . Através da linha analítica determina-se os desvios da aleatoriedade dos núcleos dentro da matriz, ou seja, se os núcleos estão localizados na fase matriz de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson. No presente caso, quando se mede a contiguidade em um plano de x_3 , a contiguidade ajusta-se nessa linha de referência. Este resultado é independente do plano em x_3 .

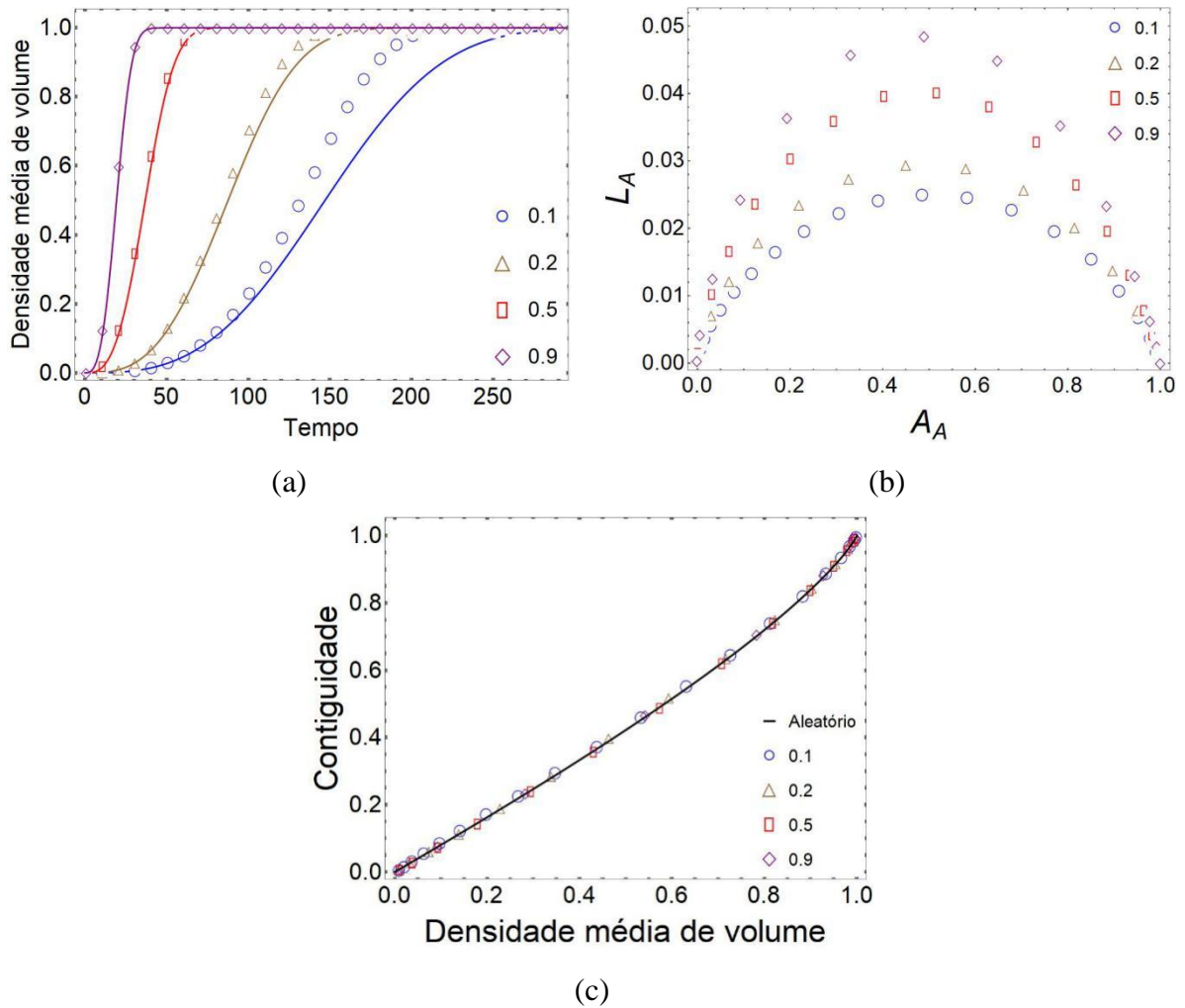


Figura 128 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 1200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade.

5.3.2 Nucleação e velocidade não homogêneas para 4800 núcleos

Nas Figura 129 e Figura 130 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 4800 núcleos e velocidade não homogênea com $G(x) = 0,1x + 0,2$. A inspeção visual mostra que nos grãos superiores são menores quando comparados aos grãos inferiores. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. O gradiente microestrutural é uma consequência do gradiente de núcleos e de velocidade: mais núcleos e maior velocidade na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos e menor velocidade na parte inferior resultam em grãos maiores. Essa diferença no tamanho de grão pode ser vista a

partir do plano 0,3 na direção do gradiente aos planos inferiores. Portanto, neste caso, a interpretação da microestrutura também é direta e relativamente fácil de entender. Como o gradiente de velocidade apresenta uma diferença de velocidade pequena entre o plano superior e inferior, os grãos mostram pouca percepção de curvatura nas interfaces. Isso fica ainda mais claro quando é visto a Figura 131 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

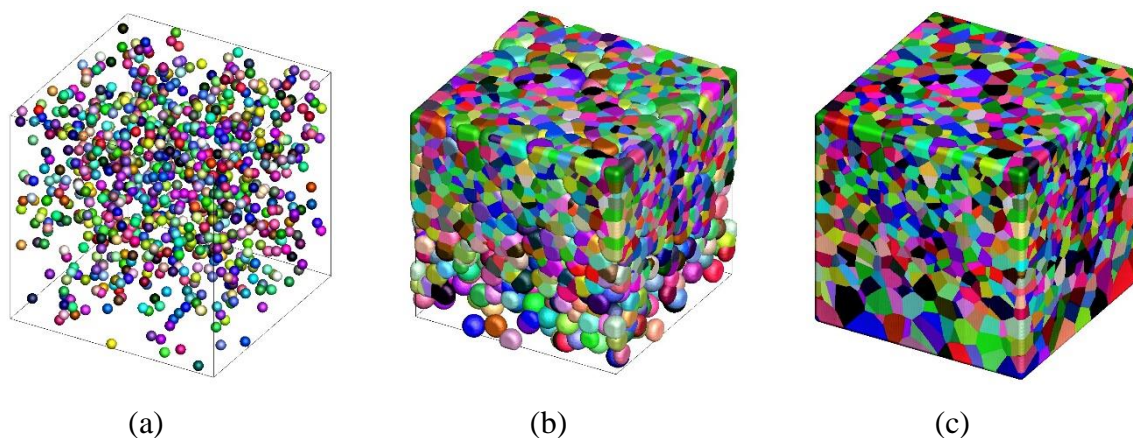


Figura 129 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

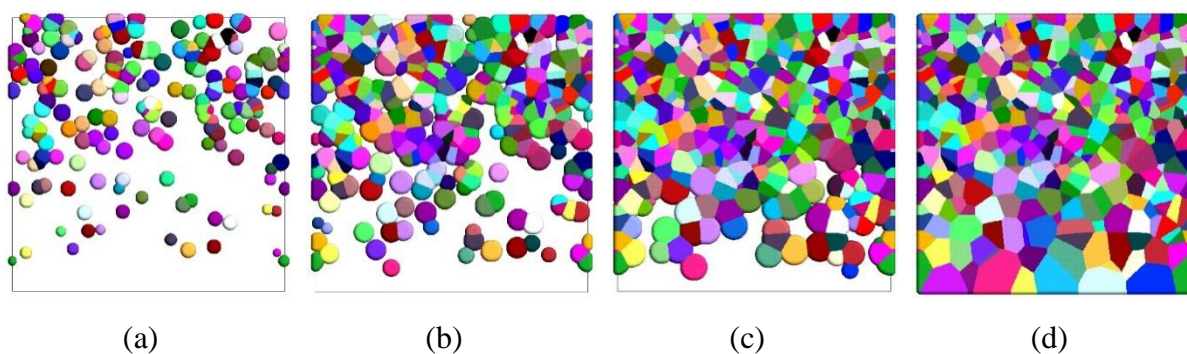


Figura 130 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

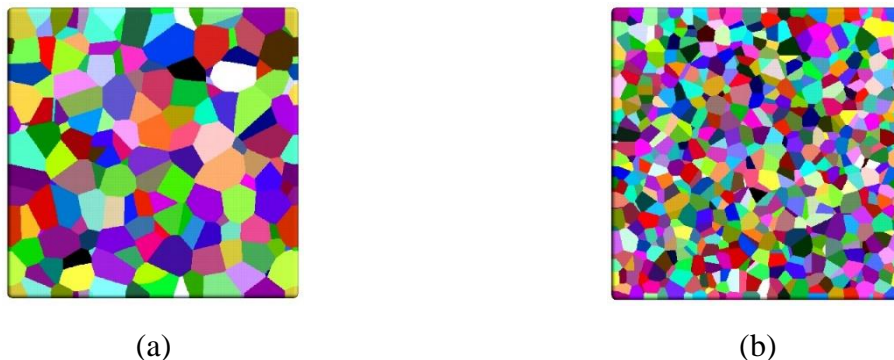


Figura 131 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 132a é mostrada a cinética de transformação dos planos, i.e densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 132b é apresentado o caminho microestrutural simulado dos planos, ou seja, L_A versus A_A . Neste caso, apesar de haver um gradiente de velocidade ao longo de x_3 , se observa que a velocidade de crescimento não interfere no caminho percorrido pelas interfaces durante a evolução microestrutural. As curvas dos planos de x_3 se mostraram simétricas, independente do plano em x_3 . Nesta figura, é possível ainda afirmar que o L_A máximo para cada plano em x_3 , aumenta de acordo com o aumento do N_V . Como visto, os planos da parte superior como o plano 0,9 possui uma área superficial por unidade de área maior do que os planos da parte inferior como o plano 0,1. Isso também pode ser observado na Figura 131 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

Na Figura 132c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . Através da linha analítica determina-se os desvios da aleatoriedade dos núcleos dentro da matriz, ou seja, se os núcleos estão localizados na fase matriz de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson. No presente caso, quando se mede a contiguidade em um plano de x_3 , a contiguidade ajusta-se nessa linha de referência. Este resultado é independente do plano em x_3 .

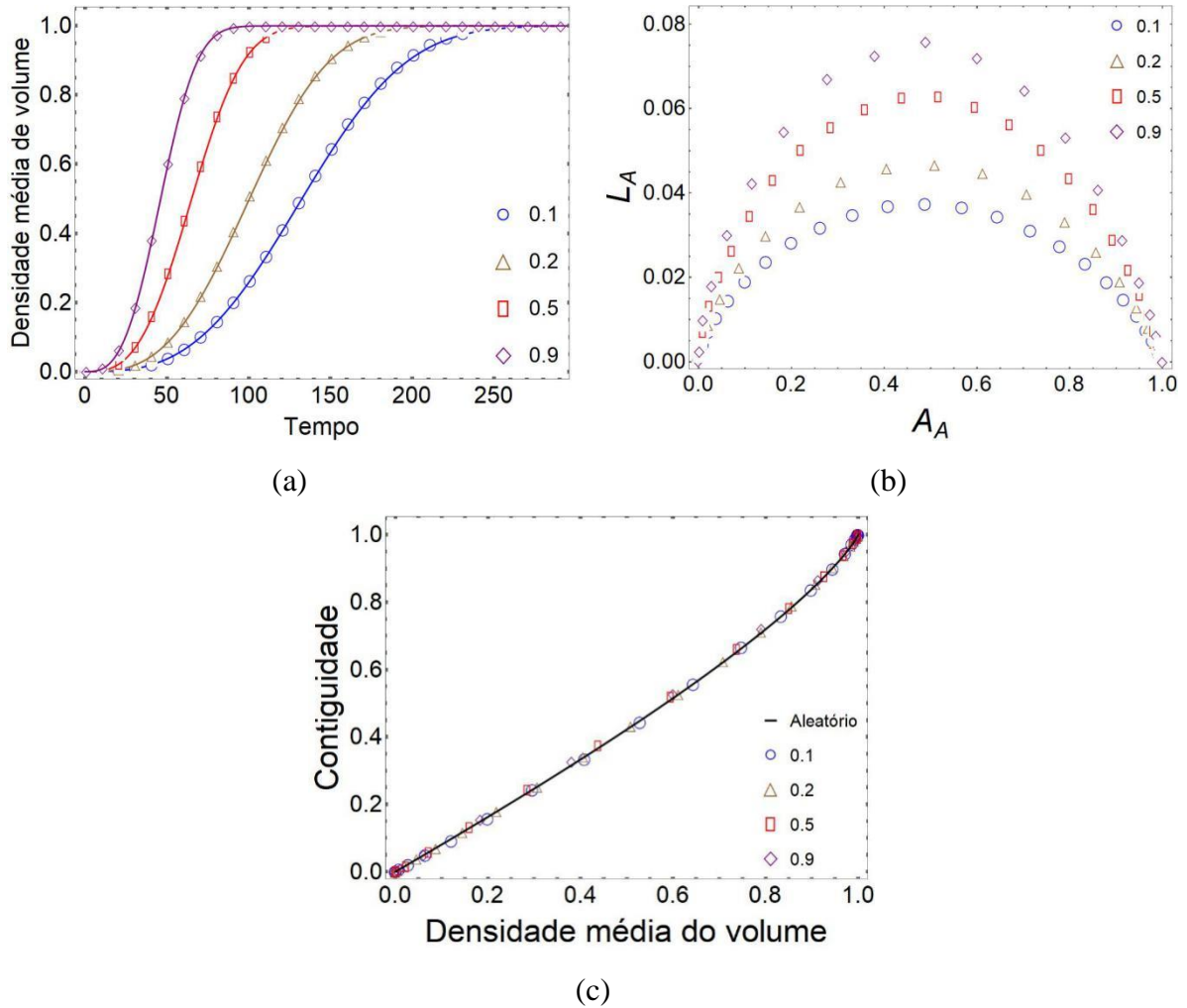


Figura 132 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade.

Nas Figura 133 e Figura 134 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 4800 núcleos e velocidade não homogênea com $G(x) = 0,3x + 0,2$. A inspeção visual mostra que nos grãos superiores são menores quando comparados aos grãos inferiores. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. O gradiente microestrutural é uma consequência do gradiente de núcleos e de velocidade: mais núcleos e maior velocidade na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos e menor velocidade na parte inferior resultam em grãos maiores. Essa diferença no tamanho de grão pode ser vista a partir do plano 0,3 na direção do gradiente aos planos inferiores. O gradiente de velocidade, por apresentar uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior que o caso anterior de $G(x) = 0,1x + 0,2$, já mostra uma maior percepção de curvatura nas interfaces. Isso

fica ainda mais claro quando é visto a Figura 135 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

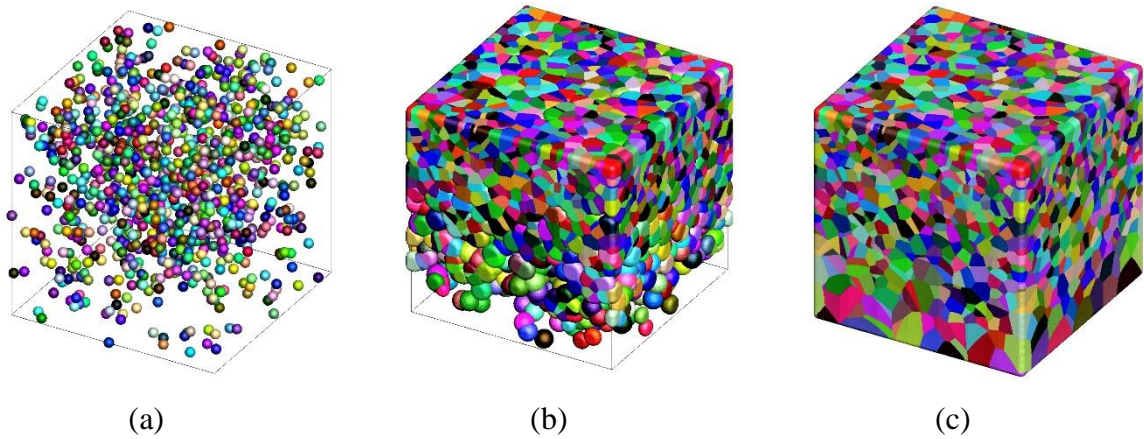


Figura 133 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

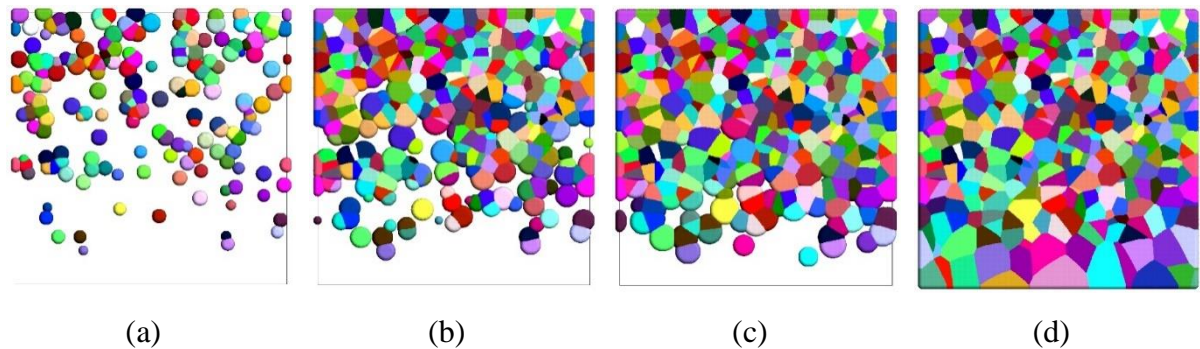


Figura 134 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.



Figura 135 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 136a é mostrada a cinética de transformação dos planos, i.e densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 136b é apresentado o caminho microestrutural simulado dos planos, ou seja, L_A versus A_A . Neste caso, apesar de haver um gradiente de velocidade ao longo de x_3 , se observa que a velocidade de crescimento não interfere no caminho percorrido pelas interfaces durante a evolução microestrutural. As curvas dos planos de x_3 se mostraram simétricas, independente do plano em x_3 . Nesta figura, é possível ainda afirmar que o L_A máximo para cada plano em x_3 , aumenta de acordo com o aumento do N_V . Como visto, os planos da parte superior como o plano 0,9 possui uma área superficial por unidade de área maior do que os planos da parte inferior como o plano 0,1. Isso também pode ser observado na Figura 135 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

Na Figura 136c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . Através da linha analítica determina-se os desvios da aleatoriedade dos núcleos dentro da matriz, ou seja, se os núcleos estão localizados na fase matriz de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson. No presente caso, quando se mede a contiguidade em um plano de x_3 , a contiguidade ajusta-se nessa linha de referência. Este resultado é independente do plano em x_3 .

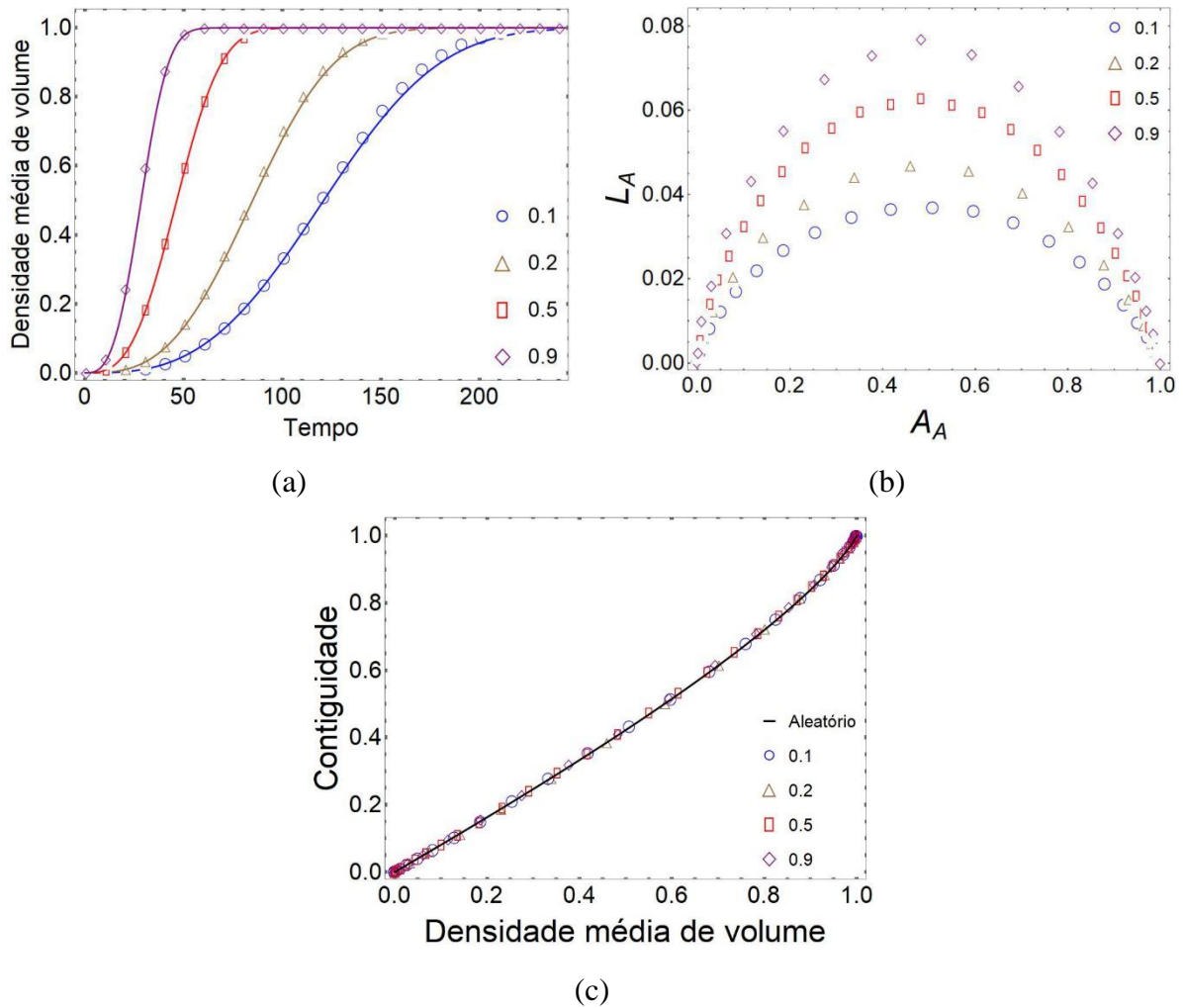


Figura 136 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade.

Nas Figura 137 e Figura 138 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 4800 núcleos e velocidade não homogênea com $G(x) = 1,0x + 0,2$. A inspeção visual mostra que nos grãos superiores são menores quando comparados aos grãos inferiores. O gradiente microestrutural é uma consequência do gradiente de núcleos e de velocidade: mais núcleos e maior velocidade na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos e menor velocidade na parte inferior resultam em grãos maiores. Entretanto, ao final da transformação os grãos apresentam-se “alongados” nos planos inferiores da matriz. Essa diferença no tamanho de grão pode ser vista a partir do plano 0,3 na direção do gradiente aos planos inferiores. O gradiente de velocidade apresenta uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior que o caso anterior de $G(x) = 0,3x + 0,2$. A transformação cessa na

parte superior bem antes que a parte inferior. Ao final da transformação os grãos de planos superiores crescem em direção a região de menor velocidade. Há diferenças evidentes nas interfaces. Os grãos com velocidade mais alta, côncavos, tendem a “envolver” grãos com velocidade mais baixa, convexo. Isso fica ainda mais claro quando é visto a Figura 139 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9. A diferença de tamanho de grão entre os planos é cada vez maior, devido ao aumento do número de núcleos.

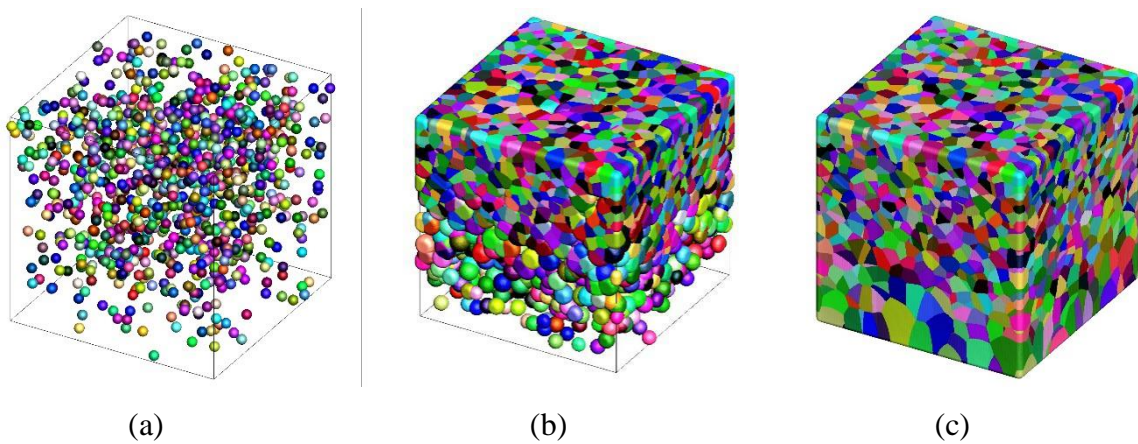


Figura 137 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

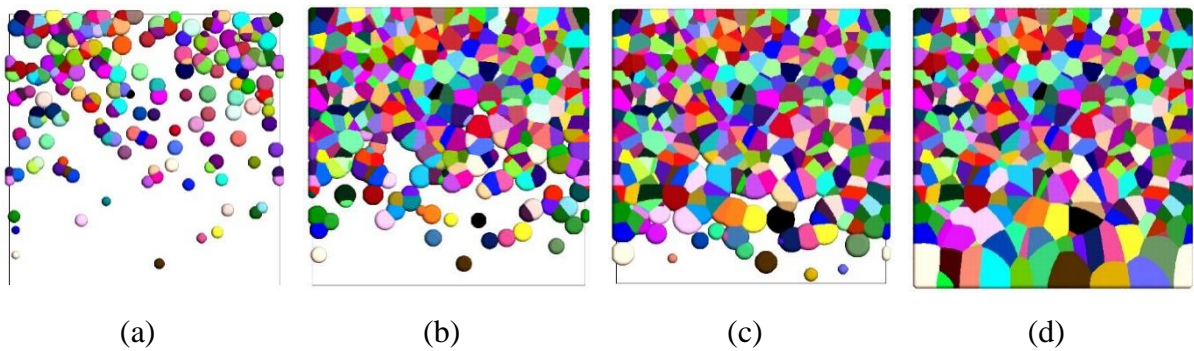


Figura 138 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

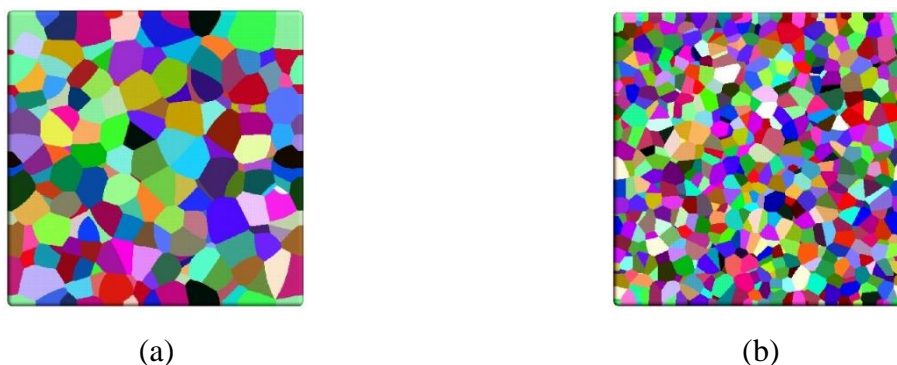


Figura 139 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 140a é mostrada a cinética de transformação dos planos, i.e densidade média do volume versus tempo. Nessa figura é mostrado um pequeno desvio entre a simulação e o resultado analítico para o plano mais próximo de $x_3 = 0$, plano $x_3 = 0,1$. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 140b é apresentado o caminho microestrutural simulado dos planos, ou seja, L_A versus A_A . Neste caso, apesar de haver um gradiente de velocidade ao longo de x_3 , se observa que a velocidade de crescimento não interfere no caminho percorrido pelas interfaces durante a evolução microestrutural. As curvas dos planos de x_3 se mostraram simétricas, independente do plano em x_3 . Nesta figura, é possível ainda afirmar que o L_A máximo para cada plano em x_3 , aumenta de acordo com o aumento do N_V . Como visto, os planos da parte superior como o plano 0,9 possui uma área superficial por unidade de área maior do que os planos da parte inferior como o plano 0,1. Isso também pode ser observado na Figura 139 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

Na Figura 140c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . Através da linha analítica determina-se os desvios da aleatoriedade dos núcleos dentro da matriz, ou seja, se os núcleos estão localizados na fase matriz de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson. No presente caso, quando se mede a contiguidade em um plano de x_3 , a contiguidade ajusta-se nessa linha de referência. Este resultado é independente do plano em x_3 .

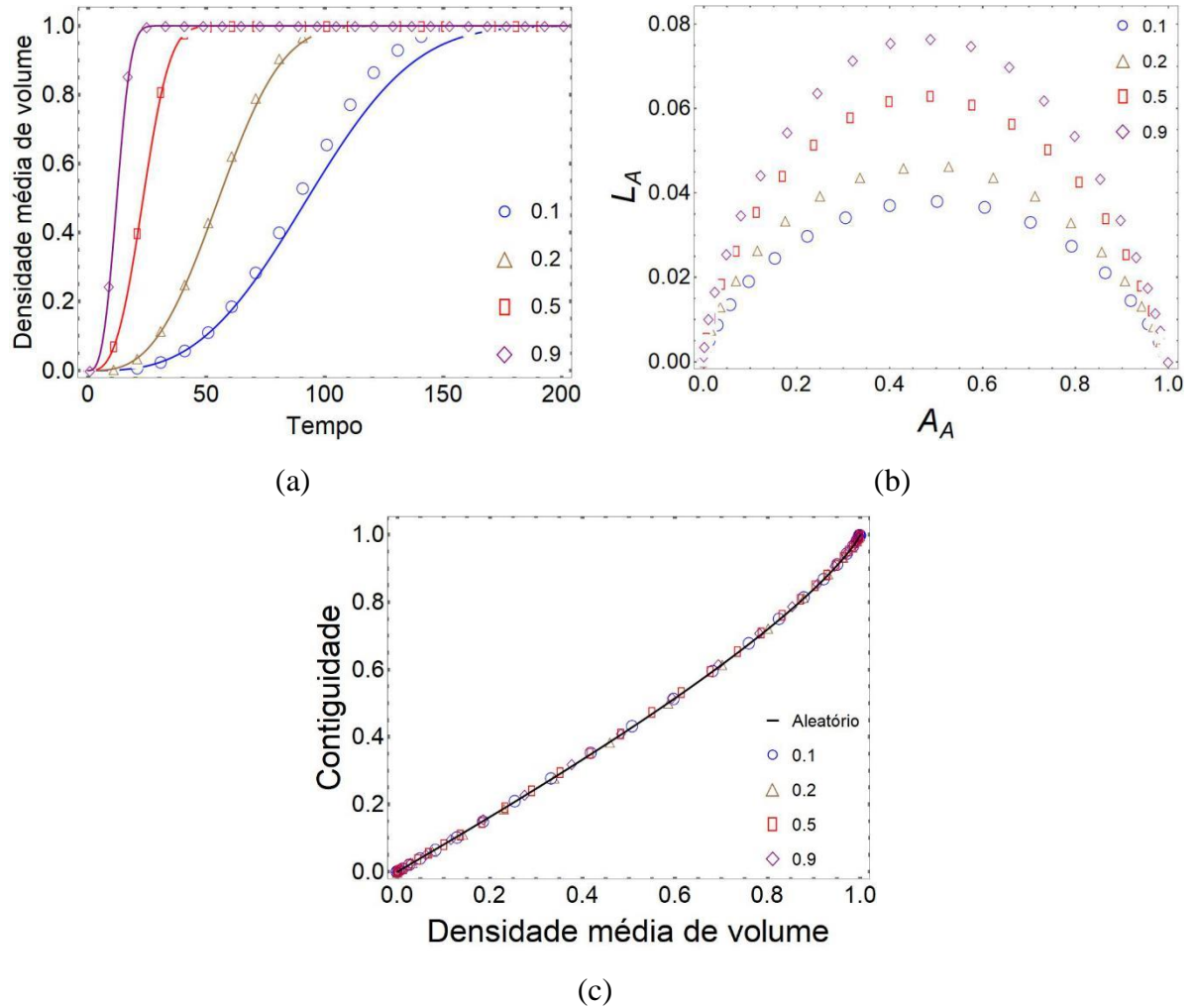


Figura 140 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 4800 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade.

5.3.3 Nucleação e velocidade não homogêneas para 19200 núcleos

Nas Figura 141 e Figura 142 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 19200 núcleos e velocidade não homogênea com $G(x) = 0,1x + 0,2$. A inspeção visual mostra que nos grãos superiores são menores quando comparados aos grãos inferiores. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. O gradiente microestrutural é uma consequência do gradiente de núcleos e de velocidade: mais núcleos e maior velocidade na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos e menor velocidade na parte inferior resultam em grãos maiores. Essa diferença no tamanho de grão pode ser vista

inicialmente entre os planos 0,3 e 0,1 até os planos inferiores, na direção do gradiente. Isso, porque a matriz apresenta mais núcleos. Portanto, neste caso, a interpretação da microestrutura também é direta e relativamente fácil de entender. Como o gradiente de velocidade apresenta uma diferença de velocidade pequena entre o plano superior e inferior, os grãos mostram pouca percepção de curvatura nas interfaces. Isso fica ainda mais claro quando é visto a Figura 143 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

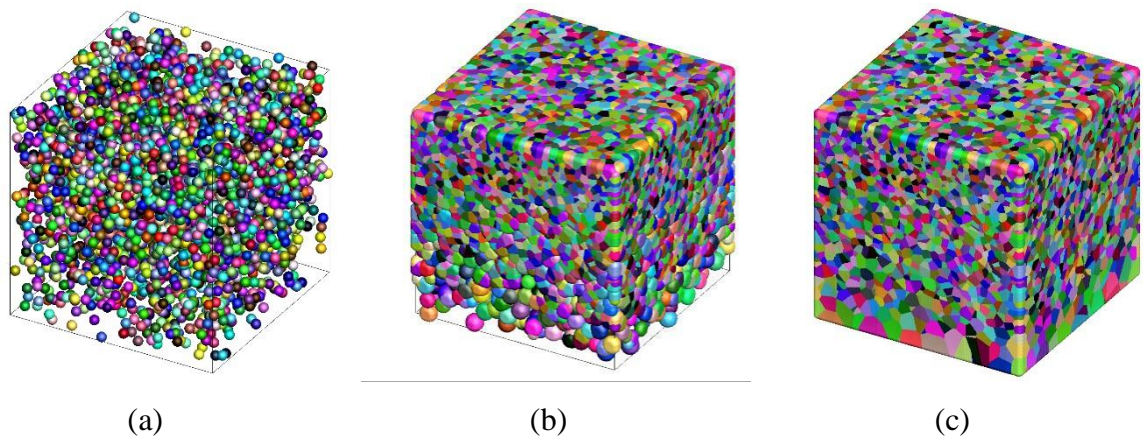


Figura 141 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

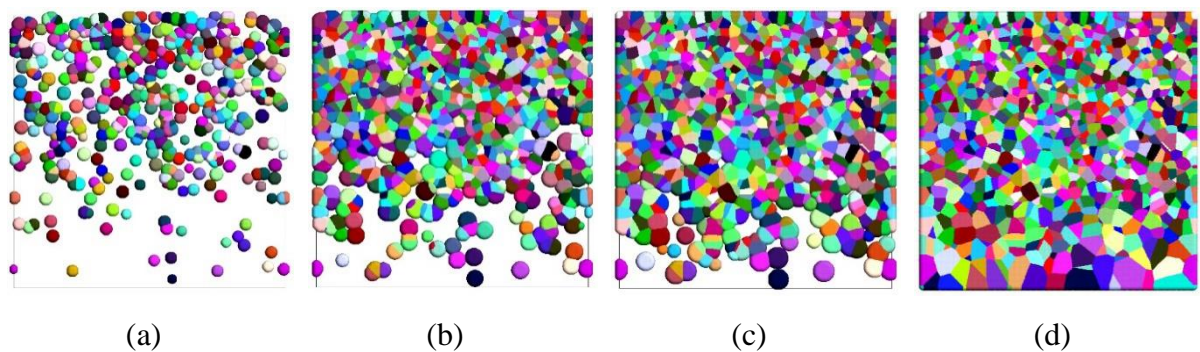


Figura 142 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.



Figura 143 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 144a é mostrada a cinética de transformação dos planos, i.e densidade média do volume versus tempo. Nesse caso, há um bom acordo com as equações analíticas. Apesar do menor gradiente de velocidade, a matriz apresenta-se mais saturada, por haver mais núcleos. Isso será discutido em breve. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 144b é apresentado o caminho microestrutural simulado dos planos, ou seja, L_A versus A_A . Neste caso, apesar de haver um gradiente de velocidade ao longo de x_3 , se observa que a velocidade de crescimento não interfere no caminho percorrido pelas interfaces durante a evolução microestrutural. As curvas dos planos de x_3 se mostraram simétricas, independente do plano em x_3 . Nesta figura, é possível ainda afirmar que o L_A máximo para cada plano em x_3 , aumenta de acordo com o aumento do N_V . Como visto, os planos da parte superior como o plano 0,9 possui uma área superficial por unidade de área maior do que os planos da parte inferior como o plano 0,1. Isso também pode ser observado na Figura 143 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

Na Figura 144c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . Através da linha analítica determina-se os desvios da aleatoriedade dos núcleos dentro da matriz, ou seja, se os núcleos estão localizados na fase matriz de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson. No presente caso, quando se mede a contiguidade em um plano de x_3 , a contiguidade ajusta-se nessa linha de referência. Este resultado é independente do plano em x_3 .

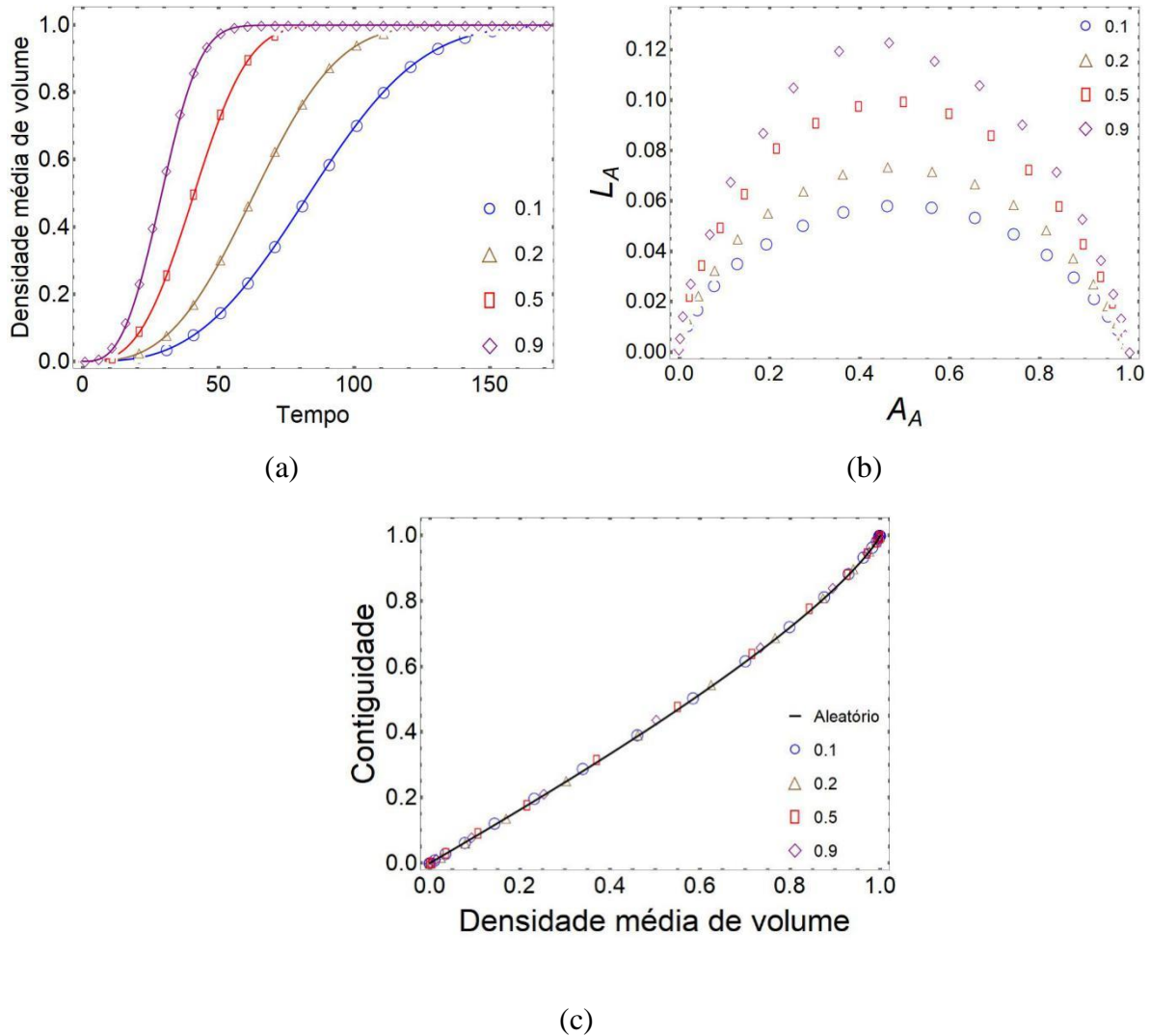


Figura 144 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 0,1x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade.

Nas Figura 145 e Figura 146 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 19200 núcleos e velocidade não homogênea com $G(x) = 0,3x + 0,2$. A inspeção visual mostra que nos grãos superiores são menores quando comparados aos grãos inferiores. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. O gradiente microestrutural é uma consequência do gradiente de núcleos e de velocidade: mais núcleos e maior velocidade na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos e menor velocidade na parte inferior resultam em grãos maiores. Essa diferença no tamanho de grão pode ser vista a partir do plano 0,3 na direção do gradiente aos planos inferiores. O gradiente de velocidade, por apresentar uma diferença de velocidade maior entre o plano superior e inferior que o caso

anterior de $G(x) = 0,1x + 0,2$, já mostra uma maior percepção de curvatura nas interfaces. Isso fica ainda mais claro quando é visto a Figura 147 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

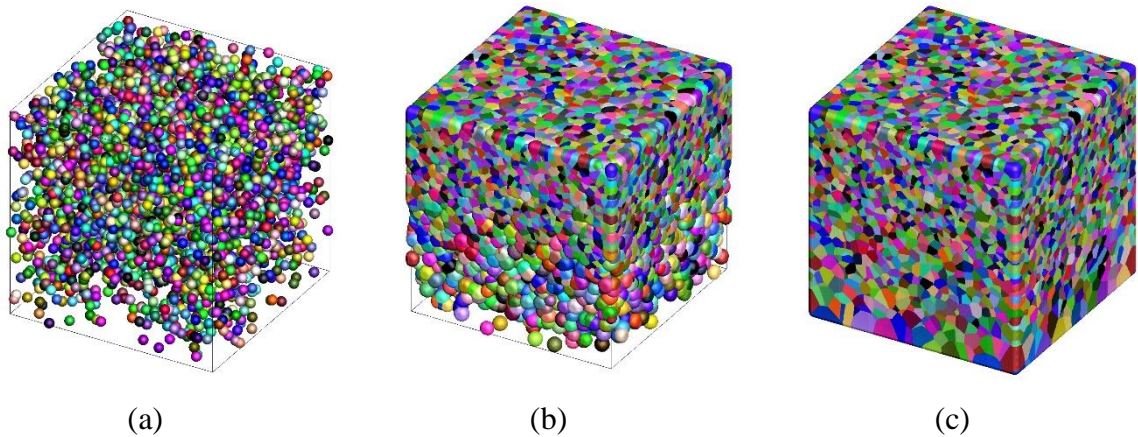


Figura 145 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

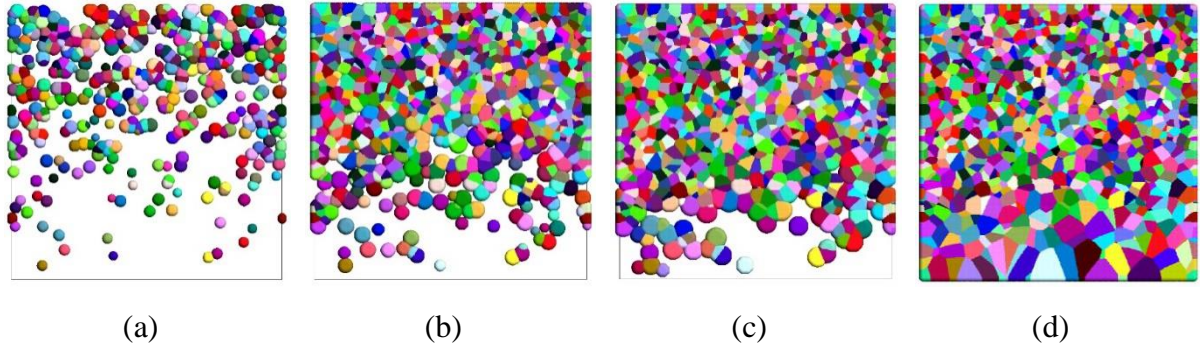


Figura 146 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.

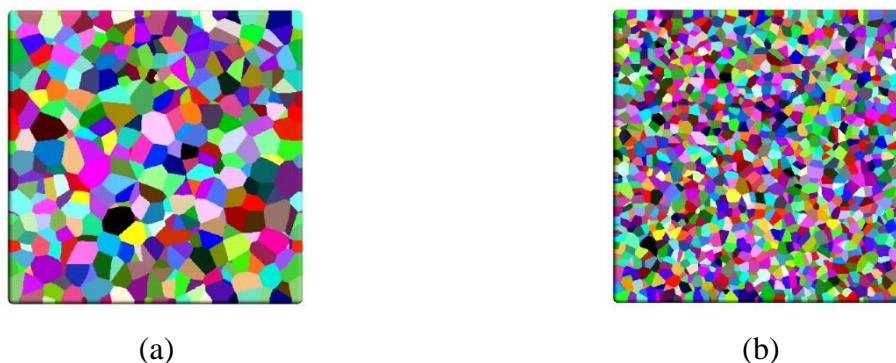


Figura 147 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 148a é mostrada a cinética de transformação dos planos, i.e densidade média do volume versus tempo. Há um bom acordo com as equações analíticas. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 148b é apresentado o caminho microestrutural simulado dos planos, ou seja, L_A versus A_A . Neste caso, apesar de haver um gradiente de velocidade ao longo de x_3 , se observa que a velocidade de crescimento não interfere no caminho percorrido pelas interfaces durante a evolução microestrutural. As curvas dos planos de x_3 se mostraram simétricas, independente do plano em x_3 . Nesta figura, é possível ainda afirmar que o L_A máximo para cada plano em x_3 , aumenta de acordo com o aumento do N_V . Como visto, os planos da parte superior como o plano 0,9 possui uma área superficial por unidade de área maior do que os planos da parte inferior como o plano 0,1. Isso também pode ser observado na Figura 147 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

Na Figura 148c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . Através da linha analítica determina-se os desvios da aleatoriedade dos núcleos dentro da matriz, ou seja, se os núcleos estão localizados na fase matriz de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson. No presente caso, quando se mede a contiguidade em um plano de x_3 , a contiguidade ajusta-se nessa linha de referência. Este resultado é independente do plano em x_3 .

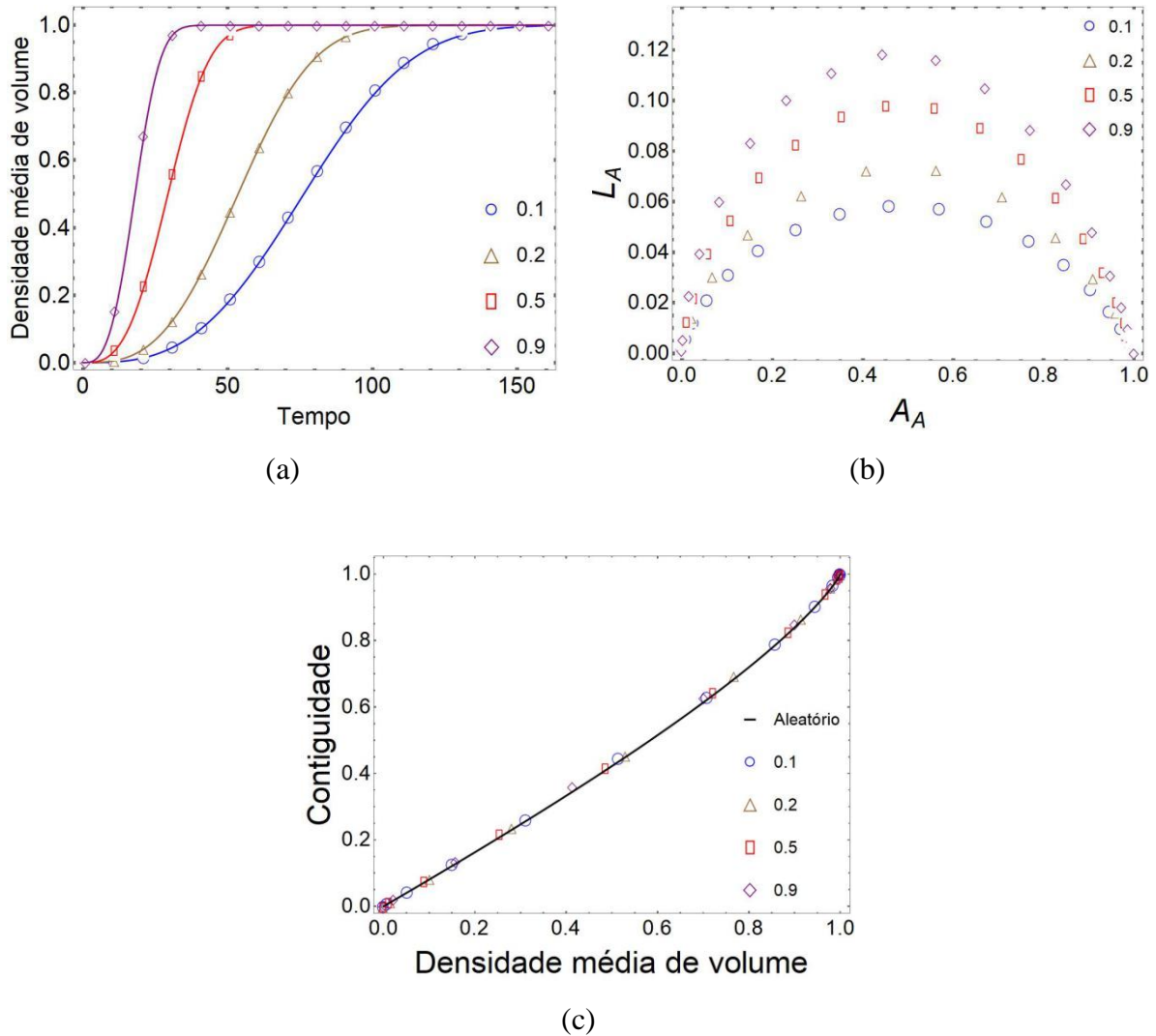


Figura 148 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 0,3x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade.

Nas Figura 149 e Figura 150 são mostrados a representação em 3D e 2D, respectivamente, da evolução microestrutural para nucleação não homogênea para 19200 núcleos e velocidade não homogênea com $G(x) = 1,0x + 0,2$. A inspeção visual mostra que nos grãos superiores são menores quando comparados aos grãos inferiores. O gradiente microestrutural é uma consequência do gradiente de núcleos e de velocidade: mais núcleos e maior velocidade na parte superior resultam em grãos pequenos, enquanto menos núcleos e menor velocidade na parte inferior resultam em grãos maiores. Entretanto, ao final da transformação os grãos apresentam-se “alongados” nos planos inferiores da matriz. Essa diferença no tamanho de grão pode ser vista inicialmente entre os planos 0,3 e 0,1 até os planos inferiores, na direção do gradiente. O gradiente de velocidade apresenta uma diferença de

velocidade bem maior entre o plano superior e inferior que o caso anterior de $G(x) = 0,3x + 0,2$. A transformação cessa na parte superior bem antes que a parte inferior. Ao final da transformação os grãos de planos superiores crescem em direção a região de menor velocidade. Há diferenças evidentes nas interfaces. Os grãos com velocidade mais alta, côncavos, tendem a “envolver” grãos com velocidade mais baixa, convexo. Isso fica ainda mais claro quando é visto a Figura 151 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9. A diferença de tamanho de grão entre os planos é cada vez maior, devido ao aumento do número de núcleos.

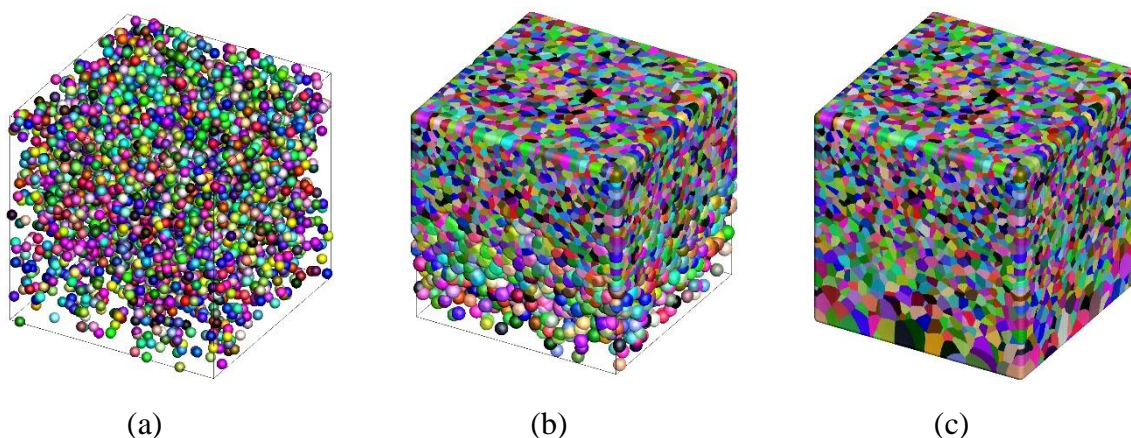


Figura 149 - Representação em 3D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) inicial, (b) 50%, (c) 100% de transformação.

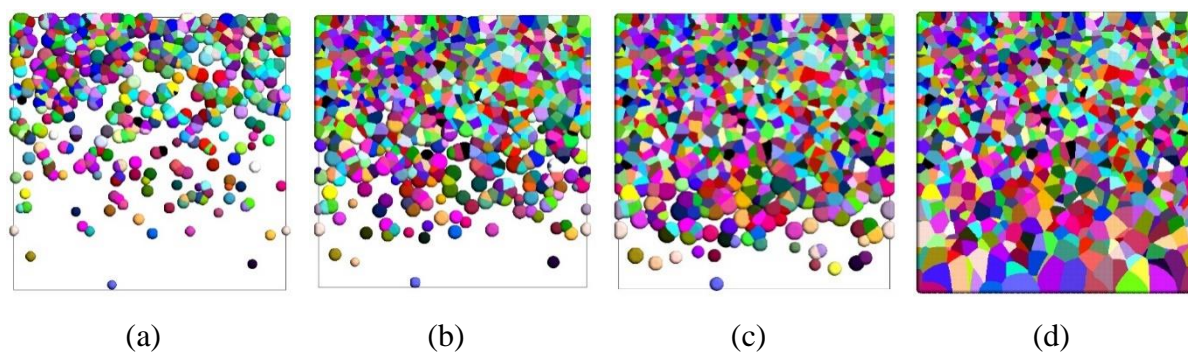


Figura 150 - Representação em 2D da evolução microestrutural de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) 10%, (b) 50%, (c) 70% e (d) 100% de transformação.



Figura 151 - Representação em 2D do plano x_1x_2 , perpendicular ao eixo do gradiente x_3 , de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$: (a) Plano 0,1, (b) Plano 0,9.

Na Figura 152a é mostrada a cinética de transformação dos planos, i.e densidade média do volume versus tempo. A figura mostra um desvio perceptível entre a simulação e o resultado analítico para o plano mais próximo de $x_3 = 0$, plano $x_3 = 0,1$. A cinética, i. e a densidade do volume médio em relação ao tempo é mais lenta na parte inferior do que na parte superior.

Na Figura 152b é apresentado o caminho microestrutural simulado dos planos, ou seja, L_A versus A_A . Neste caso, apesar de haver um gradiente de velocidade ao longo de x_3 , se observa que a velocidade de crescimento não interfere no caminho percorrido pelas interfaces durante a evolução microestrutural. As curvas dos planos de x_3 se mostraram simétricas, independente do plano em x_3 . Nesta figura, é possível ainda afirmar que o L_A máximo para cada plano em x_3 , aumenta de acordo com o aumento do N_V . Como visto, os planos da parte superior como o plano 0,9 possui uma área superficial por unidade de área maior do que os planos da parte inferior como o plano 0,1. Isso também pode ser observado na Figura 151 que mostra a seção em 2D dos planos 0,1 e 0,9.

Na Figura 152c é mostrado a curva de Contiguidade versus V_V . Através da linha analítica determina-se os desvios da aleatoriedade dos núcleos dentro da matriz, ou seja, se os núcleos estão localizados na fase matriz de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson. No presente caso, quando se mede a contiguidade em um plano de x_3 , a contiguidade ajusta-se nessa linha de referência. Este resultado é independente do plano em x_3 .

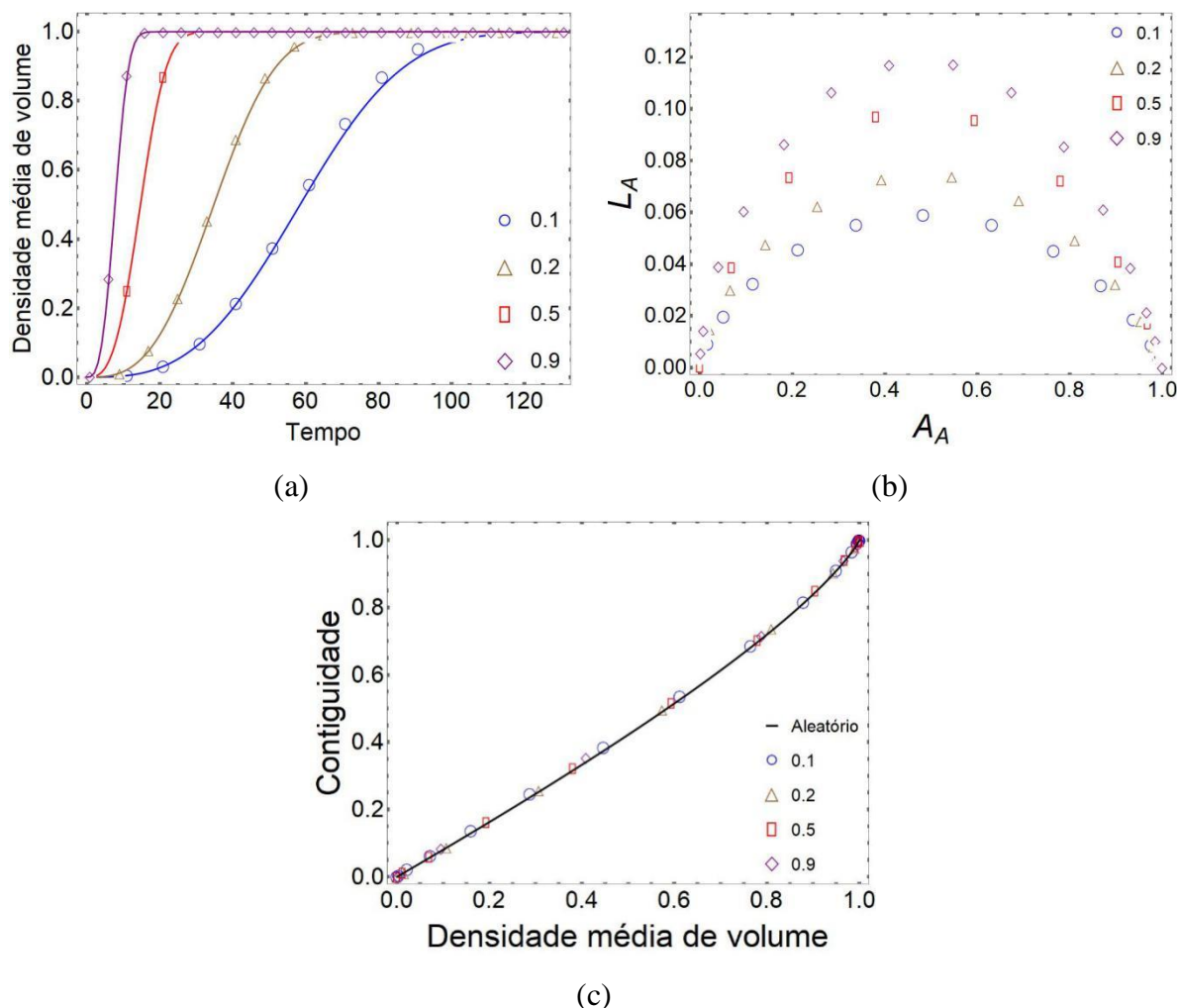


Figura 152 - Resultados de transformações com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para 19200 núcleos e $G(x) = 1,0x + 0,2$. (a) V_V versus tempo, (b) Caminho Microestrutural dos planos, (c) Contiguidade.

Na maioria dos casos, o acordo entre a solução analítica e a simulação por computador é excelente. A exceção é a Figura 128a que descreve um desvio perceptível entre a simulação e o resultado analítico para o plano mais próximo de $x_3 = 0$, plano $x_3 = 0,1$. Um desvio menor também é observado na Figura 140a. As figuras de cinética da transformação mostram que a concordância entre simulação por computador e solução analítica melhora para gradientes de velocidade mais baixos e um número maior de núcleos.

Aqui é discutido a validade da metodologia de simulação. As figuras de cinética da transformação ilustram este ponto. A simulação concorda muito bem com a teoria, exceto pelo menor número de núcleos e para planos localizada perto da parte inferior do volume da simulação, Figura 128a e Figura 140a. O plano $x_3 = 0,1$ é o plano que está em uma região que possui um pequeno número de núcleos. Portanto, o resultado sugere que, para uma menor

quantidade de núcleos e um gradiente de alta velocidade, a simulação não funciona tão bem. Uma razão provável para isso é que, para um pequeno número de núcleos ou distâncias grandes de núcleos a núcleos, a região de alta velocidade pode ignorar a região de menor velocidade. Portanto, se a simulação considerar o menor tempo para o “núcleo X”, a região de alta velocidade pode ter um tempo menor, mas, devido à necessidade de ignorar uma região transformada à sua frente, pode demorar mais tempo para chegar do que outra região. Além disso, com menos núcleos na parte inferior, a cinética de transformação desse plano acaba dependendo dos núcleos que crescem em direção a esse plano inferior. Qualquer que seja o motivo, o ponto é que, quando a simulação e a solução analítica concordam, é possível confiar na simulação por computador.

Recorda-se o argumento feito em um trabalho anterior a respeito do efeito de um gradiente de velocidade na heterogeneidade microestrutural [11]. A falta de homogeneidade microestrutural produzida por uma velocidade não homogênea depende do número de núcleos e não apenas do próprio gradiente.

Um experimento mental pode esclarecer esse ponto. Considere uma situação em que um tenha apenas dois núcleos, um localizado em $x_3 = 0,75$ e outro em $x_3 = 0,25$ ao longo do eixo central do volume da simulação. Suponha que a velocidade de crescimento da região transformada nucleada em $x_3 = 0,75$ seja três vezes a velocidade de crescimento da região nucleada em $x_3 = 0,25$. Assim, o grão resultante do núcleo em $x_3 = 0,75$ será muito maior que o grão resultante do núcleo em $x_3 = 0,25$. Nesse caso, a falta de homogeneidade microestrutural causada pela diferença de velocidade será alta.

Considere uma situação em que um tenha apenas dois núcleos, um localizado no $x_3 = 0,75$ e outro no $x_3 = 0,25$ ao longo do eixo central do volume da simulação. Suponha que a velocidade de crescimento da região transformada nucleada em $x_3 = 0,75$ seja três vezes a velocidade de crescimento da região nucleada em $x_3 = 0,25$. Além disso, suponha que a velocidade de crescimento da região transformada nucleada em $x_3 = 0,50$ seja duas vezes a velocidade de crescimento da região nucleada em $x_3 = 0,75$. Nesta situação, a presença da região transformada nucleada em $x_3 = 0,50$ inibirá o crescimento da região transformada nucleada em $x_3 = 0,25$. Consequentemente, o grão resultante do núcleo em $x_3 = 0,75$ não será muito maior que o grão resultante do núcleo em $x_3 = 0,25$, como no caso anterior. Em outras palavras, a não homogeneidade microestrutural será menos grave.

Pode-se continuar adicionando núcleos. Para um número alto de núcleos, é razoável esperar que a falta de homogeneidade devido a um gradiente de velocidade seja pequena. Esse

comportamento também foi para nucleação homogênea e velocidade não homogênea [11], onde os núcleos eram uniformes localizados aleatoriamente dentro da matriz. Uma situação análoga ocorre aqui, mesmo que se tenha núcleos localizados de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo. Para o número de núcleos usados aqui 1200, 4800 e 19200, o efeito do gradiente de velocidade na microestrutura final foi pequeno. Para relacionar esses números a aplicações práticas, pode-se considerar que a aresta do cubo de simulação tem 1 mm. Supondo que os grãos sejam esféricos com raio R , o volume é $\frac{4\pi R^3}{3}$. O tamanho do grão (comprimento médio de interceptação) é $\frac{4R}{3}$. Portanto, os tamanhos médios de grãos na simulação variam de cerca de 60 μm (para 1200 núcleos) a 20 μm (para 19200 núcleos). Esse intervalo é um intervalo prático típico de tamanhos de grãos. Se o número de núcleos for aumentado ainda mais, obteremos tamanhos de grãos ainda menores, e a tendência indica que a simulação e a solução analítica continuarão a concordar.

5.4 COMPARAÇÃO ENTRE AS TRANSFORMAÇÕES COM NUCLEAÇÃO NÃO HOMOGÊNEA E VELOCIDADE NÃO HOMOGÊNEA COM NUCLEAÇÃO NÃO HOMOGÊNEA E VELOCIDADE HOMOGÊNEA

5.4.1 Microestrutura

Por questão de falta de proximidade, as figuras de microestruturas são repetidas aqui com o intuito de facilitar a visualização. O número total de núcleos foi o mesmo em ambos os casos: 4800. Na Figura 153 é mostrado para a maior velocidade simuladas aqui, mas os resultados foram semelhantes para as velocidades mais baixas.



Figura 153 - Representação 2D que mostra a microestrutura simulada com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea. Velocidade constante e gradiente de velocidade foram comparados. (a) $G = 0,70$; (b) $G(x) = 1,0x + 0,2$ para 4800 núcleos. O tamanho final do grão é menor na parte superior do que na parte inferior nos dois casos.

Por inspeção visual, é difícil detectar uma diferença entre as Figura 153a e 153b, assim como a microestrutura em 3D. Eles parecem semelhantes, sugerindo assim que o efeito de um gradiente de velocidade na microestrutura totalmente transformada não é substancial.

No entanto, as microestruturas fornecem "pistas" para distinguir entre elas. Na Figura 153a, pode-se ver que os limites dos grãos são retos. Os limites de grão retos são típicos de transformações saturadas por local. Por outro lado, na Figura 153b é mostrado os limites de grãos curvos. Esse efeito semelhante é encontrado em trabalho anterior [11]. Nesse trabalho, apenas a combinação de gradiente de velocidade e nucleação aleatória uniforme foi estudada. O gradiente de velocidade resulta em um limite curvo porque, quando as regiões transformadas colidem, a região de crescimento mais rápido tende a envolver a região de crescimento mais lento.

Outra diferença visual, mais sutil, é que os grãos inferiores na Figura 153b parecem ser mais alongados do que os grãos inferiores da Figura 153a.

Portanto, quando se compara as microestruturas saturadas do local lado a lado, a existência de limites curvos é uma indicação de que um gradiente de velocidade pode estar envolvido.

Nas Figura 154 e Figura 155 são mostradas a evolução microestrutural na primeira metade da transformação para velocidade constante e um gradiente de velocidade. As frações de volume transformadas em todo o volume de simulação são indicadas.

A discrepância entre as Figura 154 e Figura 155 é impressionante. O gradiente de velocidade produz microestruturas nas quais há mais transformação no topo do que na base quando comparado com as microestruturas geradas por velocidade constante.

Consequentemente, mesmo que as microestruturas totalmente transformadas são semelhantes, as microestruturas divergem durante a transformação.

Desta forma, para ambos os casos em que a nucleação é não homogênea, mas com velocidades com gradiente ou constante foi observado uma falta de homogeneidade microestrutural. Embora a diferença entre as microestruturas finais não tenha sido significativa, há um ponto que pode ser usado para distingui-las. Como mencionado anteriormente, os limites de grão são retos quando a velocidade é constante, mas são curvos quando há um gradiente de velocidade, como pode ser visto, nas Figura 153a e 153b.

Com base nos resultados, um gradiente de velocidade não parece ter uma influência considerável sobre a microestrutura final. Por outro lado, um gradiente de velocidade tem um efeito substancial na cinética microestrutural da evolução e transformação. Nas Figura 154 e Figura 155 são ilustrados o efeito de um gradiente de velocidade na evolução microestrutural. Quando um gradiente de velocidade está presente, a transformação na parte superior é mais rápida que na parte inferior. Por outro lado, para velocidade constante, a transformação é mais uniforme. Observe que a falta de homogeneidade se deve ao fato de os núcleos subjacentes estarem localizados de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo.

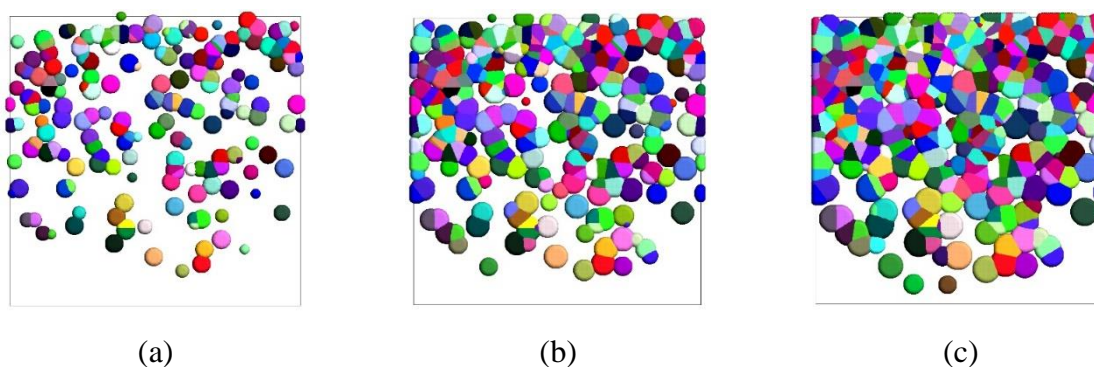


Figura 154 - Seção 2D mostrando a evolução microestrutural durante a transformação: esquerda $V_V(t) = 0,1$, meio $V_V(t) = 0,3$, direita $V_V(t) = 0,5$. A velocidade foi constante igual a 0,7 e o número de núcleos de 4800.

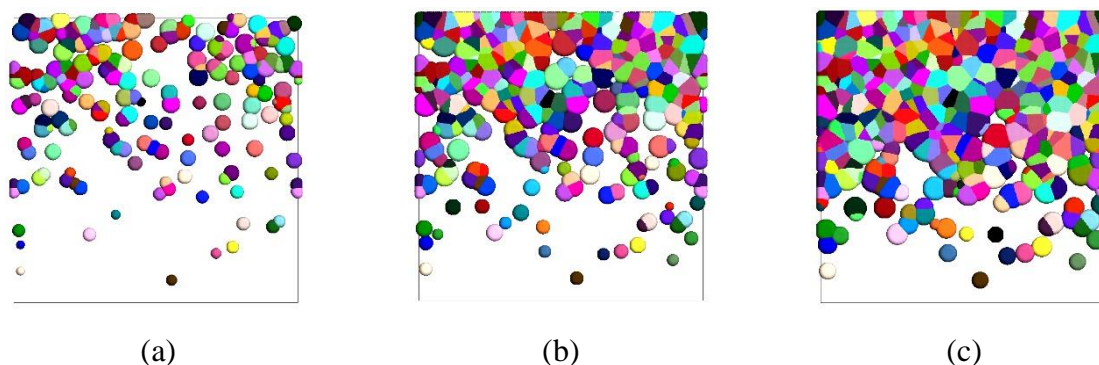


Figura 155 - Seção 2D mostrando a evolução microestrutural durante a transformação: esquerda $V_V(t) = 0,1$, meio $V_V(t) = 0,3$, direita $V_V(t) = 0,5$. O gradiente de velocidade foi igual a $G(x) = 1,0x + 0,2$ e o número de núcleos de 4800.

Uma outra análise sobre a microestrutura é comparar o tamanho de grão ou comprimento médio de interceptação dos grãos medido em cada plano x_3 , planos 0,1, 0,3, 0,5, 0,7 e 0,9, quando a transformação ocorre com uma velocidade constante ou com um gradiente de velocidade. Nas Figura 156, Figura 157 e Figura 158 são apresentadas uma pequena diferença que há entre os tamanhos de grão de cada plano na microestrutura totalmente transformada. Isso reforça a semelhança das microestruturas totalmente transformadas já detectadas por inspeção visual nas Figura 153a e Figura 153b.

Os resultados são notavelmente semelhantes para o gradiente de velocidade e velocidade constante. O tamanho do grão para um gradiente de velocidade é ligeiramente maior que o tamanho do grão para uma velocidade constante no plano mais próximo do plano $x_3 = 0$, plano $x_3 = 0,1$. Entretanto, à medida que aumenta o número de núcleos, essa diferença de tamanho de grão nos planos inferiores, $x_3 = 0,1$, é cada vez menor.

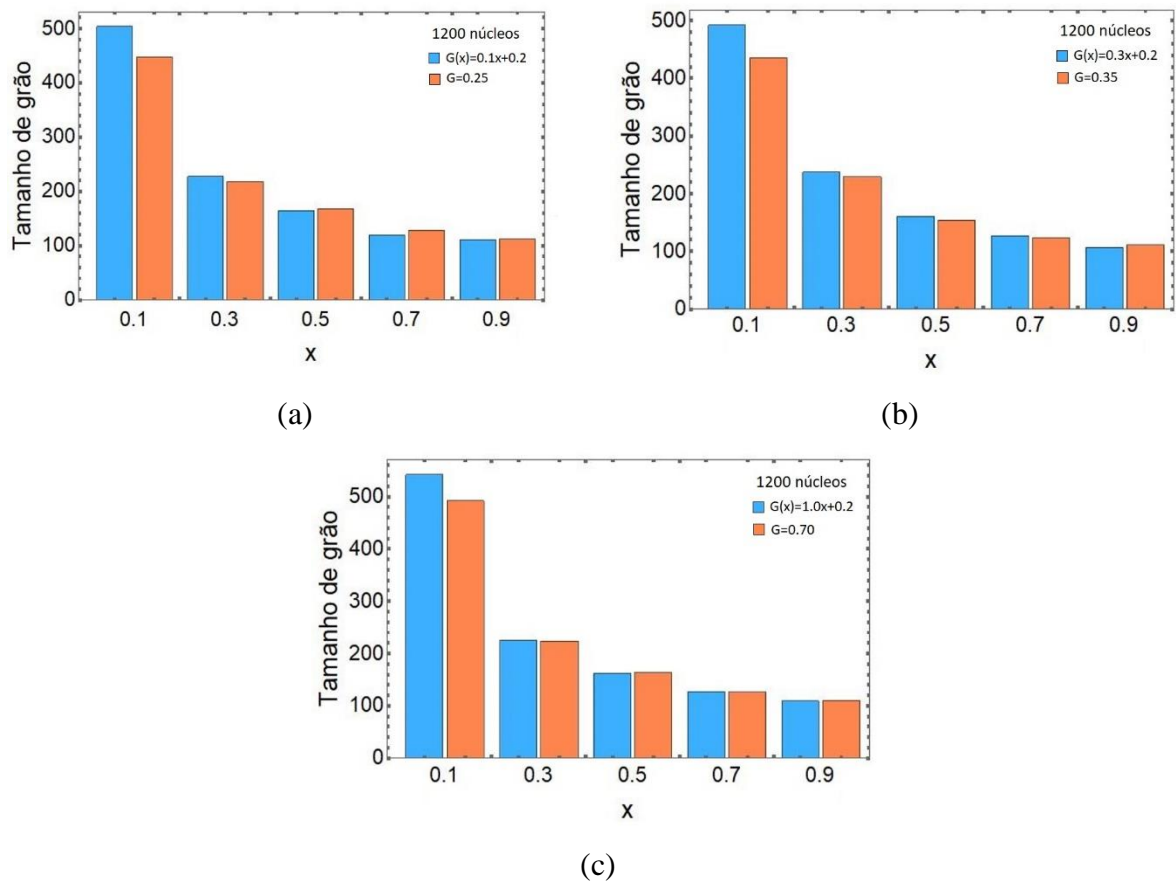


Figura 156 – Comparação dos tamanhos de grãos (comprimento médio de interceptação) medidos em cada plano entre os casos de nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea e nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 1200 núcleos.

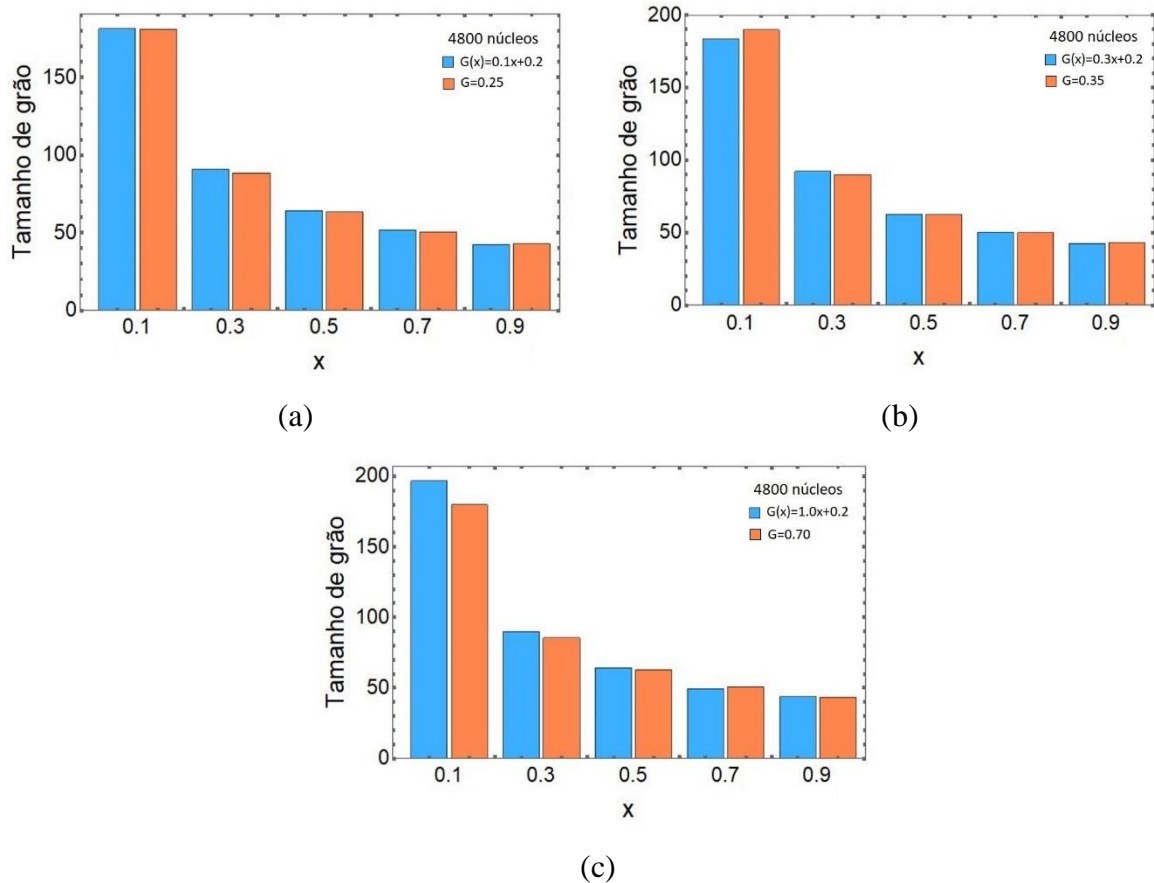


Figura 157 - Comparação dos tamanhos de grãos (comprimento médio de interceptação) medidos em cada plano entre os casos de nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea e nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 4800 núcleos.

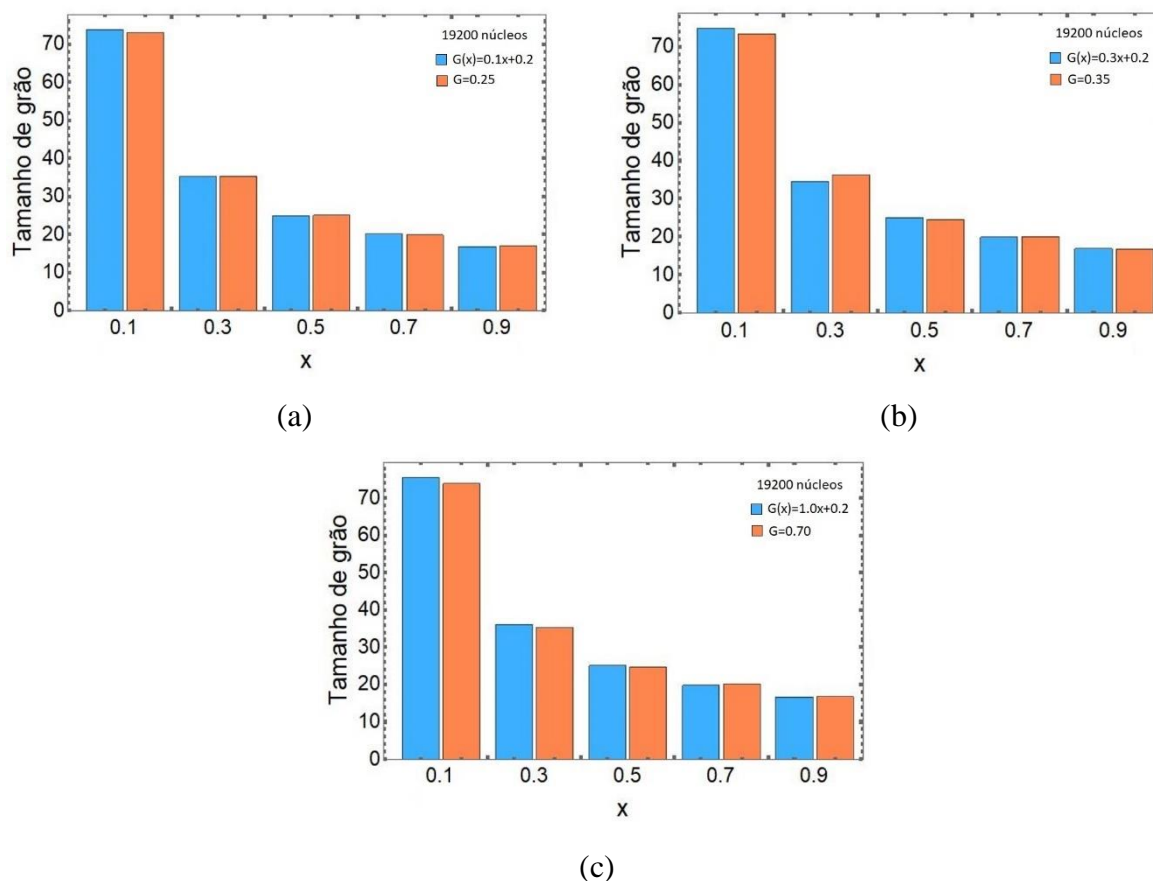


Figura 158 - Comparação dos tamanhos de grãos (comprimento médio de interceptação) medidos em cada plano entre os casos de nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea e nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 19200 núcleos.

5.4.2 Cinética de transformação total

A seguir foram comparados cinética de transformação total entre os casos de nucleação não homogênea e velocidade homogênea e nucleação não homogênea com velocidade não homogênea. Para cada gradiente de núcleos com 1200, 4800 e 19200 núcleos, foram plotados e comparados os gradientes de velocidade com as velocidades contastes.

Nas Figura 159, Figura 160 e Figura 161 são mostrados a comparação da cinética de transformação total para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com nucleação não homogênea com velocidade homogênea. O gradiente de núcleos é $\lambda(x) = 2396x + 2$ corresponde a uma média de 1200 núcleos, $\lambda(x) = 9596x + 2$

corresponde a uma média de 4800 núcleos e $\lambda(x) = 38396x + 2$ corresponde a uma média de 19200 núcleos, respectivamente. Os gradientes de velocidade e velocidade constante são, respectivamente, (Figura 159a, Figura 160a e Figura 161a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (Figura 159b, Figura 160b e Figura 161b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (Figura 159c, Figura 160c e Figura 161c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$. Para todos os casos, independentemente da quantidade de núcleos e velocidade, observa-se um distanciamento entre as curvas ao final da transformação. Embora esse distanciamento seja menor para os casos com menor gradiente de velocidade, a cinética de transformação mostra um predomínio da velocidade constante acima, em cerca de, 70% da transformação.

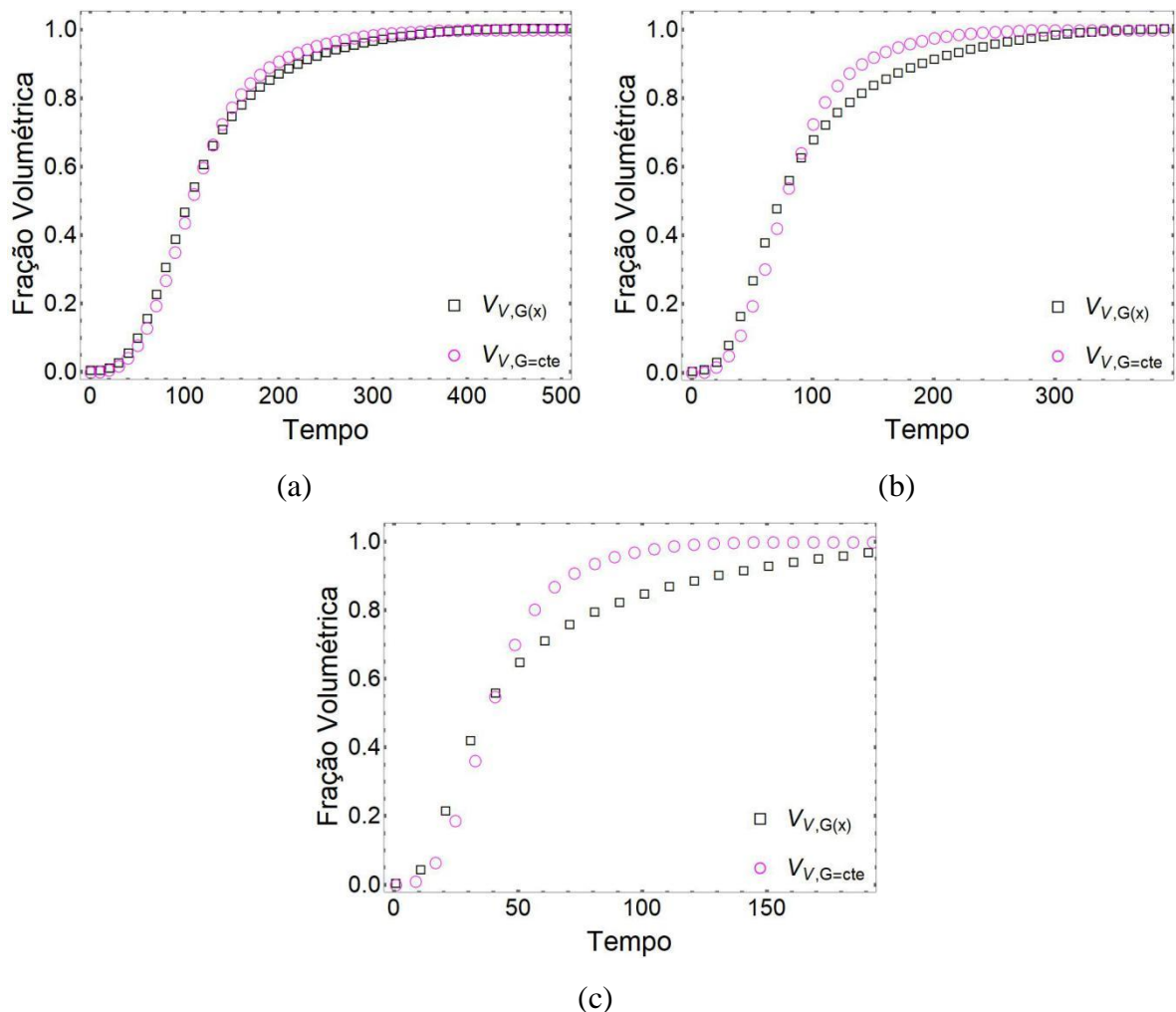


Figura 159 - Comparação da cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com a cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 1200 núcleos.

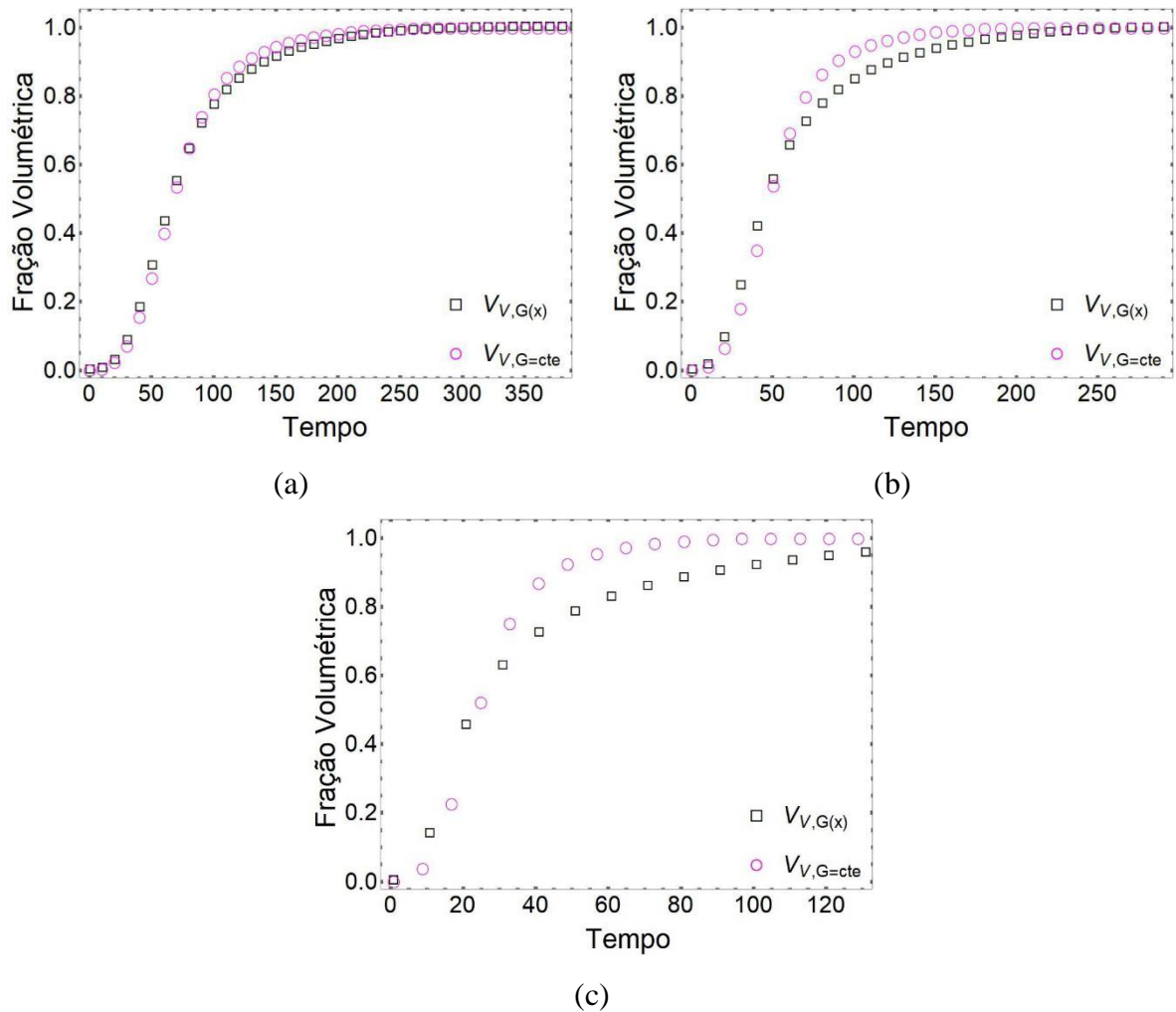


Figura 160 - Comparação da cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com a cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 4800 núcleos.

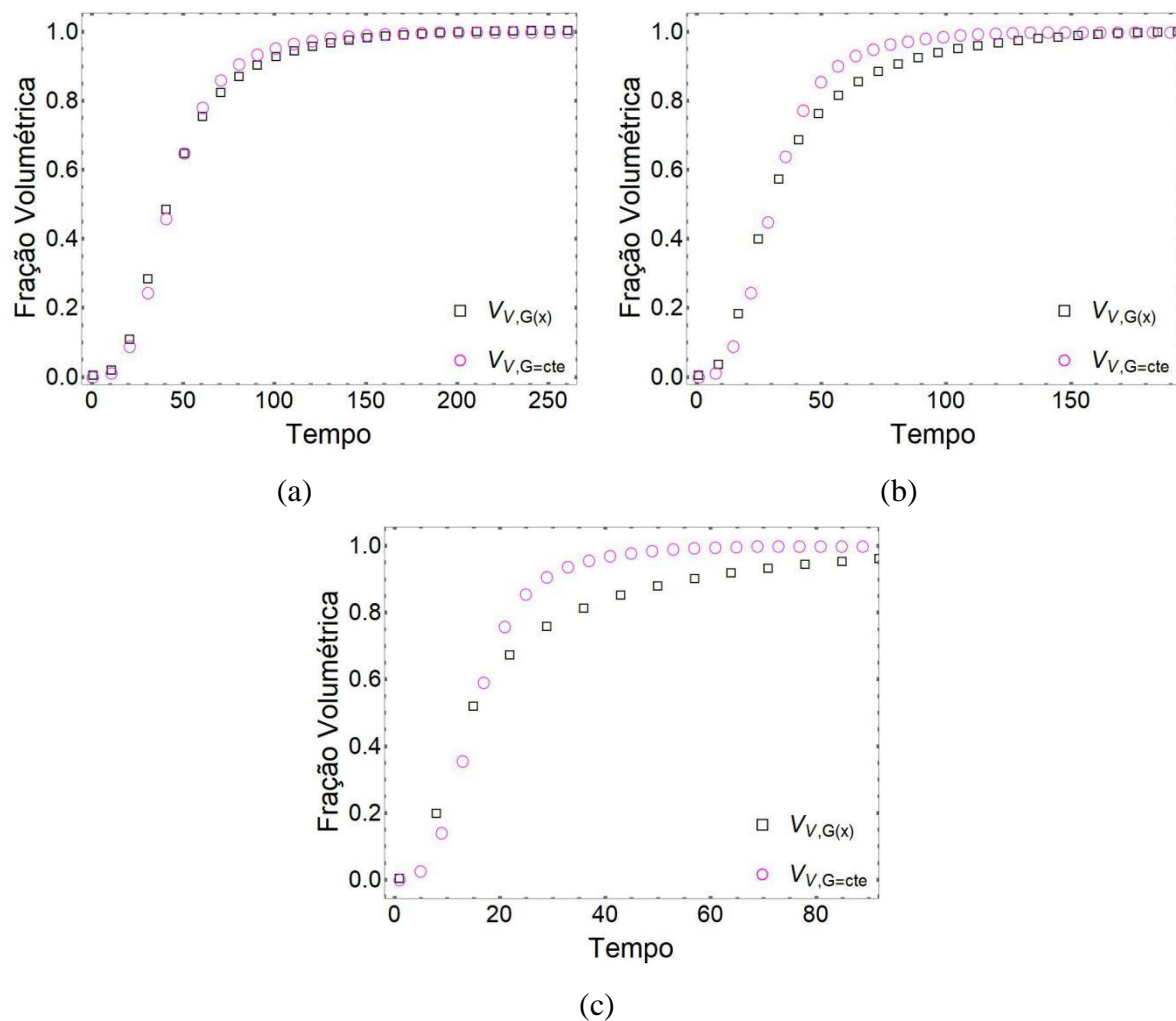


Figura 161 - Comparação da cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com a cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 19200 núcleos.

Nas Figura 162, Figura 163 e Figura 164 é apresentado outra maneira de comparar o efeito de um gradiente versus velocidade constante. O gradiente de núcleos é $\lambda(x) = 2396x + 2$ corresponde a uma média de 1200 núcleos, $\lambda(x) = 9596x + 2$ corresponde a uma média de 4800 núcleos e $\lambda(x) = 38396x + 2$ corresponde a uma média de 19200 núcleos, respectivamente. Os gradientes de velocidade e velocidade constante são, respectivamente, (Figura 162a, Figura 163a e Figura 164a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (Figura 162b, Figura 163b e Figura 164b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (Figura 162c, Figura 163c e Figura 164c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$. Os gráficos apresentam a fração de volume transformada, para nucleação não homogênea e velocidade não homogênea contra a fração de volume transformada,

para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. A linha reta de referência é a linha com inclinação unitária. Aqui, também é mostrado o predomínio da velocidade constante ao final da cinética de transformação. Quando um ponto simulado está acima da linha de referência, isso significa que a cinética de transformação com velocidade não homogênea é mais rápida. Por outro lado, quando um ponto simulado está abaixo da linha de referência, isso significa que a cinética de transformação com velocidade não homogênea é mais lenta que a cinética de transformação com velocidade constante. Nas Figura 162, Figura 163 e Figura 164 são mostradas as observações conduzidas nas Figura 159, Figura 160 e Figura 161 mais claramente. No início da transformação, a velocidade não homogênea leva a uma cinética mais rápida, enquanto no final da transformação, em torno de 0,7, a cinética de transformação para uma velocidade constante é mais rápida. Esse efeito se torna mais forte à medida que o gradiente de velocidade se torna mais acentuado. Isso fica claro quando se compara as Figura 162a, Figura 163a e Figura 164a com as Figura 162c, Figura 163c e Figura 164c. O efeito da velocidade não homogênea é pequeno se o gradiente de velocidade for menor, mas se torna significativo se o gradiente de velocidade for acentuado.

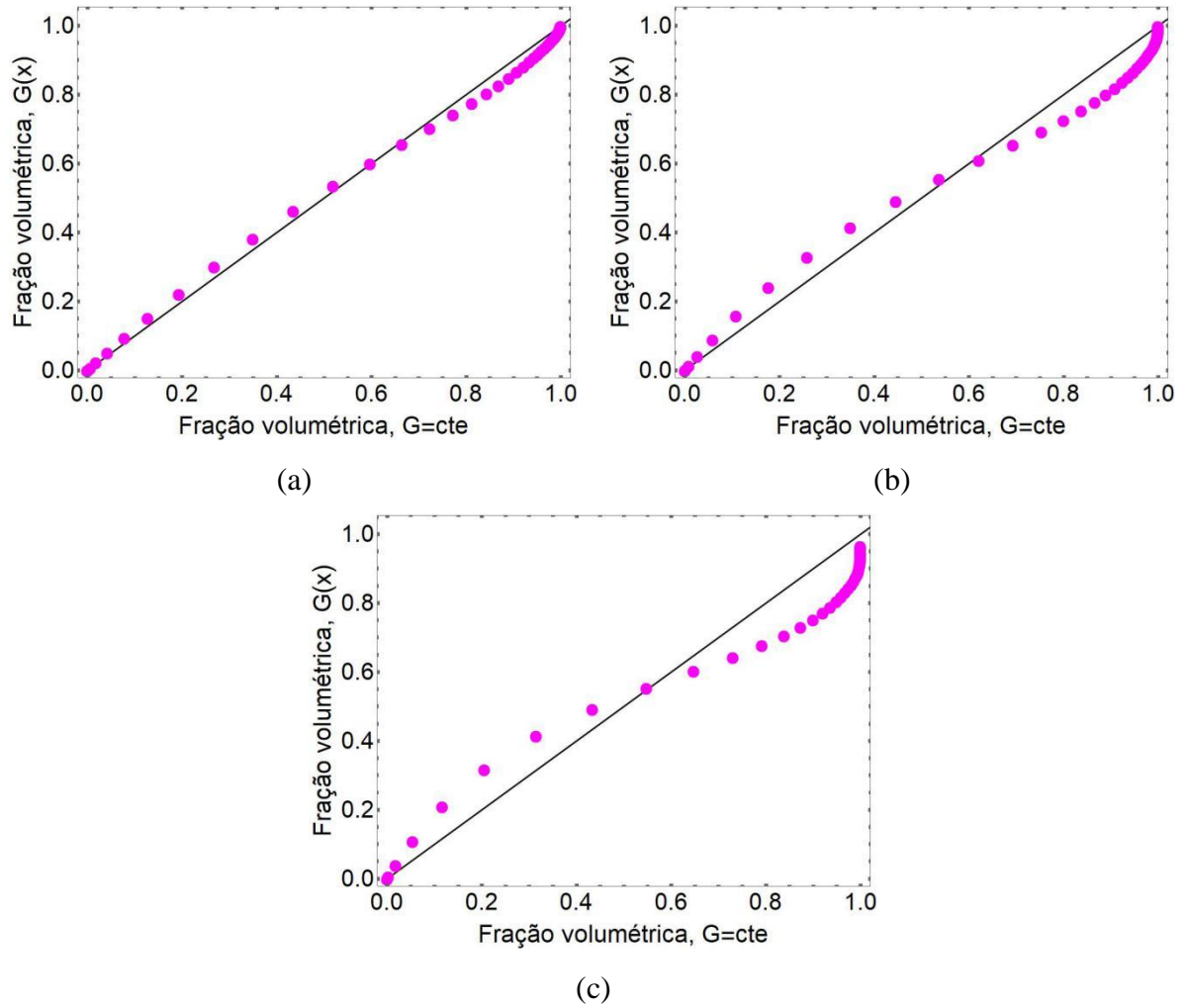


Figura 162 - Comparação do V_V total para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com o V_V total para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 1200 núcleos.

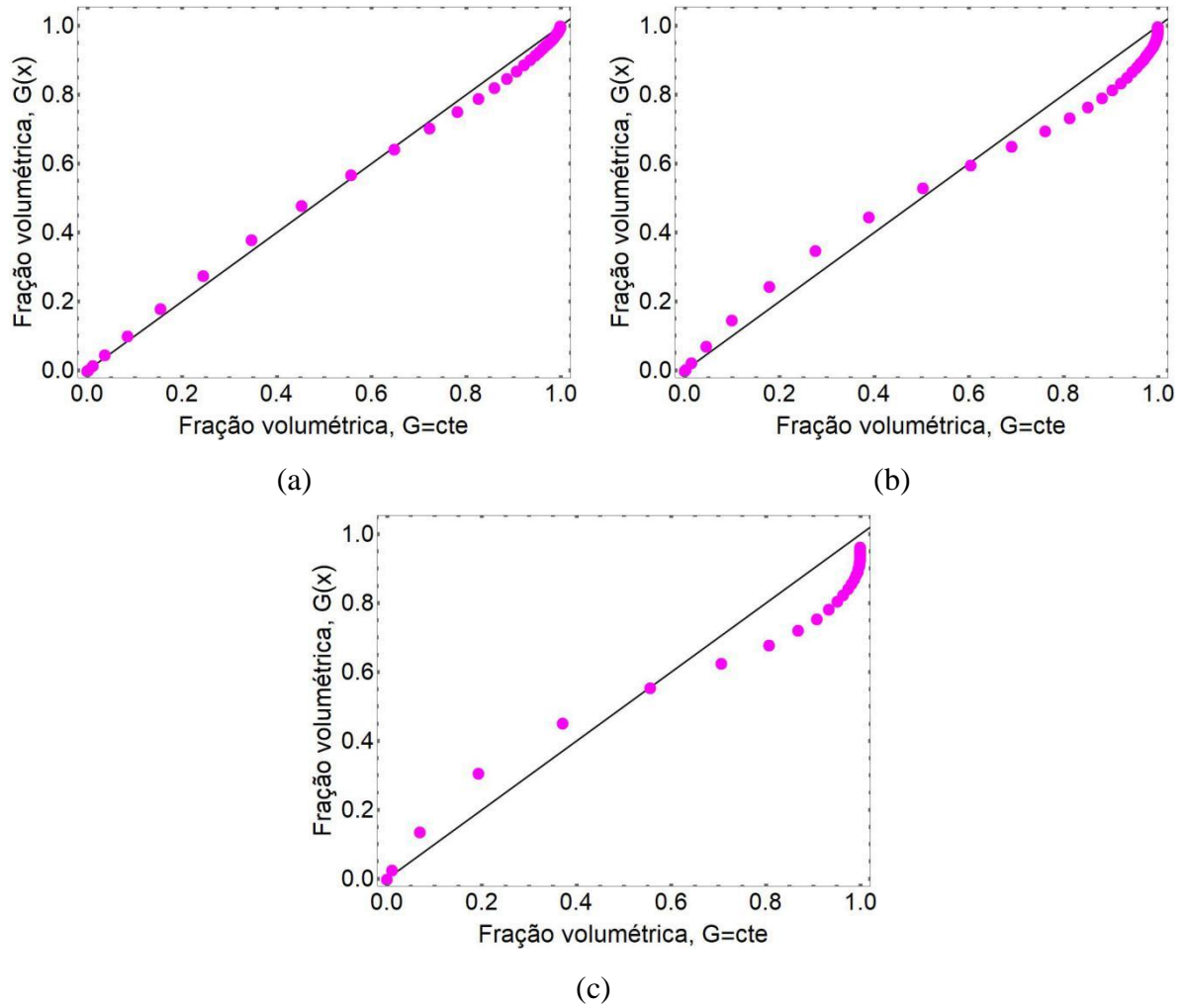


Figura 163 - Comparação do V_V total para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com o V_V total para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 4800 núcleos.

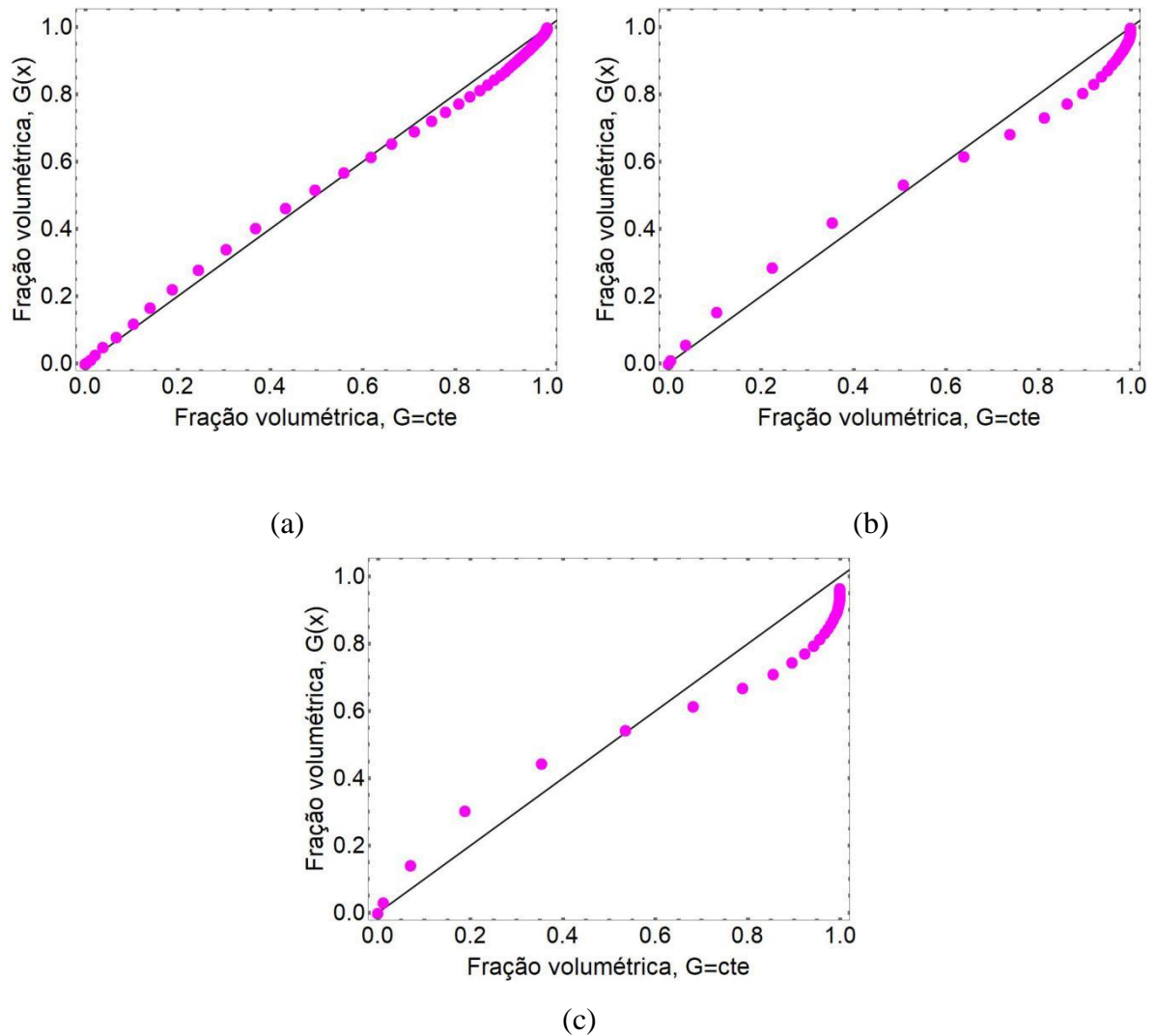


Figura 164 - Comparação do V_V total para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com o V_V total para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 19200 núcleos.

5.4.3 Cinética de transformação dos planos 0,2 e 0,9

Outra maneira de observar o efeito do gradiente de velocidade na cinética é comparar a cinética de transformação de dois $x_3 =$ planos constantes. Um plano correspondente a $x_3 = 0,2$ e outro a $x_3 = 0,9$. Nas Figura 165, Figura 166 e Figura 167 são mostradas uma comparação da cinética de transformação dos planos $x_3 = 0,2$ e $x_3 = 0,9$ para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com nucleação não homogênea com velocidade

homogênea. As linhas sólidas representam os resultados da densidade de volume média dos planos para o gradiente de velocidade. Os pontos representam os resultados da densidade volumétrica média dos planos para velocidade constante. Diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes foram comparados. (Figura 165a, Figura 166a e Figura 167a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (Figura 165b, Figura 166b e Figura 167b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (Figura 165c, Figura 166c e Figura 167c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para os gradientes de núcleos: $\lambda(x) = 2396x + 2$ corresponde a uma média de 1200 núcleos, $\lambda(x) = 9596x + 2$ corresponde a uma média de 4800 núcleos e $\lambda(x) = 38396x + 2$ corresponde a uma média de 19200 núcleos, respectivamente. Da mesma forma, pode-se ver que a cinética de transformação, a densidade média do volume em relação ao tempo, em $x_3 = 0,2$ é mais lenta que em $x_3 = 0,9$. Além disso, a velocidade de crescimento em $x_3 = 0,9$ é maior para um gradiente de velocidade do que para velocidade constante, Por outro lado, a velocidade de crescimento em $x_3 = 0,2$ é mais baixa para um gradiente de velocidade do que para velocidade constante. Na parte inferior, $x_3 = 0,2$, a cinética de transformação com constante predomina sobre a cinética de transformação com um gradiente de velocidade. O oposto é verdadeiro no topo, $x_3 = 0,9$. Aqui, fica nítido essa inversão no predomínio da velocidade. Essa diferença na cinética de transformação aumenta à medida que o gradiente de velocidade se torna mais acentuado, veja as Figura 165a, Figura 166a e Figura 167a a Figura 165c, Figura 166c e Figura 167c.

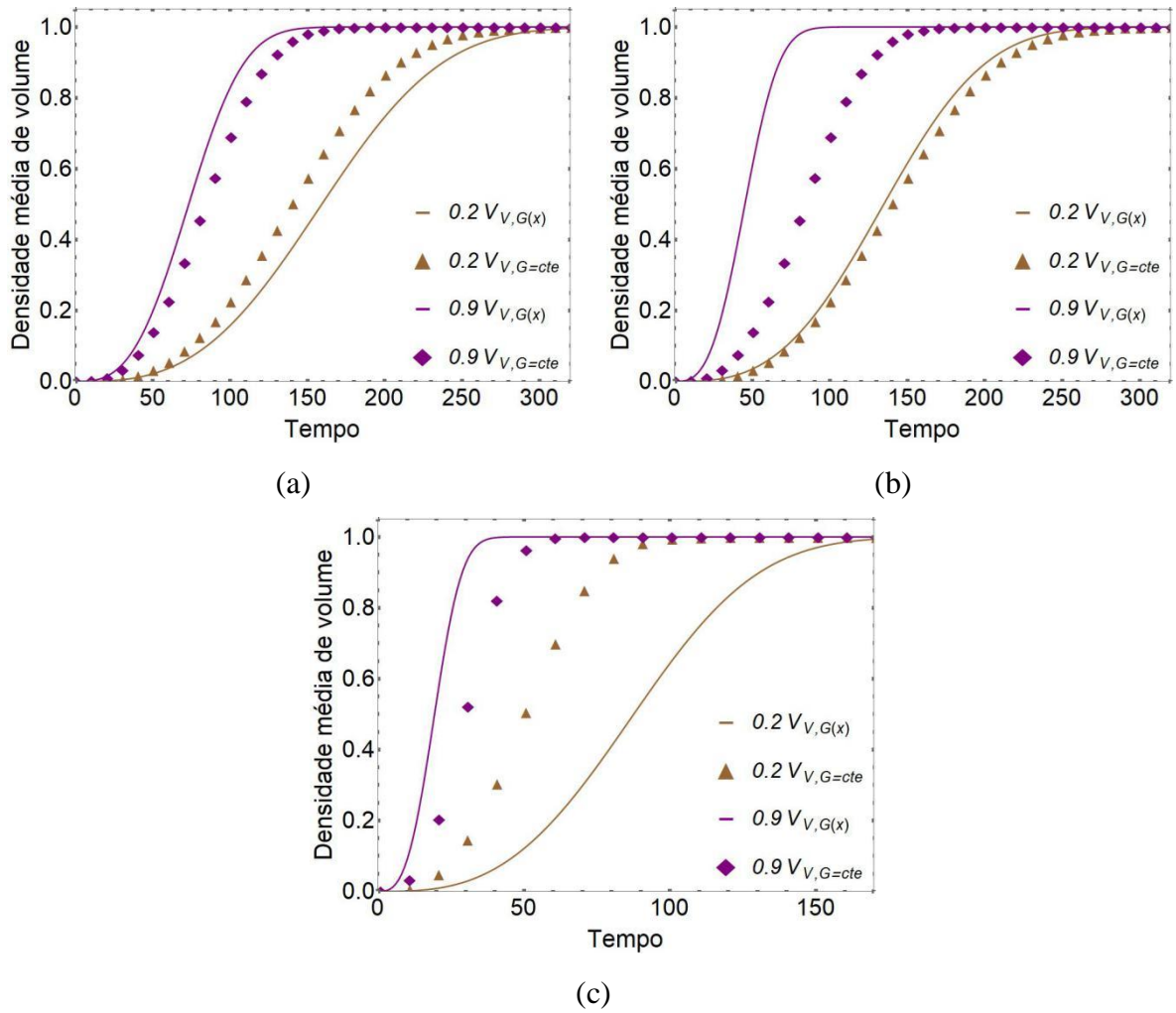


Figura 165 - Comparação da cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com nucleação não homogênea com velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 1200 núcleos para planos 0,2 e 0,9.

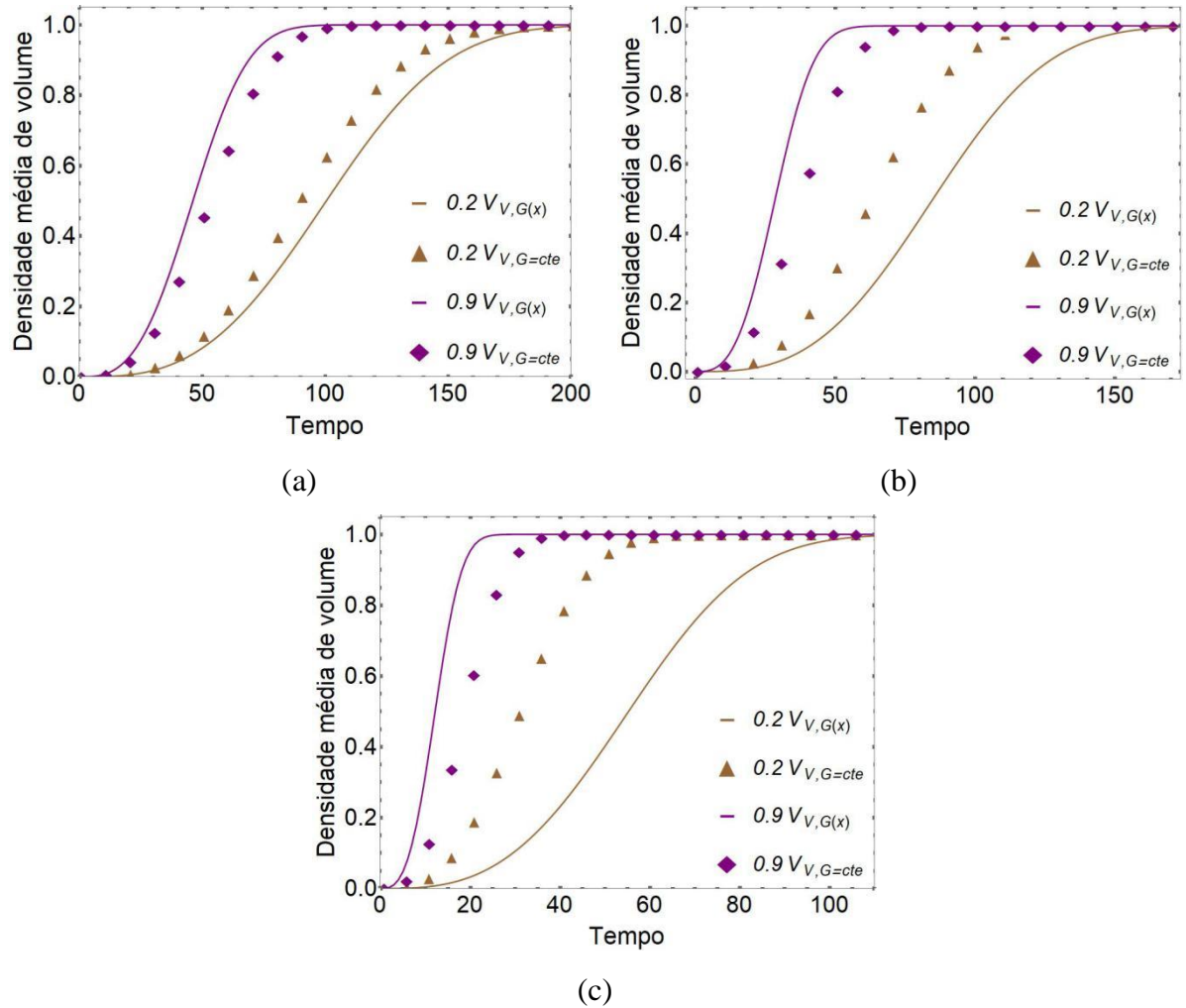


Figura 166 - Comparação da cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com nucleação não homogênea com velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 4800 núcleos para planos 0,2 e 0,9.

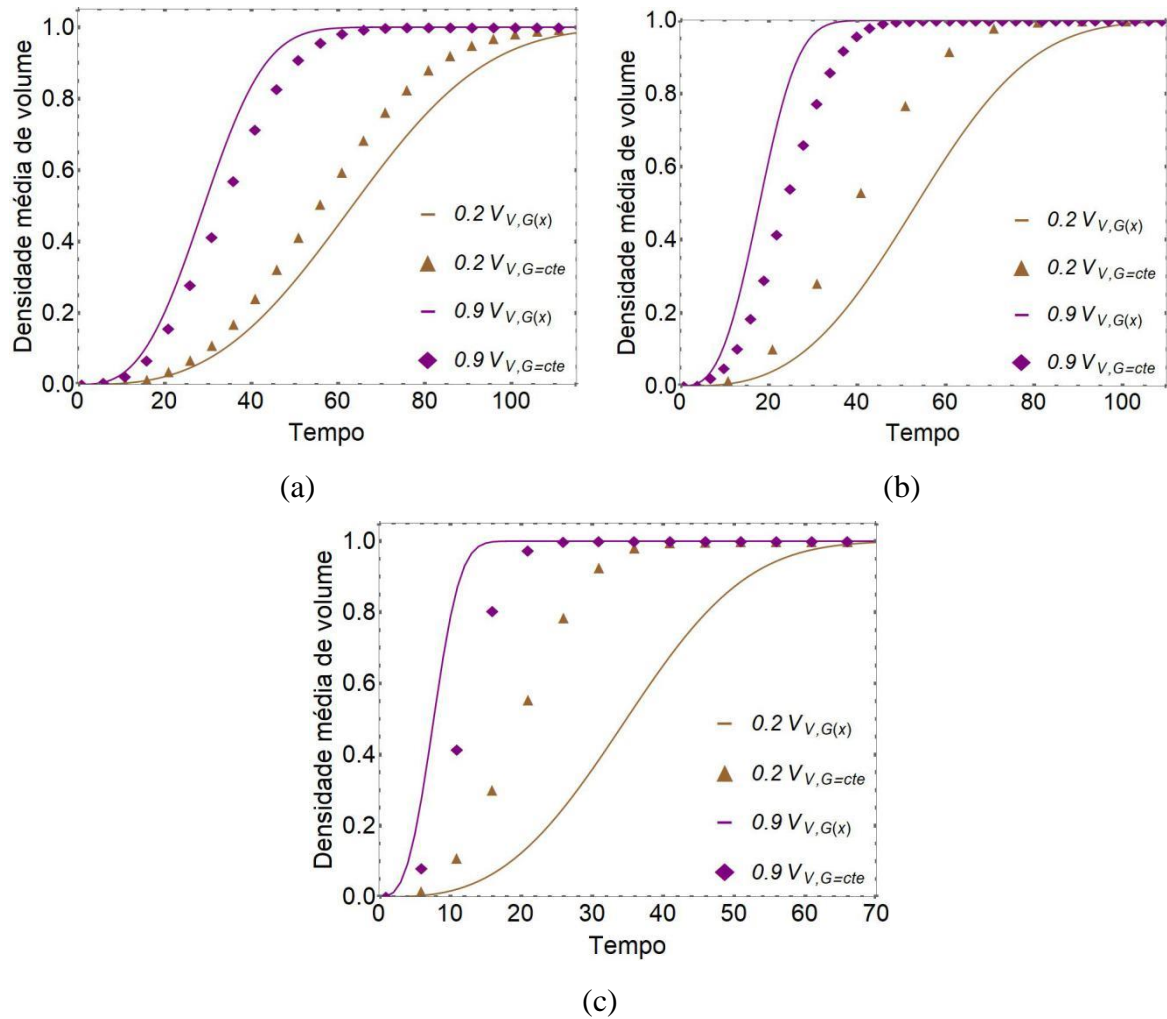


Figura 167 - Comparação da cinética de transformação para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com nucleação não homogênea com velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 19200 núcleos para planos 0,2 e 0,9.

A cinética reflete a evolução microestrutural. Nas figuras de cinética de transformação total (Figura 159 a Figura 161) e dos planos (Figura 165 a Figura 167), além da comparação entre as frações volumétricas (Figura 162 a Figura 164) da velocidade com gradiente constante é mostrado claramente isso.

No início da transformação há o predomínio do gradiente de velocidade, uma vez que, a velocidade é maior na parte superior da matriz, ou seja, no plano $x_3 = 0,9$. O gradiente de velocidade tem uma velocidade muito mais rápida que a velocidade constante. Entretanto à medida que ocorre a transformação a cinética é mais lenta no plano inferior, justamente devido a menor velocidade no plano $x_3 = 0,2$. Nesse caso, a transformação no plano é muito mais

rápida para uma velocidade constante do que para um gradiente de velocidade porque, é claro, o gradiente de velocidade tem uma velocidade muito mais lenta. A fração volumétrica total, como uma média das medidas na transformação, também mostra esse efeito, tornando-se possível observar o efeito do gradiente de velocidade em relação a velocidade constante para diferentes quantidades de núcleos.

5.4.4 Caminho Microestrutural total

Nas Figura 168, Figura 169 e Figura 170 são mostradas a comparação das curvas de caminho microestrutural total ($S_V \times V_V$) para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea. O gradiente de núcleos é $\lambda(x) = 2396x + 2$ corresponde a uma média de 1200 núcleos, $\lambda(x) = 9596x + 2$ corresponde a uma média de 4800 núcleos e $\lambda(x) = 38396x + 2$ corresponde a uma média de 19200 núcleos, respectivamente. Os gradientes de velocidade e velocidade constante são, respectivamente, (Figura 168a, Figura 169a e Figura 170a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (Figura 168b, Figura 169b e Figura 170b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (Figura 168c, Figura 169c e Figura 170c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$. A curva para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea para todos os gradientes de velocidades analisados estão direcionadas para esquerda, entretanto sendo ainda maior para maiores gradiente de velocidade. Isso indica que no início da transformação as interfaces de formam rapidamente até que ocorra o “*impingement*” em uma fração de transformação menor do que para quando a velocidade é constante. A curva para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea, apresenta-se com um pequeno desvio para esquerda, devido a maior quantidade de núcleos na parte superior provocando conseqüentemente um aumento na formação das interfaces quando se inicia a transformação. Comparando as curvas, o efeito do gradiente de velocidade é maior no início da transformação do que para velocidade constante. Analisando cada figura para uma mesma quantidade de núcleos, mas velocidades diferentes, por exemplo, nas Figura 168a, Figura 168b e Figura 168c, observa-se uma diminuição do S_V à medida que aumenta a velocidade. No início da transformação, com o gradiente de velocidade, a transformação ocorre rapidamente no plano superior devido a maior velocidade e conseqüentemente há maior formação de interfaces, entretanto como o avanço na transformação é maior, os núcleos da parte inferior têm seu crescimento cessado rapidamente. É o caso para quando os grãos estão alongados e envolvem os grãos dos planos inferiores como

já visto na microestrutura. Desta forma, apesar da maior formação de interfaces no plano superior, há uma menor formação de interfaces no plano inferior, o que justifica essa diminuição de S_V para maiores gradientes de velocidade. Essa diminuição de S_V ocorre, independentemente do número de núcleos como pode ser visto nas Figura 169 e Figura 170.

Outra análise interessante é sobre o S_V máximo para cada quantidade de núcleos. S_V máximo aumenta de acordo com o aumento do N_V . Isso já tinha sido visto para o L_A dos planos, na qual há mais núcleos nos planos superiores que inferiores. Agora se tratando de todo volume da simulação, esse fenômeno ocorre, devido a uma maior quantidade de áreas superficiais iniciais, quando se possui uma matriz com N_V maior em relação às demais. O aumento de S_V pode ser visto nas Figura 168, Figura 169 e Figura 170 à medida que aumenta a quantidade de núcleos.

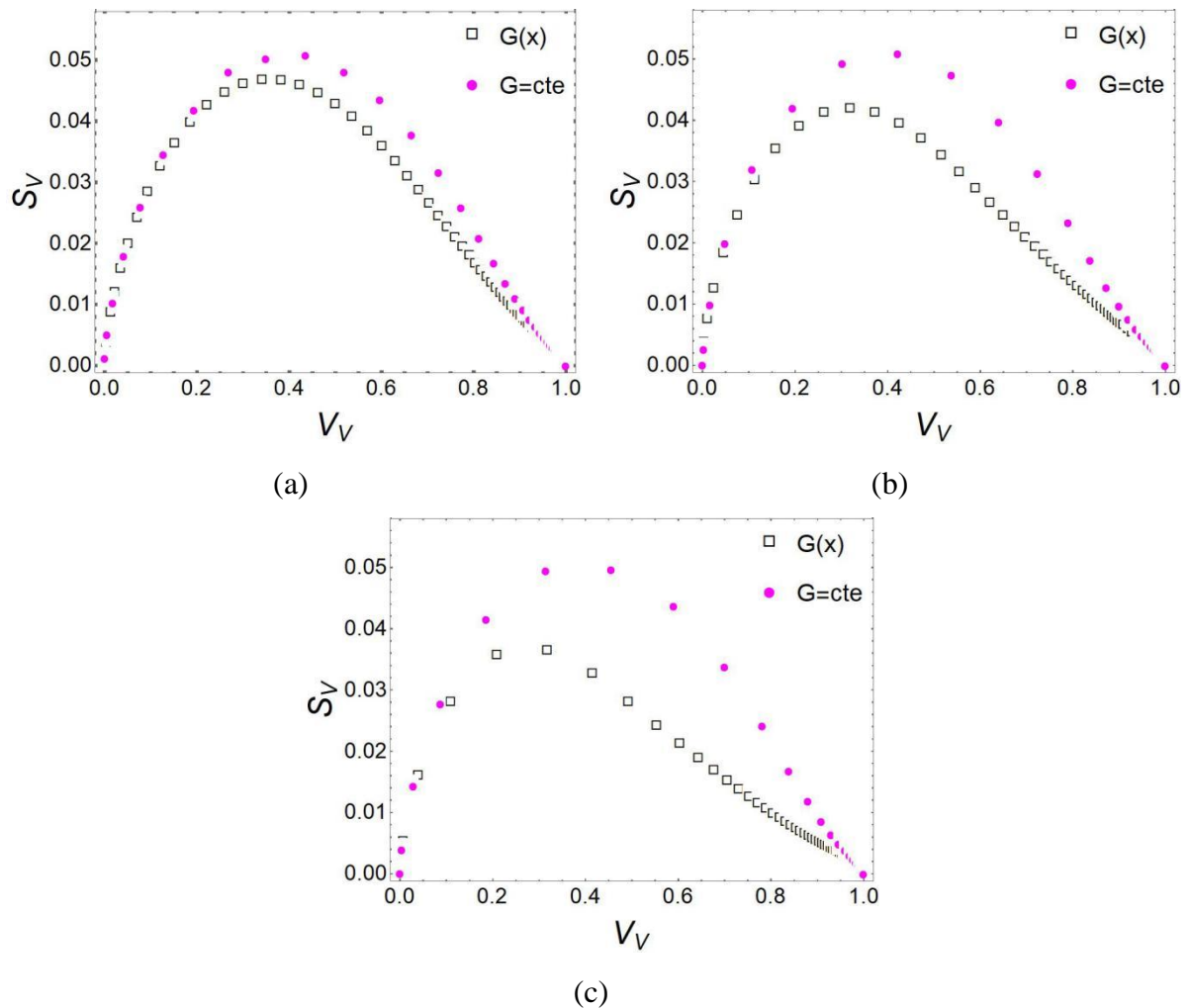


Figura 168 - Comparação do caminho microestrutural total para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com o caminho microestrutural total para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de

velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 1200 núcleos.

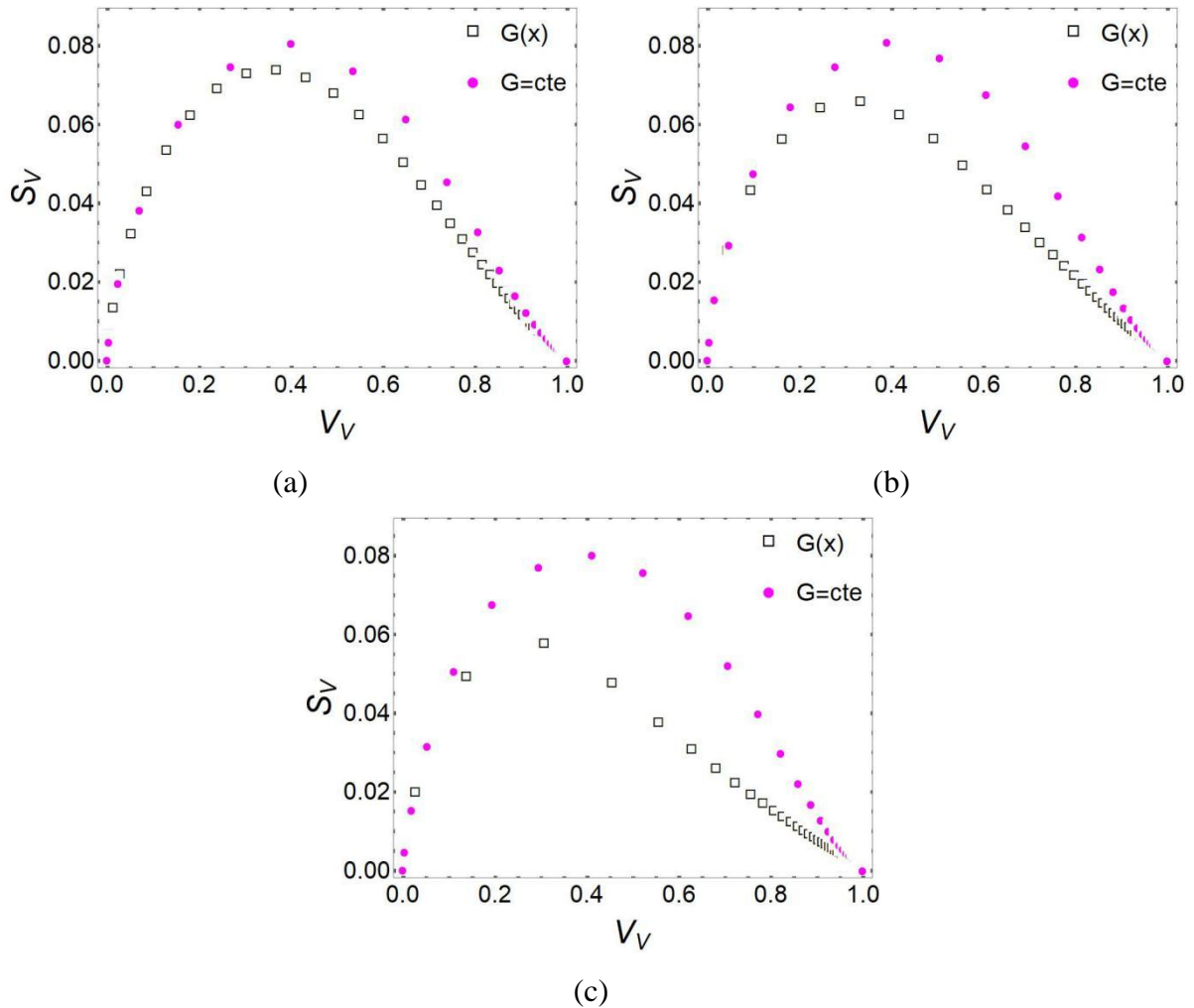


Figura 169 - Comparação do caminho microestrutural total para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com o caminho microestrutural total para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 4800 núcleos.

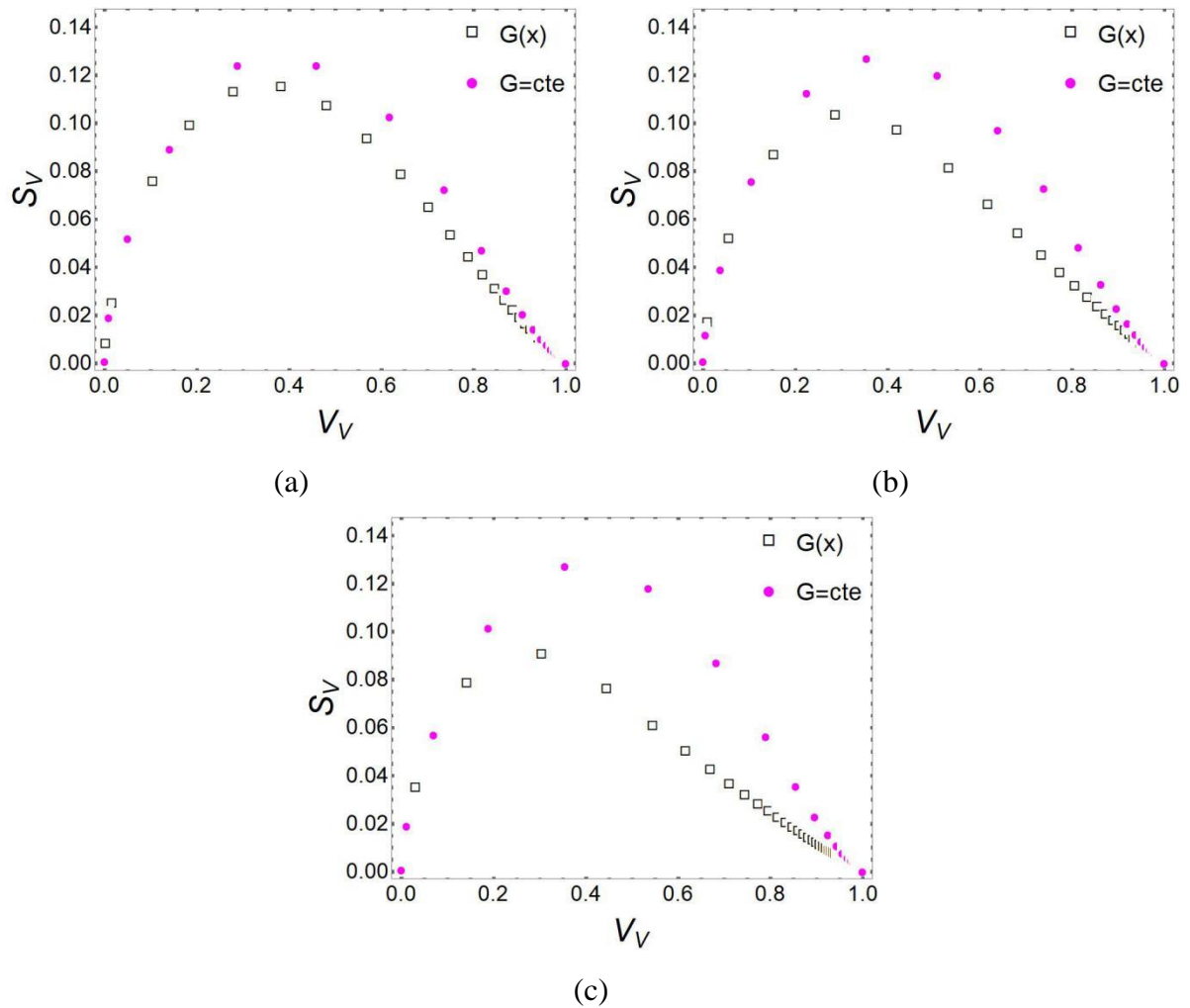


Figura 170 - Comparação do caminho microestrutural total para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento não homogênea com o caminho microestrutural total para nucleação não homogênea e velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 19200 núcleos.

5.4.5 Contiguidade total

A contiguidade caracteriza o arranjo espacial de duas fases, quantifica essa união entre as interfaces formadas durante a transformação. A proximidade dos núcleos indica uma antecipação ou um retardo da interferência durante a etapa de crescimento. Uma fase, a nova fase, nucleia dentro de outra fase, a matriz mãe. Quando os núcleos são uniformemente localizados aleatoriamente na fase mãe, ou seja, quando os núcleos estão localizados na fase mãe de acordo com um processo homogêneo de ponto de Poisson, existe uma expressão

analítica para a contiguidade em função do volume transformado [41], [42]. A linha analítica é útil como uma linha de referência [43]. A partir dessa quantificação, obtêm-se uma forma de avaliar os desvios da aleatoriedade dos núcleos dentro da matriz.

Como já visto, nos gráficos apresentados, quando se mede a contiguidade em um plano $x_3 = \text{constante}$, a contiguidade os planos 0,1, 0,3, 0,5, 0,9 concordam com a curva de contiguidade teórica (linha sólida). Isso significa que, em cada plano, os núcleos são localizados aleatoriamente, como esperado de um processo de ponto de Poisson. Este resultado é independente do plano x_3 . Este resultado também é independente de a velocidade ser uma constante ou se existe um gradiente de velocidade. Os pontos representam os dados simulados.

Em vez de plotar a contiguidade para cada plano, pode-se plotar a contiguidade para todo o volume de simulação. Nesse caso, deve-se usar a fração de volume e a área por unidade de volume das interfaces da nova fase e a área por unidade de volume das interfaces entre a nova fase e a matriz.

Nas Figura 171, Figura 172 e Figura 173 são mostradas uma comparação da contiguidade em todo o volume de simulação para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea com nucleação não homogênea com velocidade não homogênea. A linha sólida representa o resultado analítico para a situação em que os núcleos são uniformes localizados aleatoriamente no espaço, i. e., processo de ponto de Poisson homogêneo. Os pontos representam os dados simulados. Diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes foram comparados. (Figura 171a, Figura 172a e Figura 173a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (Figura 171b, Figura 172b e Figura 173b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (Figura 171c, Figura 172c e Figura 173c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para os gradiente de núcleos: $\lambda(x) = 2396x + 2$ corresponde a uma média de 1200 núcleos, $\lambda(x) = 9596x + 2$ corresponde a uma média de 4800 núcleos e $\lambda(x) = 38396x + 2$ corresponde a uma média de 19200 núcleos, respectivamente. Como observado, a contiguidade da transformação de velocidade constante está mais próxima da linha teórica do que a contiguidade da transformação do gradiente de velocidade para todos os casos analisados.

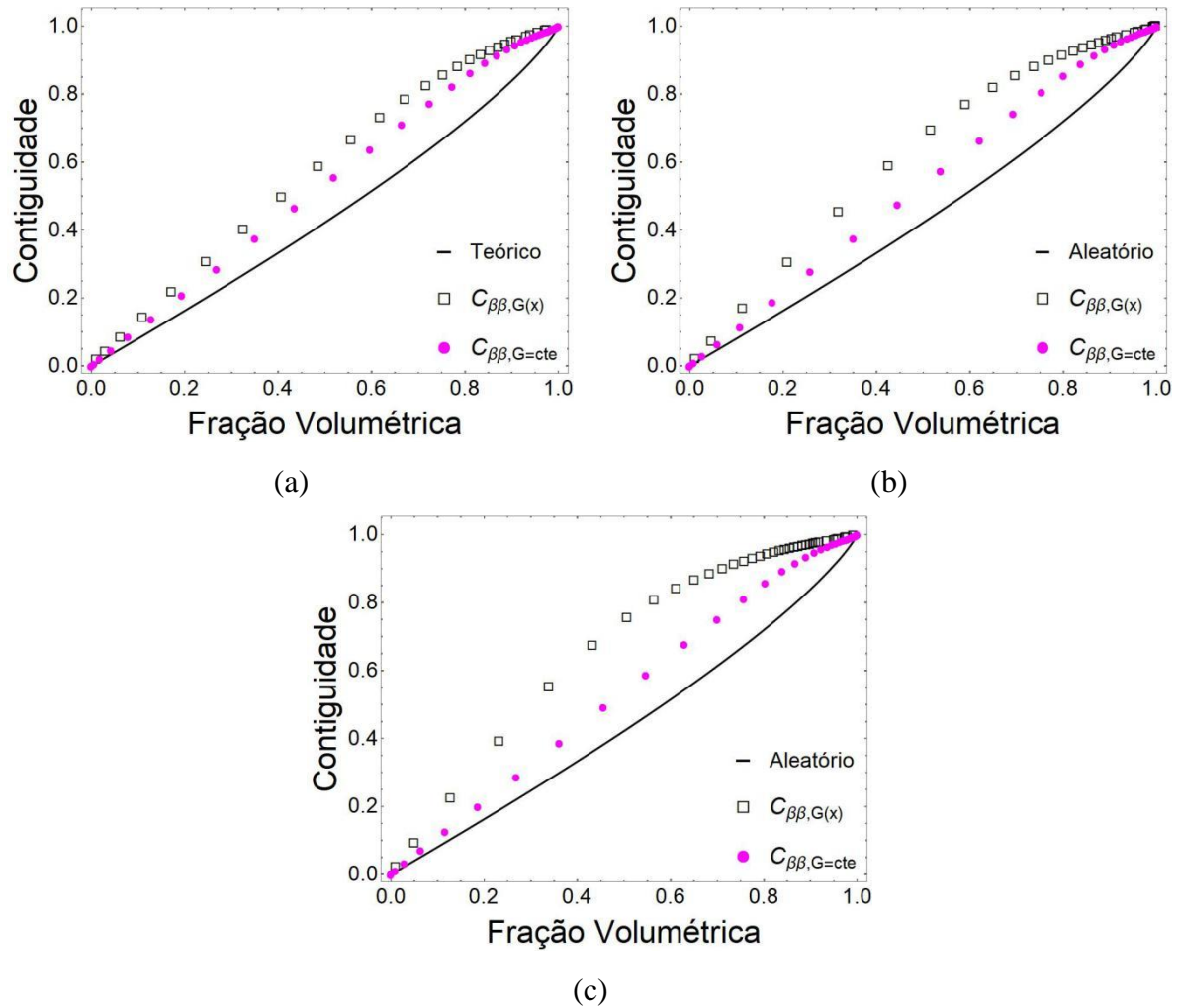


Figura 171 - Comparação da Contiguidade total versus V_V para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea com nucleação não homogênea com velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 1200 núcleos.

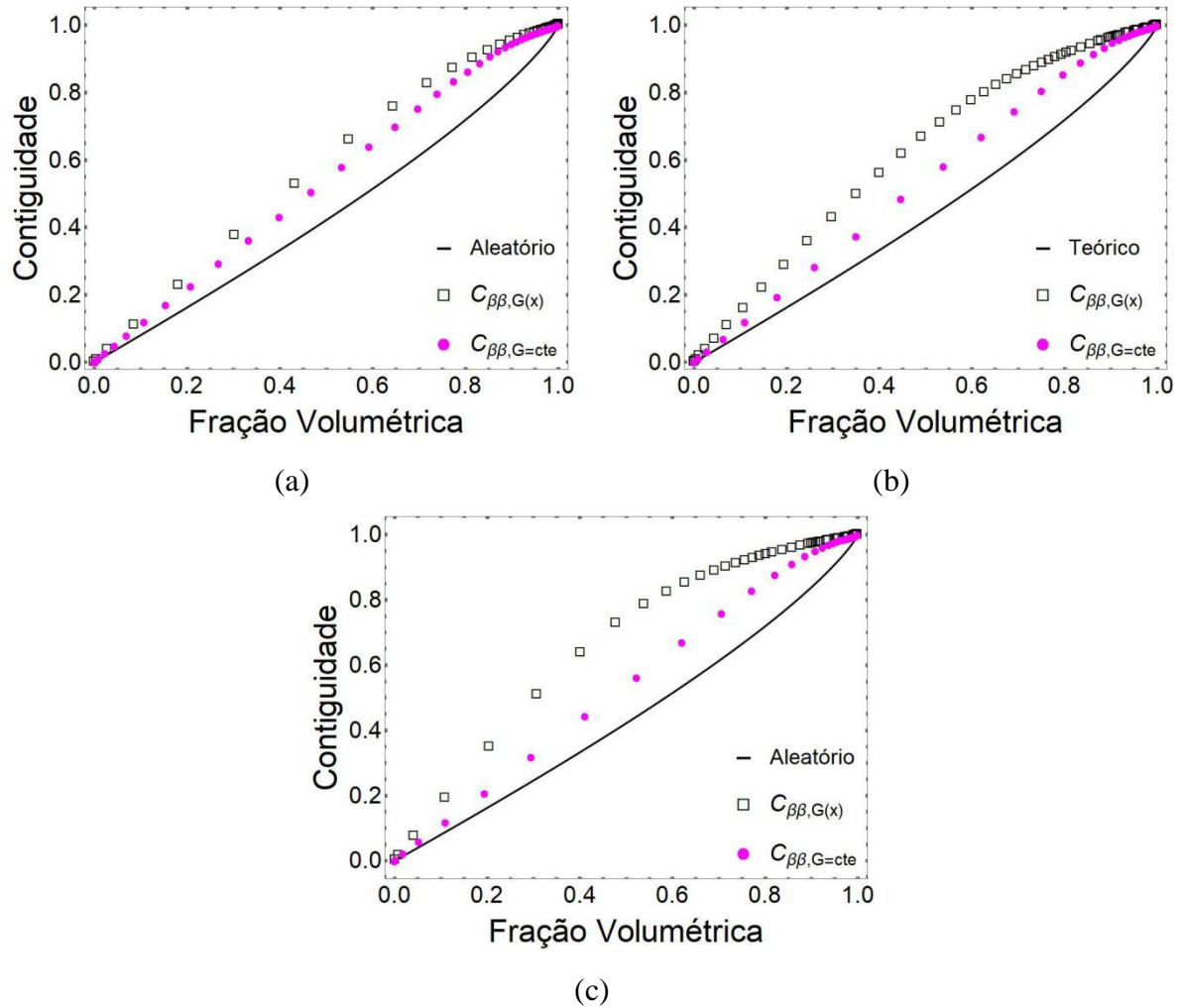


Figura 172 - Comparação da Contiguidade total versus V_V para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea com nucleação não homogênea com velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 4800 núcleos.

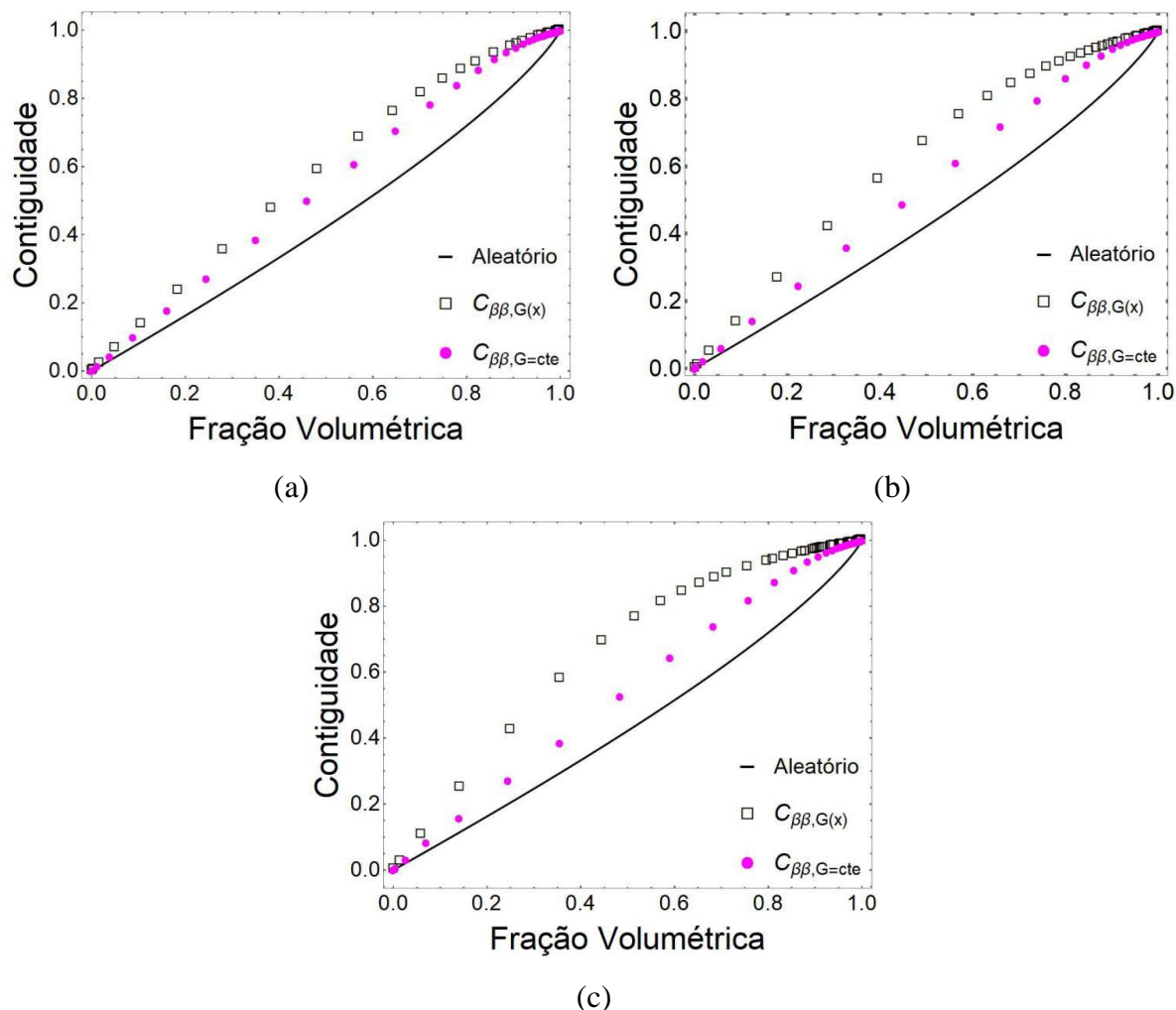


Figura 173 - Comparação da Contiguidade total versus V_V para nucleação não homogênea e velocidade de crescimento homogênea com nucleação não homogênea com velocidade homogênea. Foram comparados diferentes gradientes de velocidade e velocidades constantes. (a) $G(x) = 0,1x + 0,2$; $G = 0,25$ (b) $G(x) = 0,3x + 0,2$; $G = 0,35$ e (c) $G(x) = 1,0x + 0,2$; $G = 0,70$ para 19200 núcleos.

A contiguidade da transformação de velocidade constante está mais próxima da linha teórica do que a contiguidade da transformação do gradiente de velocidade. Vandermeer [43] propôs que, quando a curva de contiguidade está acima da curva teórica, isso aponta para o agrupamento ou “cluster”. Quando observa-se as Figura 171, Figura 172 e Figura 173, entende-se o que está acontecendo. Quando existe um gradiente de velocidade, para a mesma fração de volume total, é possível ver uma fração alta se transformar nas regiões superiores da amostra de simulação. Quando a velocidade é constante, a transformação é mais espalhada. Portanto, o efeito de “agrupamento” aqui significa uma fração mais alta transformada na parte superior do volume da simulação. Consequentemente, pode-se esperar que a contiguidade em todo o

volume da transformação do gradiente de velocidade esteja acima da transformação em todo o volume de simulação de uma velocidade constante. Além disso, percebe-se que essa tendência é aprimorada das Figura 171a, Figura 172a e Figura 173a a Figura 171c, Figura 172c e Figura 173c, pois se tem um gradiente de velocidade mais acentuado.

6 CONCLUSÕES

Neste trabalho, simulação computacional e modelos analíticos foram utilizados para analisar transformações com nucleação não homogênea e velocidade não homogênea. Nucleação saturada por local foi empregada em todas as simulações. As principais conclusões são:

- Para a faixa de gradientes de velocidade e o número de núcleos usados aqui, a maioria das simulações em computador mostraram boa concordância com o modelo analítico de Rios e Villa.
- A solução exata pode ser usada para verificar se a simulação por computador é precisa ou não para um dado gradiente de velocidade e o número de núcleos. Para nucleação homogênea e velocidade não homogênea e nucleação não homogênea e velocidade constante, a solução analítica estava de acordo com todas as simulações. Quando a nucleação e a velocidade eram não homogêneas, é preciso escolher um número total de núcleos suficientemente altos para os gradientes de velocidade empregados. Quando o número de núcleos é muito pequeno, a simulação por computador pode não concordar com a solução analítica, pelos motivos explicados no texto.
- O caminho microestrutural simulados dos planos, apesar de haver um gradiente de velocidade ao longo de x_3 , se observa que a velocidade de crescimento não interfere no caminho percorrido pelas interfaces durante a evolução microestrutural. As curvas dos planos de x_3 se mostraram simétricas. O L_A máximo para cada plano em x_3 , aumenta de acordo com o aumento do N_V . Nas curvas de caminho microestrutural total ($S_V \times V_V$), há a diminuição de S_V para maiores gradientes de velocidade. Apesar da maior formação de interfaces no plano superior, há uma menor formação de interfaces no plano inferior.
- A contiguidade dos planos 0,1, 0,3, 0,5, 0,9 concordam com a curva de contiguidade teórica (linha sólida). Isso significa que, em cada plano, os núcleos são localizados aleatoriamente, como esperado de um processo de ponto de Poisson. Este resultado independente de a velocidade ser uma constante ou se existe um gradiente de

velocidade. A contiguidade da transformação de velocidade constante está mais próxima da linha teórica do que a contiguidade da transformação do gradiente de velocidade. Ambas acima da curva teórica, indicando agrupamento ou “cluster”.

- Um gradiente de velocidade altera significativamente a cinética de transformação e a evolução microestrutural em comparação com uma velocidade constante. No entanto, para o número de núcleos e gradientes de velocidade usados aqui, as microestruturas finais foram semelhantes. Uma diferença significativa é que um gradiente de velocidade produz uma microestrutura final que possui limites de grão curvos. Por outro lado, uma velocidade de crescimento constante produz uma microestrutura final que possui limites retos de grãos.
- A velocidade de crescimento não homogênea parece ser menos capaz de promover uma heterogeneidade microestrutural do que na nucleação não homogênea.

7 SUGESTÃO PARA TRABALHOS FUTUROS

- Modelar analiticamente o S_V para os casos de velocidade não homogênea;
- Modelar para quando há gradiente de temperatura, associando a energia armazenada;
- Modelar matematicamente e computacionalmente casos em o grão cresça de acordo com o gradiente, não de maneira constante no plano. O formato do grão assume a velocidade do plano e
- Associar os estudos de nucleação e velocidade não homogênea com outras formas de transformação de fase como clusters.

8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] W. A. JOHNSON, R. F. MEHL, “Reaction kinetics in processes of nucleation and growth,” *Trans. Metall. Soc. AIME*, vol. 135, pp. 416–442, 1939.
- [2] M. AVRAMI, “Kinetics of Phase Change. I General Theory,” vol. 1103, 1939, doi: 10.1063/1.1750380.
- [3] M. AVRAMI, “Kinetics of phase change. II Transformation-time relations for random distribution of nuclei,” *J. Chem. Phys.*, vol. 8, no. 2, pp. 212–224, 1940, doi: 10.1063/1.1750631.
- [4] M. AVRAMI, “Granulation , Phase Change , Microstructure Kinetics of Phase Change .,” vol. 177, no. August 1940, 1941, doi: 10.1063/1.1750872.
- [5] A. N. KOLMOGOROV, “On the Statistical Theory of Metal Crystallization,” *Isvetiia Acad. Nauk. SSSR-Seriia Mat.*, vol. 1, pp. 335–359, 1937.
- [6] V. CAPASSO, M. BURGER, A. MICHELETTI, C. SALANI, “Mathematical Models for Polymer Crystallization Processes,” in *Mathematical modelling for polymer processing. Mathematics in Industry 2*, Heidelberg, Ed. Berlin: Springer-Verlag, 2003, pp. 167–242.
- [7] M. OHNO, T. YAMAGUCHI, D. SATO, K. MATSUURA, “Existence or nonexistence of thermal pinning effect in grain growth under temperature gradient,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 69, pp. 7–13, 2013, doi: 10.1016/j.commatsci.2012.11.017.
- [8] X. SONG, M. RETTENMAYR, C. MULLER, H. E. EXNER, “Modeling of recrystallization after inhomogeneous deformation,” *Metall. Mater. Trans. A Phys. Metall. Mater. Sci.*, vol. 32, no. 9, pp. 2199–2206, 2001, doi: 10.1007/s11661-001-0195-6.
- [9] X. SONG, M. RETTENMAYR, G. LIU, “3D Simulation study of inhomogeneous microstructure and its evolution (advantages of visual simulation technique in stereological analysis),” *Image Anal Stereol*, vol. 22, pp. 163–169, 2003.
- [10] X. SONG, M. RETTENMAYR, “Study on the effects of a deformation gradient on recrystallization in a material containing precipitates,” vol. 48, pp. 1123–1128, 2003, doi: 10.1016/S1359-6462(02)00614-0.
- [11] M. S. LYRIO, A. L. M. ALVES, G. M. S. De SÁ, H. D. S. VENTURA, W. L. D. S. ASSIS, P. R. RIOS, “Comparison of transformations with inhomogeneous nucleation and transformations with inhomogeneous growth velocity,” *J. Mater. Res. Technol.*, vol.

- 8, no. 5, pp. 4682–4686, 2019, doi: 10.1016/j.jmrt.2019.08.012.
- [12] X. WANG, Z. HUANG, B. CAI, N. ZHOU, O. MAGDYSYUK, Y. GAO, S. SRIVATSA, L. TAN, L. JIANG, “Formation mechanism of abnormally large grains in a polycrystalline nickel-based superalloy during heat treatment processing,” *Acta Mater.*, vol. 168, pp. 287–298, 2019, doi: 10.1016/j.actamat.2019.02.012.
- [13] V. M. MILLER, A. E. JOHNSON, C. J. TORBET, T. M. POLLOCK, “Recrystallization and the Development of Abnormally Large Grains After Small Strain Deformation in a Polycrystalline Nickel-Based Superalloy,” *Metall. Mater. Trans. A Phys. Metall. Mater. Sci.*, vol. 47, no. 4, pp. 1566–1574, 2016, doi: 10.1007/s11661-016-3329-6.
- [14] P. R. RIOS, E. VILLA, “Transformation kinetics for inhomogeneous nucleation,” *Acta Materialia*, pp. 1199–1208, 2009.
- [15] E. VILLA, P. R. RIOS, “On modelling recrystallization processes with random growth velocities of the grains in materials science,” no. 1937, pp. 149–162, 2012, doi: 10.5566/ias.v31.p149-162.
- [16] D. A. MOLODOV, “Microstructural Design of Advanced Engineering Materials,” Weinheim-Germany: Wiley-VCH, 2013, pp. 119–159.
- [17] M. F. B. da COSTA, “Simulação computacional de transformações não homogêneas por nucleação e crescimento”. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal Fluminense, Volta redonda - RJ, 2017.
- [18] M. J. STARINK, “Analysis of aluminium based alloys by calorimetry : quantitative analysis of reactions and reaction kinetics,” vol. 6608, 2004, doi: 10.1179/095066004225010532.
- [19] D. AQUILANO, V. CAPASSO, A. MICHELETTI, S. PATTI, L. PIZZOCCHERO, M. RUBBO, “A birth and growth model for kinetic-driven crystallization processes , Part I : Modeling,” vol. 10, pp. 71–92, 2009, doi: 10.1016/j.nonrwa.2007.08.015.
- [20] M. K. SATAM, R. NATARAJAN, S. KOBI, M. K. JANGID, Y. KRISHNAN, A. MUKHOPADHYAY, “Nucleation-growth induced phase transformation during delithiation/ lithiation of ‘ ultra-small ’ LiFePO₄ nanoparticles decorating carbon nanotubes,” *SMM*, vol. 124, pp. 1–5, 2016, doi: 10.1016/j.scriptamat.2016.06.036.
- [21] M. FANFONI, M. TOMELLINI, “Film growth viewed as stochastic dot processes,” *J. Phys. Condens. MATTER*, vol. 571, pp. R571–R605, 2005, doi: 10.1088/0953-8984/17/17/R02.
- [22] P. R. RIOS, A. F. PADILHA, “Microstructural Path of Recrystallization in a Commercial Al-Mn-Fe-Si (AA3003) Alloy,” vol. 6, no. 4, pp. 605–613, 2003.

- [23] P. R. RIOS, D. JARDIMA, W. ASSIS, T. SALAZAR, E. VILLA, “Inhomogeneous Poisson Point Process Nucleation: Comparison of Analytical Solution with Cellular Automata Simulation,” *Materials Research*, vol. 12, no. 2, pp. 219–224, 2009.
- [24] R. A. VANDERMEER, D. J. JENSEN, “Microstructural path and temperature dependence of recrystallization in commercial aluminum,” vol. 49, pp. 2083–2094, 2001.
- [25] T. YAMAMOTO, T. SAKUMA, P. R. RIOS, “Application of microstructural path analysis to abnormal grain growth of BaTiO₃ with an excess TiO₂,” *Scr. Mater.*, vol. 39, no. 12, pp. 1713–1717, 1998, doi: 10.1016/S1359-6462(98)00389-3.
- [26] P. R. RIOS, T. YAMAMOTO, T. KONDO, T. SAKUMA, “Abnormal grain growth kinetics of BaTiO₃ with an excess TiO₂,” vol. 46, no. 5, pp. 1617–1623, 1998.
- [27] P. R. RIOS, J. R. C. GUIMARÃES, “Microstructural path analysis of athermal martensite,” vol. 57, pp. 1105–1108, 2007, doi: 10.1016/j.scriptamat.2007.08.019.
- [28] P. R. RIOS, J. R. C. GUIMARÃES, “Formal Analysis of Isothermal Martensite Spread,” vol. 11, no. 1, pp. 103–108, 2008.
- [29] M. BURGER, V. CAPASSO, C. SALANI, “Modelling multi-dimensional crystallization of polymers in interaction with heat transfer,” vol. 3, pp. 139–160, 2002.
- [30] O. X. BARBOSA, W. L. D. S. ASSIS, V. da S. GARCIA, G. B. ALVAREZ, “Computational simulation of gliomas using stochastic methods,” *Pesqui. e Ensino em Ciências Exatas e da Nat.*, vol. 3, no. 2, pp. 199–215, 2019, doi: 10.29215/pecen.v3i2.1285.
- [31] P. R. RIOS, V. T. De OLIVEIRA, L. D. O. PEREIRA, M. R. PEREIRA, J. A. De CASTRO, “Cellular Automata Simulation of Site-saturated and Constant Nucleation Rate Transformations in Three Dimensions,” vol. 9, no. 2, pp. 223–230, 2006.
- [32] P. R. RIOS, E. VILLA, “On the Generalisation of JMAK’s Theory,” *Mater. Sci. Forum*, vol. 753, pp. 137–142, Mar. 2013, doi: doi:10.4028/www.scientific.net/MSF.753.137.
- [33] X. SONG, M. RETTENMAYR, “Modelling study on recrystallization, recovery and their temperature dependence in inhomogeneously deformed materials,” *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 332, no. 1–2, pp. 153–160, 2002, doi: 10.1016/S0921-5093(01)01720-8.
- [34] C. ZAMBALDI, F. ROTERS, D. RAABE, U. GLATZEL, “Modeling and experiments on the indentation deformation and recrystallization of a single-crystal nickel-base superalloy,” *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 454–455, pp. 433–440, 2007, doi: 10.1016/j.msea.2006.11.068.
- [35] M. MATSUMOTO, T. NISHIMURA, “Mersenne Twister: A 623-dimensionally

- equidistributed uniform pseudorandom number generator,” *ACM Trans. Model. Comput. Simulations*, pp. 1–26, 1998.
- [36] A. L. M. ALVES, W. L. S. ASSIS, P. R. RIOS, “Computer simulation of sequential transformations,” *Acta Mater.*, vol. 126, pp. 451–468, 2017, doi: 10.1016/j.actamat.2016.12.068.
- [37] A. L. M. ALVES, E. VILLA, P. R. RIOS, “Transformation kinetics for nucleation on second-phase particles: analytical solution and computer simulation,” *Acta Mater.*, vol. 131, pp. 523–533, 2017, doi: 10.1016/j.actamat.2017.03.078.
- [38] G. M. S. DE SÁ, M. S. LYRIO, A. L. M. ALVES, H. D. S. VENTURA, W. L. D. S. ASSIS, E. VILLA, P. R. RIOS. “Generalizing ellipsoidal growth,” *Mater. Res.*, vol. 22, no. 3, pp. 1–8, 2019, doi: 10.1590/1980-5373-MR-2019-0235.
- [39] H. D. S. VENTURA, G. M. S. De SÁ, A. C. L. DUARTE, W. L. D. S. ASSIS, P. R. RIOS, “Original Article Computer simulation in 3D of a phase transformation nucleated by simple sequential inhibition process,” *J. Mater. Res. Technol.*, vol. 9, no. 1, pp. 152–161, 2020, doi: 10.1016/j.jmrt.2019.10.040.
- [40] T. C. S. RIBEIRO, “Simulação computacional da microestrutura das transformações por nucleação e crescimento”. Tese de Doutorado. Universidade Federal Fluminense, Volta redonda - RJ, 2010. Universidade Federal Fluminense - UFF, 2011.
- [41] P. R. RIOS, R. B. GODIKSEN, S. SCHMIDT, D. JUUL JENSEN, R. A. VANDERMEER, “Analytical expression for the evolution of interfacial area density between transformed grains during nucleation and growth transformations,” *Scr. Mater.*, vol. 54, no. 8, pp. 1509–1513, 2006, doi: 10.1016/j.scriptamat.2005.12.037.
- [42] P. R. RIOS, L. O. PEREIRA, F. F. OLIVEIRA, W. L. S. ASSIS, J. A. CASTRO, “Impingement function for nucleation on non-random sites,” *Acta Mater.*, vol. 55, no. 13, pp. 4339–4348, 2007, doi: 10.1016/j.actamat.2007.04.003.
- [43] R. A. VANDERMEER, “Microstructural descriptors and the effects of nuclei clustering on recrystallization path kinetics,” vol. 53, pp. 1449–1457, 2005, doi: 10.1016/j.actamat.2004.10.054.
- [44] R. A. VANDERMEER, R. A. MASUMURA, B. B. RATH, “Microstructural paths of shape-preserved nucleation and growth transformations,” *Acta Metall. Mater.*, vol. 39, no. 3, pp. 383–389, 1991, doi: 10.1016/0956-7151(91)90317-T.
- [45] W. ASSIS, “Modelamento Numérico De Nucleação E Crescimento Via Autômato Celular”. Tese de Doutorado. Universidade Federal Fluminense, Volta redonda - RJ, 2010.