



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

Tese de Doutorado

**SIMULAÇÃO DAS
TRANSFORMAÇÕES NUCLEADAS
EM CONTORNOS ANISOTRÓPICOS**

UNIVERSIDADE
FEDERAL
FLUMINENSE

**ALUNA:
GABRIELLA M. SILVEIRA DE SÁ**

**ORIENTADORES:
PROF. Ph.D PAULO RANGEL RIOS
PROF. Dr. WESLEY L. DA S. ASSIS**

**Volta Redonda
2021**

GABRIELLA MARIA SILVEIRA DE SÁ

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

SIMULAÇÃO DAS TRANSFORMAÇÕES NUCLEADAS EM CONTORNOS ANISOTRÓPICOS

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

PROF. Dr. WESLEY L. DA S. ASSIS

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

Volta Redonda

2021

GABRIELLA MARIA SILVEIRA DE SÁ

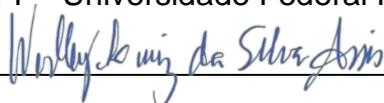
Simulação das transformações nucleadas em contornos anisotrópicos.

Aprovado em 27 de agosto de 2021.

BANCA EXAMINADORA



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

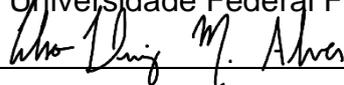


Prof. Dr. Wesley Luiz da Silva Assis - **Orientador**
UFF - Universidade Federal Fluminense

Assinado de forma digital por
LADARIO DA SILVA
ladariosilva@id.uff.br:84937343734
Dados: 2021.09.17 12:22:27 -03'00'



Prof. Dr. Ladário da Silva.
UFF - Universidade Federal Fluminense



Prof. Dr. Celso Luiz Moraes Alves.
UFF - Universidade Federal Fluminense



Prof.^a Dr.^a Ivani de Souza Bott.
PUC-Rio - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro



MABELLE BIANCARDI
OLIVEIRA DE
MEDEIROS:08646785769

Assinado de forma digital por
MABELLE BIANCARDI OLIVEIRA
DE MEDEIROS:08646785769
Dados: 2021.09.23 10:00:58
-03'00'

Prof.^a Dr.^a Mabelle Biancardi Oliveira de Medeiros.
CEFET-RJ

Volta Redonda
2021

Dedico este trabalho, à minha família que é o alicerce de minha alma, não há dúvidas que se eu cheguei até aqui foi porque os meus anjos sem asas me ajudaram, em especial, os meus pais e meu filho amado, sem eles, esse sonho não se concretizaria.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente a Deus;

A minha mãe Carla e ao meu pai Antonio, por todo incentivo, amor, apoio, compreensão. Muito obrigada mãe por sempre me aconselhar e incentivar a absorver conhecimentos sempre, a educação é a arma mais poderosa do mundo e desde cedo aprendi com a senhora. Obrigada pai por toda compreensão e zelo;

Ao meu filho amado Pedro por ser minha razão de ser adiante sempre e ser o grande responsável pela minha evolução, obrigada por tanto amor e carinho. Você é o meu maior incentivador a crescer sempre;

Aos familiares pelo incentivo;

Ao Prof. Paulo Rangel Rios pela orientação, incentivo e transferência de conhecimento, sem dúvidas foi uma grande honra poder trabalhar com esse profissional. Sou extremamente grata por não desistir de mim, e,

mesmo com todas as adversidades para elaboração desta tese, sempre esteve presente me incentivando e apoiando;

Ao Prof. Wesley Luiz da Silva Assis, vulgo Pow, pela orientação, incentivo e transferência de conhecimento. Eu tive muita sorte por ser agraciada com dois orientadores tão completos e que preservam a harmonia do ambiente de trabalho;

Aos meus orientadores, agradeço a amizade e conselhos que obtive durante a elaboração desta tese. O apoio de vocês foi crucial para tantas vitórias e momentos alegres durante esta jornada;

A família do Núcleo de Modelamento Microestrutural – UFF. Em especial, aos integrantes, Felipe e Harison, que foram muito importantes e solícitos a sanar todas as dúvidas sobre os códigos utilizados por nossa equipe;

A todos da UFF que me ajudaram de alguma forma na construção desta tese. Muito obrigada amigos por toda ajuda recebida. Em especial, aos seguranças que não se importavam quando eu virava noites no laboratório ou saia tão tarde;

A parceria do Centro de Computação de Ciência de Materiais, Instituto de Pesquisa de Materiais, da Universidade de Tohoku para o uso do supercomputador MASAMUNE-IMR (Super sistema de computação

para simulações de Multi-escala avançada do Instituto de Materiais de Pesquisa de Próxima Geração). Em particular, aos professores Yayoi Terada e Tetsuo Mohri pela colaboração através do Programa de pesquisa Tohoku (GIMRT);

Ao CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), pela bolsa de estudos e auxílio financeiro que possibilitou a dedicação integral ao programa de pós-graduação e a operacionalização do estudo.

“Se um homem tem sorte, não há como prever extensão possível de sua boa fortuna. Joguem-no Eufrates, e ele se salvará a nado com uma pérola na mão.”

(Provérbio babilônico).

RESUMO

O presente trabalho buscou modelar as transformações que ocorrem quando um policristal sofre tal tipo de processo mecânico, de modo que as interfaces ou contornos de grãos tornem-se anisotrópicos. Para a simulação Não Homogênea, os núcleos são localizados no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo. As regiões transformadas crescem com formas elipsoidais alongadas e achatadas. A simulação e a solução analítica exata apresentam um excelente acordo. No gráfico de contiguidade em relação à fração volumétrica, os dados da esfera e de todos os elipsoides caem na mesma curva. A curva de contiguidade para nucleação de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo cai acima da curva de contiguidade para nucleação de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Este comportamento indica que a nucleação de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo introduziu um efeito de agrupamento dos núcleos. O presente trabalho também apresentou uma simulação computacional de transformações nucleadas em contorno de grão que crescem como elipsoides em planos paralelos. A cinética de transformação da simulação computacional mostra excelente concordância com as expressões analíticas exatas, como esperado. A contiguidade mostrou-se muito útil para entender o efeito das formas dos elipsoides e o número de núcleos por plano nas microestruturas. A contiguidade revelou uma tendência de "agrupamento" típico da nucleação em contornos de grão. Para a nucleação nas interfaces da matriz, a cinética de transformação da matriz com crescimento esférico e crescimento elipsoidal com a mesma quantidade de núcleos nas interfaces obtiveram curvas semelhantes de acordo com a quantidade de núcleos na matriz. A curva de contiguidade para nucleação nas interfaces das matrizes cai acima da curva de contiguidade para nucleação de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Este comportamento indica que a nucleação nas interfaces da matriz introduziu um efeito de agrupamento dos núcleos semelhante ao caso das demais simulações.

Palavras-chave: Transformação de Fases, Recristalização, Simulação Computacional, Contorno de Grão, Microestrutura.

ABSTRACT

This paper sought to model the transformations that occur when a polycrystal suffers such a mechanical process, so that the interfaces or grain boundaries become anisotropic. For the non-homogeneous simulation, the nucleus are located in a space according to a non-homogeneous Poisson point process. The transformed regions grow with elongated and flat ellipsoidal form. The simulation and the exact analytical solution present an excellent agreement. Microstructures were generated for the computational simulation. On the contiguity graph in relation to the volume fraction, the sphere data and from all the ellipsoidal fall on the same curve. The contiguity curve for nucleation according to a non-homogeneous Poisson point process can be drawn above of the contiguity curve for a nucleation according to a homogeneous Poisson point process. This behavior indicates that the nucleation according to a non-homogeneous Poisson point process introduced a grouping effect of the nucleus. This work also showed a computational simulation of transformations nucleated on grain boundaries which grow like parallel ellipsoidal plains. The computational simulation results were compared with a new exact analytical expression obtained by Villa and Rios. The computational simulation kinect transformation shows excellent agreement with the exact analytical expressions, as expected. The contiguity proved very useful to understand the ellipsoidal forms effect and the number of nucleus by plain on the microstructures. The contiguity revealed a "grouping" tendency typical of nucleation in grain boundaries. For the nucleations on the matrix interfaces, the kinect transformation of the matrix with spherical growth and ellipsoidal growth with the same quantities of nucleus on the interfaces obtained similar curves according to the matrix nucleus quantity. The contiguity curves for the nucleation on the matrix interfaces will be plotted above the contiguity curve for the nucleation according to a homogeneous Poisson point process. This behavior indicates that the nucleation on the matrix interfaces introduced a grouping effect of the similar nucleus in the case of the simulations presented before.

Key words: Phase Transformations, Recrystallization, Computer Simulation, Grain Boundary; Microstructure.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Esquema da austenita deformada à quente[15].....	32
Figura 2 - Austenita não recristalizada, deformada 43%[15]	32
Figura 3 - Imagem por EBSD de monocristal de Nb puro deformado por Ecap, linhas claras indicam contornos de baixo ângulo (foto cortesia de H. Sandim).	34
Figura 4 - Fluxograma esquemático do algoritmo desenvolvido.....	43
Figura 5 - Representação em três dimensões do cone causal. [20]	44
Figura 6 - Representação hipotética da teoria do cone causal entre os pontos da matriz: (a) tempo igual a 1, (b) tempo igual a 2, (c) tempo igual a 3, (d) tempo igual a 4, onde ocorre a transformação da célula interceptando um núcleo.[30]	45
Figura 7 - Representação esquemática das condições de contorno. (a) face, (b) aresta, (c) vértice[20].....	45
Figura 8 - Ilustração de um grão altamente deformado por laminação.	47
Figura 9 - Simulação computacional da nucleação aletória plano com 45 planos e 45 núcleos por plano.	49
Figura 10 - Fração volumétrica, V_v , da nucleação aletória plano com 45 planos e 45 núcleos por plano.	50
Figura 11 - Area interfacial, S_v , da nucleação aletória plano com 45 planos e 45 núcleos por plano.	50
Figura 12 - Caminho Microestrutural, MPM, da nucleação aletória plano com 45 planos e 45 núcleos por plano.....	51
Figura 13 - Simulação computacional com 100 núcleos por plano e fator de alongamento de 0,5 na direção X e Y. (a) 5 planos, (b) 10 planos, (c) 15 planos e (d) 30 planos.....	52
Figura 14 - Simulação computacional com nucleação Aleatória. (a) 1000 núcleos e (b) 2000 núcleos.....	53
Figura 15 - Simulação computacional da nucleação não homogênea com grãos elipsoidais prolato com razão: (a) 3:2:2; (b) 2:1:1; (c) 4:1:1; (d) 5:1:1; (e) 8:1:1 e (f) 16:1:1.	55

Figura 16 - Caminho Microestrutural, $S_v(t)$ vs. $V_v(t)$, da nucleação não homogênea com grãos elipsoidais prolato com razão: (a) 3:2:2; (b) 2:1:1; (c) 4:1:1; (d) 5:1:1; (e) 8:1:1 e (f) 16:1:1.....	56
Figura 17 - Area interfacial, S_v , da nucleação não homogênea com grãos elipsoidais prolato com razão: (a) 3:2:2; (b) 2:1:1; (c) 4:1:1; (d) 5:1:1; (e) 8:1:1 and (f) 16:1:1. ...	57
Figura 18 - Fração volumétrica, V_v , da nucleação não homogênea com grãos elipsoidais prolato com razão: (a) 3:2:2; (b) 2:1:1; (c) 4:1:1; (d) 5:1:1; (e) 8:1:1 and (f) 16:1:1.	58
Figura 19 - Simulação computacional da nucleação não homogênea com grãos elipsoidais prolato com razão de: (a) 2:3:3, (b) 1:2:2, (c) 1:4:4, (d) 1:5:5, (e) 1:8:8 and (f) 1:16:16.....	60
Figura 20 - Caminho Microestrutural, $S_v(t)$ vs. $V_v(t)$, da nucleação não homogênea com grãos elipsoidais oblato com razão: (a) 3:2:2; (b) 2:1:1; (c) 4:1:1; (d) 5:1:1; (e) 8:1:1 and (f) 16:1:1.....	61
Figura 21 - Area interfacial, S_v , da nucleação não homogênea com grãos elipsoidais oblato com razão: (a) 3:2:2; (b) 2:1:1; (c) 4:1:1; (d) 5:1:1; (e) 8:1:1 and (f) 16:1:1. ...	62
Figura 22 - Fração volumétrica, V_v , da nucleação não homogênea com grãos elipsoidais oblato com razão: (a) 3:2:2; (b) 2:1:1; (c) 4:1:1; (d) 5:1:1; (e) 8:1:1 and (f) 16:1:1.	63
Figura 23 - Microestruturas via simulação computacional da nucleação não homogênea com grãos que crescem como esferóides oblatos com razão de aspecto 4: 4: 1: $V_v = 0,3$ (b) $V_v = 0,7$, (c) $V_v = 1$ [40].	72
Figura 24 - Microestruturas via simulação computacional da nucleação não homogênea com grãos que crescem como esferóides prolatos com razão de aspecto 4: 1: 1: $V_v = 0$ (b) $V_v = 0,3$, (c) $V_v = 1$ [40].	73
Figura 25 - Microestruturas via simulação computacional da nucleação não homogênea com grãos que crescem como esferóides com razão de aspecto 2:2:1.	73
Figura 26 - Microestruturas via simulação computacional da nucleação não homogênea com grãos que crescem como esferóides com razão de aspecto 2:1:1.	74

Figura 27 - Microestruturas via simulação computacional da nucleação não homogênea com grãos que crescem como esferóides com razão de aspecto 8:8:1.	74
Figura 28 - Microestruturas via simulação computacional da nucleação não homogênea com grãos que crescem como esferóides com razão de aspecto 8:1:1.	74
Figura 29 - Microestrutura totalmente transformada em x_1 , seções com grãos que crescem com razões de aspecto: (a) 1:1:1 no plano $x_1= 0,1$; (b) 1:1:1 no plano $x_1= 0,5$; (c) 1:1:1 no plano $x_1= 0,9$; (d) 2:2:1 no plano $x_1 = 0,1$; (e) 2:2:1 no plano $x_1= 0,5$; (f) 2:2:1 no plano $x_1= 0,9$; (g) 2:1:1	75
Figura 30 - Microestrutura totalmente transformada em x_1 , seções com grãos que crescem: (a) 4:4:1 no plano $x_1= 0,1$; (b) 4:4:1 no plano $x_1= 0,5$; (c) 4:4:1 no plano $x_1= 0,9$; (d) 4:1:1 no plano $x_1 = 0,1$; (e) 4:1:1 no plano $x_1= 0,5$; (f) 4:1:1 no plano $x_1= 0,9$; (g) 8:8:1 no plano $x_1 = 0,1$; (h) 8:8:1 em plano $x_1 = 0,5$; (i) 8:8:1 no plano $x_1 = 0,9$, (j) 8:1:1 no plano $x_1 = 0,1$; (k) 8:1:1 em plano $x_1 = 0,5$; (l) 8:1:1 no plano $x_1 = 0,9$	76
Figura 31 - Cinética de transformação para elipsoides oblatos com razões de aspecto: 2: 2: 1, 4: 4: 1, 8: 8: 1. (a) Densidade de volume média em função do tempo normalizado; (b) Fração volumétrica em função do tempo normalizado. [40]	77
Figura 32 - Cinética de transformação para elipsoides prolatos com razões de aspecto: 2: 1: 1, 4: 1: 1, 8: 1: 1. (a) Densidade de volume média em função do tempo normalizado; (b) Fração volumétrica em função do tempo normalizado. [40]	77
Figura 33 - Cinética de transformação para elipsoides com razões de aspecto: 2: 2: 1. (a) Densidade de volume média em função do tempo; (b) Fração volumétrica em função do tempo.....	78
Figura 34 - Cinética de transformação para elipsoides com razões de aspecto: 2: 1: 1. (a) Densidade de volume média em função do tempo; (b) Fração volumétrica em função do tempo.....	78
Figura 35 - Cinética de transformação para elipsoides com razões de aspecto: 4: 4: 1. (a) Densidade de volume média em função do tempo; (b) Fração volumétrica em função do tempo.....	78
Figura 36 - Cinética de transformação para elipsoides com razões de aspecto: 4: 1: 1. (a) Densidade de volume média em função do tempo; (b) Fração volumétrica em função do tempo.....	79

Figura 37 - Cinética de transformação para elipsoides com razões de aspecto: 8: 8: 1. (a) Densidade de volume média em função do tempo; (b) Fração volumétrica em função do tempo.....	79
Figura 38 - Cinética de transformação para elipsoides com razões de aspecto: 8: 1: 1. (a) Densidade de volume média em função do tempo; (b) Fração volumétrica em função do tempo.....	79
Figura 39 - Contiguidade em relação à fração volumétrica. Linha sólida: o crescimento de esferas nucleadas de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Linha tracejada: o crescimento de esferas nucleadas de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo. Os símbolos correspondem a elipsoides nucleados de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo.[40].....	80
Figura 40 - Microestrutura de elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 20 núcleos aleatórios em cada plano. A relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o comprimento mais curto eixo do elipsoide é 4:4:1. A microestrutura corresponde a uma fração transformada de: a) $V_v = 0.1$; b) $V_v = 0.5$; c) $V_v = 1$ [59].....	97
Figura 41 - Microestrutura de elipsoides prolatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 20 núcleos aleatórios em cada plano. A relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o comprimento mais curto eixo do elipsoide é 4:1:1. A microestrutura corresponde a uma fração transformada de: a) $V_v = 0.1$; b) $V_v = 0.5$; c) $V_v = 1$ [59].....	97
Figura 42 - Microestrutura de elipsoides oblatos e prolatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 10 núcleos aleatórios em cada plano. A microestrutura corresponde a matriz totalmente transformada: (a) 2:2:1, (b) 2:1:1, (c) 4:4:1, (d) 4:1:1, (e) 8:8:1 e (f) 8:1:1.....	98
Figura 43 - Microestrutura com crescimento esférico nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 10 núcleos aleatórios em cada plano. A microestrutura corresponde a matriz totalmente transformada.	99
Figura 44 - Microestrutura com crescimento esférico nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 20 núcleos aleatórios em cada plano. A microestrutura corresponde a matriz totalmente transformada.	99
Figura 45 - Microestrutura de elipsoides oblatos e prolatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 20 núcleos aleatórios em cada plano. A microestrutura	

corresponde a matriz totalmente transformada: (a) 2:2:1, (b) 2:1:1, (c) 4:4:1, (d) 4:1:1, (e) 8:8:1 e (f) 8:1:1..... 100

Figura 46 - Microestrutura de elipsoides oblatos e prolatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 80 núcleos aleatórios em cada plano. A microestrutura corresponde a matriz totalmente transformada: (a) 2:2:1, (b) 2:1:1, (c) 4:4:1, (d) 4:1:1, (e) 8:8:1 e (f) 8:1:1..... 101

Figura 47 - Microestrutura com crescimento esférico nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 80 núcleos aleatórios em cada plano. A microestrutura corresponde a matriz totalmente transformada..... 102

Figura 48 - Seção longitudinal mostrando a microestrutura totalmente transformada de elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios. A proporção do comprimento dos eixos mais longos em relação ao eixo mais curto do elipsoide é 4: 4: 1. As Figuras representam microestruturas que mostram o efeito para o número de núcleos por plano: a) 20 núcleos em cada plano; b) 80 núcleos em cada plano.[59] 103

Figura 49 - Seção longitudinal mostrando a microestrutura totalmente transformada de elipsoides prolatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios. A proporção do comprimento dos eixos mais longos em relação ao eixo mais curto do elipsoide é 4: 1: 1. As Figuras representam microestruturas que mostram o efeito para o número de núcleos por plano: a) 20 núcleos em cada plano; b) 80 núcleos em cada plano.[59] 103

Figura 50 - Seção longitudinal mostrando a microestrutura totalmente transformada de elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios e 10 núcleos. A proporção do comprimento dos eixos mais longos em relação ao eixo mais curto do elipsoide é: (a) 2:2:1, (b) 2:1:1, (c) 4:4:1, (d) 4:1:1, (e) 8:8:1 e (f) 8:1:1..... 105

Figura 51 - Seção longitudinal mostrando a microestrutura totalmente transformada de elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios e 20 núcleos. A proporção do comprimento dos eixos mais longos em relação ao eixo mais curto do elipsoide é: (a) 2:2:1, (b) 2:1:1, (c) 8:8:1, (d) 8:1:1. 106

Figura 52 - Seção longitudinal mostrando a microestrutura totalmente transformada de elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios e 80 núcleos. A proporção do comprimento dos eixos mais longos em relação ao eixo mais curto do elipsoide é: (a) 2:2:1, (b) 2:1:1, (c) 8:8:1, (d) 8:1:1. 107

Figura 53 - Cinética de transformação de elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios. Cada Figura mostra o efeito do número de núcleos por plano na transformação cinética: 10 núcleos e 80 núcleos em cada plano. A Figura 53a representa o resultado do número de núcleos por plano na transformação cinética de elipsoides achatados. A relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o comprimento do eixo mais curto do elipsoide oblato é 4:4:1. A Figura 53b mostra o resultado do número de núcleos por plano na cinética de transformação de elipsoides prolatos. A proporção do comprimento dos eixos mais curtos do elipsoide prolato para o eixo mais longo é 1:1:4.[59].....	108
Figura 54 - Efeito da razão de aspecto e do número de núcleos por plano na cinética de transformação de elipsoides oblatos. Em cada Figura, as curvas mostram o efeito da relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o eixo mais curto dos elipsoides com 10 núcleos por plano.	108
Figura 55 - Efeito da razão de aspecto e do número de núcleos por plano na cinética de transformação de elipsoides oblatos. Em cada Figura, as curvas mostram o efeito da relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o eixo mais curto dos elipsoides com 20 núcleos por plano.	109
Figura 56 - Efeito da razão de aspecto e do número de núcleos por plano na cinética de transformação de elipsoides oblatos. Em cada Figura, as curvas mostram o efeito da relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o eixo mais curto dos elipsoides com 80 núcleos por plano.	109
Figura 57 - Efeito da razão de aspecto e do número de núcleos por plano na cinética de transformação de elipsoides prolatos. Em cada Figura, as curvas mostram o efeito da relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o eixo mais curto dos elipsoides com 10 núcleos por plano.	110
Figura 58 - Efeito da razão de aspecto e do número de núcleos por plano na cinética de transformação de elipsoides prolatos. Em cada Figura, as curvas mostram o efeito da relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o eixo mais curto dos elipsoides com 20 núcleos por plano.	110
Figura 59 - Efeito da razão de aspecto e do número de núcleos por plano na cinética de transformação de elipsoides prolatos. Em cada Figura, as curvas mostram o efeito da relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o eixo mais curto dos elipsoides com 80 núcleos por plano.	111

Figura 60 - Contiguidade de elipsoides oblatos e prolatos em função da fração volumétrica transformada. A linha tracejada é a linha teórica para a contiguidade das regiões esféricas nucleado no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. A linha sólida é a contiguidade simulada de esferas nucleadas em planos paralelos. Os símbolos correspondem a resultados da simulação computacional. Contiguidade de elipsoides nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 10 núcleos por cada plano. Adaptado de [59].....	112
Figura 61 - Contiguidade de elipsoides oblatos e prolatos em função da fração volumétrica transformada. A linha tracejada é a linha teórica para a contiguidade das regiões esféricas nucleado no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. A linha sólida é a contiguidade simulada de esferas nucleadas em planos paralelos. Os símbolos correspondem a resultados da simulação computacional. Contiguidade de elipsoides nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 20 núcleos por cada plano.	113
Figura 62 - Contiguidade de elipsoides oblatos e prolatos em função da fração volumétrica transformada. A linha tracejada é a linha teórica para a contiguidade das regiões esféricas nucleado no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. A linha sólida é a contiguidade simulada de esferas nucleadas em planos paralelos. Os símbolos correspondem a resultados da simulação computacional. Contiguidade de elipsoides nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 80 núcleos por cada plano. Adaptado de [59].....	113
Figura 63 - Matriz inicial com 128 núcleos, com razão de aspecto: (a) 1:1:1, (b) 1:1:1, (c) 2:2:1, (d) 2:2:1, (e) 4:4:1 e (f) 4:4:1.	121
Figura 64 - Matriz inicial com 128 núcleos, com razão de aspecto: (a) 8:8:1, (b) 8:8:1, (c) 16:16:1, (d) 16:16:1.....	122
Figura 65 – Matriz inicial com razão de aspecto 2:2:1 com 3000 núcleos nas interfaces. Corte na seção X.	123
Figura 66 – Evolução da Matriz com 3000 núcleos, corte na seção X, com, $Vv = 0.1$ e $Vv = 1$. Com razão de aspecto: 1:1:1.	123
Figura 67 - Nucleação com 250 núcleos nas interfaces da matriz inicial com 128 núcleos, com razão de aspecto: (a) 2:2:1, (b) 4:4:1, (c) 8:8:1 e (d) 16:16:1.....	124
Figura 68 - Nucleação com 250 núcleos nas interfaces da matriz inicial com 128 núcleos, com crescimento esférico na matriz inicial.....	125

Figura 69 - Nucleação com 707 núcleos nas interfaces da matriz inicial com 128 núcleos, com crescimento esférico na matriz inicial.....	125
Figura 70 - Nucleação com 707 núcleos nas interfaces da matriz inicial com 128 núcleos, com razão de aspecto: (a) 2:2:1, (b) 4:4:1, (c) 8:8:1 e (d) 16:16:1.....	126
Figura 71 - Nucleação com 1507 núcleos nas interfaces da matriz inicial com 128 núcleos, com razão de aspecto: (a) 2:2:1, (b) 4:4:1, (c) 8:8:1 e (d) 16:16:1.....	127
Figura 72 - Nucleação com 1507 núcleos nas interfaces da matriz inicial com 128 núcleos, com crescimento esférico na matriz inicial.....	127
Figura 73 - Nucleação com 3000 núcleos nas interfaces da matriz inicial com 128 núcleos, com razão de aspecto: (a) 2:2:1, (b) 4:4:1, (c) 8:8:1 e (d) 16:16:1.....	128
Figura 74 - Nucleação com 3000 núcleos nas interfaces da matriz inicial com 128 núcleos, com crescimento esférico na matriz inicial.....	129
Figura 75 - Cinética de transformação da matriz com crescimento esférico com 250 núcleos nas interfaces.....	129
Figura 76 - Cinética de transformação da matriz com crescimento elipsoidal com 250 núcleos nas interfaces com razão de aspecto (a) 2:2:1, (b) 4:4:1, (c) 8:8:1 e (d) 16:16:1.	130
Figura 77 - Cinética de transformação da matriz com crescimento elipsoidal com 707 núcleos nas interfaces com razão de aspecto (a) 2:2:1, (b) 4:4:1, (c) 8:8:1 e (d) 16:16:1.	131
Figura 78 - Cinética de transformação da matriz com crescimento esférico com 707 núcleos nas interfaces.....	131
Figura 79 - Cinética de transformação da matriz com crescimento elipsoidal com 1507 núcleos nas interfaces com razão de aspecto (a) 2:2:1, (b) 4:4:1, (c) 8:8:1 e (d) 16:16:1.	132
Figura 80 - Cinética de transformação da matriz com crescimento esférico com 1507 núcleos nas interfaces.....	133
Figura 81 - Cinética de transformação da matriz com crescimento esférico com 250 núcleos nas interfaces.....	133
Figura 82 - Cinética de transformação da matriz com crescimento elipsoidal com 3000 núcleos nas interfaces com razão de aspecto (a) 2:2:1, (b) 4:4:1, (c) 8:8:1 e (d) 16:16:1.	134

Figura 83 - Contiguidade de elipsoides oblatos em função da fração volumétrica transformada com 250 núcleos. A linha tracejada é a linha teórica para a contiguidade das regiões esféricas nucleado no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Os símbolos correspondem a resultados da simulação computacional nas interfaces das matrizes com elipsoides de diferentes formas... 135

Figura 84 - Contiguidade de elipsoides oblatos em função da fração volumétrica transformada com 707 núcleos. A linha tracejada é a linha teórica para a contiguidade das regiões esféricas nucleado no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Os símbolos correspondem a resultados da simulação computacional nas interfaces das matrizes com elipsoides de diferentes formas... 135

Figura 85 - Contiguidade de elipsoides oblatos em função da fração volumétrica transformada com 1507 núcleos. A linha tracejada é a linha teórica para a contiguidade das regiões esféricas nucleado no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Os símbolos correspondem a resultados da simulação computacional nas interfaces das matrizes com elipsoides de diferentes formas... 136

Figura 86 - Contiguidade de elipsoides oblatos em função da fração volumétrica transformada com 3000 núcleos. A linha tracejada é a linha teórica para a contiguidade das regiões esféricas nucleado no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Os símbolos correspondem a resultados da simulação computacional nas interfaces das matrizes com elipsoides de diferentes formas... 136

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Área superficial por unidade de volume S_V , determinado por cada direção. S_{va1} para a direção em x, S_{va2} para a direção em y e S_{va3} para a direção em z. .54

Tabela 2 - Área superficial por unidade de volume S_v , determinado por cada direção. S_{va1} para a direção em x, S_{va2} para a direção em y e S_{va3} para a direção em z. .59

LISTA DE ABREVIATURAS, SIGLAS E SÍMBOLOS

JMAK	Johnson, Mehl, Avrami e Kolmogorov
3D	Três Dimensões
2D	Duas Dimensões
V_E	Volume Estendido
V_V	Fração Volumétrica Transformada
t	Tempo
n	Constante de Avrami que Indica o Tipo de Nucleação
G	Velocidade de Crescimento
N_V	Número de Núcleos por Unidade de Volume
S_V	Área Superficial entre Material transformado e não transformado por Unidade de Volume
V_E	Volume Estendido
V_V	Fração Volumétrica Transformada
R	Raio da Partícula Esférica
MP	Caminho Microestrutural
S_V^{Planos}	Área por Unidade de Volume dos Planos Aleatórios
λ_s	Número de Núcleos por Unidade de Área dos Planos
C	Contiguidade
R_C	Raio da Esfera do Cone Causal
N	Número de Núcleos
D	Diâmetro
r	Raio Equivalente ao Raio da Esfera

Sumário

1. INTRODUÇÃO	25
2. OBJETIVOS	27
2.1. Objetivos Gerais	27
2.2. Objetivos Específicos	27
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	28
3.1. FENÔMENOS QUE OCORREM DURANTE A DEFORMAÇÃO E RECRISTALIZAÇÃO	28
3.1.1. Bandas de deformação	29
3.1.2. Bandas de transição	29
3.1.3. Bandas de cisalhamento	29
3.1.4. Microbandas	30
3.2 EXEMPLOS DE MICROESTRUTURAS POLICRISTAIS COM INTERFACES ANISOTRÓPICAS	31
3.2.1. Austenita deformada à quente	31
3.2.2. Ecap	33
3.3. TEORIA CLÁSSICA DE JOHNSON-MEHL, AVRAMI E KOMOGOROV (JMAK)	34
3.3.1. Limitações da teoria de JMAK	35
3.4. TEORIA DO MODELO DE JMAK PARA GRÃOS ELIPSOIDAIIS	36
3.5. NUCLEAÇÃO POR PROCESSO DE PONTO DE POISSON	37
3.6. MODELO ANALÍTICO DE CAHN PARA NUCLEAÇÃO EM PLANOS E LINHAS	40
4. METODOLOGIA	41
4.1. MODELO COMPUTACIONAL	41
4.2. CONE CAUSAL	44
4.3. CONDIÇÕES DE CONTORNO PERIÓDICAS	45

5. CONSTRUÇÃO VIA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA MATRIZ DEFORMADA.....	46
5.1 METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL.....	47
5.1.1. Matriz deformada.....	47
5.1.2 Inserção do fator de alongamento.....	47
5.1.3 Nucleação segundo processo de Poisson não homogêneo com grãos prolatos	48
5.1.4 Nucleação segundo processo de Poisson não homogêneo com grãos oblatos	48
5.2. RESULTADOS E DISCUSSÃO	48
5.2.1 Variação dos núcleos iniciais.	48
5.2.2. Inserção do fator de alongamento.....	51
5.2.3. Nucleação segundo processo de Poisson não homogêneo com grãos prolatos	54
5.2.3 Nucleação segundo processo de Poisson não homogêneo com grãos oblatos	59
5.3. CONCLUSÕES.....	64
6. SIMULAÇÃO DA GENERALIZAÇÃO DO CRESCIMENTO ELIPSOIDAL	65
6.1 FUNDO MATEMÁTICO	66
6.2 METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL.....	71
6.3 RESULTADOS	72
6.3.1 Evolução Microestrutural	72
6.3.2. Fração volumétrica transformada em relação ao tempo	77
6.3.3. Contiguidade	80
6.4. DISCUSSÃO.....	80
6.5. CONCLUSÕES.....	84

7. MODELAGEM ANALÍTICA E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA TRANSFORMAÇÃO DE ELIPSOIDES NUCLEADO EM PLANOS PARALELOS ALEATÓRIOS	86
7.1. FUNDO MATEMÁTICO	90
7.2. METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL	95
7.3. RESULTADOS.....	96
7.3.1. Evolução microestrutural em 3D.....	96
7.3.1.1. Microestutura em 3D com 10 núcleos e 20 planos.....	97
7.3.1.2. Microestutura em 3D com 20 núcleos e 20 planos.....	99
7.3.1.3. Microestutura em 3D com 80 núcleos e 20 planos.....	100
7.3.2. Evolução microestrutural em 2D.....	102
7.3.2.1. Microestutura em 2D com 10 núcleos e 20 planos.....	104
7.3.2.2. Microestutura em 2D com 20 núcleos e 20 planos.....	105
7.3.2.3. Microestutura em 2D com 80 núcleos e 20 planos.....	106
7.3.3. Fração volumétrica transformada em função do tempo	107
7.3.4. Contiguidade.....	112
7.4. DISCUSSÃO.....	115
7.5. CONCLUSÃO	117
8. ESTUDO COMPARATIVO DO MODELO ANALÍTICO COM A SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA NUCLEAÇÃO NAS INTERFACES.....	119
8.1. METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL.....	120
8.2. RESULTADOS	123
8.2.1 Evolução Microestrutural	123
8.2.1.1. Simulação Computacional com 250 núcleos.....	124
8.2.1.2. Simulação Computacional com 707 núcleos.....	125
8.2.1.3. Simulação Computacional com 1507 núcleos.....	126
8.2.1.4. Simulação Computacional com 3000 núcleos.....	128

8.2.2. Cinética.....	129
8.2.2.1. Cinética da simulação computacional com 250 núcleos.....	129
8.2.1.2 Cinética da simulação computacional com 707 núcleos.....	130
8.2.1.3. Cinética da simulação computacional com 1507 núcleos.....	132
8.2.1.4. Cinética da simulação computacional com 3000 núcleos.....	133
8.2.2. Contiguidade.....	134
8.3. DISCUSSÃO.....	137
8.4. CONCLUSÕES.....	139
9. CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	140
10. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	142
11. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	143
12. APÊNDICES.....	152
12.1. TRABALHOS PUBLICADOS DURANTE O DESENVOLVIMENTO DESTA TESE.....	152
12.1.1. Artigos completos publicados em periódicos.....	152
12.1.2. Trabalhos completos publicados em anais de congressos.....	153
12.1.3. Resumos publicados em anais de congressos.....	154
12.1.3.1. Resumos expandidos publicados em anais de congressos.....	154

1. INTRODUÇÃO

Os aços durante seu processamento, sofrem tanto deformação a quente quanto a frio. Por esse motivo é de grande importância o conhecimento de encruamento, recuperação, recristalização, crescimento de grão, não só para processar corretamente esses materiais, mas também para controlar suas microestruturas. Nesta tese dá-se o foco às simulações pelo método do Cone Causal com nucleações com crescimento esféricos e elipsoidais do tipo oblato e prolato com variações na razão de aspecto. Desta maneira, foi proposto modelar as transformações que ocorrem quando um policristal possui as interfaces ou contornos de grãos anisotrópicos. Isto é, a densidade das interfaces depende da direção escolhida.

A cinética de transformação é analisada com a clássica teoria de John-Mehl, Avrami e Kolmogorov, JMAK[1–5]. Essa teoria tem em seu desenvolvimento suposições como: nucleação aleatória, crescimento com velocidade constante, forma dos grãos esférica e homogeneidade energética na matriz. Existem teorias para o caso de nucleação periódica[6] e para alguns casos quando ocorrem “clustering”[7].

Entretanto, algumas das suposições consideradas para o desenvolvimento da teoria analítica do modelo de JMAK fogem da realidade dos fenômenos. Se considerar a energia armazenada, após o processo de deformação, como sendo uniforme. Quando o material é deformado, a distribuição de energia armazenada não é uniforme devido a alguns fatores como: diferença de taxa de deformação de uma região para outra, átomos de impureza e/ou precipitados que restringem o movimento das discordâncias, entre outros. Conseqüentemente, como a energia armazenada é a força motriz para o processo de recristalização, a nucleação não é aleatória. Porque ela ocorre em sítios de maior energia armazenada e o crescimento não ocorre com velocidade constante.

Partindo deste ponto é levado em consideração o modelo analítico de Cahn também para a análise das curvas de cinética de transformação. Cahn em seu estudo

derivou expressões para a fração volumétrica transformada em função do tempo quando a nucleação ocorre em planos e linhas aleatórias, sendo de grande interesse esse modelo para esta tese.

No capítulo 6, foi generalizado trabalhos anteriores de Rios e Villa sobre o crescimento elipsoidal. A equação generalizada se aplica à nucleação de elipsoides de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo. Na simulação, os núcleos estão localizados no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo. As regiões transformadas crescem com elipsoides no formato de prolatos e oblatos.

No capítulo 7, foi abordado a questão da generalização da nucleação elipsoidal em contornos de grão abordando três aspectos chaves. O primeiro aspecto é uma generalização da nucleação e crescimento de elipsoides em contornos de grão. O segundo aspecto é uma simulação computacional da nucleação e crescimento de elipsoides oblatos e prolatos em planos paralelos aleatórios e a comparação da simulação computacional com a solução matemática exata de Villa e Rios. E o terceiro aspecto é usar o resultado da solução para planos paralelos aleatórios, igual à solução para planos aleatórios. Este resultado é valioso porque nos permite discutir o comportamento da nucleação e crescimento de elipsoides em planos aleatórios, ou seja, contornos de grãos com base na solução analítica e simulação computacional para planos paralelos aleatórios.

No capítulo 8, abordou-se o modelamento das nucleações nas interfaces de matrizes com grãos elipsoidais com diferentes formas. Variou-se o número de núcleos para uma melhor investigação do efeito da nucleação nas interfaces. O capítulo 9 apresenta as considerações finais de todo o estudo abordado por esta tese de doutorado.

Cabe ainda salientar que durante a realização desta tese, foram publicados 13 trabalhos, dos quais 5 em periódicos internacionais de relevância, inclusive com conceito A no Qualis CAPES. A lista completa dessas publicações encontra-se no Apêndice 12.1.

2. OBJETIVOS

2.1. Objetivos Gerais

Nesta tese foi proposto modelar as transformações que ocorrem quando um policristal possui as interfaces ou contornos de grão anisotrópicos. Isto é, a densidade das interfaces depende da direção escolhida.

2.2. Objetivos Específicos

- Desenvolver um código computacional, capaz de simular com fidelidade as transformações que ocorrem quando um policristal possui as interfaces ou contornos de grãos anisotrópicos;
- Simular a situação na qual o policristal foi deformado de tal forma que os grãos estejam alongados;
- Simular a situação na qual a transformação nucleie nas interfaces de grãos deformados por laminação, grãos “panqueca”;
- Propor parâmetros microestruturais capazes de caracterizar qualitativa e quantitativamente as microestruturas multifásicas;
- Comparar as simulações computacionais com o modelo analítico de JMAK[1-5], Cahn e Rios e Vila[6] e assim extrair conclusões pertinentes;

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1. FENÔMENOS QUE OCORREM DURANTE A DEFORMAÇÃO E RECRISTALIZAÇÃO

A deformação plástica pode ocorrer de quatro modos distintos: deformação por deslizamento, maclação, difusão e transformação de fases. Sendo mais comumente a deformação por deslizamento de planos ocasionados pelo movimento das discordâncias. A deformação plástica por deslizamento acontece segundo determinados planos e direções denominados sistemas de escorregamentos.

Segundo HANSEN[8], a deformação plástica ocorrida em materiais policristalino, está relacionada a processos de acomodação macro e microscópica que afetam a evolução microestrutural. Durante a acomodação macroscópica ocorre a mudança no formato dos grãos, que se tornam mais alongados, seguido de um considerável aumento na área total dos contornos de grãos. Enquanto ocorre a acomodação, discordâncias são geradas continuamente durante a deformação e passam a interagir entre si levando à formação de subestruturas mais complexas[9]. Os fenômenos de recuperação e recristalização são determinados através da quantidade de energia armazenada durante os processos de deformação plástica. Assim, a condição microestrutural do estado deformado irá determinar o desenvolvimento, o crescimento e a orientação dos núcleos que originarão novas estruturas de grão durante a recristalização. A distribuição de defeitos criados durante a deformação depende de fatores como a estrutura cristalina, a natureza química e a pureza do material, velocidade de deformação e sua energia de empilhamento (EDE)[10].

As heterogeneidades de deformação iniciam-se pela ativação de novos sistemas de deslizamento com o intuito de acomodar localmente as flutuações das tensões induzidas na microestrutura. Na laminação a frio as heterogeneidades de deformação,

são de grande importância no estudo da recristalização e da evolução da textura cristalográfica. Mas, devido à complexidade das estruturas de deformação, os diferentes tipos de subestruturas, foram classificados de acordo com uma análise detalhada da desorientação, morfologia, espaçamento, e orientação cristalográfica. Subestruturas formadas no interior dos grãos durante a deformação plástica podem ser classificadas como banda de deformação, microbandas ou bandas de transição, contorno de grão e regiões de inclusão[11]. As principais heterogeneidades de deformação serão abordadas a seguir.

3.1.1. Bandas de deformação

Pode se definir bandas de deformação como uma região vizinha de um mesmo grão que sofreu rotações distintas. O surgimento das bandas de deformação é sugerido através de dois mecanismos[12]. No primeiro caso a banda de deformação surge pela deformação imposta no cristal que pode ser acomodada por distintos sistemas de deslizamento. O outro tipo seria pela deformação distinta em diferentes regiões do mesmo grão. Uma característica dessa heterogeneidade é que as bandas de deformação ficam contidas no interior do grão. Metais puros com estrutura cristalina do tipo CCC e CFC, geralmente apresentam este tipo de banda de deformação.

3.1.2. Bandas de transição

As bandas de transição são regiões que determinam a fronteira entre duas bandas de deformação, e são caracterizadas pela constante mudança de orientação[12]. São constituídas em regiões distintas de um mesmo grão que sofreram rotações diferentes durante a deformação devido à utilização de diferentes sistemas de escorregamento[13]. Como as bandas de deformação, as bandas de transição não ultrapassam seus contornos, permanecendo no interior do grão. As células de discordâncias no interior das bandas de transição são menores e mais alongadas na direção da banda ou da solicitação mecânica.

3.1.3. Bandas de cisalhamento

As bandas de cisalhamento, em geral, ocorrem em metais altamente deformados a frio e com grãos grosseiros, em ligas de alumínio contendo elevados

teores de magnésio ou cobre e em ligas contendo partículas cisalháveis. Estas heterogeneidades ocorrem durante a laminação até grandes reduções e, dependendo da deformação aplicada e da espessura da chapa, colônias deste tipo de bandas tendem a unir-se de um lado ao outro da espessura levando a ruptura ou à formação de defeitos superficiais indesejáveis. A nucleação da recristalização é beneficiada através das significativas diferenças de orientação entre a estrutura de discordâncias desenvolvida dentro da própria banda e em relação a sua vizinhança, estas heterogeneidades de deformação são locais de nucleação mais favoráveis para a recristalização primária[12].

3.1.4. Microbandas

As microbandas podem ser definidas como estruturas que separam diferentes blocos de discordâncias em metais e ligas deformados plasticamente para pequenas e médias deformações. Estas heterogeneidades tendem a alinhar-se com a direção de laminação como aumento da deformação. As paredes que formam as microbandas, assim como as células de deformação são formadas por arranjos de discordâncias, porém a densidade de discordâncias encontrada no interior das microbandas é mais elevada[14]. A diferença de orientação entre as microbandas em relação à matriz é pequena, e devido às dimensões deste tipo de estrutura, sua observação só se torna possível com o auxílio da técnica de microscopia eletrônica de transmissão (MET).

Como foi mencionado, com a deformação induzida em um material ocorre o aumento da densidade de discordâncias elevando também o nível de energia armazenada na forma metaestável. Sob um subsequente aquecimento esta energia pode ser liberada por dois distintos processos: recuperação e recristalização. A recuperação pode ser entendida como uma forma de rearranjo e aniquilação das discordâncias dentro da matriz deformada. E a recristalização como sendo o rearranjo das discordâncias formando uma região isenta de defeitos unido a um contorno de alto ângulo com alta mobilidade.

A recristalização primária é a etapa específica em que acontece a nucleação e o crescimento de novos grãos. A nucleação é o período de ativação térmica dos núcleos com os maiores níveis energéticos armazenados na matriz deformada. As

regiões que contém os contornos de grão, maclas, bandas de deformação e precipitados são geralmente locais que apresentam altos níveis de energia armazenada em relação ao restante da matriz. Sendo assim, tornam-se locais propícios para a ativação e desenvolvimento dos núcleos. Essa afirmação pode ser feita partindo-se do princípio que os contornos de grão de baixo e alto ângulo evoluem com maior facilidade em regiões mais favorecidas de força motriz para o crescimento.[13]

3.2 EXEMPLOS DE MICROESTRUTURAS POLICRISTAIS COM INTERFACES ANISOTRÓPICAS

3.2.1. Austenita deformada à quente

O principal objetivo da laminação controlada é refinar a microestrutura e, assim, aumentar tanto a resistência quanto à tenacidade do aço laminado a quente. A diferença entre os aços laminados a quente convencionalmente para os que sofreram laminação controlada está no fato de que a nucleação da ferrita α ocorre exclusivamente nas interfaces do grão da austenita γ para a laminação a quente convencional, enquanto, a nucleação da ferrita α ocorre no interior do grão da austenita γ e nas interfaces do grão da austenita γ durante a laminação controlada levando a uma estrutura de grão mais refinada. A Figura 1 apresenta o esquema da austenita deformada à quente sendo possível observar na Figura 2a a estrutura da austenita antes da deformação com grãos grosseiros. Após a deformação imposta no material ocorre uma mudança no formato dos grãos devido a processos de acomodação macro e microscópica em consequência da deformação plástica, apresentando a partir de então grãos alongados como pode ser observado na Figura 2b, e na Figura 2c o material se encontra recristalizado obtendo-se uma estrutura de grãos uniforme e refinada[8,15].

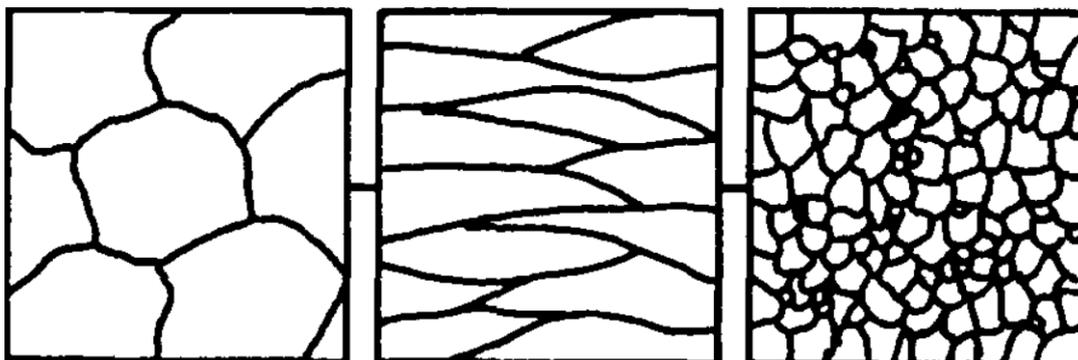


Figura 1 - Esquema da austenita deformada à quente[15]

A recrystalização pode ser estática ou dinâmica. O comportamento da recrystalização se divide em: recuperação, recrystalização parcial e recrystalização. Na região parcialmente recrystalizada a estrutura consiste da mistura de grãos recrystalizados e dos grãos recuperados. Na prática, os passes de laminação são realizados na região de recuperação ou, no máximo, na região parcialmente recrystalizada. Mesmo se a deformação for aplicada repetidamente na região de recuperação, ocorre uma recrystalização muito lenta e incompleta que leva à formação de uma estrutura mista de grãos ferríticos α nucleados nas interfaces dos grãos austeníticos γ e no interior do grão austeníticos γ e por este meio obtém-se grãos ultrafinos. Na Figura 2 é possível observar a variação na morfologia dos grãos após 43% de redução em laminação controlada em uma região recuperada. Os grãos não estão muito alongados, pois, a deformação é pequena.

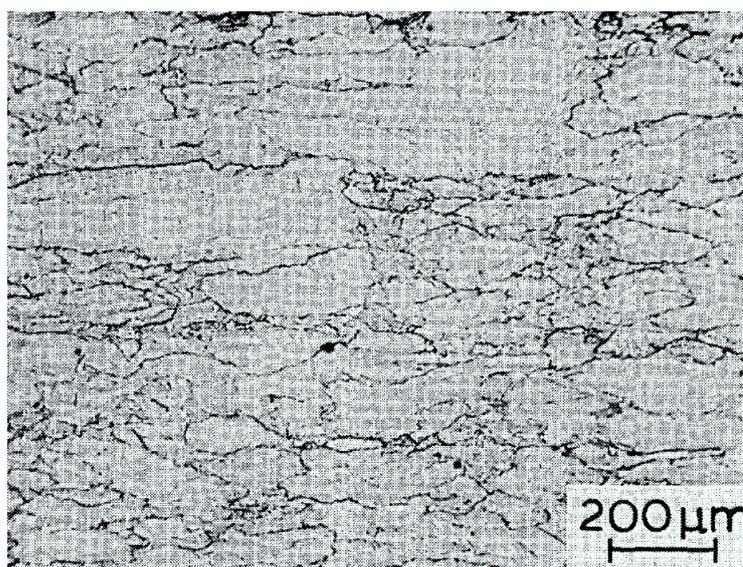


Figura 2 - Austenita não recrystalizada, deformada 43% [15].

3.2.2. ECAP

A deformação plástica ocorrida em materiais policristalino, está relacionada a processos de acomodação macro e microscópica que afetam a evolução microestrutural. Durante a acomodação macroscópica ocorre a mudança no formato dos grãos, que se tornam mais alongados, seguido de um considerável aumento na área total dos contornos de grãos[16]. Enquanto ocorre a acomodação, discordâncias são geradas continuamente durante a deformação e passam a interagir entre si levando à formação de subestruturas mais complexas[17]. Os fenômenos de recuperação e recristalização são determinados através da quantidade de energia armazenada durante os processos de deformação plástica. Assim, a condição microestrutural do estado deformado irá determinar o desenvolvimento, o crescimento e a orientação dos núcleos que originarão novas estruturas de grão durante a recristalização.

Um material quando submetido a uma deformação, via ECAP (Figura 3), por exemplo, apresenta diferentes condições para a ocorrência dos mecanismos de início da recristalização dependendo da temperatura de recozimento[18].

O início da recristalização pode ocorrer por mecanismos de migração de contornos induzida por deformação, migração de subcontornos e coalescimento de subgrãos. O coalescimento é um mecanismo que promove crescimento de subgrão, eliminação de subcontornos (diminuindo a energia armazenada) e alteração das diferenças de orientação entre o grupo que sofreu coalescimento e os subgrãos vizinhos. O aumento dessas diferenças de orientação leva ao aparecimento de um contorno de alto ângulo capaz de migrar com alta velocidade, constituindo um núcleo de recristalização[13].

Na Figura 3 as linhas brancas indicam contornos de baixo ângulo e as linhas pretas contornos de alto ângulo. Nos estágios iniciais do refinamento microestrutural durante a deformação são desenvolvidas estruturas de células de discordâncias com contornos de grãos de baixo ângulo, e estes se encontram em um estado de não equilíbrio. Com o aumento do número de passes é esperado que esses contornos atinjam um estado de maior equilíbrio evoluindo para contornos com caráter de alto ângulo.

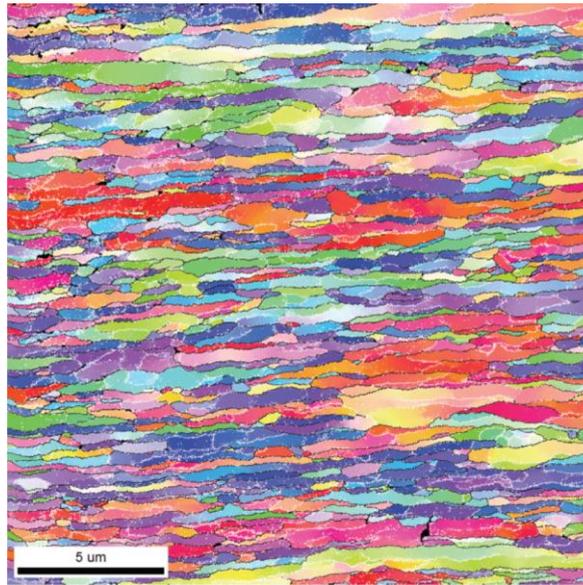


Figura 3 - Imagem por EBSD de monocristal de Nb puro deformado por Ecap, linhas claras indicam contornos de baixo ângulo (foto cortesia de H. Sandim).

3.3. TEORIA CLÁSSICA DE JOHNSON-MEHL, AVRAMI E KOMOGOROV (JMAK)

Em um trabalho clássico feito há quase 80 anos atrás Johnson-Mehl, Avrami e Komogorov (JMAK) obtiveram uma expressão para fração volumétrica transformada em função do tempo quando uma nova fase (ou região recristalizada) nucleia em sítios aleatórios no espaço. A principal dificuldade em se obter tal expressão é o fato de que mesmo que as regiões tenham inicialmente a forma esférica e cresçam com velocidade constante, G , como supuseram JMAK, elas irão interferir no crescimento umas das outras. Esta interferência (impingement) causa a mudança de forma nas regiões que crescem o que complica consideravelmente a solução do problema. Esta dificuldade foi resolvida por JMAK.[1–5]

Supondo que a nucleação ocorra em locais uniformemente aleatórios na matriz e quando todos os núcleos são formados no tempo ($t=0$), isto é, ocorre a chamada “saturação de sítios”, JMAK[1–5] obtiveram a expressão para fração transformada em função do tempo, V_V .

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

Onde t é o tempo, N_V é número de núcleos por unidade de volume e G é a velocidade de crescimento da suposta constante.

3.3.1. Limitações da teoria de JMAK

Ainda que a teoria de JMAK seja amplamente empregada para várias transformações de fase, ela trabalha com certas suposições, sendo necessário algumas com siderações, sendo elas[7,19]:

- As transformações devem ocorrer em um espaço amostral infinito;
- Os núcleos devem estar distribuídos aleatoriamente no espaço;
- Os núcleos devem possuir uma forma geométrica similar;
- O crescimento deve ser isotrópico e seu crescimento irá cessar quando uma interferência dos grãos, “impingement”.

Na natureza podem existir algumas situações em que essas suposições não são verdadeiras, o que pode causar um desvio da cinética abordada pelo modelo podendo acarretar erros na análise do processo experimental.

Um exemplo clássico é a suposição de nucleação aleatória em materiais que contêm bandas de deformação após uma laminação a frio. Resultados experimentais e teóricos sugerem que os núcleos surgem preferencialmente em locais de maior energia armazenada como as bandas de deformação em questão. O crescimento em forma de elipsoides é outro problema encontrado quando se assume que é possível a utilização da teoria JMAK. A correção não funciona bem, pois as extremidades do elipsoide têm velocidade maior que as do centro. Outro fator importante que é descartado quando se utiliza o modelo JMAK é a existência de gradiente de deformação e de alta EDE no material. Tanto o gradiente de deformação, quanto, a alta EDE são fatores que ocasionam decréscimo de velocidade média das interfaces. Este fator ocorre porque a velocidade dos grãos decresce ao entrar em uma região menos deformada do gradiente (menor força motriz).

3.4. TEORIA DO MODELO DE JMAK PARA GRÃOS ELIPSOIDAIS

O trabalho pioneiro de Johnson-Mehl, Avrami e Kolmogorov (JMAK) [1–5] está normalmente associado ao crescimento de grãos esféricos. No entanto, Kolmogorov em seus primeiros trabalhos já afirmava que as fórmulas se sustentam sob o pressuposto crescimento uniforme em todas as direções (crescimento esférico) ou para regiões de forma arbitrária similarmente orientadas no espaço.

Esta afirmação significa que Kolmogorov já sabia que seu resultado seria válido para o crescimento elipsoidal desde que os eixos correspondentes fossem paralelos. Para a saturação de sítios, ou seja, todos os sítios de nucleação são saturados no início da reação ou, em outras palavras, todas as novas regiões se formam em $t = 0$ e crescem com uma forma elipsoidal com uma taxa constante:

$$V_V(t) = 1 - \exp\left(-\frac{4\pi}{3}\lambda a_1 a_2 a_3 t^3\right) \quad (2)$$

Onde α_1, α_2 e α_3 são os eixos principais do elipsoide e λ é o número de núcleos por unidade de volume. O elipsoide mantém sua forma constante se supusermos que α_1, α_2 e α_3 sejam constantes. Claramente se $\alpha_1=\alpha_2=\alpha_3$ então Eq. (2) reduz a expressão usual para crescimento esférico.

Recentemente, Rios e Villa revisitaram o modelo JMAK e o colocaram em bases matemáticas mais rigorosas. Assim, locais “uniformemente aleatórios” podem ser mais precisamente definidos por um processo de ponto de Poisson. O processo de ponto de Poisson homogêneo resulta na mesma expressão obtida por JMAK. Em diversos trabalhos, Rios e Villa obtiveram expressões para situações nas quais a nucleação difere da suposta por JMAK, por exemplo, processo de Poisson não homogêneo, nucleação quando os núcleos estão agrupados (clusters), quando os núcleos ocorrem na superfície e no interior de placas finas, fios finos e pós de pequenas dimensões, dentre outros.[6] A Figura 44 abaixo ilustra três situações típicas no que tange à localização espacial dos núcleos.

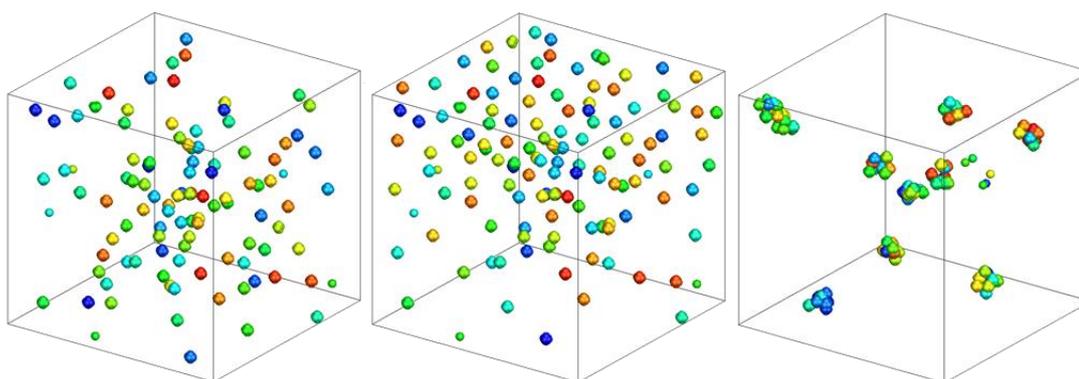


Figura 4 - Exemplos de sítios de nucleação: a) Processo de ponto de Poisson homogêneo (JMAK); b) Processo de ponto de Poisson heterogêneo; c) Nucleação agrupada (em “clusters”) (foto cortesia de P. R. Ríos).

3.5. NUCLEAÇÃO POR PROCESSO DE PONTO DE POISSON

Para a presente tese, o modelamento da nucleação enfatizará apenas por saturação de sítios. Na nucleação por saturação de sítios os núcleos estão uniformemente distribuídos no espaço amostral, porém objetiva-se que cada sítio de nucleação seja independente dos demais. No processo de Ponto de Poisson os núcleos surgem independentes um do outro. Por isso foi adotado este processo. Assim, cada número extraído do modelo de processo de ponto de Poisson é apenas uma realização dentre as possíveis, e cada realização é independente da outra.

Sumarizando o processo, considere que G é um processo de Poisson em R^3 com intensidade Λ , se[20]:

- A_1, \dots, A_m são subconjuntos disjuntos e compactos em R^3 ,
- $G(A_1), \dots, G(A_m)$ forem independentes.
- $P(G(A) = k) = \frac{\Lambda(A)^k}{k!} e^{-\Lambda(A)}$

Se Λ admite densidade, ou seja, se existe uma função $\lambda: R^3 \rightarrow R_+$, tal que:

$$\Lambda(A) = \int_A \lambda(x) dx \quad \forall A \in B_{R^3} \quad (3)$$

Então λ é chamado intensidade de G .

Se λ é constante, tem-se:

- λ é igual ao número de núcleos por unidade de volume;
- G é chamado de processo de ponto de Poisson homogêneo.

Se λ não é constante, tem-se:

- $\lambda(x)dx$ é igual ao número de núcleos em uma região espacial infinitesimal dx ;
- G é chamado de processo de ponto de Poisson não homogêneo.

A Figura mostra a diferença das posições dos núcleos para os processos de Poisson homogêneo e não homogêneo.

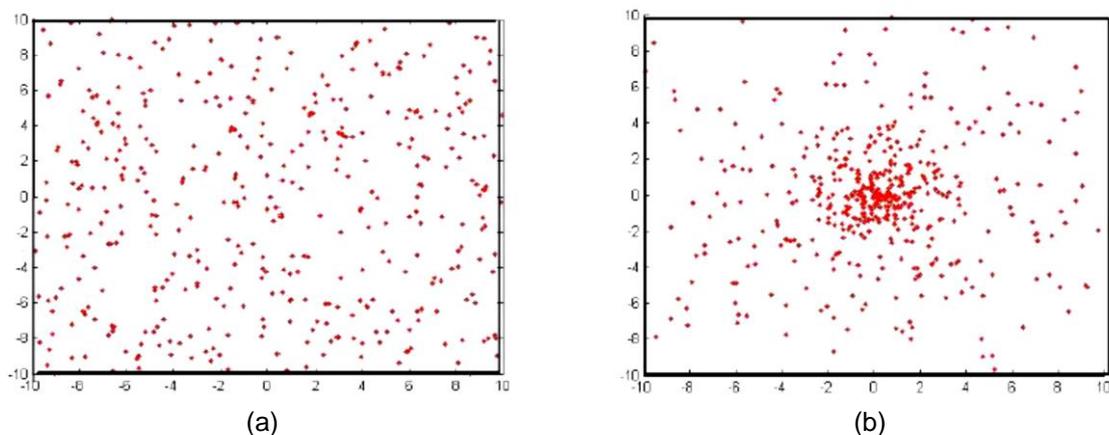


Figura 5 – (a) Processo de ponto de Poisson homogêneo para $\lambda = 1$; (b) Processo de ponto de Poisson não homogêneo para $\lambda(x, y) = \frac{30}{1+x^2+y^2}$. [21]

Modelos analíticos, como o modelo clássico de JMAK[1–5], são utilizados para modelar a nucleação por processo de ponto de Poisson, como por exemplo, a recristalização. Essa teoria foi desenvolvida a partir de suposições como nucleação aleatória e homogênea, crescimento com velocidade constante, forma dos grãos esférica e homogeneidade energética na matriz deformada.[22] A Figura mostra a nucleação por processo de ponto de Poisson Homogêneo. As Equações (3), (5) e (6) descrevem a cinética desse processo de nucleação. Nota-se que para esse tipo específico de nucleação, as equações são muito parecidas com a equação de JMAK[1–5]. Isso porque as suposições são as mesmas, diferenciando-se apenas pela introdução da grandeza estocástica da intensidade λ .

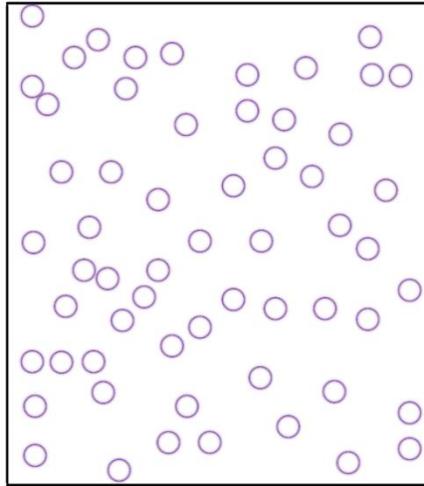


Figura 6 - Nucleação por processo de ponto de Poisson Homogêneo. Adaptado de[23]

A distribuição dos núcleos de forma aleatória na matriz, dependera do λ que é a intensidade de núcleos, para o caso de nucleação por processo de Poisson homogêneo.

Tem-se as equações:

$$S_V(t, z) = 4\pi\lambda(x)G^2t^2 \exp\left(-\frac{4\pi}{3}\lambda(x)G^3t^3\right) \quad (4)[24]$$

$$S_V(t, z) = (36\pi\lambda(z))^{1/3}(1 - V_V(t, z)) \left(\ln\left(\frac{1}{1 - V_V(t, z)}\right)\right)^{2/3} \quad (5)$$

Na nucleação não homogênea, os núcleos são distribuídos de forma não homogênea, que pode variar em uma ou mais direções na matriz. Neste trabalho são mostrados e discutidos os resultados para variação de núcleos em uma única direção. A Figura 7 mostra uma distribuição de núcleos com variação ao longo do eixo z , e demonstra o eixo z variando 0 a 1, ou seja, em coordenada adimensional. A intensidade na direção z varia linearmente, segundo a equação $\lambda(z) = mz + n$, onde m e n são constantes.

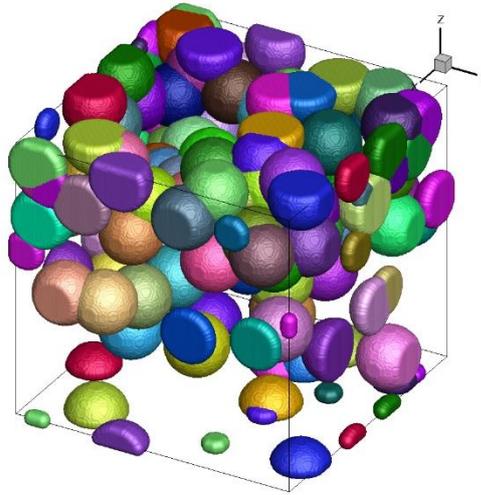


Figura 7 - Distribuição não homogênea dos núcleos.

3.6. MODELO ANALÍTICO DE CAHN PARA NUCLEAÇÃO EM PLANOS E LINHAS

Cahn em seu estudo derivou expressões para fração transformada em função do tempo quando a nucleação ocorre em planos e linhas aleatórios, sendo de grande interesse esse modelo para esta tese.[24]

A expressão encontrada para a nucleação em planos aleatórios para o caso de saturação de sítios é:

$$V_V(t) = 1 - \exp\left(-2 S_V^{\text{planos}} Gt \int_0^1 \{1 - e^{-\pi \lambda_s G^2 t^2 [1-z^2]}\} dz\right) \quad (6)$$

Onde S_V^{planos} é a área por unidade de volume dos planos aleatórios e λ_s é o número de núcleos por unidade de área dos planos.

Recentemente, Rios e Villa obtiveram um resultado importante, provaram rigorosamente que a equação de Cahn também é válida para planos paralelos desde que o espaçamento entre os planos siga uma distribuição de Poisson.[24,25] De forma análoga a expressão de Cahn obtida para retas aleatórias também é válida para retas paralelas desde que a disposição das retas no espaço siga determinadas condições explicitadas por Villa e Rios.[26] Este resultado é importante para esta tese, pois, planos paralelos podem ser considerados um caso limite de quando o material sofre grande redução de espessura durante a laminação de modo que os as interfaces sejam quase que 100% paralelas ao plano de laminação.

4. METODOLOGIA

Nesta tese utilizou-se um modelo numérico escrito em linguagem *Fortran* 2003, e compilado pelo *Microsoft Visual Studio*2012® e paralelização em Open MP. A visualização das microestruturas geradas foi obtida com o programa *Tecplot* 360® e os gráficos foram gerados com o auxílio do programa *Wolfram Mathematica* 10®.

Para a realização das simulações computacionais utilizou-se os seguintes recursos: computador com dois processadores físicos Intel Xeon E5-2650 v2 ® 2.60 GHz 64 bits, memória Ram 128Gb e HD de 2Tb em sistema operacional Windows Server 2008 R2 ®, e computador com processador Intel Core I7 ® 3.40 GHz, memória Ram 32Gb e HD de 2Tb em sistema operacional Windows 8.1 Pro ®.

Em alguns casos simulou-se em uma matriz cúbica de 300^3 células e em uma matriz cúbica de 500^3 células e a nucleação se deu por saturação de sítios para todos os casos. Para simular uma amostra infinita foram utilizadas condições de contorno periódicas para todas as direções da matriz cúbica.

4.1. MODELO COMPUTACIONAL

Ao longo dos trabalhos desenvolvidos no Núcleo de Modelamento Microestrutural (NMM)[20,26,27]. O código computacional inicial para simulação de reações com nucleação e crescimento em 3D tinha como parâmetro de crescimento o modelo Autômato Celular. Mas com o desenvolvimento do trabalho “Simulação Computacional da Microestrutura das Transformações por Nucleação e Crescimento[28], foi elaborado nesse código inicial o parâmetro de crescimento Cone

Causal. Para simular os fenômenos de nucleação e crescimento foi utilizado a metodologia do Cone Causal.

Para o presente trabalho o código original passou por melhorias, visando à otimização do mesmo e foi elaborada novas rotinas na busca de uma simulação mais fiel ao que ocorre na prática e conseqüentemente ajustar com as equações analíticas. O fluxograma apresentado na Figura 44 apresenta esquematicamente o algoritmo desenvolvido.

Ao iniciar-se o programa, na entrada de dados todos os parâmetros que serão considerados na simulação devem ser especificados, tais como: o tamanho da matriz, a média de Poisson que será a quantidade de núcleos iniciais de cada fase, tipo de nucleação (Aleatória, Aleatória Plano, Não Homogênea e Interfaces), a regra de transição (Cone Causal), e a fração volumétrica de transformação.

No início da simulação a matriz é formada, sendo alocada na memória do computador, e a distribuição aleatória dos pontos onde serão alocados os núcleos iniciais. Após a formação da matriz, é executada a nucleação, que ocorre por saturação de sítios. Com o término da nucleação, é iniciado o crescimento dos grãos, isso se dá até que toda a matriz tenha se transformado.

Ao fim das transformações, têm-se a geração dos dados que ocorre na Saída de dados, esses são: tempo de reação, fração volumétrica transformada (V_v), área interfacial por unidade de volume (S_v), velocidade de crescimento e o caminho microestrutural. Também se geram outros dados que são utilizados para a visualização das microestruturas e sua evolução.

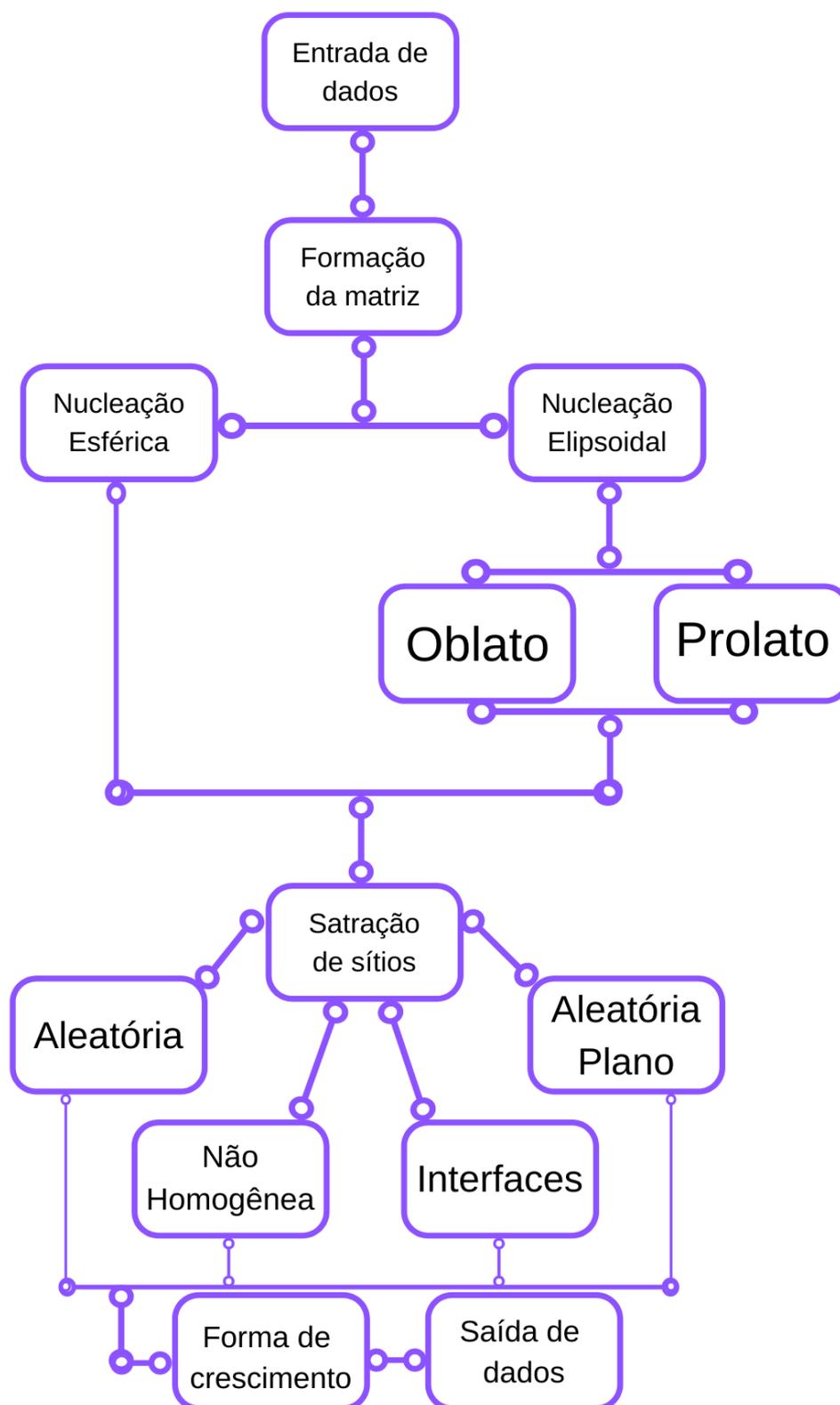


Figura 4 - Fluxograma esquemático do algoritmo desenvolvido.

4.2. CONE CAUSAL

Após a etapa de nucleação, os núcleos começam a crescer até ocorrer a completa transformação da matriz. O modelo de crescimento é baseado na teoria do cone causal. Na teoria do Cone Causal (Figura 55 e 6) para haver a transformação de um ponto qualquer na matriz é necessário que contenha pelo menos um núcleo dentro da esfera de raio R que é centrada neste ponto qualquer.[29]

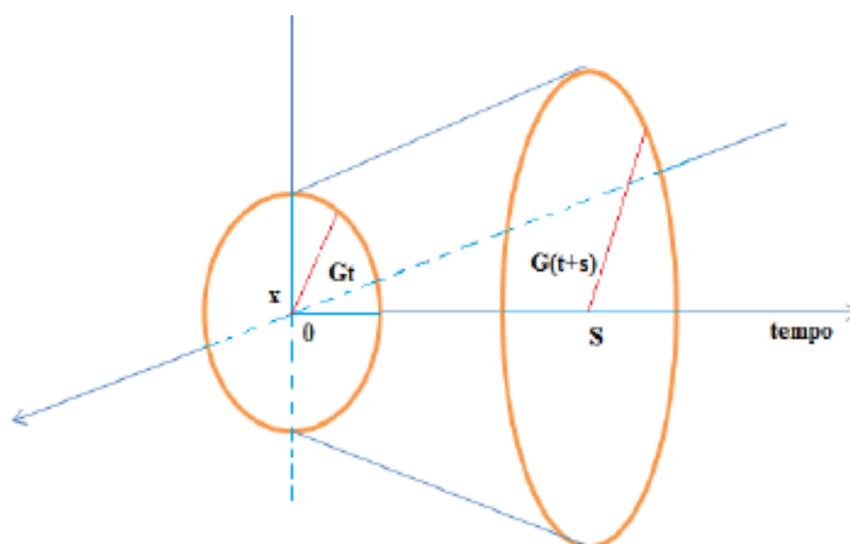


Figura 5 - Representação em três dimensões do cone causal. [20]

Com a formação da nucleação os núcleos ficam dispostos na matriz de forma aleatória. O raio R dessa esfera aumenta com o tempo aumentando a possibilidade da existência de núcleos dentro da esfera. A evolução da simulação se dá através das interações ao longo do tempo. O programa analisa para cada interação todos os pontos da matriz para descobrir de quais serão transformados. O modo que essa verificação ocorre é pelo cálculo da distância da esfera em relação ao núcleo, se a distância entre núcleo e esfera for menor que zero, significa que o núcleo está dentro da esfera sendo necessário existir pelo menos um núcleo dentro da esfera para ocorrer a transformação.

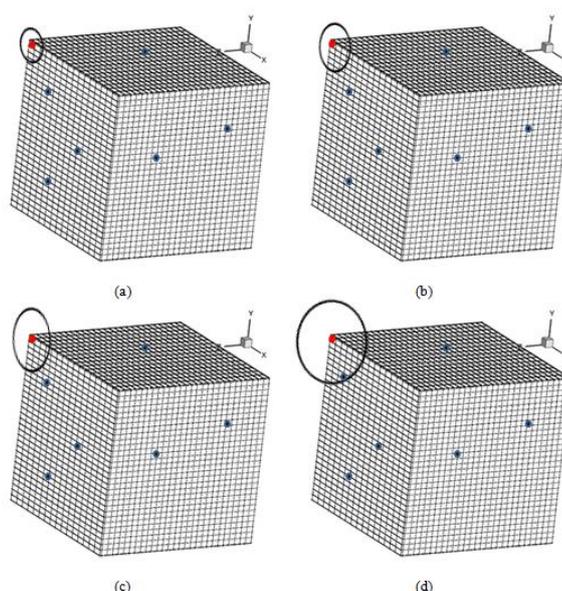


Figura 6 - Representação hipotética da teoria do cone causal entre os pontos da matriz: (a) tempo igual a 1, (b) tempo igual a 2, (c) tempo igual a 3, (d) tempo igual a 4, onde ocorre a transformação da célula interceptando um núcleo.[30]

4.3. CONDIÇÕES DE CONTORNO PERIÓDICAS

Para as simulações foi utilizado às condições de contorno periódicas, de modo que a matriz gerada seja considerada infinita. A Figura 7 apresenta esquematicamente as condições de contorno que serão adotadas.

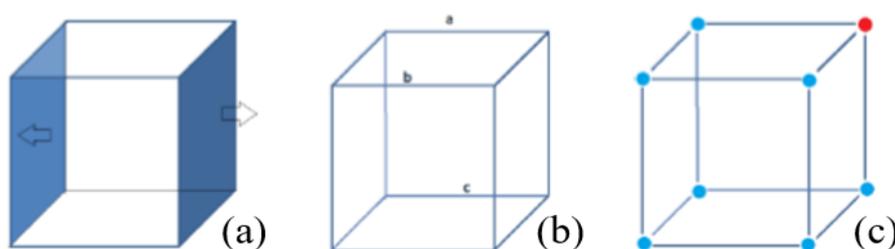


Figura 7 - Representação esquemática das condições de contorno. (a) face, (b) aresta, (c) vértice[20].

De acordo com a Figura 7, um núcleo quando atinge uma face continua crescendo na face contrária como é visto na Figura 7a. Para o crescimento nas arestas, na ocasião em que um núcleo atinge, por exemplo, a aresta “a”, ele continua crescendo nas arestas “b” e “c” (Figura 7b), e quando um núcleo atinge um vértice, o seu crescimento continua em todos os outros vértices a medida que ocorre a evolução do tempo (c)[20].

5. CONSTRUÇÃO VIA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA MATRIZ DEFORMADA.

A microestrutura é geralmente descrita por parâmetros como a fração volumétrica transformada, V_v , e área interfacial por unidade de volume em função do tempo, S_v , sendo estes dois descritos os mais estimados experimentalmente e menos triviais de serem simulados a partir de modelos analíticos.

Para a obtenção de uma matriz deformada genérica, foi imposta algumas considerações com o intuito de obter grãos alongados que se aproximassem com uma microestrutura real de um material submetido a um trabalho mecânico. Uma laminação a frio com 80% de redução, por hipótese. Em que há uma alta taxa de deformação imposta, acarretando uma mudança no formato dos grãos devido a processos de acomodação macro e microscópica em consequência da deformação plástica, apresentando a partir de então grãos alongados dependente da direção de laminação.

Foi considerada a necessidade da ocorrência da nucleação em planos paralelos. De modo que ao chegar num determinado valor de quantidade de planos e quantidades de núcleos seria obtido grãos alongados.

Como as diversas tentativas com a variação da quantidade de núcleos por plano, quantidade de planos na matriz e o espaçamento entre os planos não apresentaram resultados satisfatórios. Foi proposto a inserção de um fator de alongamento com o mesmo valor em dois eixos.

5.1 METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

5.1.1. Matriz deformada.

Na primeira tentativa da construção da matriz deformada, simulou-se o tipo de nucleação Aleatória Plano. Na nucleação Aleatória Plano, os núcleos são distribuídos aleatoriamente nos planos da matriz.

Neste caso foi analisada a situação em que a matriz obtinha: 45 núcleos por plano e 45 planos, totalizando 2025 núcleos totais na matriz.

5.1.2 Inserção do fator de alongamento.

Neste caso, foi proposto a inserção de um fator de alongamento com o mesmo valor em dois eixos. O objetivo foi obter grãos achatados semelhantes aos grãos que sofrem o processo de laminação, “grãos panqueca”. Um exemplo desta situação é austenita laminada à quente e, posteriormente, transformada em ferrita [15].

Com esta linha de raciocínio para conseguir grãos achatados (Figura 8), a geometria do grão simulado passou de esférico para elipsoidal com o intuito da microestrutura reproduzida se aproximar com uma microestrutura real deformada.

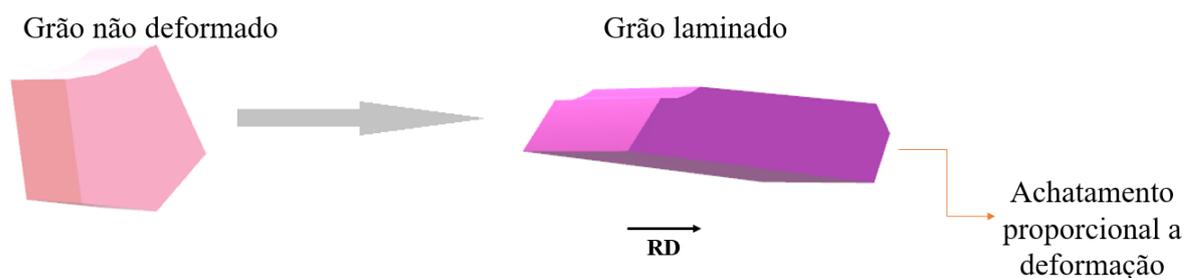


Figura 8 - Ilustração de um grão altamente deformado por laminação.

O valor utilizado no fator de alongamento foi 0,5. Verificou-se que alterando o cálculo do raio do Cone Causal na direção y , acrescentado um parâmetro ajustável variando de 0,0 a 1,0. Observou-se que ao ajustar o parâmetro para 0,0 obtêm-se grãos totalmente lineares nas direções x e y .

5.1.3 Nucleação segundo processo de Poisson não homogêneo com grãos prolatos

Após as tentativas anteriores, simulou-se a nucleação ocorrida pelo processo de ponto de Poisson homogêneo em grãos elipsoidais prolato com as razões de aspecto: 2:1:1; 3:2:2; 4:1:1; 5:1:1; 8:1:1; 16:1:1.

5.1.4 Nucleação segundo processo de Poisson não homogêneo com grãos oblatos

Simulou-se também a nucleação ocorrida pelo processo de ponto de Poisson homogêneo em grãos elipsoidais oblato com as razões de aspecto: 1:2:2; 2:3:3; 1:4:4; 1:5:5; 1:8:8; 1:16:16 para analisar as matrizes com grãos elipsoidais prolato e oblato.

5.2. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para os casos apresentados a seguir realizou-se uma comparação direta entre as simulações e os modelos analíticos de JMAK e Cahn. Para tal obteve-se gráficos da cinética da transformação em função do tempo, curva V_v versus Tempo e gráficos do caminho microestrutural. Nesses gráficos os dados das simulações foram representados por quadrados vazados, os dados previstos pelo modelo de Cahn, foram representados por linha tracejada, e por fim os dados previstos pelo modelo analítico de JMAK, foram representados por linha cheia. Para facilitar a leitura dos gráficos nem todos os pontos de simulação foram representados. Para todos os casos também se demonstrou as microestruturas geradas através da simulação computacional.

5.2.1 Variação dos núcleos iniciais.

Na primeira tentativa da construção da matriz deformada, o tipo de nucleação utilizada foi Aleatória Plano. Mantendo o número de planos que foi 45 planos e 45

núcleos por plano totalizando em 2025 núcleos totais na matriz. Na Figura 9 observa-se as microestruturas da simulação.

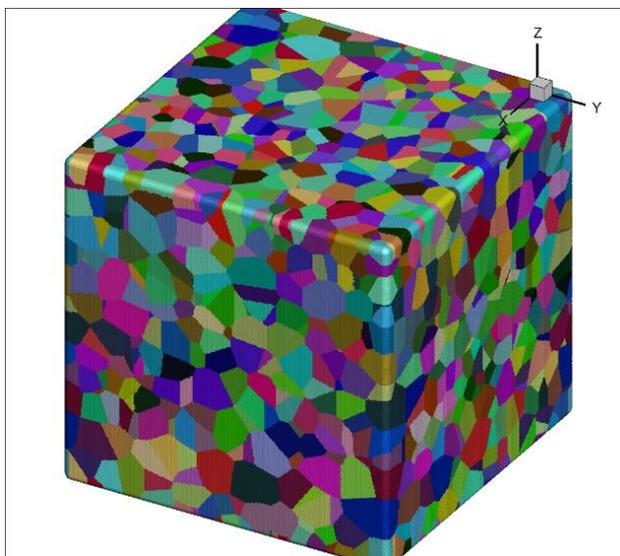


Figura 9 - Simulação computacional da nucleação aleatória plano com 45 planos e 45 núcleos por plano.

Foi possível observar que não houve a formação de grãos alongados característicos de uma microestrutura deformada. Os grãos na matriz apresentaram uma morfologia equiaxial e devido a quantidades de núcleos por plano houve um refinamento dos grãos.

Deste modo, foi realizado outros testes com outros valores na variação da quantidade de núcleos e na quantidade de planos. Foram realizados testes com variação da quantidade de núcleos em 5, 15, 45 e 90 núcleos por plano em uma matriz com 30 planos, sem sucesso também. Com a quantidade de núcleos por plano fixa em 100 núcleos por plano, com variação de 5, 10, 15, 25 e 30 planos em cada matriz, também sem sucesso.

As curvas da fração volumétrica, V_v , como era esperado se aproximaram com a curva do modelo analítico de Cahn. Na Figura 9 observa-se claramente que a cinética da transformação é bem descrita pelo modelo de Cahn para o caso com 45 planos. As curvas simuladas ficam distantes das curvas do modelo de JMAK, correspondente as limitações que o modelo proporciona. Para o caso apresentado os núcleos estão distribuídos aleatoriamente em cada plano na matriz.

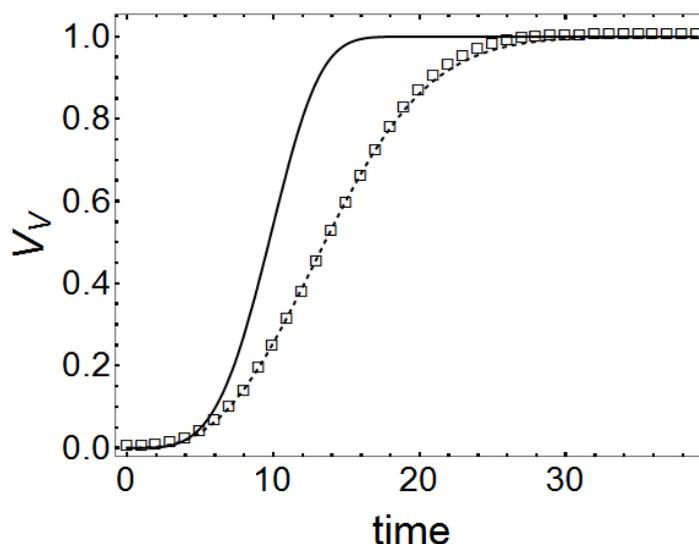


Figura 10 - Fração volumétrica, V_v , da nucleação aletória plano com 45 planos e 45 núcleos por plano.

As curvas da área interfacial (Figura 10), S_v , e do caminho microestrutural (Figura 11), MPM, apresentam um comportamento semelhante a curva da fração volumétrica, V_v , em relação as curvas do modelo de JMAK e Cahn.

As curvas da simulação computacional se aproximam da curva do modelo de Cahn. Foi possível observar que as curvas simuladas não se aproximam da curva do modelo de JMAK devido ao tipo de nucleação em questão.

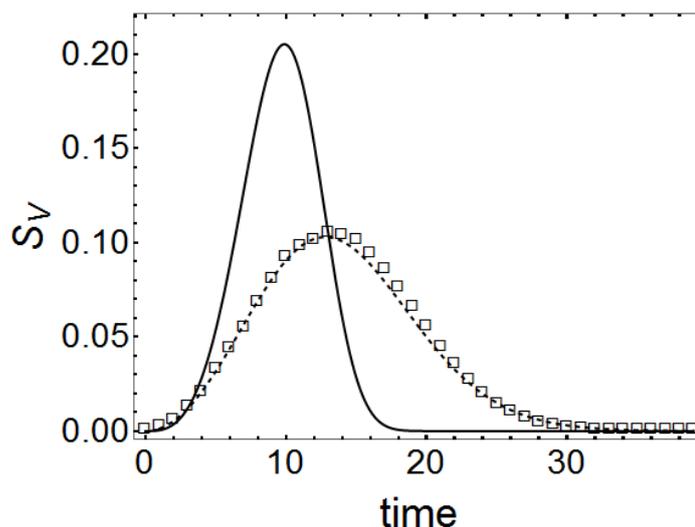


Figura 11 - Area interfacial, S_v , da nucleação aletória plano com 45 planos e 45 núcleos por plano.

O caminho microestrutural, MPM, descreve o caminho das transformações no espaço S_v versus V_v . A obtenção de S_v se faz relevante uma vez que o parâmetro de transformação mais empregado após V_v seja a curva de S_v versus V_v .

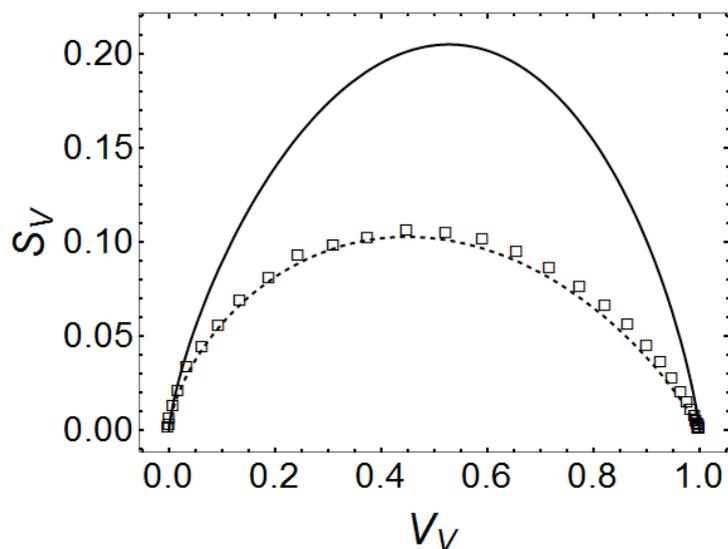


Figura 12 - Caminho Microestrutural, MPM, da nucleação aleatória plano com 45 planos e 45 núcleos por plano.

5.2.2. Inserção do fator de alongamento.

Como as diversas tentativas com a variação da quantidade de núcleos por plano, quantidade de planos na matriz e o espaçamento entre os planos não apresentaram resultados satisfatórios como visto na seção anterior. Foi proposto a inserção de um fator de alongamento com o mesmo valor em dois eixos. Neste caso, o objetivo foi obter grãos achatados semelhantes aos grãos que sofrem o processo de laminação, “grãos panqueca”. Um exemplo desta situação é austenita laminada à quente e, posteriormente, transformada em ferrita [15].

Com esta linha de raciocínio para conseguir grãos achatados (Figura 8), a geometria do grão simulado passou de esférico para elipsoidal com o intuito da microestrutura reproduzida se aproximar com uma microestrutura real deformada.

O valor utilizado no fator de alongamento foi 0,5. Verificou-se que alterando o cálculo do raio do Cone Causal na direção y, acrescentado um parâmetro ajustável variando de 0,0 a 1,0. Observou-se que ao ajustar o parâmetro para 0,0 obtêm-se grãos totalmente lineares nas direções x e y.

Com o parâmetro 1,0 foi obtido grãos equiaxiais e o parâmetro 0,5 foi o mais razoável. Mas novamente o resultado não foi como esperado, as microestruturas

estavam longe da realidade. Como é possível observar na Figura 13, para a realização das simulações foi estipulado 0,5 o fator de alongamento para todas as simulações e o mesmo número de núcleos por plano foi 100 núcleos. Para a análise dos resultados variou a quantidade de planos na matriz com: 5, 10, 15 e 30 planos em cada matriz respectivamente.

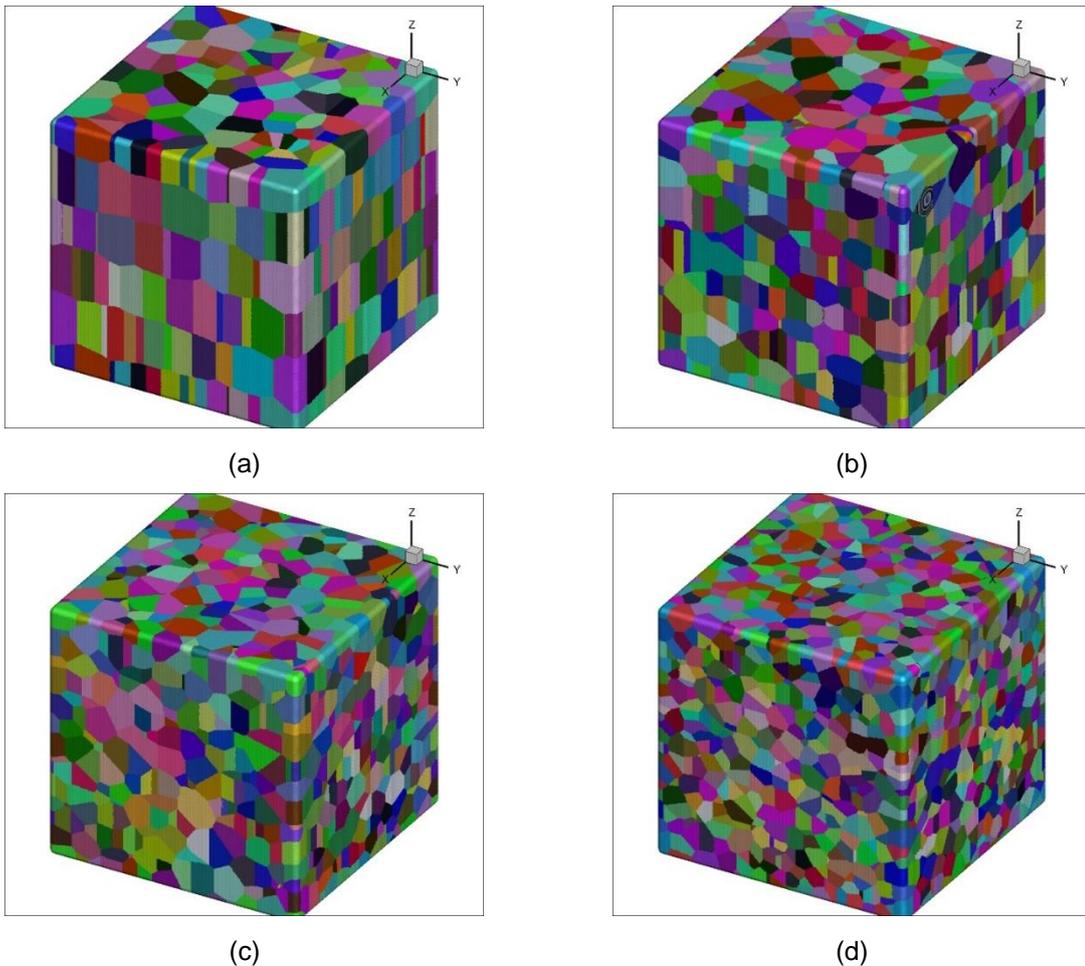


Figura 13 - Simulação computacional com 100 núcleos por plano e fator de alongamento de 0,5 na direção X e Y. (a) 5 planos, (b) 10 planos, (c) 15 planos e (d) 30 planos.

Com as microestruturas pode-se observar que uma grande quantidade de núcleos por plano dificulta o seu crescimento no plano, ou seja nas direções X e Y. Logo, uma microestrutura com poucos planos tenderá o seu crescimento na direção em Z, como observado na Figura 13(a). E uma microestrutura com muitos planos, há uma saturação entre os planos não havendo espaço para o seu crescimento na direção em Z e nas direções do plano, sendo obtida uma microestrutura refinada com grãos equiaxiais como observado na Figura 13(d).

Foram realizados outros testes variando o número de núcleos por plano e o número de planos na matriz, conservando o valor do fator de alongamento. Mas os resultados não foram satisfatórios.

Deste modo, mudou-se o tipo de nucleação para a nucleação Aleatória com o mesmo valor do fator de alongamento de 0,5. Na nucleação Aleatória, os núcleos se encontram distribuídos aleatoriamente na matriz durante o crescimento e não em planos como o tipo de nucleação apresentada anteriormente.

Foi observado nas microestruturas (Figura 14) uma anisotropia dos grãos (setas amarelas), porém a morfologia dos grãos ainda não estava tão alongada como almejado e na zona inferior da matriz a microestrutura apresentou grãos grosseiros (setas vermelhas). Ao elevar a densidade de núcleos houve uma diminuição na anisotropia, pois a microestrutura apresentou grãos mais refinados.

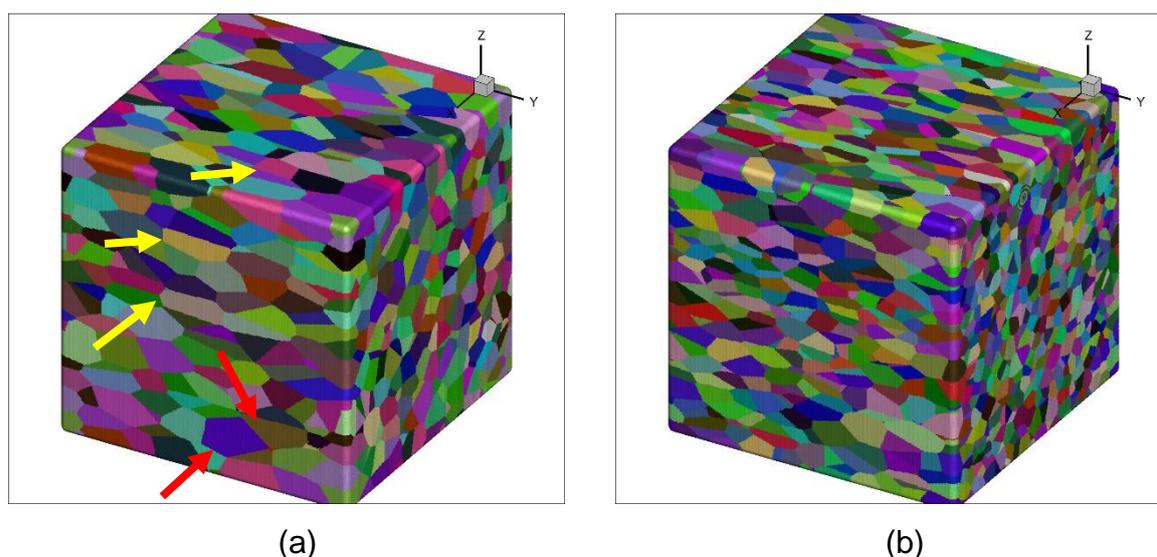


Figura 14 - Simulação computacional com nucleação Aleatória. (a) 1000 núcleos e (b) 2000 núcleos.

Devido aos resultados da morfologia dos grãos das matrizes simuladas, novamente foi realizado outro teste com um tipo de nucleação diferente. Sendo proposto a nucleação segundo processo de ponto de Poisson homogêneo com grãos elipsoidais, apresentados na próxima seção.

5.2.3. Nucleação segundo processo de Poisson não homogêneo com grãos prolatos

Nesta seção será apresentado, resultados referentes a nucleação ocorrida pelo processo de ponto de Poisson homogêneo em grãos elipsoidais prolatos com as razões: 2:1:1; 3:2:2; 4:1:1; 5:1:1; 8:1:1; 16:1:1. Para comparar os resultados obtidos com a simulação foi extraído da simulação a área interfacial, S_v , de todas as direções da matriz (**Erro! Fonte de referência não encontrada.**).

Tabela 1 - Área superficial por unidade de volume S_v , determinado por cada direção. S_{va1} para a direção em x, S_{va2} para a direção em y e S_{va3} para a direção em z.

Razão de aspecto	Sva1	Sva2	Sva3
2:1:1	1.82E-02	3.64E-02	3.63E-02
3:2:2	2.24E-02	3.40E-02	3.39E-02
4:1:1	1.18E-02	4.60E-02	4.55E-02
5:1:1	1.02E-02	4.97E-02	4.91E-02
8:1:1	6.93E-03	5.73E-02	5.60E-02
16:1:1	2.60E-03	6.21E-02	6.04E-02

Na **Erro! Fonte de referência não encontrada.** é possível observar que durante a evolução microestrutural os grãos obtiveram uma orientação semelhante para uma determinada direção. Essa anisotropia fica mais clara com o aumento das razões de aspecto, se aproximando com a morfologia dos grãos alongados de uma microestrutura real deformada.

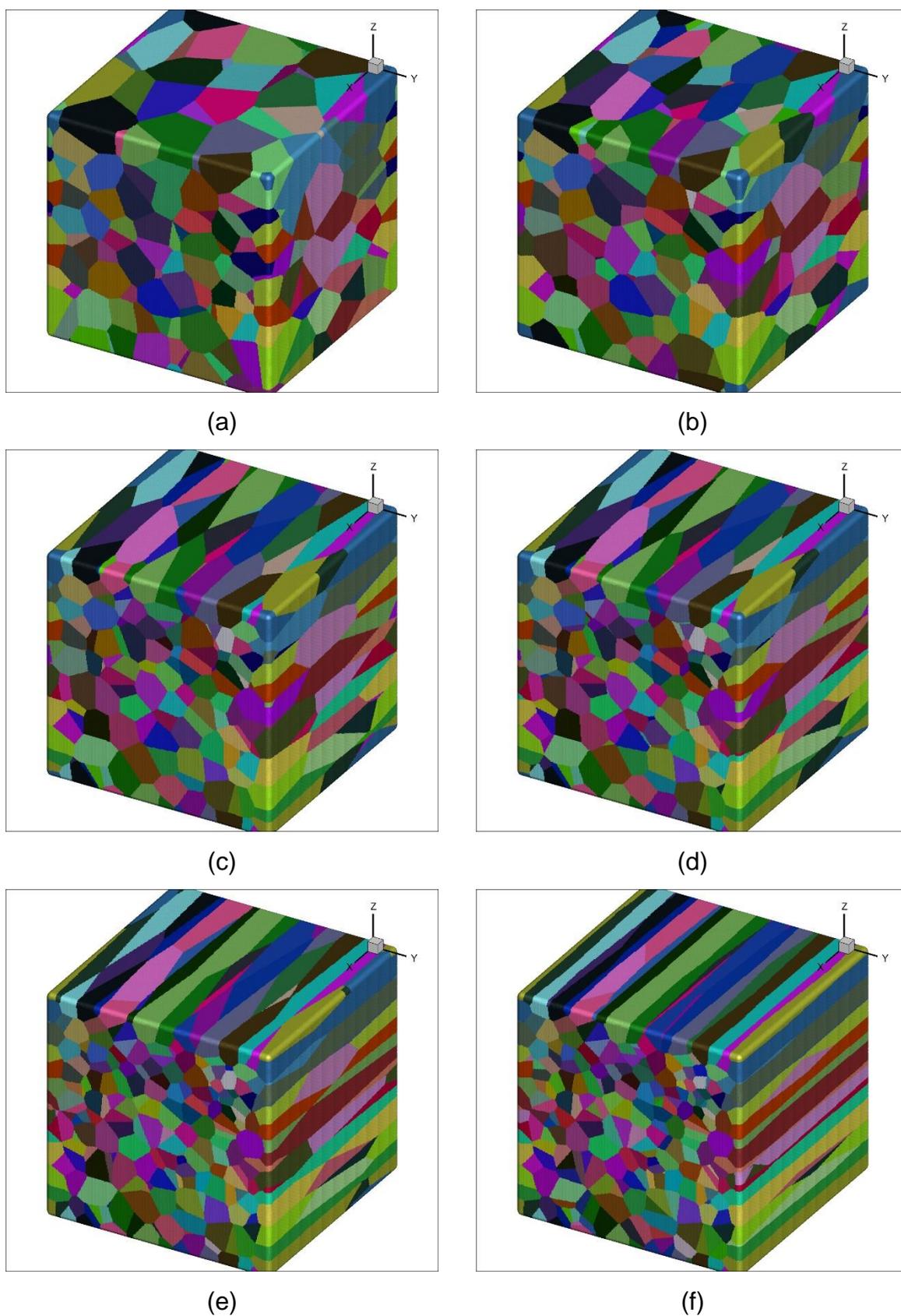


Figura 15 - Simulação computacional da nucleação não homogênea com grãos elipsoidais prolato com razão: (a) 3:2:2; (b) 2:1:1; (c) 4:1:1; (d) 5:1:1; (e) 8:1:1 e (f) 16:1:1.

A Figura 16 apresenta o caminho microestrutural, sendo possível observar que os dados simulados corroboram com o modelo analítico de JMAK.

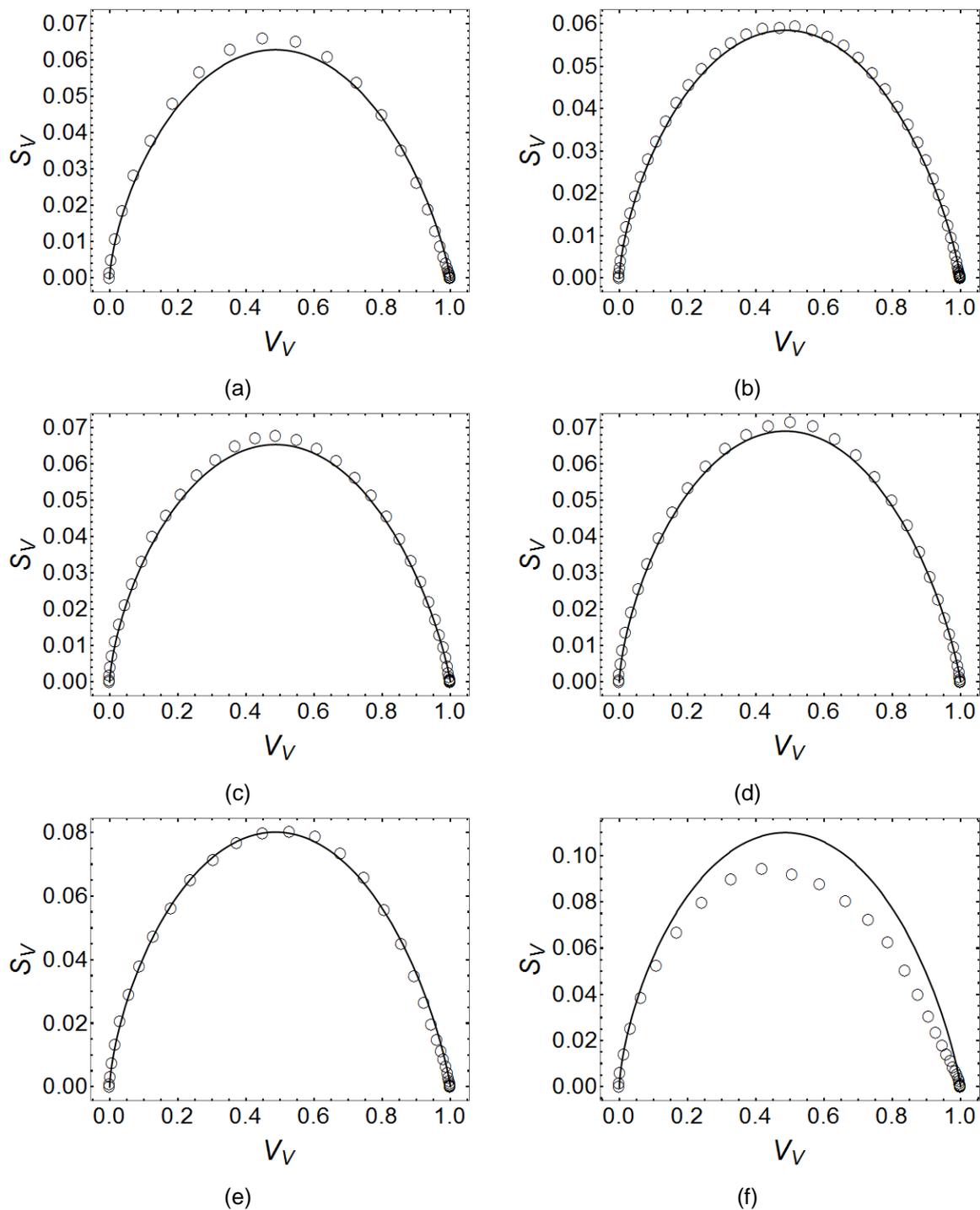


Figura 16 - Caminho Microestrutural, $S_V(t)$ vs. $V_V(t)$, da nucleação não homogênea com grãos elipsoidais prolato com razão: (a) 3:2:2; (b) 2:1:1; (c) 4:1:1; (d) 5:1:1; (e) 8:1:1 e (f) 16:1:1.

Isto ocorre porque o tipo de nucleação é homogênea, isto é, os grãos estão distribuídos uniformemente aleatórios no espaço. Uma das condições estabelecidas

peelo modelo. A Figura 17 apresenta a evolução da área interfacial, S_V , e a Figura 18 apresenta a evolução da fração volumétrica, V_V , para grãos elipsoidais prolato sendo possível observar também que as curvas simuladas se aproximam com o modelo analítico de JMAK.

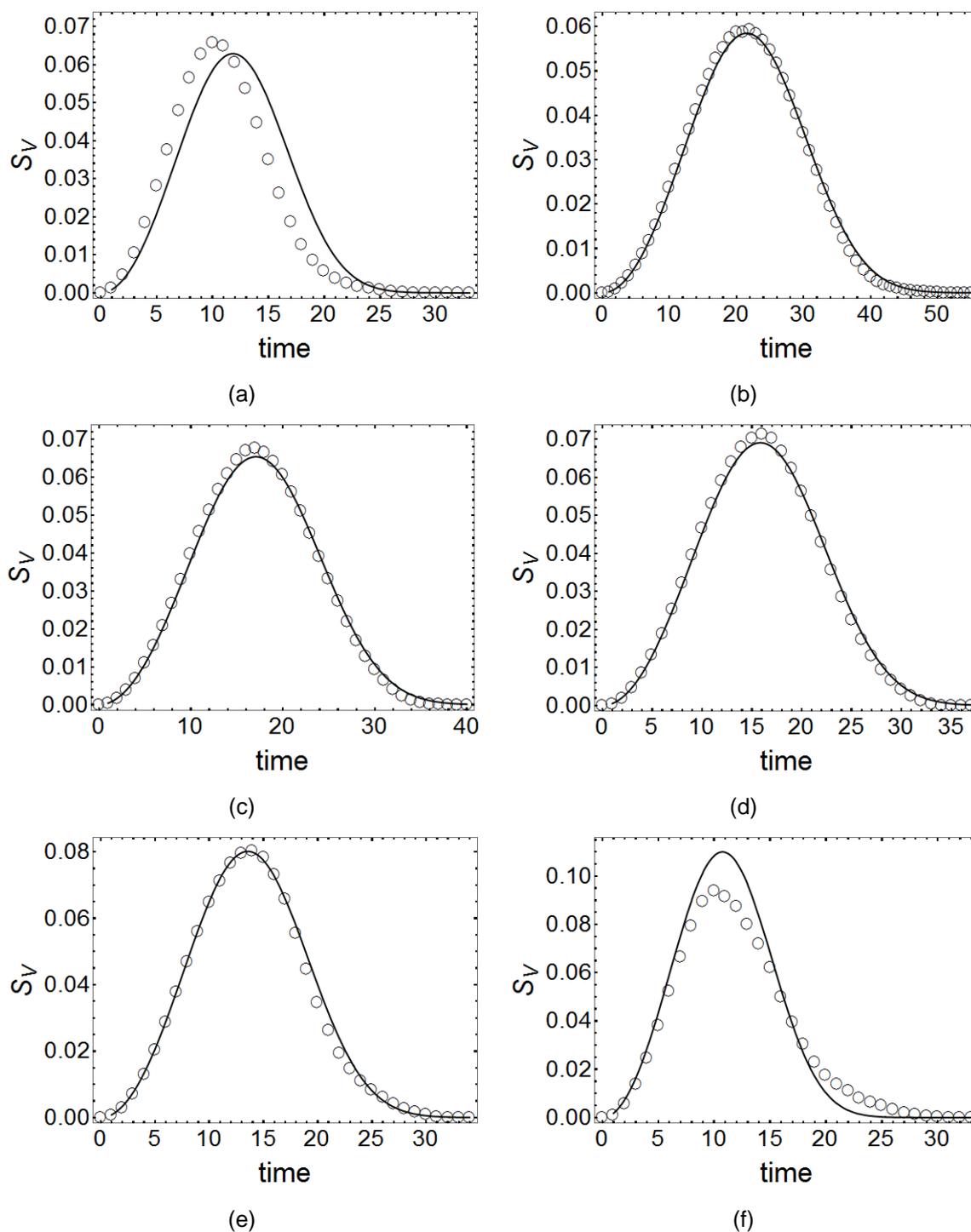


Figura 17 - Area interfacial, S_V , da nucleação não homogênea com grãos elipsoidais prolato com razão: (a) 3:2:2; (b) 2:1:1; (c) 4:1:1; (d) 5:1:1; (e) 8:1:1 and (f) 16:1:1.

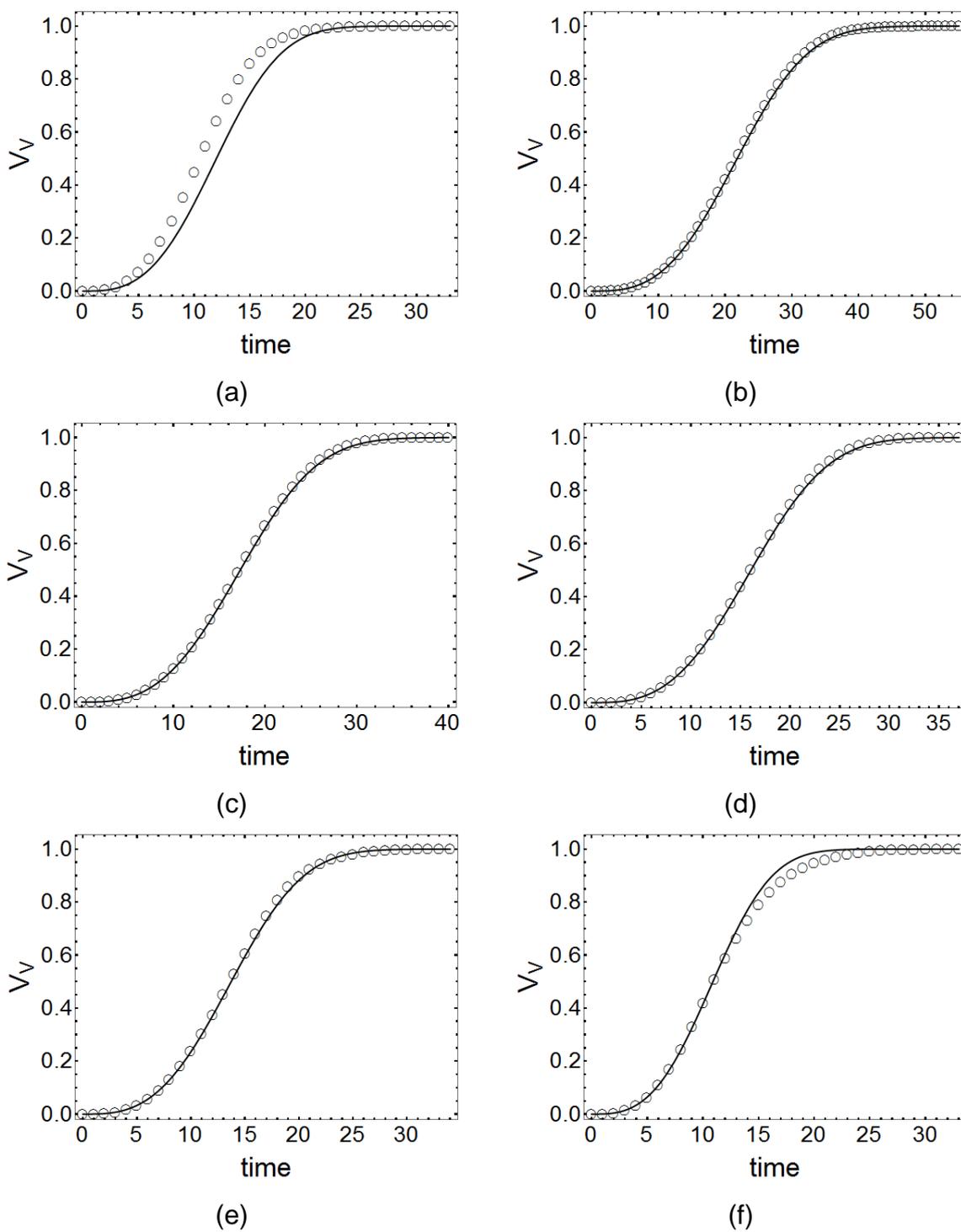


Figura 18 - Fração volumétrica, V_v , da nucleação não homogênea com grãos elipsoidais prolato com razão: (a) 3:2:2; (b) 2:1:1; (c) 4:1:1; (d) 5:1:1; (e) 8:1:1 and (f) 16:1:1.

5.2.3 Nucleação segundo processo de Poisson não homogêneo com grãos oblatos

Nesta seção será apresentado, resultados referentes a nucleação ocorrida pelo processo de ponto de Poisson homogêneo em grãos elipsoidais oblato com as razões de aspecto: 1:2:2; 2:3:3; 1:4:4; 1:5:5; 1:8:8; 1:16:16. Para comparar os resultados obtidos com a simulação foi extraído da simulação a área interfacial, S_v , de todas as direções da matriz (**Erro! Fonte de referência não encontrada.**).

Tabela 2 - Área superficial por unidade de volume S_v , determinado por cada direção. S_{va1} para a direção em x, S_{va2} para a direção em y e S_{va3} para a direção em z.

Razão de aspecto	Sva1	Sva2	Sva3
1:2:2	4.56E-02	2.39E-02	2.42E-02
2:3:3	3.82E-02	2.69E-02	2.72E-02
1:4:4	7.23E-02	1.96E-02	2.02E-02
1:5:5	8.32E-02	1.84E-02	1.91E-02
1:8:8	1.12E-01	1.63E-02	1.71E-02
1:16:16	1.74E-01	1.39E-02	1.50E-02

Na Figura 19 é possível observar que durante a evolução microestrutural os grãos obtiveram uma orientação semelhante para uma determinada direção. Essa anisotropia fica mais clara mais uma vez, com o aumento das razões de aspecto. Aproximando-se com a morfologia dos grãos de uma microestrutura real deformada.

A

Figura 20 apresenta o caminho microestrutural, sendo possível observar que os dados simulados corroboram com o modelo analítico de JMAK. Novamente isto ocorre porque o tipo de nucleação é homogênea, ou seja, os grãos estão distribuídos uniformemente aleatórios no espaço.

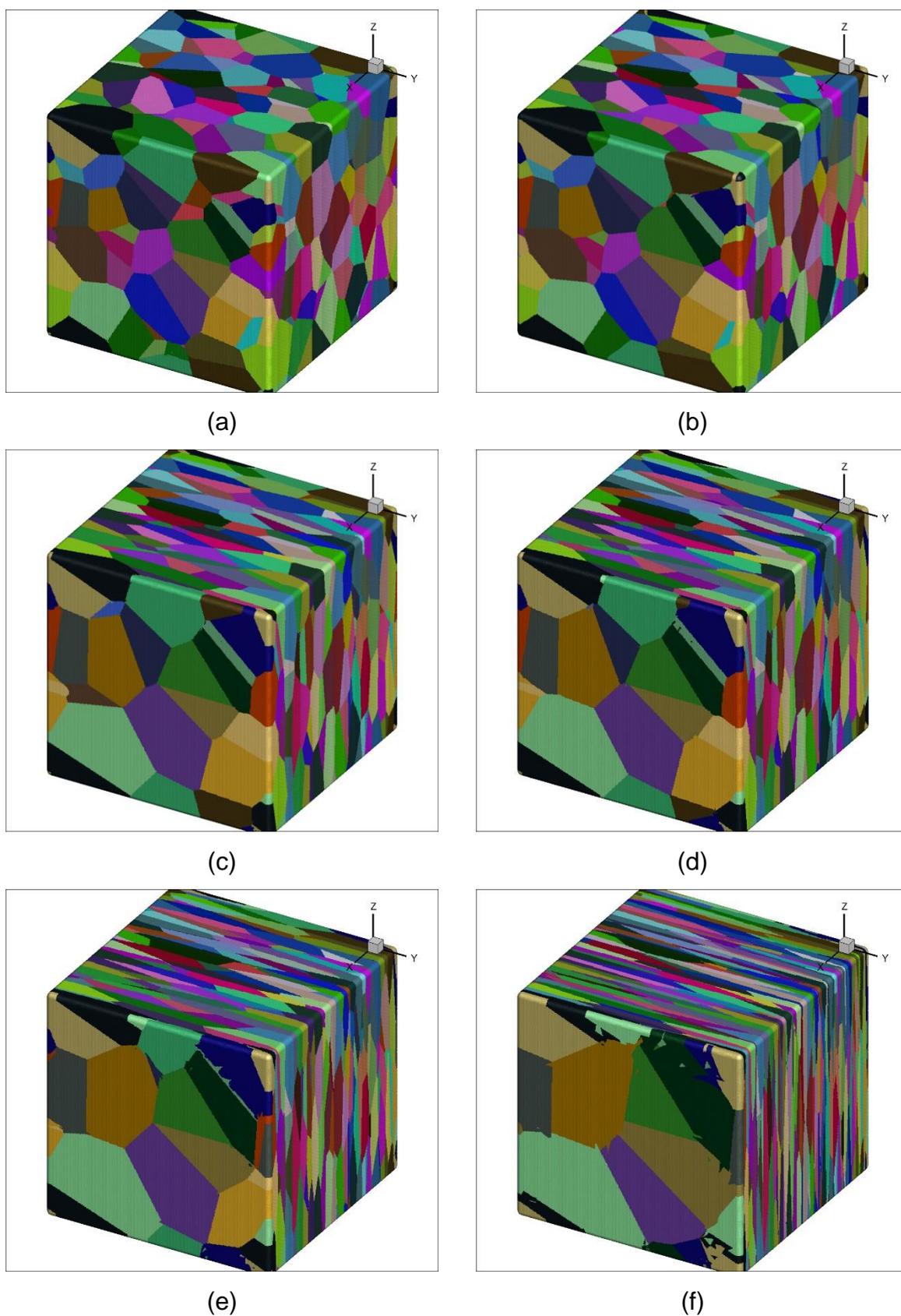


Figura 19 - Simulação computacional da nucleação não homogênea com grãos elipsoidais prolatos com razão de: (a) 2:3:3, (b) 1:2:2, (c) 1:4:4, (d) 1:5:5, (e) 1:8:8 and (f) 1:16:16.

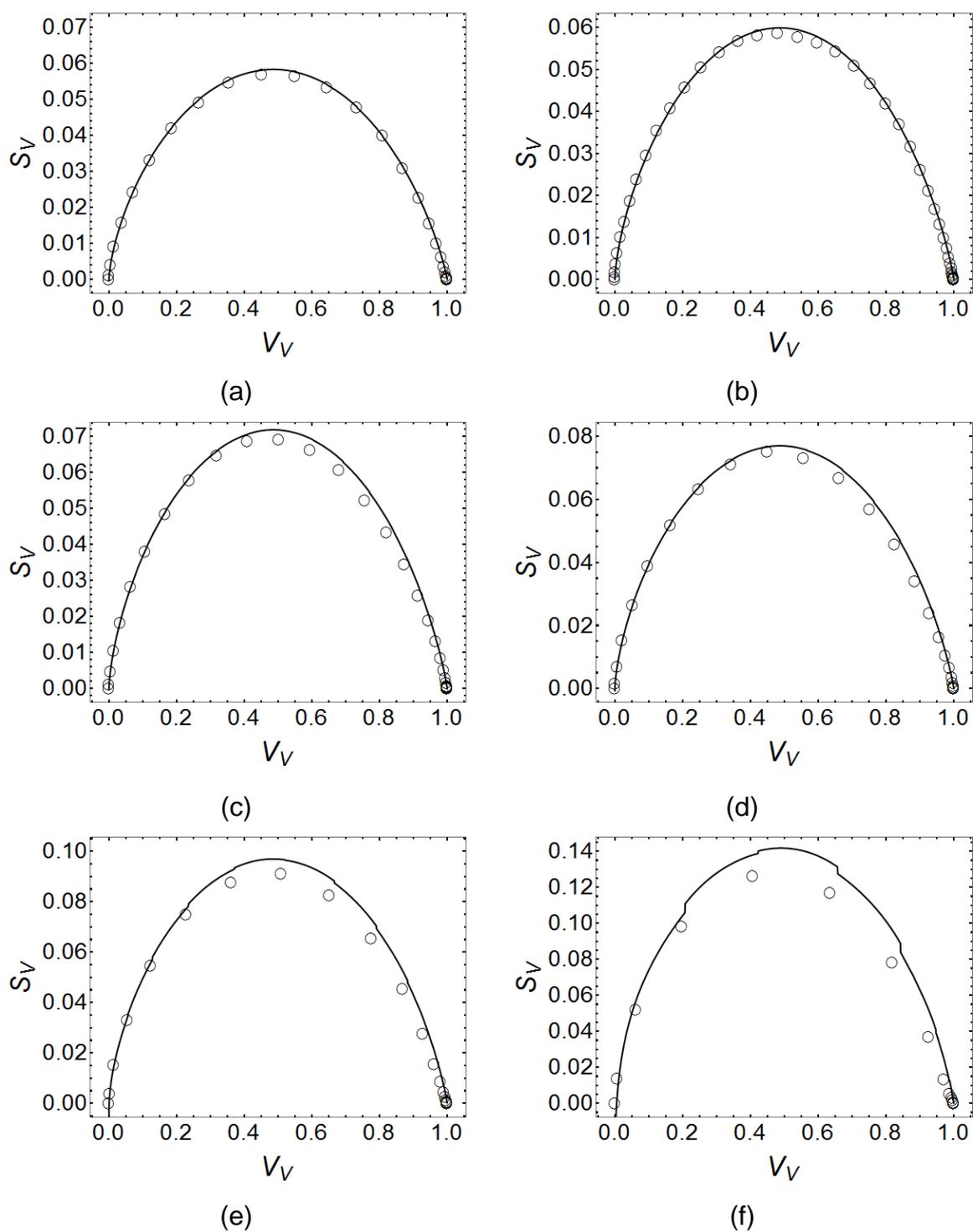


Figura 20 - Caminho Microestrutural, $S_V(t)$ vs. $V_V(t)$, da nucleação não homogênea com grãos elipsoidais oblato com razão: (a) 3:2:2; (b) 2:1:1; (c) 4:1:1; (d) 5:1:1,; (e) 8:1:1 and (f) 16:1:1.

A Figura 21 apresenta a evolução da área interfacial, S_V , e a Figura 22 apresenta a evolução da fração volumétrica, V_V , para grãos prolatos sendo possível

observar também que as curvas simuladas se aproximam com o modelo analítico JMAK.

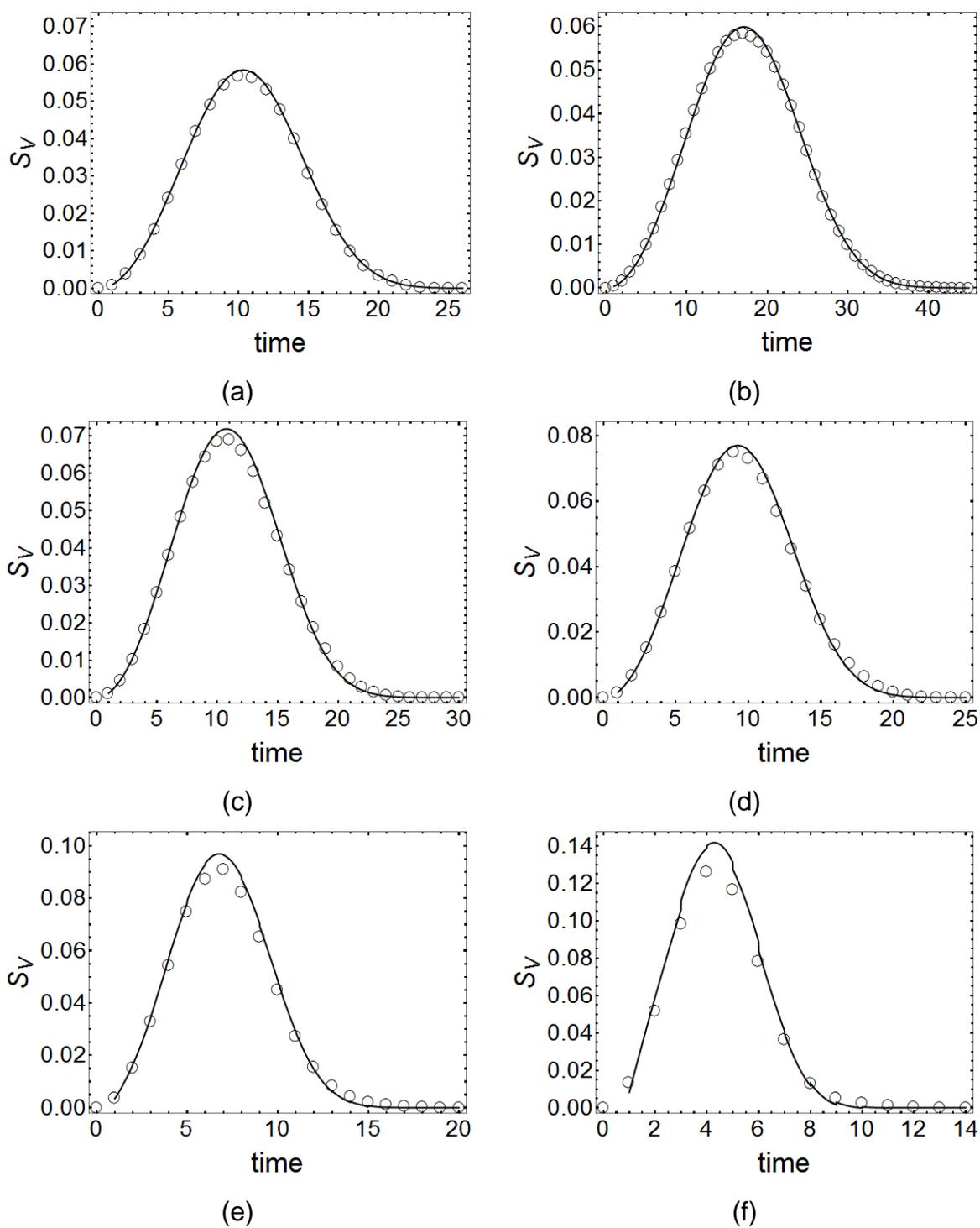


Figura 21 - Area interfacial, S_V , da nucleação não homogênea com grãos elipsoidais oblato com razão: (a) 3:2:2; (b) 2:1:1; (c) 4:1:1; (d) 5:1:1; (e) 8:1:1 and (f) 16:1:1.

Nas Figuras 21 e 22 observou-se uma boa concordância da simulação computacional com o modelo analítico de JMAK.

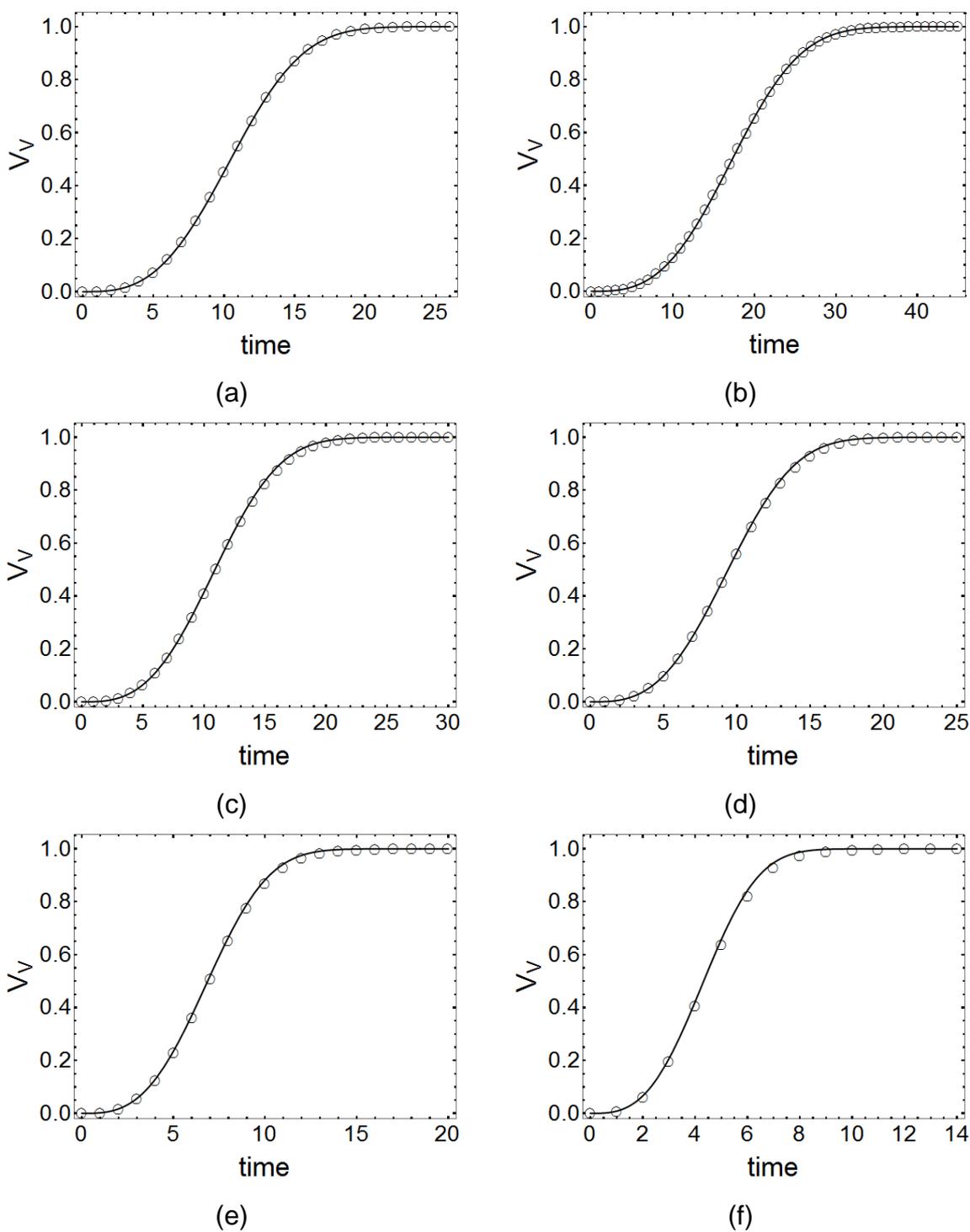


Figura 22 - Fração volumétrica, V_V , da nucleação não homogênea com grãos elipsoidais oblato com razão: (a) 3:2:2; (b) 2:1:1; (c) 4:1:1; (d) 5:1:1; (e) 8:1:1 and (f) 16:1:1.

5.3. CONCLUSÕES

Os resultados da simulação computacional mostraram boa concordância com os resultados teóricos. Além disso, a simulação computacional gera as microestruturas obtidas por nucleação e crescimento de acordo com o tipo de nucleação utilizado. As microestruturas permitem a melhor visualização do efeito do tipo de nucleação na forma dos grãos na microestrutura.

A simulação computacional permite a medição da área interfacial entre regiões transformadas e não transformadas também como a área interfacial entre regiões transformadas.

Os resultados foram satisfatórios com o tipo de nucleação apresentado nesta seção. Deste modo, foi proposto simular uma generalização de grãos com crescimento elipsoidal para a partir de então, modelar as transformações que ocorrem quando um policristal possui as interfaces ou contornos de grão anisotrópicos.

6. SIMULAÇÃO DA GENERALIZAÇÃO DO CRESCIMENTO ELIPSOIDAL

Neste capítulo generalizou-se trabalhos anteriores de Rios e Villa sobre crescimento elipsoidal. A equação generalizada se aplica à nucleação de elipsoides de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo. Na simulação, os núcleos estão localizados no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo. As regiões transformadas crescem com elipsoides no formato de prolato e oblato e os elipsoides têm seus eixos correspondentes paralelos.

Os grãos dos policristais são geralmente equiaxiais. Em outras palavras, a microestrutura é isotrópica. No entanto, devido alguns processos, o formato do grão pode ser alongado e a microestrutura se torna anisotrópica.

Por exemplo, quando um policristal é deformado por laminação a frio ou por ECAP[8,16,31,32] a microestrutura torna-se anisotrópica. Outro exemplo é a formação da ferrita a partir da austenita deformada[15]. Nesta situação, os grãos da ferrita podem ter a forma alongada em vez de equiaxial[13,15]. Um exemplo menos comum, é a precipitação em uma liga de Ti-20% em peso de Mo sob compressão[33] que resulta em precipitados elipsoidais paralelos.

Elipsoides são a primeira aproximação para grãos alongados. Portanto, é de interesse estudar a formação de grãos elipsoidais em detalhe. Neste capítulo, foi utilizado a simulação computacional e métodos analíticos para realizar este estudo.

6.1 FUNDO MATEMÁTICO

Normalmente associamos o trabalho clássico de Johnson-Mehl, Avrami e Kolmogorov[1–5] com o crescimento de grãos esféricos. No entanto, Kolmogorov no início do seu trabalho já afirmou que[5]:

"As fórmulas mantêm-se sob a suposição de crescimento uniforme em todas as direções (crescimento esférico) ou para regiões de forma arbitrária orientadas de forma semelhante no espaço".

Este trecho significa que Kolmogorov já sabia que seu resultado pode ser válido para o crescimento elipsoidal desde que os eixos correspondentes sejam paralelos. Considerando a nucleação por saturação de sítios, ou seja, novas regiões nucleadas em $t = 0$ e crescer com uma forma elipsoidal com uma taxa constante a expressão para o crescimento elipsoidal é:

$$V_v(t) = 1 - \exp\left(-\frac{4\pi}{3}\lambda G_1 G_2 G_3 t^3\right) \quad (7)$$

Na Eq. (7) o crescimento das regiões mantêm sua forma durante o crescimento. G_1 , G_2 e G_3 são as velocidades de crescimento ao longo do eixos principais e λ é o número de núcleos por unidade de volume. Os comprimentos dos eixos são $a_1 = G_1 t$, $a_2 = G_2 t$, $a_3 = G_3 t$.

Claramente, se $G_1 = G_2 = G_3$, então a Eq. (7) se reduz à expressão usual para o crescimento esférico.

A questão crítica aqui é a assertividade de Kolmogorov de que as regiões devem ser orientadas de forma semelhante no espaço. A Eq. (7) não é válida se os elipsoides forem orientados aleatoriamente no espaço.

A equação não é válida porque se os elipsoides forem orientados aleatoriamente durante uma transformação de nucleação e crescimento, esse elipsoide pode impedir o crescimento de outro elipsoide. Ocorrendo o fenômeno conhecido como *blocking* ou traduzido como bloqueio[19,34].

Existem muitos estudos sobre este problema, e soluções aproximadas foram propostas por [19,34]. Ainda assim, uma solução matemática exata para este problema não está disponível. Godiksen et al.[35] realizaram uma simulação

computacional de elipsoides oblatos e prolatos orientados aleatoriamente. Os resultados de Godiksen et al. mostrou que as formas particulares da Eq. (7) para esferóides prolatos e oblatos dados por Vandermeer et al.[21] são válidos se a proporção do maior para o menor eixo elipsoidal é menor do que quatro. Por exemplo, elipsoides prolatos com eixos de 4:1:1 ainda obedeceu à Eq. (7) mas não com eixos 8:1:1[35].

Em todos esses casos, a nucleação dos elipsoides foi supostamente originada em sítios localizados uniformemente aleatórios no espaço. Em outras palavras, os sítios de nucleação que estão localizados de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo[36]. Dentro além desses estudos de nucleação e crescimento, outros trabalhos tem sido feito sobre a influência da anisotropia na distribuição final do tamanho de grão sem equilíbrio[37,38].

Em um trabalho anterior, Rios e Villa[6] generalizaram o trabalho de JMAK tratando para que os núcleos possam ser localizados no espaço não apenas por um processo de ponto de Poisson homogêneo, mas também de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo. Como resultado, em vez da fração volumétrica, agora tem uma média dependente da posição da densidade de volume, $V_v(t, x)$. Rios e Villa ainda conseguiram dar uma expressão simples para o caso generalizado de saturação de sítios com velocidade constante e isotrópica, G , que é o crescimento esférico

$$V_v(t, x) = 1 - \exp\left(-\frac{4\pi}{3}\lambda(x)G^3t^3\right) \quad (8)$$

onde $\lambda(x)$ é a intensidade dependente da posição de um processo de ponto de Poisson não homogêneo.

Reconhece-se prontamente que, quando se tem um processo de ponto de Poisson homogêneo, λ é independente da posição e é igual ao número de núcleos por unidade de volume. Se λ é uma constante, a Eq. (8) se reduz à fórmula de JMAK bem conhecida.

No entanto, para que a Eq. (8) tenha uma expressão conveniente, Rios e Villa assumiram que $\lambda(x)$ era uma função harmônica, isto é, $\Delta\lambda(x) = 0$. Caso contrário, se $\lambda(x)$ não fosse harmônico, Rios e Villa mostraram que ainda se poderia obter uma

expressão para um processo de ponto de Poisson não homogêneo arbitrário, mas envolveria integrais[6]. A Eq. (8) foi testada contra simulação computacional usando autômato celular em um trabalho anterior[23]. Por causa disso, não se pode simplesmente introduzir $\lambda(x)$ na Eq. (7) "por analogia" para obter uma expressão para elipsoides nucleados de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo.

Neste capítulo, foi generalizado a Eq. (7). A nucleação de elipsoides seguem um processo de ponto de Poisson não homogêneo. Sendo determinado as condições que $\lambda(x)$ deve satisfazer para que ainda se possa ter uma expressão conveniente como a Eq. (8). Foi testada esta expressão contra a simulação computacional com nucleação e crescimento de elipsoides prolatos e oblatos de forma semelhante orientados no espaço para várias razões de aspecto.

Conforme demonstrado por Rios e Villa[6], o ponto crítico para obter a Eq. (8) em tal forma conveniente é uma propriedade de integrais de funções harmônicas: a propriedade do valor médio. Em 3D, esta propriedade afirma que a integral de uma função harmônica f dentro de uma bola de razão unitária centrada em x é igual a $(4\pi/3)f(x)$. No que se segue, foi derivado quais condições a função f deve satisfazer para que uma propriedade semelhante se aplica. Essa propriedade semelhante é que, em vez de uma bola centrada na origem, tem-se um elipsoide centrado na origem. Desta propriedade, uma expressão como a Eq. (8) pode ser obtido para elipsoides.

Por uma questão de simplicidade, foi considerado o caso por saturação de sítios. Ou seja, todos os locais de nucleação são transformados em $t = 0$.

Sendo o modelo de crescimento o seguinte: os grãos crescem com uma forma elipsoidal com uma taxa constante. Ou seja, no momento t o grão nascido no ponto x é dado por um elipsoide centrado em x com eixos de comprimento a_1 , a_2 e a_3 , respectivamente. Os elipsoides são orientados no espaço de modo que seus eixos correspondentes sejam paralelo. Assim, denotemos por $E(x; a_1, a_2, a_3)$ o elipsoide em \mathbb{R}^3 centrado em $x = (x_1, x_2, x_3)$ com eixos a_1 , a_2 e a_3 , e tal que a direção do eixo a_1 está ao longo do vetor $(1,0,0)$.

$$E(X; a_1, a_2, a_3) = \left\{ (y_1, y_2, y_3) \in \mathbb{R}^3 : \frac{(y_1 - x_1)^2}{a_1^2} + \frac{(y_2 - x_2)^2}{a_2^2} + \frac{(y_3 - x_3)^2}{a_3^2} \leq 1 \right\} \quad (9)$$

Desta forma, podemos modelar o processo de nucleação por um processo de ponto $N = \{x_n\}$ em \mathbb{R}^3 onde x_n representa a localização espacial do enésimo núcleo do grão elipsoidal. Desse modo, denotado por $\theta^t(x)$ o grão nascido no ponto x e crescido até o tempo t , temos que a região cristalizada θ^t no momento t é o conjunto fechado aleatório

$$\theta^t := \cup_{(x_n) \in N} \theta^t(x_n) \quad (10)$$

Onde

$$\theta^t(x_n) = E(\chi_n; a_1, a_2, a_3) \quad (11)$$

O cone causal $C(t, x)$ no tempo t no ponto x é dado por

$$C(t, x) = \{y \in \mathbb{R}^3: y \in \theta^t(x)\} \quad (12)$$

Segue

$$\Lambda(C(t, x)) = \int_{\theta^t(x)} \lambda(y) dy \quad (13)$$

Como bem sabemos[6], se o processo de nucleação N é um Processo de ponto de Poisson, então a densidade de volume média $Vv(t, x)$ é dado por

$$v_v(t, x) = 1 - e^{-\Lambda(C(t, x))} \quad (14)$$

O problema agora é calcular a integral na Eq. (13). Se a intensidade $\lambda(y)$ é uma função em \mathbb{R}^3 de tal modo que

$$\sum_{i=1}^3 \partial_i^2 f(y) = 0 \quad (15)$$

Onde $f(y) = \lambda(a_1 y_1 + x_1, a_2 y_2 + x_2, a_3 y_3 + x_3)$.

A eq. (15) garante que tem a propriedade de valor médio para elipsoides. Portanto, seguindo um procedimento semelhante descrito em Rios e Vila[6] pode-se integrar a Eq. (13)

$$v_v(t, x) = 1 - \exp\left\{-\lambda(x) \frac{4}{3} \pi G_1 G_2 G_3 t\right\}^3 \quad (16)$$

Observe que, o caso do crescimento esférico é um caso particular do caso elipsoidal onde $G_1 = G_2 = G_3$.

Acima, foi obtido uma expressão para um número de núcleos espacialmente dependente, mas independente do tempo. Seguindo o mesmo raciocínio acima[6], também podemos derivar uma expressão para um número de núcleos espacialmente dependente, mas dependente do tempo: uma taxa constante de nucleação, $I(x)$, por exemplo, uma taxa de nucleação constante (mas espacialmente dependente).

$$v_v(t, x) = 1 - \exp\left\{-I(x) \frac{\pi}{3} G_1 G_2 G_3 t^4\right\} \quad (17)$$

A função, $I(x)$, deve satisfazer o mesmo critério derivado para $\lambda(x)$ expresso pela Eq. (15).

Em relação a uma taxa de nucleação constante no contexto de um processo de ponto de Poisson não homogêneo, Eq. (17).

Voltando à Eq. (16) pode-se notar que uma intensidade em função de λ do tipo

$$\lambda(\chi) = ax_1 + b \quad (18)$$

Satisfaz a eq. (15). Além disso, também se pode definir um tempo normalizado para cada transformação como $\tau = \sqrt[3]{G_1 G_2 G_3} t$, a Eq. (8) e Eq. (16) pode ser reescrita como a Eq. (19). Observe que, neste caso, cada transformação tem seu tempo normalizado que depende dos parâmetros geométricos a_1 , a_2 e a_3 .

$$v_v(t, x) = 1 - \exp\left\{-\lambda(\chi) \frac{4}{3} \pi \tau^3\right\} \quad (19)$$

O tempo normalizado será útil no que se segue, como poderemos combinar no mesmo gráfico a cinética de elipsoides de diferentes formas.

A fração volumétrica transformada pode ser definida como a integral da densidade de volume média sobre todo o volume $[0,1] \times [0,1] \times [0,1]$.

$$v_v(t) = \iiint_0^1 v_v(t, x) dx \quad (20)$$

6.2 METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Para o processo de nucleação e crescimento, foi realizado a simulação computacional utilizando o método do Cone Causal[39].

A matriz compreendia para as simulações foi de 300x300x300 células cúbicas. Foi simulado elipsoides prolatos com razões de aspecto de 8:1:1, 4:1:1 e 2:1:1 e elipsoides oblatos com razões de aspecto de 8:8:1, 4:4:1 e 2:2:1. Simulações empregando crescimento esférico também foram realizadas para comparação. Todas as simulações foram realizadas por nucleação em saturação de sítios como descrito na seção acima.

Os núcleos foram localizados dentro da matriz de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo com uma intensidade, $\lambda(x)$, variando ao longo de apenas uma direção x_1 .

A intensidade foi igual a $\lambda(x) = \lambda(x_1, x_2, x_3) = mx_1 + n$ onde "m" e "n" são constantes iguais a 596 e 2, respectivamente. Os mesmos valores de "m" e "n" foram usados em um trabalho anterior em que o crescimento estava equiaxial[23]. Para fins dimensionais, consideramos que cada lado de uma célula mede 1 μm . Portanto, a matriz tem um volume igual a 300x300x300 μm^3 . Esses números foram escolhidos para dar um número total de núcleos igual a 300. Como resultado, o tamanho médio do grão é de aproximadamente 44 μm , que é um valor razoável. Condições de contorno periódicas foram adotadas, exceto ao longo do eixo x_1 .

Todas as velocidades de crescimento foram mantidas constante ao longo da transformação. Cada resultado para cada elipsoide é o valor médio de 50 simulações.

Ou seja, foi repetido a simulação 50 vezes em cada caso dos elipsoides. Este número de repetições, 50, foi usado em vários trabalhos com resultados confiáveis.

6.3 RESULTADOS

Como resultados construiu-se uma comparação direta entre as simulações e os modelos analíticos anteriormente apresentados. Para tal optou-se por gráficos da cinética da transformação em função do tempo, curva V_v versus Tempo. Em todos os casos demonstrou-se também as microestruturas geradas com auxílio da simulação computacional.

6.3.1 Evolução Microestrutural

A Figura 23 apresenta a evolução microestrutural para grãos elipsoidais oblato com razão de aspecto de 4:4:1. Há um aumento na densidade volumétrica, $V_v(t, x)$, de $x_1 = 0$ para $x_1 = 1$. Isso é consistente com o fato de que a densidade de núcleos aumenta com x_1 .

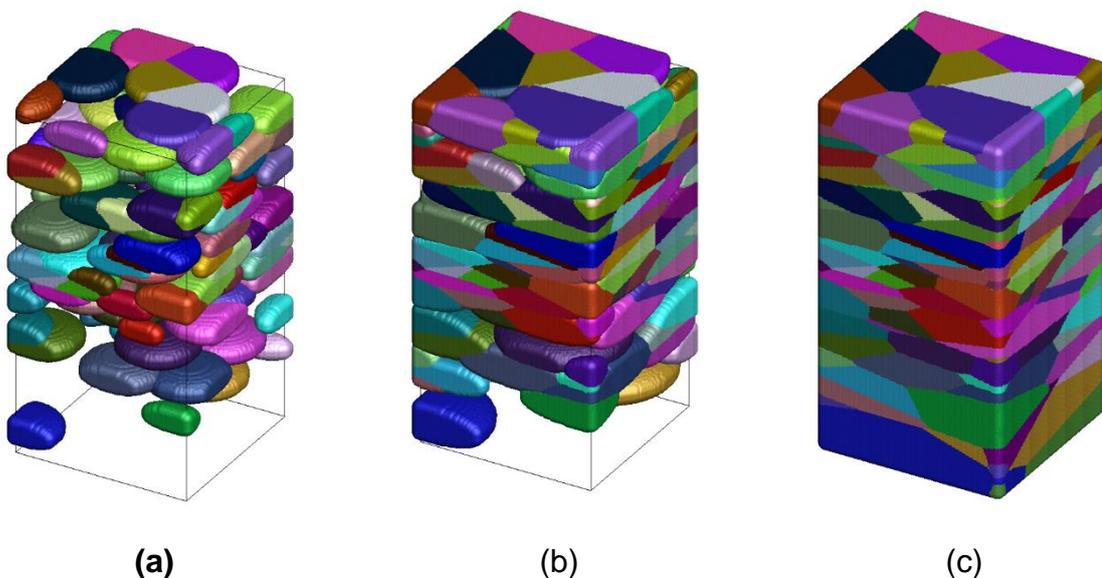


Figura 23 - Microestruturas via simulação computacional da nucleação não homogênea com grãos que crescem como esferóides oblato com razão de aspecto 4: 4: 1: $V_v = 0,3$ (b) $V_v = 0,7$, (c) $V_v = 1$ [40].

A Figura 24 mostra uma situação análoga para a evolução microestrutural de elipsoides prolatos com relações de aspecto 4:1:1

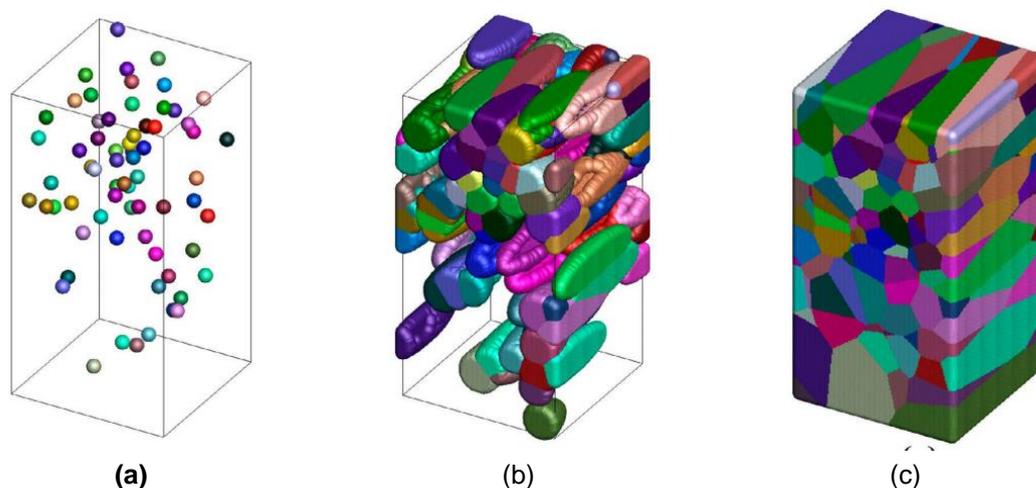


Figura 24 - Microestruturas via simulação computacional da nucleação não homogênea com grãos que crescem como esferóides prolatos com razão de aspecto 4: 1: 1: $V_V = 0$ (b) $V_V = 0,3$, (c) $V_V = 1[40]$.

As Figuras 25, 26, 27 e 28 apresenta as microestruturas para os elipsoides com razões de aspecto: 2:2:1 e 2:1:1, 8:8:1 e 8:1:1 respectivamente.

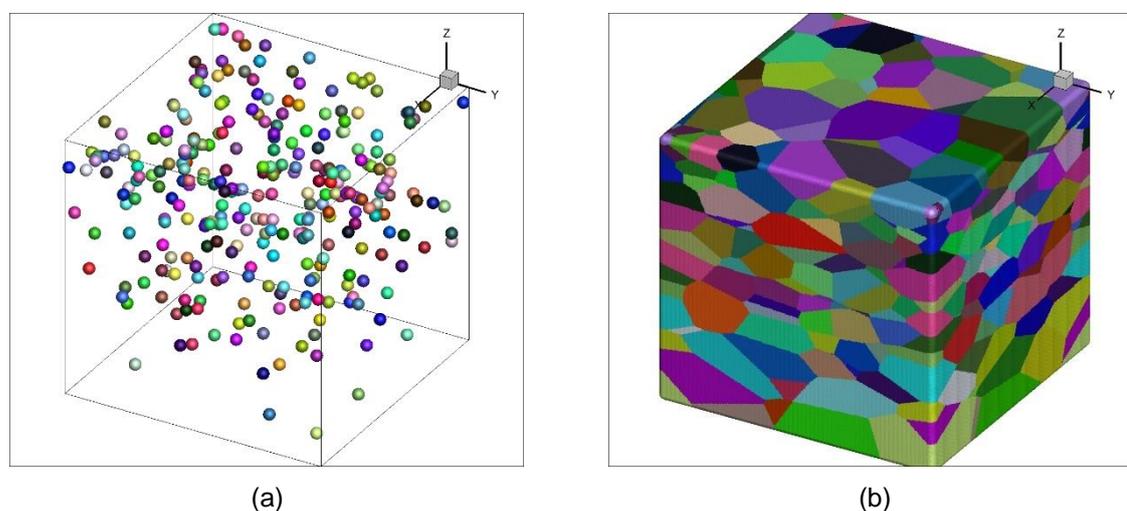


Figura 25 - Microestruturas via simulação computacional da nucleação não homogênea com grãos que crescem como esferóides com razão de aspecto 2:2:1.

A Figura 29 exibe a microestrutura totalmente transformada nos planos $x_1 = 0,1$, $x_1 = 0,5$ e $x_1 = 0,9$, respectivamente. Os elipsoides em crescimento têm razões de aspecto: (a) 1:1:1; (b) 1:1:1; (c) 1:1:1, (d) 2:2:1, (e) 2:2:1, (f) 2:2:1, (g) 2:1:1, (h) 2:1:1 e (i) 2:1:1.

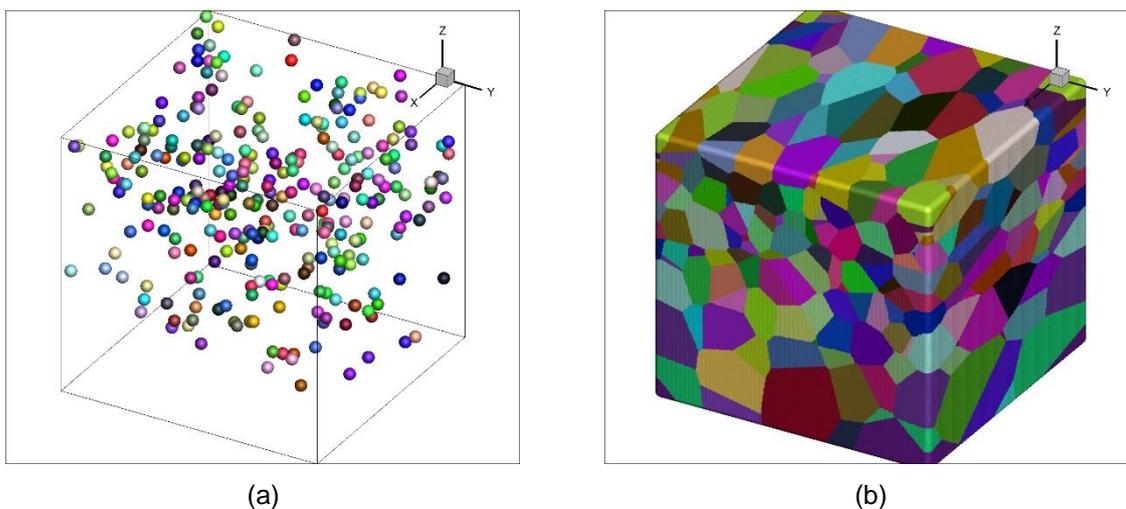


Figura 26 - Microestruturas via simulação computacional da nucleação não homogênea com grãos que crescem como esferóides com razão de aspecto 2:1:1.

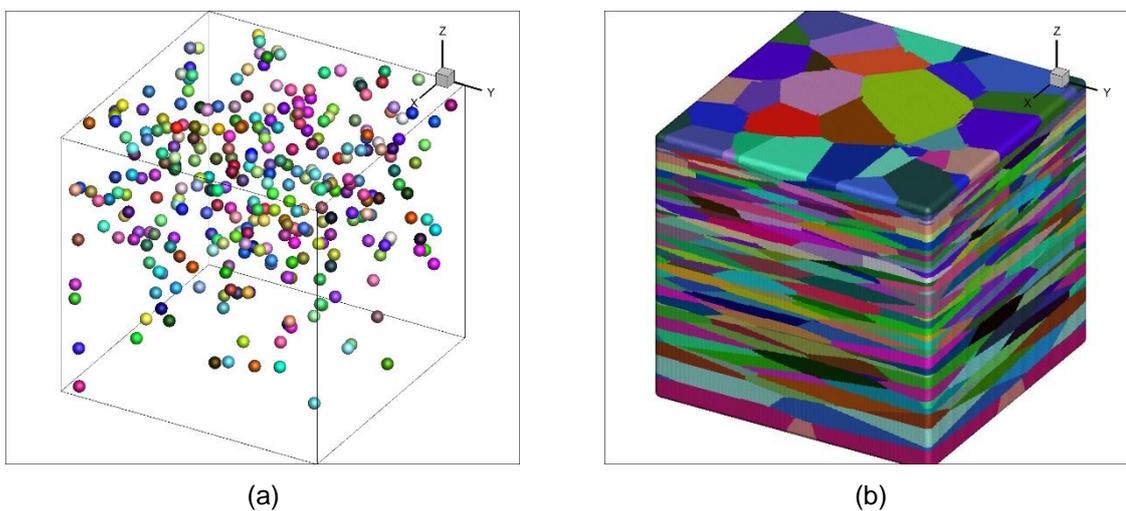


Figura 27 - Microestruturas via simulação computacional da nucleação não homogênea com grãos que crescem como esferóides com razão de aspecto 8:8:1.

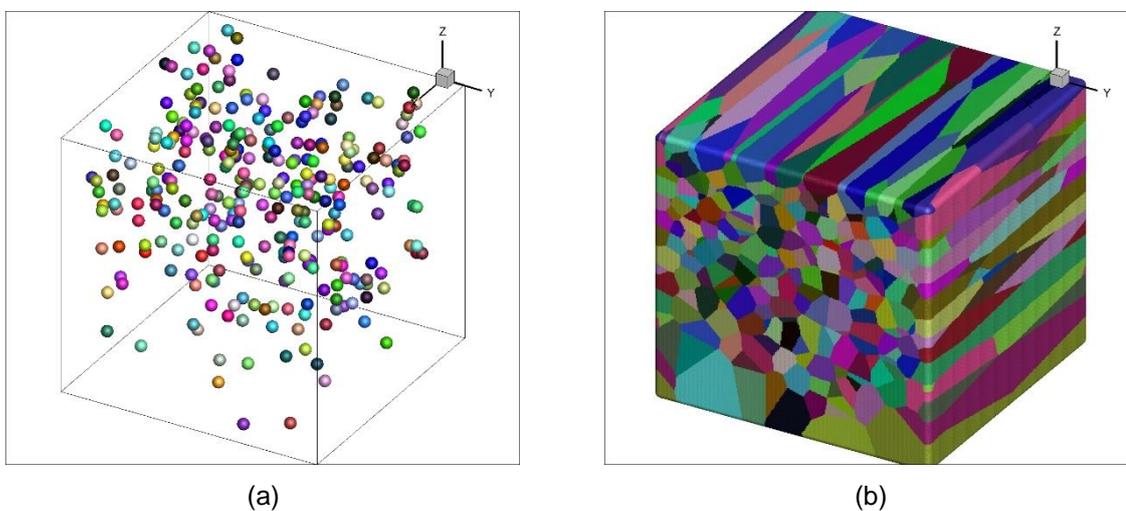


Figura 28 - Microestruturas via simulação computacional da nucleação não homogênea com grãos que crescem como esferóides com razão de aspecto 8:1:1.

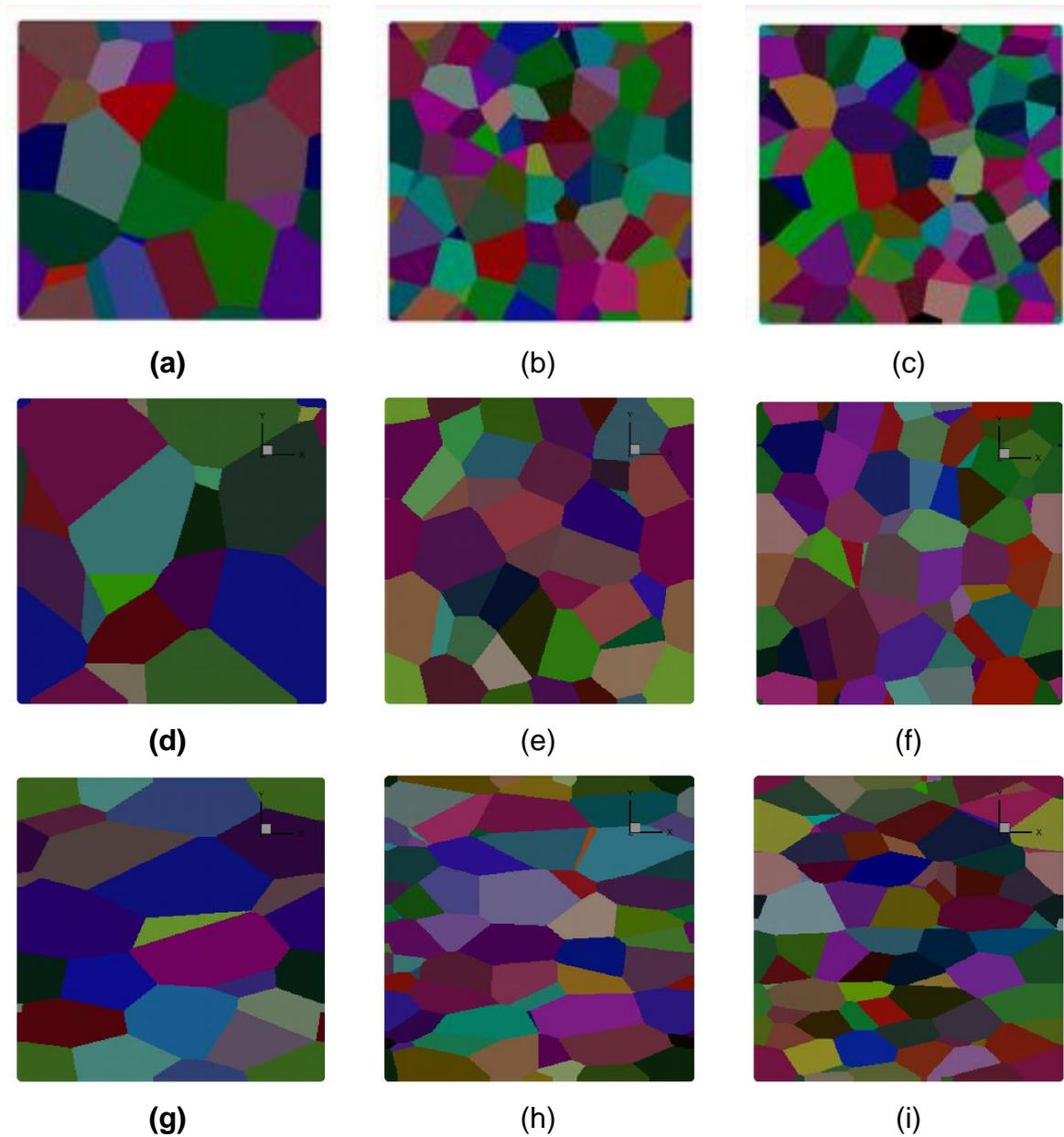


Figura 29 - Microestrutura totalmente transformada em x_1 , seções com grãos que crescem com razões de aspecto: (a) 1:1:1 no plano $x_1 = 0,1$; (b) 1:1:1 no plano $x_1 = 0,5$; (c) 1:1:1 no plano $x_1 = 0,9$; (d) 2:2:1 no plano $x_1 = 0,1$; (e) 2:2:1 no plano $x_1 = 0,5$; (f) 2:2:1 no plano $x_1 = 0,9$; (g) 2:1:1 no plano $x_1 = 0,1$; (h) 2:1:1 em plano $x_1 = 0,5$; e (i) 2:1:1 no plano $x_1 = 0,9$.

A Figura 30 exibe a microestrutura totalmente transformada nos planos $x_1 = 0,1$, $x_1 = 0,5$ e $x_1 = 0,9$, respectivamente. Os elipsoides em crescimento têm razões de aspecto: (a) 4:4:1; (b) 4:4:1; (c) 4:4:1, (d) 4:1:1, (e) 4:1:1, (f) 4:1:1, (g) 8:8:1, (h) 8:8:1, (i) 8:8:1, (j) 8:1:1, (k) 8:1:1 e (l) 8:1:1.

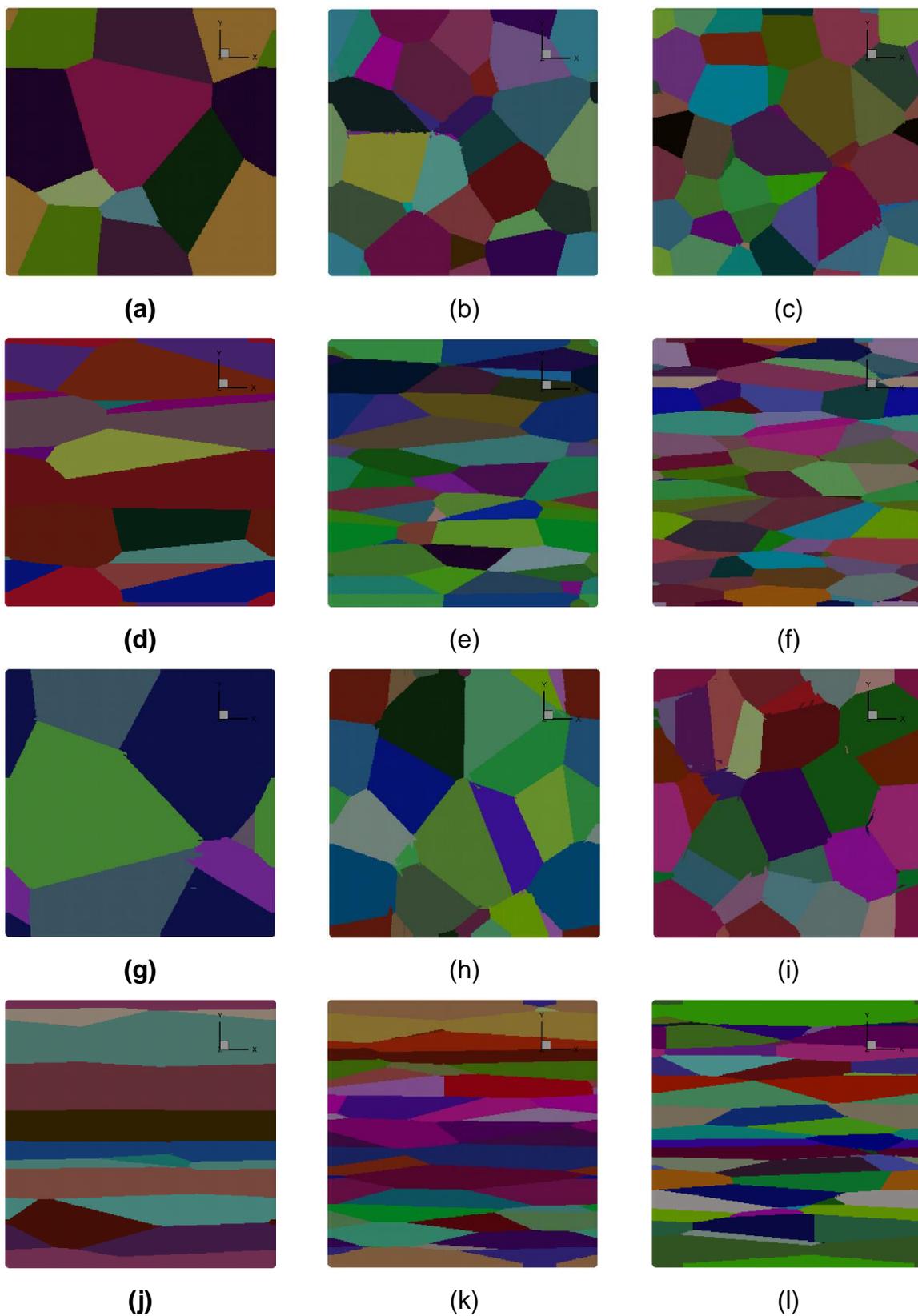


Figura 30 - Microestrutura totalmente transformada em x_1 , seções com grãos que crescem: (a) 4:4:1 no plano $x_1 = 0,1$; (b) 4:4:1 no plano $x_1 = 0,5$; (c) 4:4:1 no plano $x_1 = 0,9$; (d) 4:1:1 no plano $x_1 = 0,1$; (e) 4:1:1 no plano $x_1 = 0,5$; (f) 4:1:1 no plano $x_1 = 0,9$; (g) 8:8:1 no plano $x_1 = 0,1$; (h) 8:8:1 em plano $x_1 = 0,5$; (i) 8:8:1 no plano $x_1 = 0,9$; (j) 8:1:1 no plano $x_1 = 0,1$; (k) 8:1:1 em plano $x_1 = 0,5$; (l) 8:1:1 no plano $x_1 = 0,9$.

6.3.2. Fração volumétrica transformada em relação ao tempo

Para elipsoides oblatos, a Figura 31a mostra a densidade de volume média $V_V(t, x)$ em função do tempo normalizado. A Figura 31b mostra a fração volumétrica, $V_V(t)$, em função do tempo normalizado. A Figura 32 apresenta a cinética de transformação de forma análoga para elipsoides prolatos.

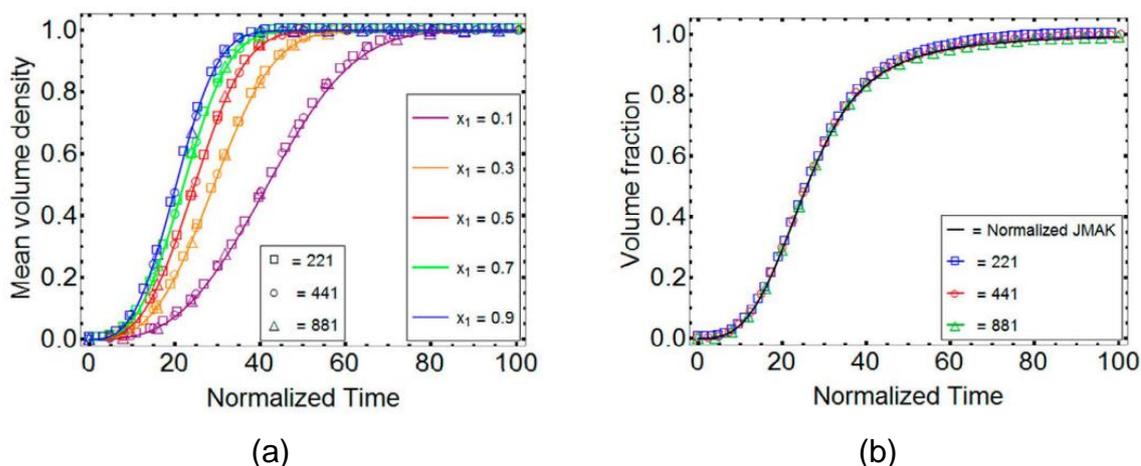


Figura 31 - Cinética de transformação para elipsoides oblatos com razões de aspecto: 2:2:1, 4:4:1, 8:8:1. (a) Densidade de volume média em função do tempo normalizado; (b) Fração volumétrica em função do tempo normalizado. [40]

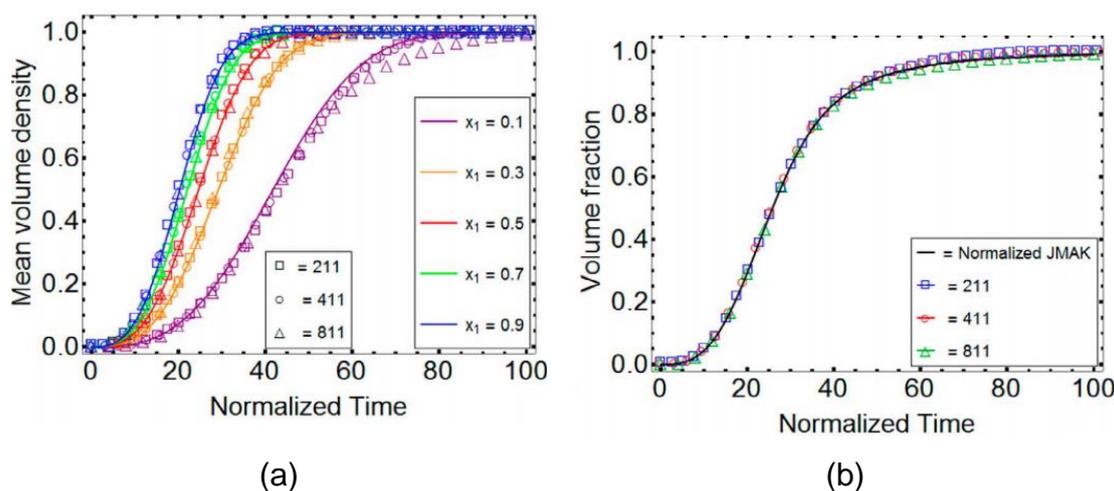
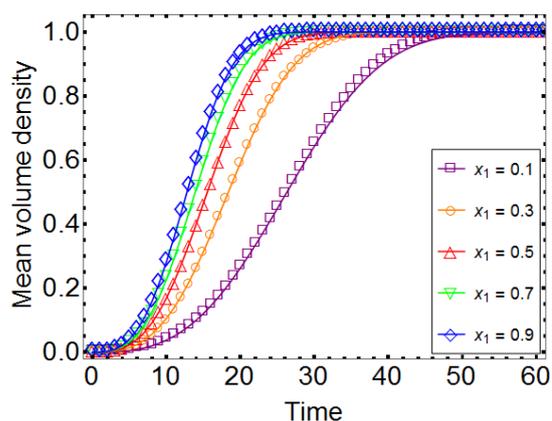
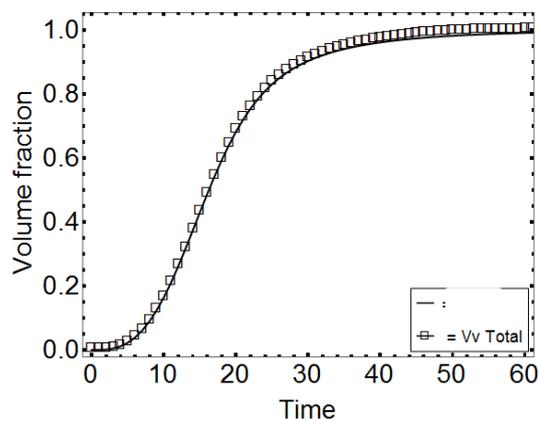


Figura 32 - Cinética de transformação para elipsoides prolatos com razões de aspecto: 2:1:1, 4:1:1, 8:1:1. (a) Densidade de volume média em função do tempo normalizado; (b) Fração volumétrica em função do tempo normalizado. [40]

As Figuras 33, 34, 35, 36, 37 e 38 apresentam a cinética de transformação em função do tempo de cada transformação dos elipsoides separadamente para elipsoides com razões de aspecto: 2:2:1, 2:1:1, 4:4:1, 4:1:1, 8:8:1 e 8:1:1 respectivamente.

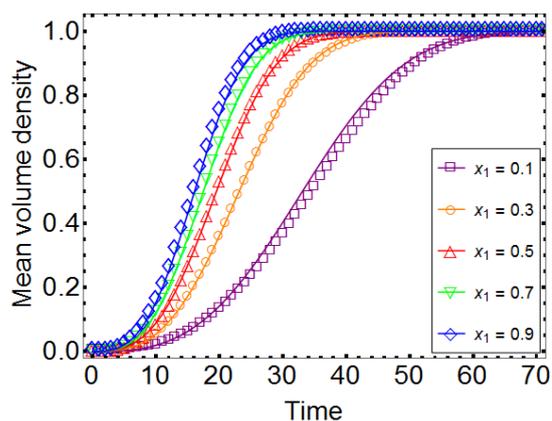


(a)

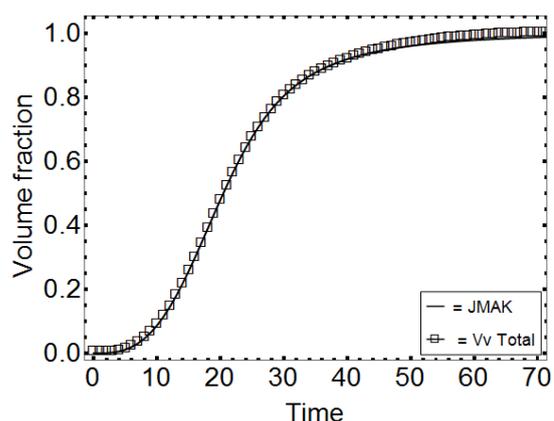


(b)

Figura 33 - Cinética de transformação para elipsoides com razões de aspecto: 2: 2: 1. (a) Densidade de volume média em função do tempo; (b) Fração volumétrica em função do tempo.

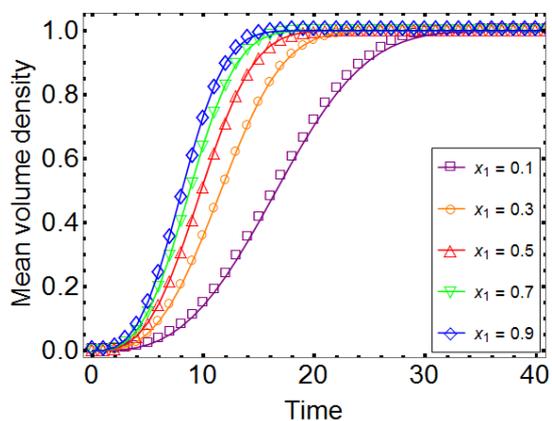


(a)

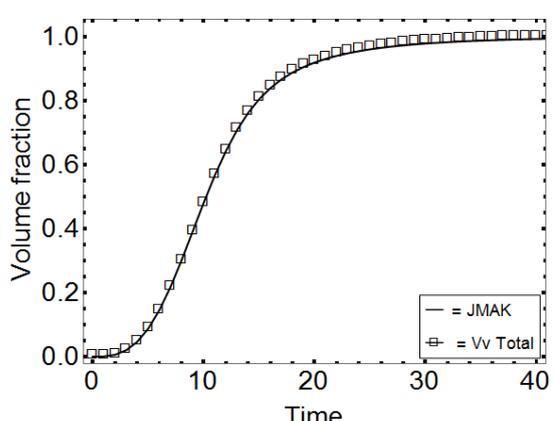


(b)

Figura 34 - Cinética de transformação para elipsoides com razões de aspecto: 2: 1: 1. (a) Densidade de volume média em função do tempo; (b) Fração volumétrica em função do tempo.

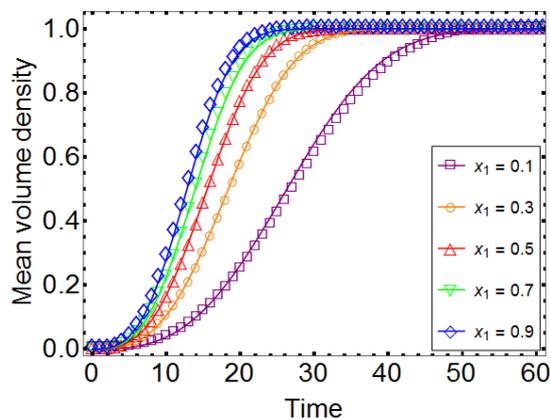


(a)

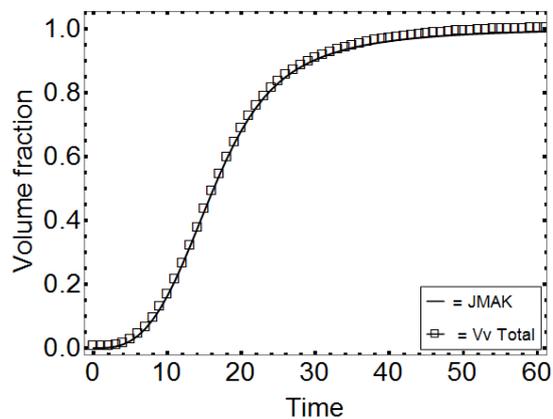


(b)

Figura 35 - Cinética de transformação para elipsoides com razões de aspecto: 4: 4: 1. (a) Densidade de volume média em função do tempo; (b) Fração volumétrica em função do tempo.

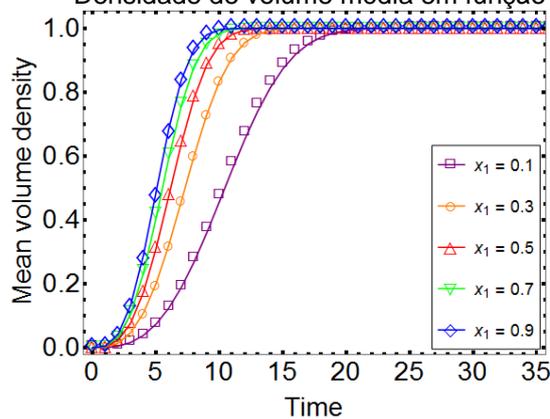


(a)

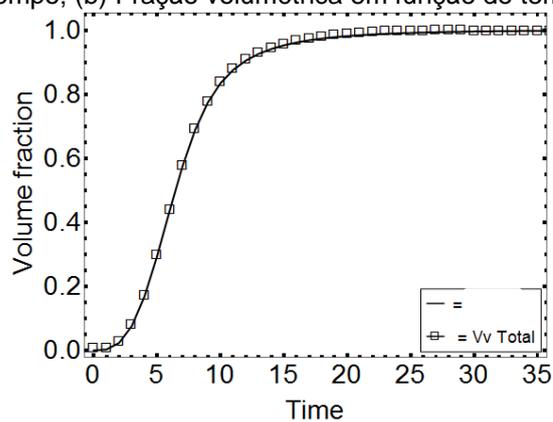


(b)

Figura 36 - Cinética de transformação para elipsoides com razões de aspecto: 4: 1: 1. (a) Densidade de volume média em função do tempo; (b) Fração volumétrica em função do tempo.

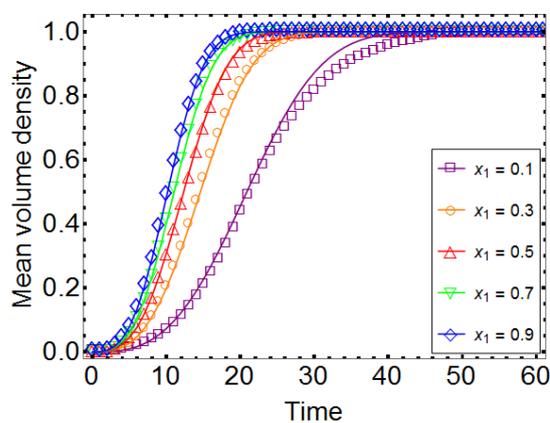


(a)

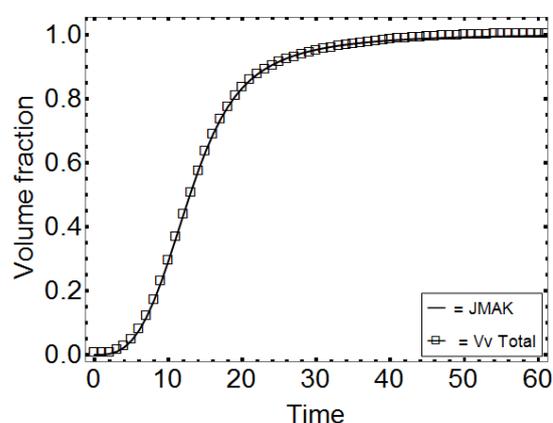


(b)

Figura 37 - Cinética de transformação para elipsoides com razões de aspecto: 8: 8: 1. (a) Densidade de volume média em função do tempo; (b) Fração volumétrica em função do tempo.



(a)



(b)

Figura 38 - Cinética de transformação para elipsoides com razões de aspecto: 8: 1: 1. (a) Densidade de volume média em função do tempo; (b) Fração volumétrica em função do tempo.

6.3.3. Contiguidade

A Figura 39 mostra um gráfico da contiguidade medida ao longo do volume total $[0,1] \times [0,1] \times [0,1]$ em função da fração volumétrica transformada.

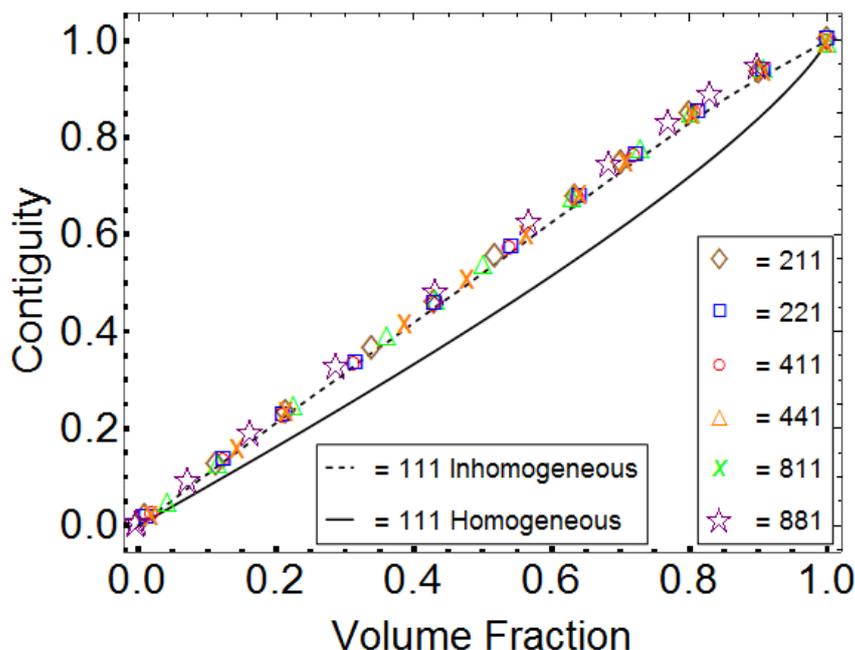


Figura 39 - Contiguidade em relação à fração volumétrica. Linha sólida: o crescimento de esferas nucleadas de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Linha tracejada: o crescimento de esferas nucleadas de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo. Os símbolos correspondem a elipsoides nucleados de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo.[40]

6.4. DISCUSSÃO

Como mostrado na seção anterior a Figura 23 apresenta a evolução microestrutural para grãos elipsoidais oblato com razão de aspecto 4:4:1. Há um aumento na densidade volumétrica, $V_V(t, x)$, de $x_1=0$ para $x_1=1$. Isso é consistente com o fato de que a densidade de núcleos aumenta com x_1 .

Portanto, a parte inferior da matriz contém grãos maiores, pois tem menos núcleos que a parte superior [41,42]. A Figura 24 mostra uma situação análoga para a evolução microestrutural de elipsoides prolatos com razão de aspecto 4:1:1.

Nas Figuras 25a, 26a, 27a e 28a apresentam mais evidente o efeito do tipo de nucleação simulado, contendo uma densidade maior de grãos na parte superior da matriz inicial. As Figuras 25b, 26b, 27b e 28b apresenta as microestruturas totalmente

transformada. As Figuras 26b e 28b evidenciam mais claramente a variação do tamanho dos grãos devido o aumento aumento na densidade volumétrica, $V_V(t, x)$, de $x_1=0$ para $x_1=1$.

As Figuras 29 e 30 exibe a microestrutura totalmente transformada nos planos $x_1 = 0,1$, $x_1 = 0,5$ e $x_1 = 0,9$, respectivamente. Os elipsoides em crescimento têm razões de aspecto: (a) 1:1:1; (b) 1:1:1; (c) 1:1:1, (d) 2:2:1, (e) 2:2:1, (f) 2:2:1, (g) 2:1:1, (h) 2:1:1 e (i) 2:1:1 na Figura 29 e razões de aspecto: (a) 4:4:1; (b) 4:4:1; (c) 4:4:1, (d) 4:1:1, (e) 4:1:1, (f) 4:1:1, (g) 8:8:1, (h) 8:8:1, (i) 8:8:1, (j) 8:1:1, (k) 8:1:1 e (l) 8:1:1 na Figura 30. Como esperado, o tamanho do grão diminui conforme a intensidade dos núcleos aumenta de $x_1 = 0,1$ a $x_1 = 0,9$ em todos os casos. Os elipsoides prolatos exibem crescimento anisotrópico mais explícito comparados com elipsoides oblatos.

Para elipsoides oblatos, a Figura 31a mostra a densidade de volume média $V_V(t, x)$ em função do tempo normalizado. A Figura 31b mostra a fração volumétrica, $V_V(t)$, em função do tempo normalizado.

Para elipsoides prolatos, a Figura 32a exibe a densidade de volume média, $V_V(t, x)$ em função do tempo normalizado. A Figura 32b mostra a fração volumétrica $V_V(t)$, em função do tempo normalizado.

Podemos comparar o presente resultado com o trabalho anterior[23] que usava autômatos celular para simular a transformação nucleada de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo. No trabalho anterior[23,27], as regiões de crescimento não foram esférica, mas equiaxial devido ao uso de autômatos celular. Nesta tese, a teoria analítica e o experimento também estavam de acordo.

O plano de referência para a cinética de transformação é o plano com $x_1 = 0,5$. Neste plano, temos $\lambda(0,5) = 300$. Isso significa que a curva de transformação associada com $x_1 = 0,5$ é a mesma curva que seria obtida se os 300 núcleos fossem localizados dentro de $[0,1] \times [0,1] \times [0,1]$ de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Qualquer plano acima do plano de referência tem uma cinética mais rápida à medida que mais núcleos estão presente. Em contraste, qualquer plano abaixo do plano de referência tem uma cinética mais lenta devido ao menor número de núcleos.

Graças ao uso do tempo normalizado, a cinética de todos os elipsoides em um determinado plano nas Figuras 31a e 32a caíram na mesma linha para um determinado valor de x_1 . Isso significa que a cinética da simulação realizada aqui pode

ser reduzida à cinética do crescimento esférico. Mas é preciso ter em mente que uma condição crítica para que isso seja possível é que $\lambda(x)$ deve satisfazer a Eq. (15) para todos os valores de a_1 . Somente quando $\lambda(x)$ satisfaz a Eq. (15) pode-se obter a Eq. (10) formalmente semelhante à equação derivada para o crescimento esférico por Rios e Villa[6]. Pode-se lembrar que, para crescimento esférico, como mencionado acima, é suficiente que $\lambda(x)$ seja uma função harmônica, ou seja, $\Delta\lambda(x) = 0$.

Além disso, note que, segundo Rios e Villa[6], se a nucleação ocorre muito perto de $x_1 = 0$ ou $x_1 = 1$, um deve introduzir fatores de correção. Esses fatores de correção são necessários para compensar o fato de que uma região não pode crescer além de $x_1 = 0$ ou $x_1 = 1$. Conforme mencionado na Metodologia, não há condições de contorno periódicos sobre o plano topo, $x_1 = 0$ e o plano inferior, $x_1 = 1$. Condições de contorno foram usadas apenas nos planos $x_2 = 0$ e $x_2 = 1$ e em $x_3 = 0$ e $x_3 = 1$. No caso presente, as transformações de nucleação em $x_1 = 0,1$ ou $x_1 = 0,9$ tiveram boa concordância com teoria analítica sem correção.

Uma diferença significativa de uma transformação homogeneamente nucleada é que a fração volumétrica transformada deve ser calculada integrando-se ao volume total $[0,1] \times [0,1] \times [0,1]$, Eq. 20. As curvas da fração volumétrica contra o tempo são mostradas nas Figuras 31b e 32b. Da mesma forma, todas as curvas da Figura 31a e 32a podem ser normalizadas para cair em uma curva única. Um ponto crítico é que a fração volumétrica das curvas mostradas nas Figuras 31b e 32b são diferentes das curvas mostradas nas Figuras 31a e 32a para $x_1 = 0,5$. Em outras palavras, a fração volumétrica em relação às curvas das Figuras 31b e 32b não coincidem com a curva que seria obtido se os 300 núcleos estivessem localizados dentro de $[0,1] \times [0,1] \times [0,1]$ de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. A fração volumétrica em função do tempo em relação às curvas são significativamente influenciada pela nucleação não homogênea.

As Figuras 33, 34, 35, 36, 37 e 38 apresentam a cinética de transformação em função do tempo de cada transformação dos elipsoides separadamente para elipsoides com razões de aspecto: 2:2:1, 2:1:1, 4:4:1, 4:1:1, 8:8:1 e 8:1:1 respectivamente.

A contiguidade é a medida que quantifica o “impingement” ocorrido pelo contato dos grãos dentro da matriz em 3D. Segundo Vandermeer [43], a contiguidade é muito

sensível aos desvios da não-aleatoriedade dos grãos alocados dentro de uma matriz, em duas ou em três dimensões. A contiguidade é definida como [43]

$$C^{\beta\beta} = \frac{2s_v^{\alpha\beta}}{2s_v^{\alpha\beta} + s_v^{\beta\beta}} \quad (21)$$

Este parâmetro permite quantificar o impacto dos grãos dentro da matriz. De acordo com Vandermeer[43], a contiguidade detecta desvios da aleatoriedade da nucleação. Por exemplo, se os núcleos formam clusters ou são organizados periodicamente, a contiguidade será significativamente diferente.

A Figura 39 mostra um gráfico da contiguidade medida ao longo do volume total $[0,1] \times [0,1] \times [0,1]$ em função da fração volumétrica transformada. A Figura 39 ilustra a nucleação de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo, a contiguidade de esferas, em linha tracejada e elipsoides de diferentes formas, representados por símbolos na Figura 39, caem na mesma linha.

A Figura 39 demonstra que a curva de contiguidade de uma transformação nucleada de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo encontra-se acima da curva de contiguidade de uma transformação nucleada de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. A contiguidade é considerada um parâmetro confiável para determinar o arranjo de grãos no espaço em relação uns aos outros[43].

De acordo com Vandermeer [43], quando a curva de contiguidade de transformação encontra-se abaixo da linha para a nucleação do processo de ponto de Poisson homogêneo, a linha sólida na Figura 39, isso indica que os núcleos tendem a um arranjo periódico. Por contraste, quando a curva de contiguidade de uma transformação está acima da linha para nucleação homogênea do processo de ponto de Poisson, este indica que os núcleos tendem a se agrupar.

Aglomerados de núcleos têm um amplo significado. Sempre que houver um grupo de núcleos mais próximos um ao outro do que a distância média entre os núcleos, tem um cluster de núcleos. Por exemplo, quando os núcleos se formam no contorno de grão de um policristal, eles formam um cluster, e sua transformação subsequente tem uma curva de contiguidade acima dessa de um processo de ponto de Poisson homogêneo. No presente caso, o processo de ponto de Poisson não

homogêneo resulta em mais núcleos localizados perto de $x_1 = 1$ do que perto de $x_1 = 0$. Portanto, pode-se dizer que há um efeito de agrupamento de núcleos na parte superior do volume de transformação. Isso se reflete no fato de que a curva de contiguidade para nucleação de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo encontra-se acima da curva para nucleação de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Este comportamento é coerente com a observação de Vandermeer [43]. Também é coerente com a simulação computacional de Rios et al. [44] que mudou sistematicamente a localização dos núcleos: de periódico para agrupado. Para Rios et al. [44] os resultados foram totalmente de acordo com a declaração de Vandermeer que foi baseada na observação experimental.

6.5. CONCLUSÕES

Este capítulo generalizou ainda mais o trabalho anterior de Rios e Villa em crescimento esférico. As equações generalizadas, Eq. (16) e Eq. (17), aplica-se à nucleação de elipsoides de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo. O crescimento esférico é um caso particular da equação mais geral derivada aqui. No entanto, as equações gerais, Eq. (16) e Eq. (17), conseguiu preservar a forma conveniente da equação para o crescimento esférico.

Os resultados da simulação computacional mostraram excelentes concordância com os resultados teóricos. Além disso, a simulação computacional gera as microestruturas obtidas por nucleação e crescimento de elipsoides oblatos e prolatos. As microestruturas permitem a melhor visualização do efeito da forma dos elipsoides na microestrutura.

A simulação computacional permite a medição da área interfacial entre regiões transformadas e não transformadas também como a área interfacial entre regiões transformadas. A determinação dessas áreas interfaciais permite a determinação da contiguidade.

No gráfico de contiguidade em relação à fração volumétrica, os dados da esfera e todos os elipsoides caem na mesma curva. A curva de contiguidade para nucleação de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo cai acima da curva de contiguidade para nucleação de acordo com um processo de ponto de Poisson

homogêneo. Este comportamento indica que a nucleação de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo introduziu um efeito de agrupamento dos núcleos.

7. MODELAGEM ANALÍTICA E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA TRANSFORMAÇÃO DE ELIPSOIDES NUCLEADO EM PLANOS PARALELOS ALEATÓRIOS

Um número considerável de materiais de engenharia é policristalino, e por isso há um interesse no estudo. Os policristais são materiais essenciais da engenharia. Nos policristais, a nucleação geralmente ocorre nos contornos de grão ou faces, nas junções triplas ou arestas e nas junções quádruplas ou vértices dos grãos.

Cahn propôs expressões analíticas para transformações nucleadas nas faces dos grãos, junções triplas e junções quádruplas. Por isso, é de interesse ter soluções analíticas e simulações computacionais de transformações nucleadas em contorno de grão não apenas para crescimento esférico, mas também para o crescimento elipsoidal. Neste capítulo, é apresentado uma simulação computacional de transformações nucleadas em contornos de grãos que crescem como elipsoides.

O trabalho inicial de Kolmogorov[5], Johnson-Mehl[1], e Avrami[2–4], conhecido como teoria KJMA ou JMAK, considerou que a nucleação por saturação de sítios é distribuída de forma uniforme e aleatória no espaço. No trabalho de JMAK, a distribuição espacial dos núcleos era a mesma para as duas taxas de nucleação diferentes que eles usaram. No primeiro, a taxa de nucleação inicial era extremamente alta no início da transformação, sem nucleação ocorrendo depois. Esta é a chamada saturação de sítios, que já foi empregada nos outros capítulos desta tese e será empregado no presente capítulo também.

No segundo caso, a taxa de nucleação foi considerada sendo constante. Esta é a chamada transformação por taxa de nucleação constante.

Em um trabalho clássico, Vandermeer e Rath [45] demonstraram que a cinética de recristalização de um único cristal de ferro poderia ser descrita pela transformação de saturação de sítios de acordo com JMAK.

Na prática, surgem muitas situações que diferem das suposições originais de JMAK. Talvez o desvio mais fácil seja que a velocidade pode não ser constante durante a transformação. Neste caso particular, as descobertas de JMAK podem ser adaptadas introduzindo, por exemplo, uma velocidade dependente do tempo.

A metodologia de JMAK pode não ser tão simples de modificar em outros casos. Pode haver situações em que a taxa de nucleação e a taxa de crescimento podem não ser fáceis de determinar. A Avrami reconheceu que os desvios de suas suposições poderiam ocorrer e propôs uma forma generalizada da sua equação que é conhecida até hoje como a equação de Avrami [2].

$$V_v(t) = 1 - \exp(-kt^n) \quad (22)$$

Onde k e n são parâmetros ajustáveis.

Mais recentemente, Rios e Villa generalizaram a teoria de JMAK usando geometria estocástica [6,36]. O conceito do processo de ponto de Poisson homogêneo substituiu a ideia de uniforme aleatoriamente. Rios e Villa mostraram como estender o modelo de JMAK para a situação em que os núcleos estavam localizados no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo. Mais detalhes podem ser encontrados na ref.[6]. No entanto, os sítios de nucleação podem ser localizados no espaço de muitas maneiras diferentes. Rios e Villa derivaram expressões exatas para alguns desses casos, refs.[6,46,47].

Cahn [24] tratou as faces dos grãos como planos localizados aleatoriamente no espaço, contornos de grão como linhas também localizadas aleatoriamente no espaço e vértices dos grão como pontos uniformes localizados aleatoriamente no espaço. Portanto, a expressão de Cahn para nucleação nos vértices do grão coincidiram com as fornecidas pela teoria de JMAK.

A situação que este capítulo examina mais de perto é a nucleação por saturação de sítios em faces de grãos. Especificamente, Cahn derivou uma expressão para a cinética de transformações nucleadas em contornos de grãos. Como dito

acima, Cahn supôs que os contornos de grão eram planos aleatórios. A expressão de Cahn foi avaliada contra simulações computacionais. Os resultados mostram que a expressão não é totalmente precisa, dependendo da rede subjacente que representa o policristal[48,49]. Ainda assim, a equação de Cahn é a única expressão analítica disponível.

Jägle et al.[50] sugeriram que a equação de Cahn pode ser útil para descrever uma ampla gama de situações, se for possível tratar cada um de seus parâmetros como um parâmetro ajustável.

Cahn supôs que os núcleos crescem com uma forma esférica. Para grãos que crescem com forma esférica, Rios e Villa [25,26] demonstraram que a expressão de Cahn para planos aleatórios era idêntico à expressão derivada para planos paralelos. A questão é que a suposição de Cahn de planos aleatórios no espaço não é necessário. A suposição de que o número de planos aleatórios, N , em um volume aleatório deve ser uma variável aleatória de Poisson é suficiente para produzir a expressão de Cahn [25,26]. Por exemplo, para planos paralelos aleatórios, o único requisito é que o número de planos paralelos em um volume aleatório deve ser uma variável aleatória de Poisson. Uma comparação detalhada entre a metodologia de Cahn e a matemática rigorosa aplicada por Rios e Villa pode ser encontrado em [25,26].

A suposição de crescimento esférico é padrão. Não obstante, novas regiões nem sempre crescem como esferas [40,45,51]. Bradley et al. demonstraram em uma série de artigos[52–54] que um contorno de grão de ferrita alotriomorfa nucleada é mais bem descrito por um elipsoide oblato. A razão pela qual essas regiões crescem com formas elipsoidais é que o crescimento no plano de contorno do grão é mais rápido do que o espessamento na austenita[52–54],

Além disso, Enomoto e Aaronson[55] realizaram um estudo detalhado da cinética de nucleação da ferrita nos contornos dos grãos. Eles descobriram que a densidade dos núcleos de ferrita na austenita nos contornos dos grãos diminuíram conforme a temperatura de nucleação aumentou.

Neste capítulo, foi utilizado a nucleação por saturação de sítios. Por causa dessas obras clássicas do grupo de Aaronson, é de interesse ter soluções analíticas para transformações em contorno de grão nucleado não apenas para o crescimento esférico, mas também para crescimento elipsoidal. Por exemplo, Tanaka et al.[56]

usaram uma expressão derivada de Obara et al.[57] baseada em Cahn, para o crescimento de elipsoides oblatos com proporção de 1/3.

Além disso, podemos, portanto, assumir que a densidade dos núcleos nos planos paralelos tem valores diferentes que correspondem a diferentes temperaturas de nucleação[56].

Apesar dos estudos aprofundados do grupo de Aaronson sobre o crescimento de regiões de ferrita oblata a partir dos contornos de grão da austenita, não houve nenhum acompanhamento teórico de seu trabalho.

Neste capítulo, foi abordado a questão da generalização da nucleação elipsoidal em contornos de grão abordando três aspectos chaves.

O primeiro aspecto é uma generalização da nucleação e crescimento de elipsoides em contornos de grão. Sendo apresentado aqui na seção de Fundo Matemáticos[58]. Em seu artigo, Villa e Rios apresentam uma solução geral para nucleação e crescimento de elipsoides em planos paralelos aleatórios. O artigo de Villa e Rios[58] é escrito principalmente para um público matemático e inclui provas rigorosas baseadas na geometria estocástica. Portanto, apresentar um resumo da ref.[58] é conveniente para o cientista de materiais.

O segundo aspecto é uma simulação computacional da nucleação e crescimento de elipsoides oblatos e prolatos em planos paralelos aleatórios e a comparação da simulação computacional com a solução matemática exata de Villa e Rios[58]. É claro que é útil ter uma solução analítica. No entanto, as soluções analíticas lidam com o valor médio das propriedades. A simulação computacional permite a geração de microestruturas que são extremamente úteis para cientistas de materiais. Também se pode quantificar a evolução microestrutural, ambas com quantidades dadas pela solução exata e com parâmetros, como a contiguidade, para o qual não há solução analítica disponível.

O terceiro aspecto é usar o resultado da solução para planos paralelos aleatórios é igual à solução para planos aleatórios, conforme descrito acima. Este resultado é valioso porque nos permite discutir o comportamento da nucleação e crescimento de elipsoides em planos aleatórios, ou seja, contornos de grãos com base na solução analítica e simulação computacional para planos paralelos aleatórios.

Resumindo, neste capítulo, foi simulado transformações nos contornos de grãos

nucleados que crescem como elipsoides. Os resultados foram comparados com uma expressão matemática geral recentemente obtida[58] para a nucleação e crescimento de elipsoides em planos paralelos.

7.1. FUNDO MATEMÁTICO

A seguir, é apresentado um resumo dos trabalhos recentemente publicadas por Villa e Rios [58] sobre o problema da nucleação e crescimento de elipsoides em planos paralelos aleatórios. Nesse resumo, é fornecido apenas os resultados principais conduzindo o leitor por meios matemáticos. Provas matemáticas completas podem ser encontradas em Villa e Rios[58]. Na seção de discussão, é abordado a aplicabilidade desta solução a planos aleatórios.

Rios e Villa obtiveram expressões rigorosamente matemática explícita para volume médio e a densidades da superfície de modelos de grãos dinâmicos com crescimento esférico e elipsoidal cujo processo de nucleação associado ocorre em planos paralelos aleatórios nas refs.[25,58] respectivamente. Tais trabalhos contêm resultados mais gerais, que vão além do objetivo do presente capítulo. Portanto, a noção essencial e resultados que serão apresentados na sequência, referindo-se aos trabalhos acima mencionados para as provas e outros detalhes.

A transformação em consideração prossegue em R^3 ao longo do tempo em duas etapas distintas: na primeira, a nova região aparece, e na segunda, esta nova região aumenta de tamanho. Essas etapas são descritas matematicamente empregando o chamado *processo de nascimento e crescimento (estocástico)*, ou, equivalentemente, *processo de nucleação e crescimento (estocástico)*. Ou seja, um processo de nascimento e crescimento é um modelo dinâmico de grão germinativo usado para modelar situações em que os núcleos (gérmen) nascem no tempo e estão localizados no espaço aleatoriamente. Cada núcleo gera um grão que evolui no tempo de acordo com uma dada lei de crescimento.

Uma vez que, em geral, a nucleação é aleatória no tempo e no espaço, então a região transformada em qualquer momento $t > 0$ será um conjunto aleatório em R^3 [36]. Denotado por T_j a variável aleatória R_+ representando valores aleatórios o *tempo de nascimento* do j -ésimo núcleo, e por X_j o R^3 – variável de valor aleatório que

representa a *localização espacial* do núcleo nascido no tempo T_j . Seja $\Theta^{t_{T_j}}(X_j)$ o grão obtido conforme a evolução até o tempo $t \geq T_j$ do núcleo nascido no tempo T_j em X_j ; então a microestrutura da amostra Θ^t no tempo t é do tipo

$$\theta^t = \bigcup_{T_j \leq t} \theta_{T_j}^t(X_j), \quad t \in R_+ \quad (23)$$

A seguir, será considerado o caso mais simples de nucleação por saturação de sítios; isso ocorre quando todos os núcleos aparecem no início da transformação, $t = 0$, mas nenhum núcleo depois disso (ou seja, $T_j = 0$ para qualquer j).

Caso contrário, a nucleação é referida como uma nucleação dependente do tempo. Um processo de nucleação por saturação de sítios pode ser modelado utilizando um processo de ponto N em R^3 que é uma sequência localmente finita de pontos $\{X_j\}_j$ localizados aleatoriamente no espaço, de acordo com uma determinada lei da probabilidade. Uma medida importante associada a qualquer processo de ponto N é a chamada *medida de intensidade* Λ de N , que é uma medida em R^3 definida como $\Lambda(A) := E[N(A)]$ para todos $A \in B_{R^3}$ representando o número médio de núcleos em A , B_{R^3} o Borel σ -álgebra de R^3 .

Além disso, devemos assumir que todo o crescimento de grãos com formato elipsoidal, com orientação fixa, e que o processo de nucleação ocorre apenas em planos paralelos, com uma direção ortogonal paralela a um dos três semieixos dos grãos. Sendo denotado:

$$E_0 := \left\{ (x_1, x_2, x_3) \in R^3 : \frac{x_1^2}{a_1^2} + \frac{x_2^2}{a_2^2} + \frac{x_3^2}{a_3^2} \leq 1 \right\} \quad (24)$$

então para qualquer $t > 0$

$$\theta^t = \bigcup_{x_j \in N} (\chi_j + G_t E_0) \quad (25)$$

que é uma união aleatória de elipsoides centrados no ponto X_j do processo de nucleação N , e com semieixos comprimentos fornecidos por, $G_t a_1$, $G_t a_2$, e $G_t a_3$. Observe que o caso esférico segue um caso particular tomando $a_1 = a_2 = a_3 = 1$.

Para modelar a nucleação em planos paralelos aleatórios em $R^2 \times [0, K]$, precisamos apresentar: o processo de nucleação N_u em um plano fixo $B(u) := \{x \in R^3: x_3 = u\}$ para qualquer valor $u \geq 0$, e o processo de ponto $\mathcal{E} = \{D_j\}_j$ no semieixo positivo x_3 , representando as distâncias aleatórias da origem dos planos $B_1 = B(D_1)$, $B_2 = B(D_2)$, ... , respectivamente. Então a região transformada em função do tempo t , digamos Θ^t_K , será dado pela união das regiões transformadas, Θ^{t,D_i} no tempo t devido à nucleação nos planos $B(D_i)$ com distâncias aleatórias $D_i \in [0, K]$ da origem, onde para qualquer realização $D_i = u_i$ a região transformada correspondente, Θ^{t,u_i} é definido como em (23) substituindo N por N_{u_i} .

Para qualquer $u > 0$ fixo assumimos que N_u é um processo de ponto de Poisson em $B(u)$ com medida de intensidade:

$$\Lambda_u(dx) = f(x)\delta_{B(u)}(x) dx \quad (26)$$

onde $\delta_{B(u)}$ é a função usual de Dirac-delta em $B(u)$, que força a nucleação no plano $B(u)$. Além disso, foi assumido que mesmo $\mathcal{E} = \{D_j\}_j$ é um processo de Poisson em R_+ , com medida de intensidade $\Lambda_{\mathcal{E}}(d_u) = h_{(u)(0,\infty)}(u) du$.

Lembrando que a densidade de volume média $V_V(t, x)$ no ponto $x \in R^3$ de Θ^t_K no tempo t é definido como a quantidade de tal modo que:

$$\int_A V_V(t, x) dx = \mathbb{E}[\nu^3(\Theta^t \cap A)] \quad \forall A \in \mathcal{B}_{R^3} \quad (27)$$

onde \mathbb{E} denota o valor esperado, ν^3 a medida do volume, e \mathcal{B}_{R^3} a Borel σ -álgebra de R^3 .

Está provado na ref.[58] que se a função f está variando ao longo de uma direção preferencial, ou seja, do tipo

$$f(x) = \sum_{i=1}^3 p_i x_i + q \quad (28)$$

com, $p \in R^3$ e $q \in R$ tais que $f(x) \geq 0$ para qualquer x na janela de observação considerada,

então

$$V_V(t, x) = 1 - \exp \left\{ - \int_0^K V_V^u(t, x) h(u) du \right\} \quad (29)$$

Com

$$V_V^u(t, x) = (1 - \exp \left\{ -f((x_1, x_2, u)) \pi a_1 a_2 \left(G^2 t^2 - \frac{(u - x_3)^2}{a_3^2} \right) \right\})_{[x_3 - Gta_3, x_3 + Gta_3]}(u) \quad (30)$$

As Equações 29 e 30 são provadas na ref. [58]. Em primeiro instante no modelo analítico produzindo a densidade de volume média, $V_V(t, x)$, em vez da fração volumétrica ser derivada. Contudo, não será explorado esse resultado totalmente aqui. Apenas casos particulares em que se tem a fração volumétrica transformada foram simulados aqui.

Seja $K = 1$, ou seja, nossa amostra está em $\mathbb{R}^2 \times [0, 1]$. Foi distinguido os seguintes casos de saturação de sítios.

Mesma nucleação homogênea em cada plano; distribuição não homogênea dos planos

Suponha que o número médio de núcleos por unidade de área em cada plano é $c > 0$ que é $f(x) \equiv c$ em (6) e que $h(u) = b_1 u + b_0$, com b_0 e b_1 positivo; então

$$V_V(t, x) = 1 - \exp \left\{ - \int_{\max\{0, x_3 - Gta_3\}}^{\min\{1, x_3 + Gta_3\}} V_V^u(t, x) (b_1 u + b_0) du \right\} \quad (31)$$

Com

$$V_V^u(t, x) = 1 - e^{-c\pi a_1 a_2 (G^2 t^2 - (u - x_3)^2 / a_3^2)} \quad (32)$$

Nucleação homogênea diferente em cada plano; distribuição homogênea dos planos

Suponha que a função esteja variando apenas ao longo do Semieixo- x_3 que é

$$f(x) = px_3 + q, \quad p, q > 0 \quad (33)$$

Isso implica a nucleação homogênea em cada plano, aumentando à medida que a distância do plano da origem aumenta. Suponha também que o processo de Poisson Ξ tem a constante de intensidade $h(u) \equiv M$; isso significa que existem M planos em $\mathbb{R}^2 \times [0,1]$, e isso, dado que o número de planos em $\mathbb{R}^2 \times [0,1]$ é m . Eles são uniformemente distribuídos.

Nesse caso, é válido:

$$V_V(t, x) = 1 - \exp \left\{ -M \int_{\max\{0, x_3 - Gta_3\}}^{\min\{1, x_3 + Gta_3\}} V_V^u(t, x) du \right\} \quad (34)$$

Com

$$V_V^u(t, x) = 1 - e^{-(pu+q)\pi a_1 a_2 (G^2 t^2 - (u-x_3)^2/a_3^2)} \quad (35)$$

Mesma nucleação homogênea em cada plano; distribuição homogênea dos planos

Procedendo da mesma forma que acima, seja $f(x) \equiv c$ e $h(u) \equiv M$; então

$$V_V(t, x) = 1 - \exp \left\{ -M \int_{\max\{0, x_3 - Gta_3\}}^{\min\{1, x_3 + Gta_3\}} \left(1 - e^{-c\pi a_1 a_2 (G^2 t^2 - (u-x_3)^2/a_3^2)} \right) du \right\} \quad (36)$$

No caso esférico $a_1 = a_2 = a_3 = 1$ obtemos novamente como um caso particular, as expressões dadas na ref.[6].

Além disso, foi observado que para qualquer $x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^2 \times [0,1]$, de modo que $0 \leq 1 - Gta_3 \leq x_3 \leq Gta_3 \leq 1$, todos as integrais acima são tomadas entre 0 e 1.

Fórmulas para esferoides oblatos e prolatos nucleados por saturação de sítios em planos paralelos aleatórios

Prolato:

$$V_V(t) = 1 - \exp \left(- 2 S_V^{\text{planos}} a_1 G t \int_0^1 \{ 1 - e^{-\pi \lambda_s a_1 a_3 G^2 t^2 [1-z^2]} \} dz \right) \quad (37)$$

Oblato:

$$V_V(t) = 1 - \exp \left(- 2 S_V^{\text{planos}} a_3 G t \int_0^1 \{ 1 - e^{-\pi \lambda_s a_1^2 G^2 t^2 [1-z^2]} \} dz \right) \quad (38)$$

Esfera:

$$V_V(t) = 1 - \exp \left(- 2 S_V^{\text{planos}} G t \int_0^1 \{ 1 - e^{-\pi \lambda_s G^2 t^2 [1-z^2]} \} dz \right) \quad (39)$$

S_V^{planos} é a densidade média da área por unidade de volume dos planos e λ_s é o número de núcleos por unidade de área de um plano.

7.2. METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Para o processo de nucleação e crescimento, foi realizado a simulação computacional usando o método do Cone Causal[6,39]. A matriz foi compreendida com 500x500x500 células cúbicas. As simulações foram realizadas com o suporte do Centro de Computação de Ciência de Materiais, do Instituto de Pesquisa de Materiais, Universidade de Tohoku para o uso do supercomputador MASAMUNE-IMR através do Global Institute for Materials Programa de pesquisa Tohoku (GIMRT).

Cada dimensão da matriz foi considerada como tendo um comprimento adimensional igual a 1 para que o domínio simulado seja efetivamente por unidade cúbica: $[0,1]^3$. Elipsoides prolatos com razões de aspecto de 1:1:8, 1:1:4, e 1:1:2 e

elipsoides oblatos com razões de aspecto de 8:8:1, 4:4:1 e 2:2:1 foram simulados. Simulações empregando o crescimento esférico também foram realizados para comparação. Todas as simulações foram realizadas com nucleação por saturação de sítios.

O número de núcleos e o número de planos foram localizados dentro da matriz de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Havia um total de 200 núcleos dentro da matriz de simulação para a situação de 10 núcleos e 20 planos, 400 núcleos dentro da matriz de simulação para os 20 núcleos e 20 planos e 1600 núcleos dentro da matriz de simulação para a situação de 80 núcleos e 20 planos. Condições de contorno periódico foram adotadas. Todas as velocidades de crescimento foram mantidas constantes durante toda a transformação. Cada quantidade relatada aqui é o valor médio de 100 simulações. Ou seja, repetimos cada simulação 100 vezes. O número de repetições foi escolhido para resultados confiáveis.

7.3. RESULTADOS

7.3.1. Evolução microestrutural em 3D

A Figura 40 apresenta a evolução microestrutural dos elipsoides oblatos com 20 planos paralelos aleatórios e 20 núcleos em cada plano. A proporção do comprimento dos eixos mais longos para o comprimento do eixo mais curto é 4:4:1. A fração transformada é apresentada com: a) $V_v = 0.1$; b) $V_v = 0.5$; c) $V_v = 1$.

A Figura 41 apresenta a evolução microestrutural dos elipsoides prolatos com 20 planos paralelos aleatórios e 20 núcleos em cada plano. A proporção do comprimento dos eixos mais longos para o comprimento do eixo mais curto é 4:1:1. A fração transformada é apresentada com: a) $V_v = 0.1$; b) $V_v = 0.5$; c) $V_v = 1$.

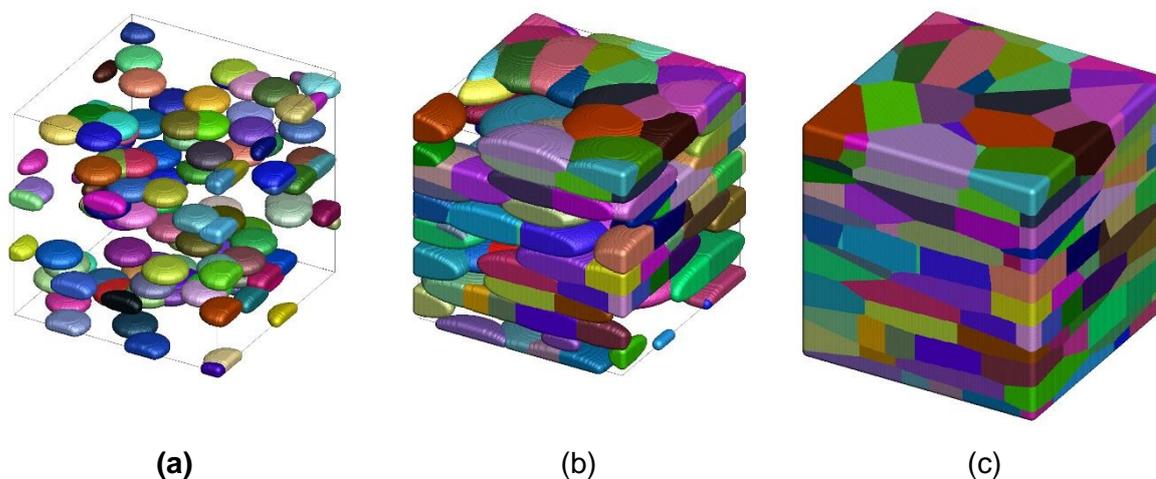


Figura 40 - Microestrutura de elipsoides oblato nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 20 núcleos aleatórios em cada plano. A relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o comprimento mais curto eixo do elipsoide é 4:1:1. A microestrutura corresponde a uma fração transformada de: a) $V_v = 0.1$; b) $V_v = 0.5$; c) $V_v = 1$ [59].

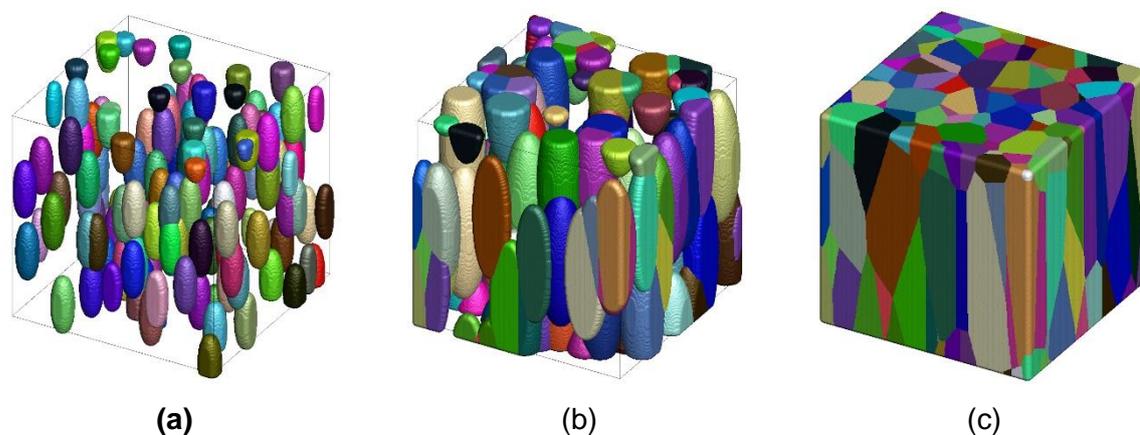


Figura 41 - Microestrutura de elipsoides prolato nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 20 núcleos aleatórios em cada plano. A relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o comprimento mais curto eixo do elipsoide é 4:1:1. A microestrutura corresponde a uma fração transformada de: a) $V_v = 0.1$; b) $V_v = 0.5$; c) $V_v = 1$ [59].

7.3.1.1. Microestutura em 3D com 10 núcleos e 20 planos.

A Figura 42 apresenta a microestrutura totalmente transformada dos elipsoides oblato e prolato com 20 planos paralelos aleatórios e 10 núcleos em cada plano.

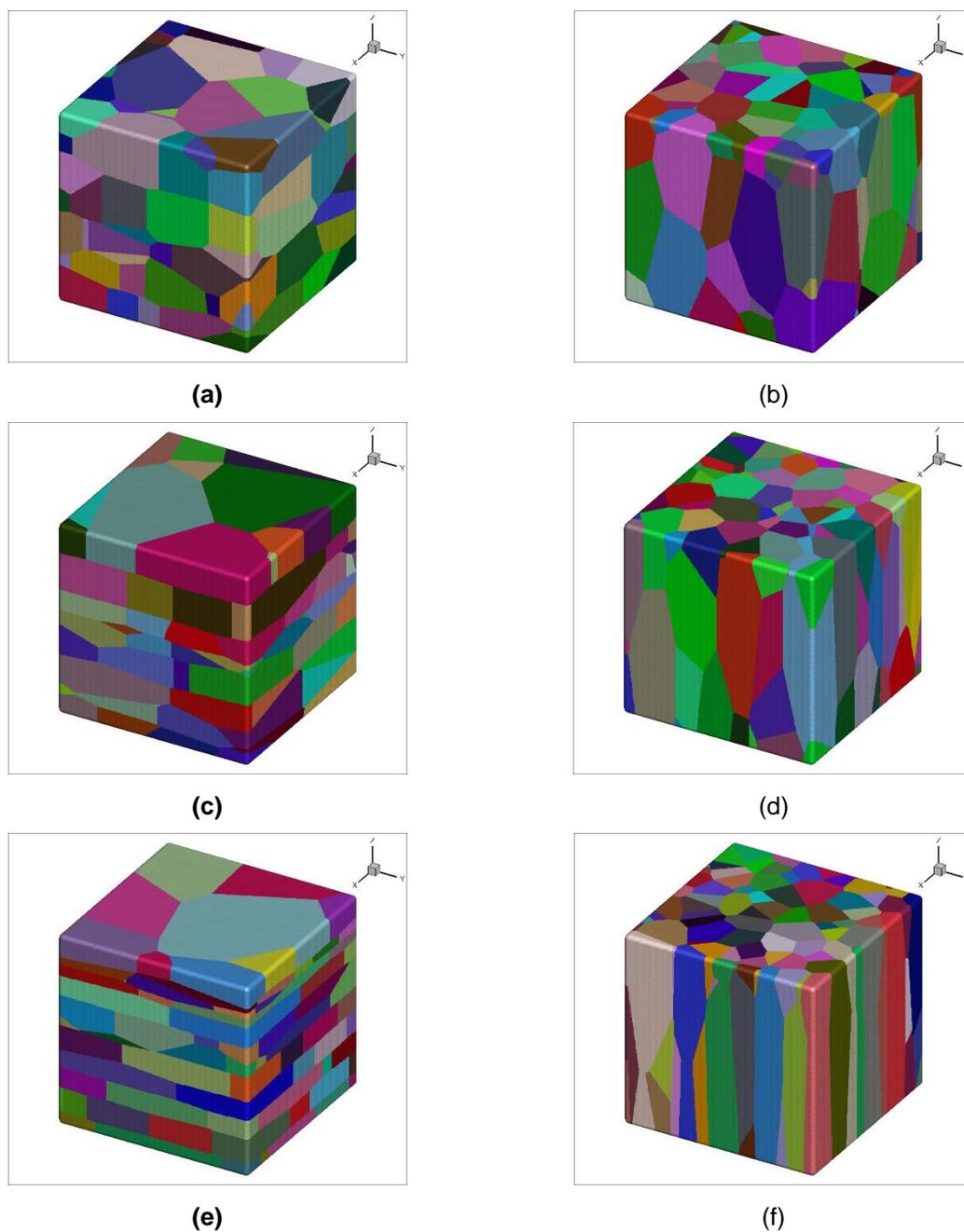


Figura 42 - Microestrutura de elipsoides oblatos e prolatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 10 núcleos aleatórios em cada plano. A microestrutura corresponde a matriz totalmente transformada: (a) 2:2:1, (b) 2:1:1, (c) 4:4:1, (d) 4:1:1, (e) 8:8:1 e (f) 8:1:1.

A Figura 43 apresenta a microestrutura totalmente transformada para o caso com crescimento esférico, ou seja, com razão de aspecto 1:1:1, com 20 planos paralelos aleatórios e 10 núcleos em cada plano.

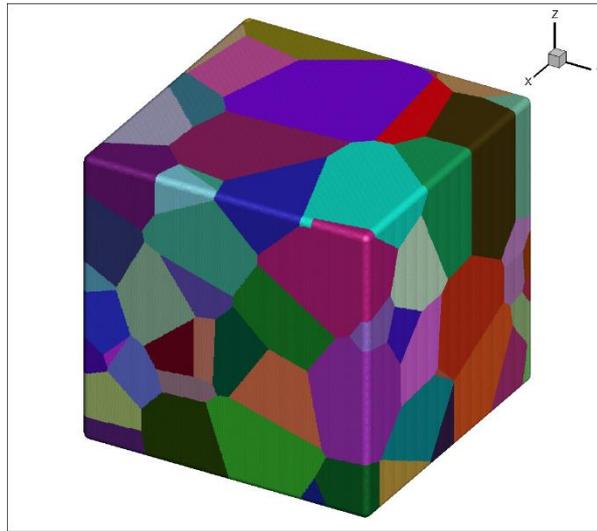


Figura 43 - Microestrutura com crescimento esférico nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 10 núcleos aleatórios em cada plano. A microestrutura corresponde a matriz totalmente transformada.

7.3.1.2. Microestutura em 3D com 20 núcleos e 20 planos.

A Figura 44 apresenta a microestrutura totalmente transformada para o caso com crescimento esférico, ou seja, com razão de aspecto 1:1:1, com 20 planos paralelos aleatórios e 20 núcleos em cada plano.

A Figura 45 apresenta a microestrutura totalmente transformada dos elipsoides oblatos e prolatos com 20 planos paralelos aleatórios e 20 núcleos em cada plano.

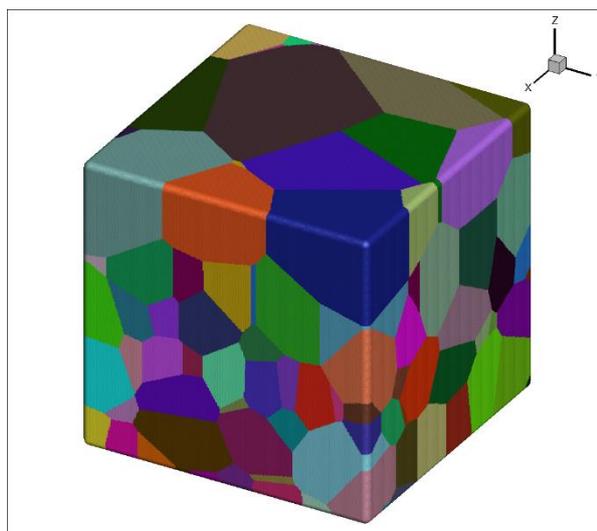


Figura 44 - Microestrutura com crescimento esférico nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 20 núcleos aleatórios em cada plano. A microestrutura corresponde a matriz totalmente transformada.

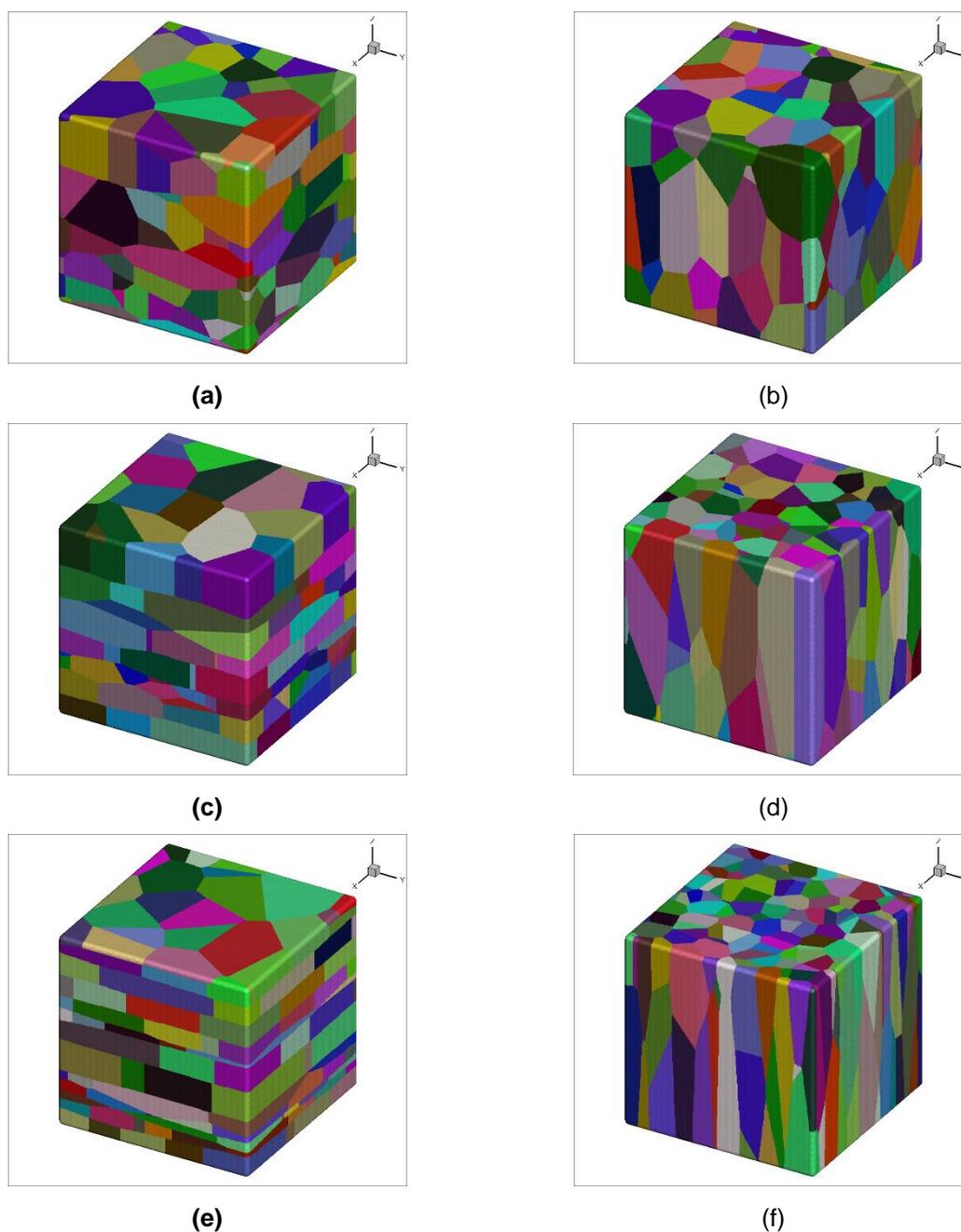


Figura 45 - Microestrutura de elipsoides oblatos e prolatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 20 núcleos aleatórios em cada plano. A microestrutura corresponde a matriz totalmente transformada: (a) 2:2:1, (b) 2:1:1, (c) 4:4:1, (d) 4:1:1, (e) 8:8:1 e (f) 8:1:1.

7.3.1.3. Microestrutura em 3D com 80 núcleos e 20 planos.

A Figura 46 apresenta a microestrutura totalmente transformada dos elipsoides oblatos e prolatos com 20 planos paralelos aleatórios e 20 núcleos em cada plano.

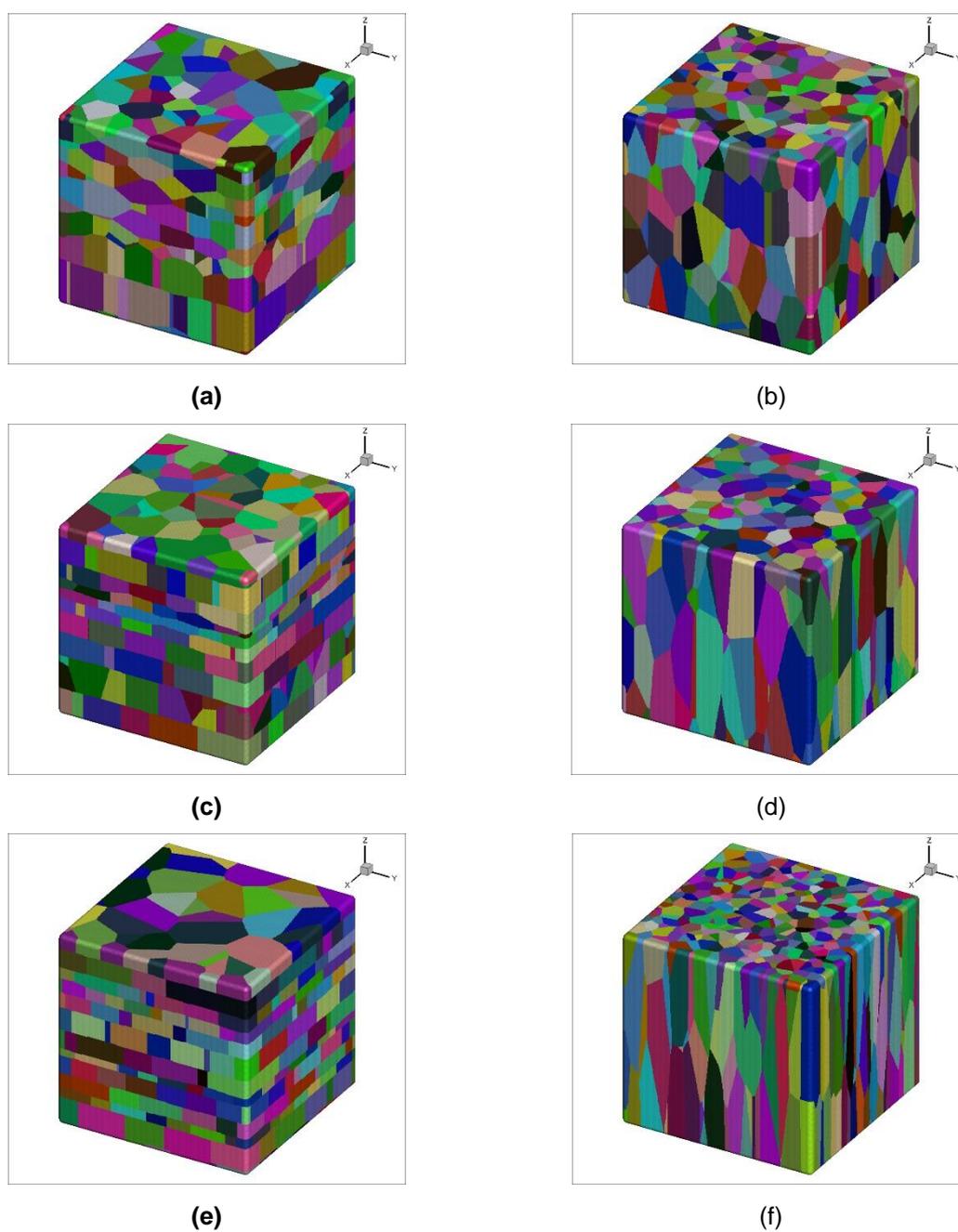


Figura 46 - Microestrutura de elipsoides oblatos e prolatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 80 núcleos aleatórios em cada plano. A microestrutura corresponde a matriz totalmente transformada: (a) 2:2:1, (b) 2:1:1, (c) 4:4:1, (d) 4:1:1, (e) 8:8:1 e (f) 8:1:1.

A Figura 47 apresenta a microestrutura totalmente transformada dos elipsoides oblatos e prolatos com 20 planos paralelos aleatórios e 80 núcleos em cada plano.

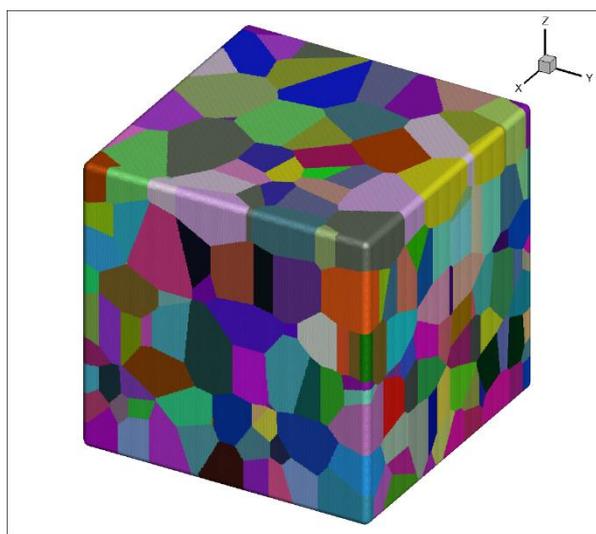


Figura 47 - Microestrutura com crescimento esférico nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 80 núcleos aleatórios em cada plano. A microestrutura corresponde a matriz totalmente transformada.

7.3.2. Evolução microestrutural em 2D

A Figura 48 apresenta uma seção longitudinal da simulação mostrando uma microestrutura totalmente transformada de elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios. A proporção do comprimento dos eixos mais longos ao comprimento do eixo mais curto do elipsoide é 4:4:1. As microestruturas mostram o efeito do número de núcleos por plano: a) 20 núcleos por plano; b) 80 núcleos por plano.

A Figura 49 representa uma seção longitudinal da simulação mostrando uma microestrutura totalmente transformada de elipsoides prolatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios. A proporção do comprimento dos eixos mais longos ao comprimento do eixo mais curto do elipsoide é 4:1:1. As microestruturas mostram o efeito do número de núcleos por plano: a) 20 núcleos por plano; b) 80 núcleos por plano.

A inspeção visual mostra que as microestruturas totalmente transformadas geradas pelos elipsoides oblatos têm uma proporção significativa de sua área interfacial paralela ao plano $X_3 = 0$. Comparado com a microestrutura gerada por elipsoides nucleados no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo no trabalho anterior[40].

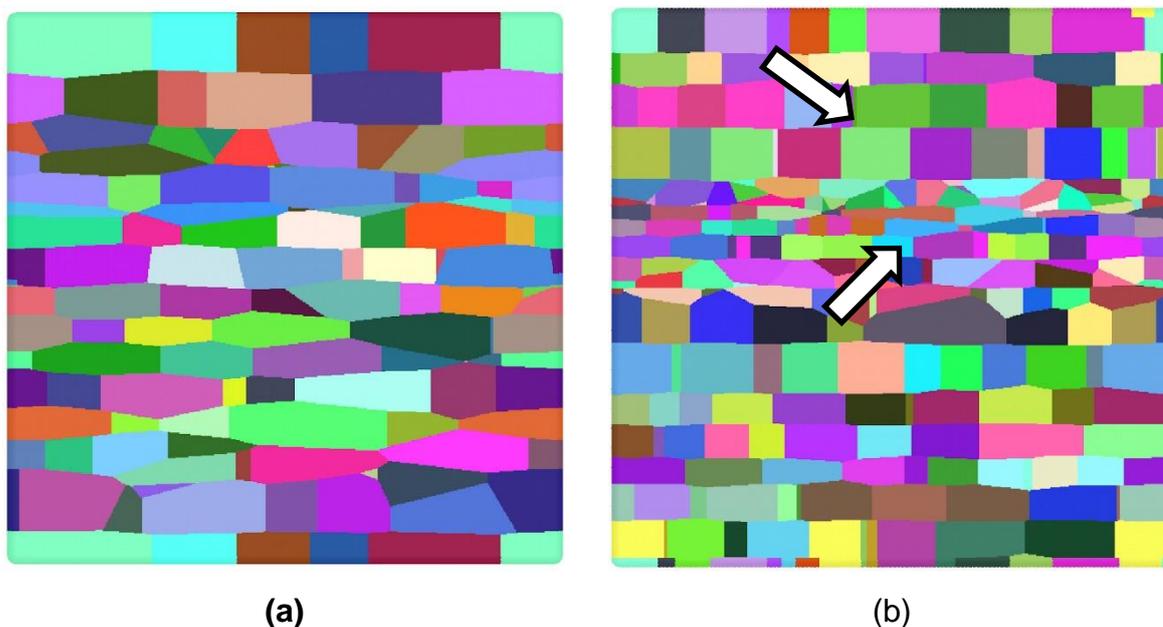


Figura 48 - Seção longitudinal mostrando a microestrutura totalmente transformada de elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios. A proporção do comprimento dos eixos mais longos em relação ao eixo mais curto do elipsoide é 4: 4: 1. As Figuras representam microestruturas que mostram o efeito para o número de núcleos por plano: a) 20 núcleos em cada plano; b) 80 núcleos em cada plano[59].

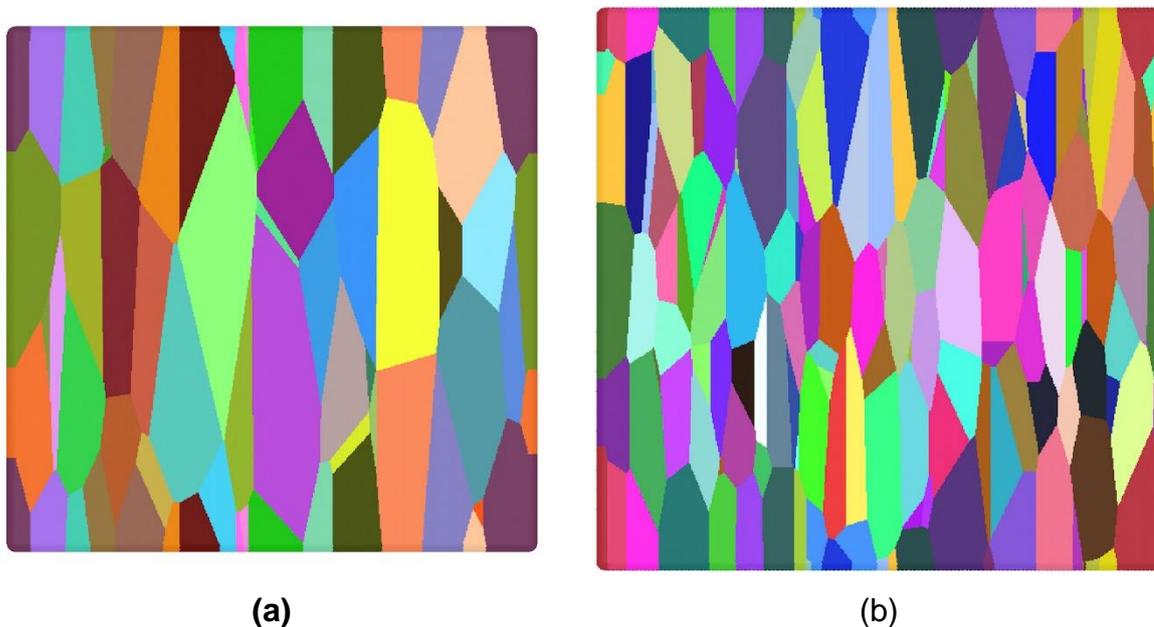


Figura 49 - Seção longitudinal mostrando a microestrutura totalmente transformada de elipsoides prolatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios. A proporção do comprimento dos eixos mais longos em relação ao eixo mais curto do elipsoide é 4: 1: 1. As Figuras representam microestruturas que mostram o efeito para o número de núcleos por plano: a) 20 núcleos em cada plano; b) 80 núcleos em cada plano[59].

Vale a pena comentar sobre o recurso microestrutural, veja a seta, na Figura 48b que resulta da proximidade dos planos paralelos. Um processo de ponto de Poisson homogêneo é um processo estocasticamente independente. Isso significa que a posição de um ponto é independente do outro. Isso pode resultar em dois pontos ou, neste caso, dois planos paralelos sendo perto um do outro. Para introduzir artificialmente um mínimo de distância violaria a independência estocástica do Processo de ponto de Poisson, e as equações analíticas não seriam mais válidas. No entanto, isso é semelhante a situação estudada por Ventura et al.[60,61]. Os autores estudaram o efeito de uma zona de exclusão em torno de cada núcleo usando processos de pontos de Poisson não convenientes.

7.3.2.1. Microestrutura em 2D com 10 núcleos e 20 planos.

A Figura 50 apresenta uma seção longitudinal da simulação mostrando uma microestrutura totalmente transformada de elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios e 10 núcleos por plano. A proporção do comprimento dos eixos mais longos ao comprimento do eixo mais curto do elipsoide é: (a) 2:2:1, (b) 2:1:1, (c) 4:4:1, (d) 4:1:1, (e) 8:8:1 e (f) 8:1:1.

É possível observar nas Figuras 50c e 50e com o auxílio das setas a proximidade dos planos paralelos nas microestruturas bem evidentes devido ao processo de ponto de Poisson homogêneo empregado na nucleação desta simulação computacional.

Houve um aumento da anisotropia dos grãos elipsoidais tanto prolatos quanto oblatos com o aumento da razão de aspecto.

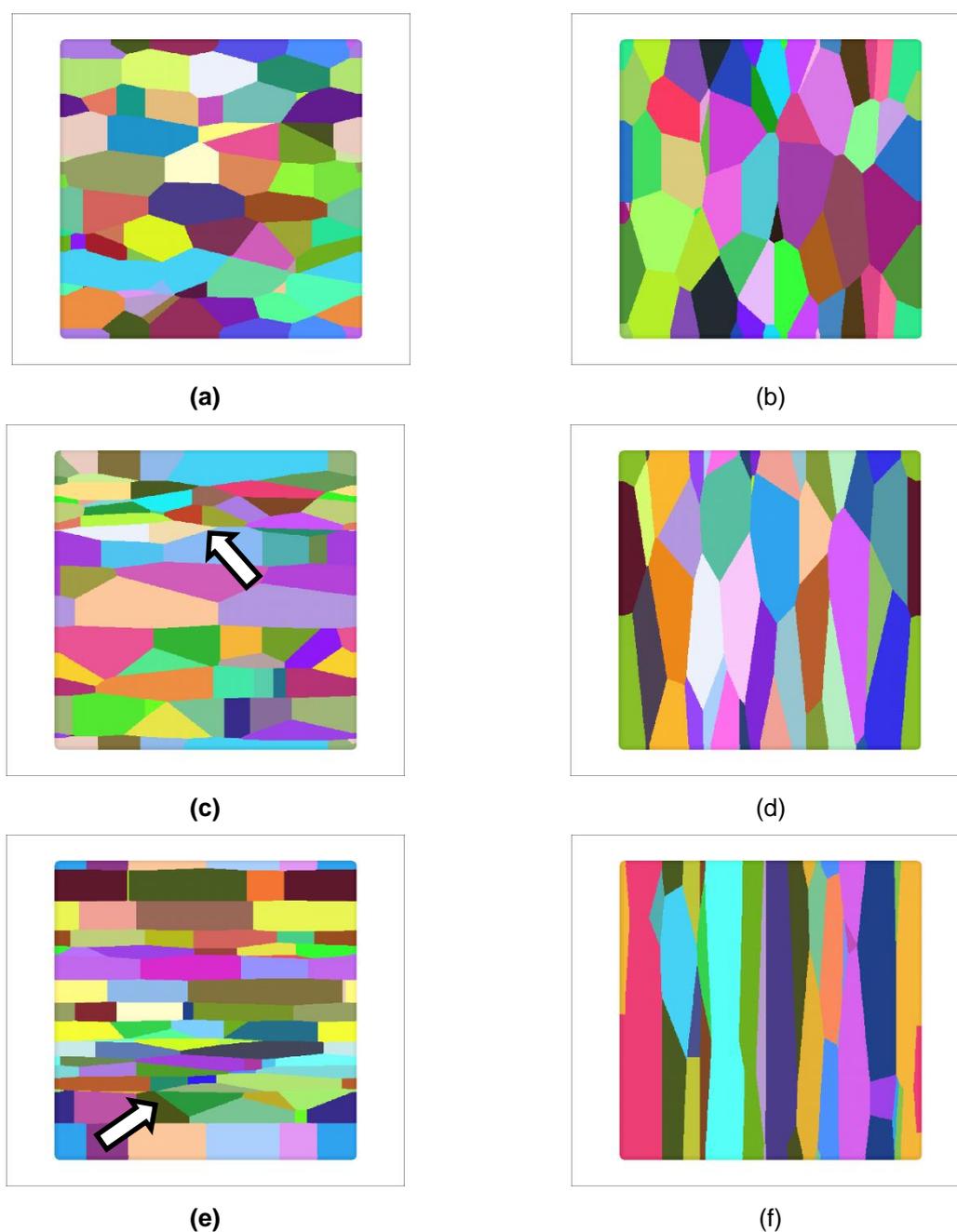


Figura 50 - Seção longitudinal mostrando a microestrutura totalmente transformada de elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios e 10 núcleos. A proporção do comprimento dos eixos mais longos em relação ao eixo mais curto do elipsoide é: (a) 2:2:1, (b) 2:1:1, (c) 4:4:1, (d) 4:1:1, (e) 8:8:1 e (f) 8:1:1.

7.3.2.2. Microestrutura em 2D com 20 núcleos e 20 planos.

A Figura 51 apresenta uma seção longitudinal da simulação mostrando uma microestrutura totalmente transformada de elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios e 20 núcleos por plano. A proporção do comprimento dos eixos

mais longos ao comprimento do eixo mais curto do elipsoide é: (a) 2:2:1, (b) 2:1:1, (c) 8:8:1, (d) 8:1:1.

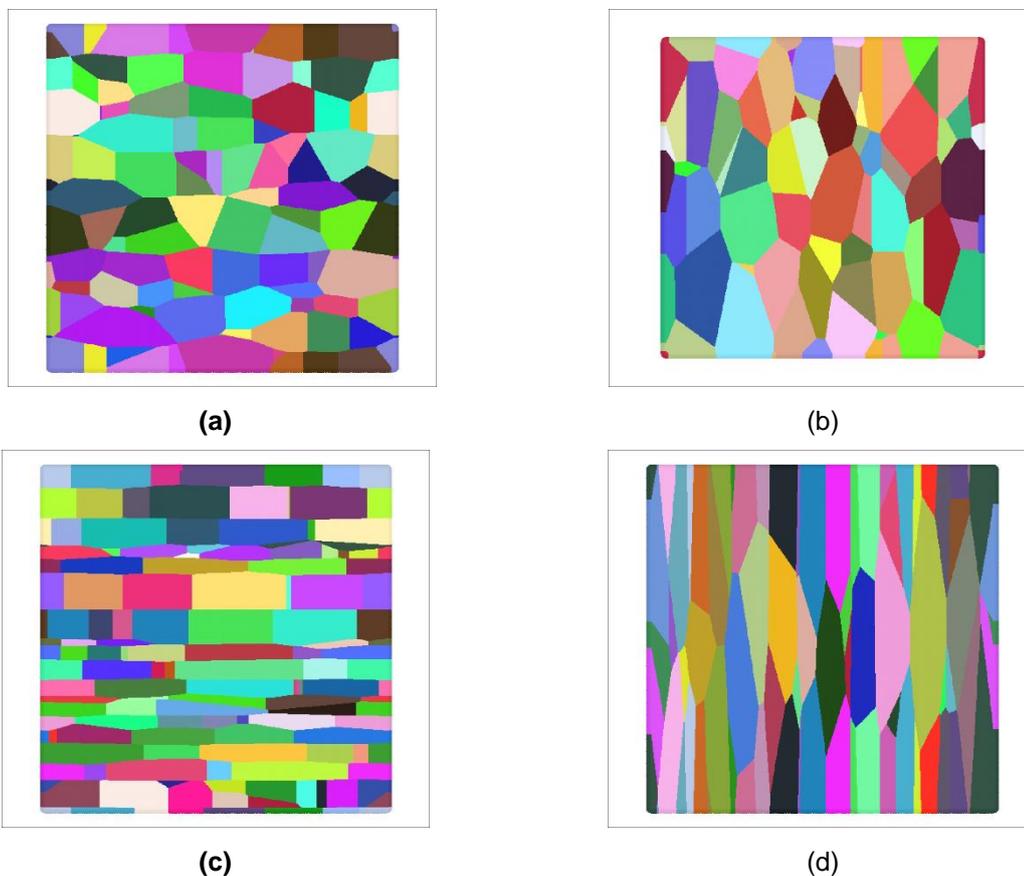


Figura 51 - Seção longitudinal mostrando a microestrutura totalmente transformada de elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios e 20 núcleos. A proporção do comprimento dos eixos mais longos em relação ao eixo mais curto do elipsoide é: (a) 2:2:1, (b) 2:1:1, (c) 8:8:1, (d) 8:1:1.

7.3.2.3. Microestutura em 2D com 80 núcleos e 20 planos.

A Figura 52 apresenta uma seção longitudinal da simulação mostrando uma microestrutura totalmente transformada de elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios e 80 núcleos por plano. A proporção do comprimento dos eixos mais longos ao comprimento do eixo mais curto do elipsoide é: (a) 2:2:1, (b) 2:1:1, (c) 8:8:1, (d) 8:1:1.

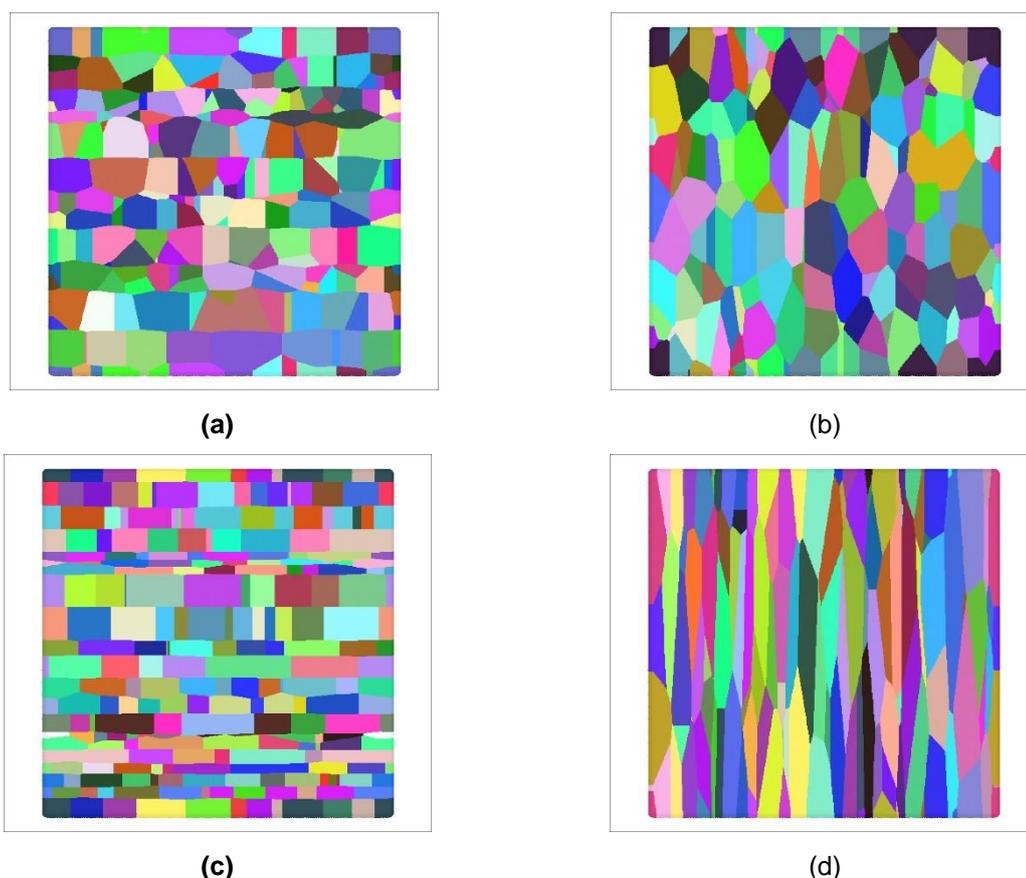


Figura 52 - Seção longitudinal mostrando a microestrutura totalmente transformada de elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios e 80 núcleos. A proporção do comprimento dos eixos mais longos em relação ao eixo mais curto do elipsoide é: (a) 2:2:1, (b) 2:1:1, (c) 8:8:1, (d) 8:1:1.

7.3.3. Fração volumétrica transformada em função do tempo

A Figura 53 representa a cinética de transformação dos elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios. A proporção do comprimento dos eixos mais longos ao comprimento do eixo mais curto do elipsoide é 4:4:1. As curvas representadas na Figura 53 mostram o efeito do número de núcleos por plano na transformação: 53a) 10 núcleos por plano; 53b) 80 núcleos por plano.

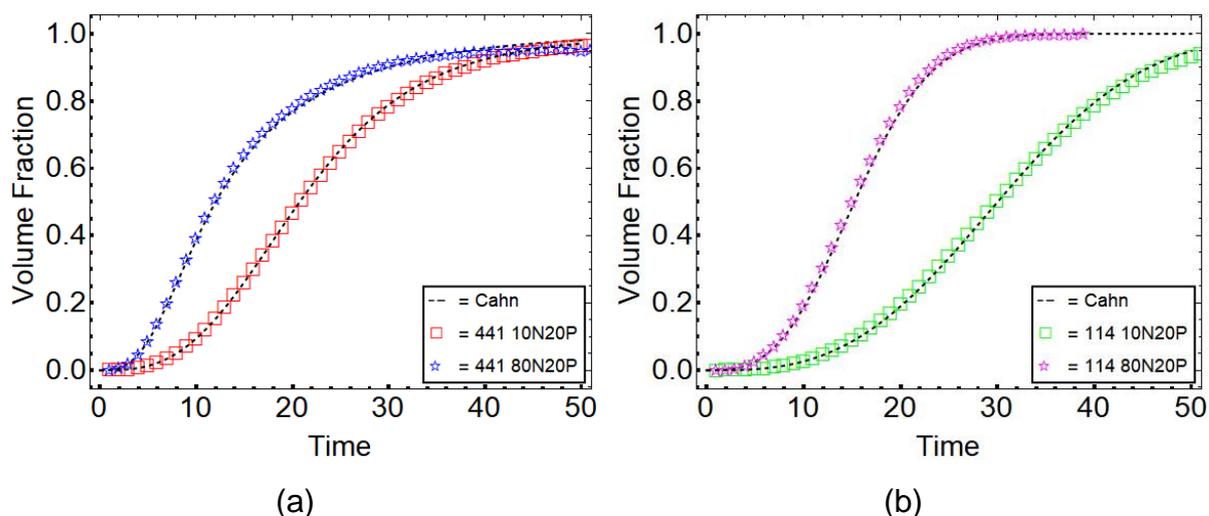


Figura 53 - Cinética de transformação de elipsoides oblato nucleados em 20 planos paralelos aleatórios. Cada Figura mostra o efeito do número de núcleos por plano na transformação cinética: 10 núcleos e 80 núcleos em cada plano. A Figura 53a representa o resultado do número de núcleos por plano na transformação cinética de elipsoides achatados. A relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o comprimento do eixo mais curto do elipsoide oblato é 4:4:1. A Figura 53b mostra o resultado do número de núcleos por plano na cinética de transformação de elipsoides prolato. A proporção do comprimento dos eixos mais curtos do elipsoide prolato para o eixo mais longo é 1:1:4.[59]

A Figura 54 representa a cinética de transformação dos elipsoides oblato nucleados em 20 planos paralelos aleatórios e 10 núcleos por plano. As curvas mostram o efeito da proporção do comprimento dos eixos mais longos para o comprimento do eixo mais curto do elipsoide.

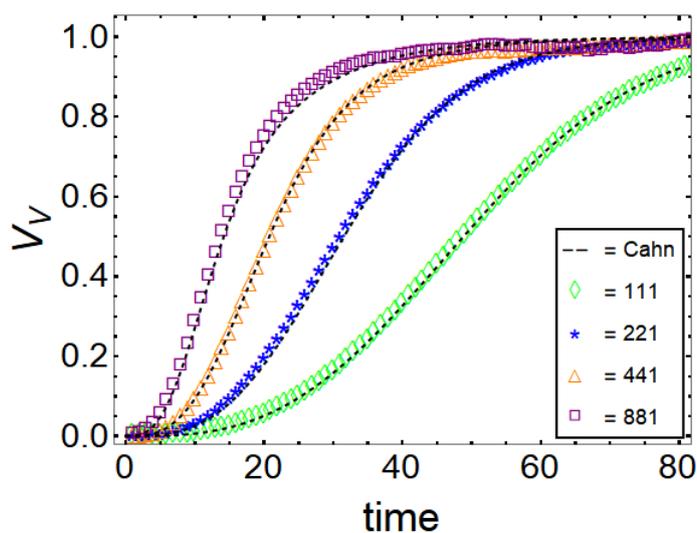


Figura 54 - Efeito da razão de aspecto e do número de núcleos por plano na cinética de transformação de elipsoides oblato. Em cada Figura, as curvas mostram o efeito da relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o eixo mais curto dos elipsoides com 10 núcleos por plano.

A Figura 55 representa a cinética de transformação dos elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios e 20 núcleos por plano. As curvas mostram o efeito da proporção do comprimento dos eixos mais longos para o comprimento do eixo mais curto do elipsoide.

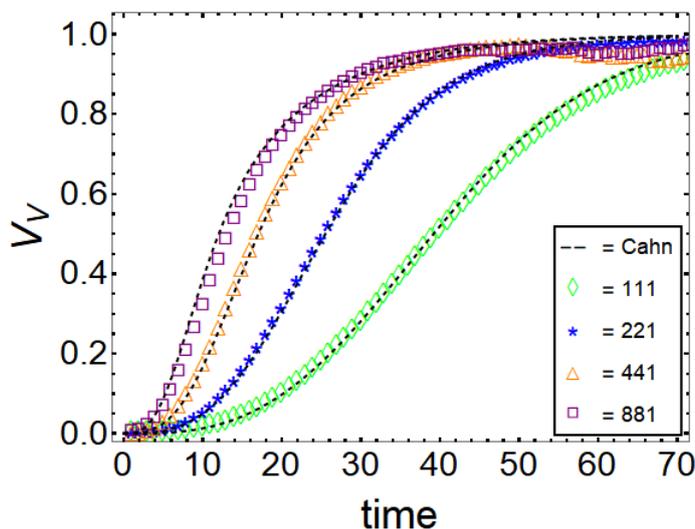


Figura 55 - Efeito da razão de aspecto e do número de núcleos por plano na cinética de transformação de elipsoides oblatos. Em cada Figura, as curvas mostram o efeito da relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o eixo mais curto dos elipsoides com 20 núcleos por plano.

A Figura 56 representa a cinética de transformação dos elipsoides oblatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios e 80 núcleos por plano. As curvas mostram o efeito da proporção do comprimento dos eixos mais longos para o comprimento do eixo mais curto do elipsoide.

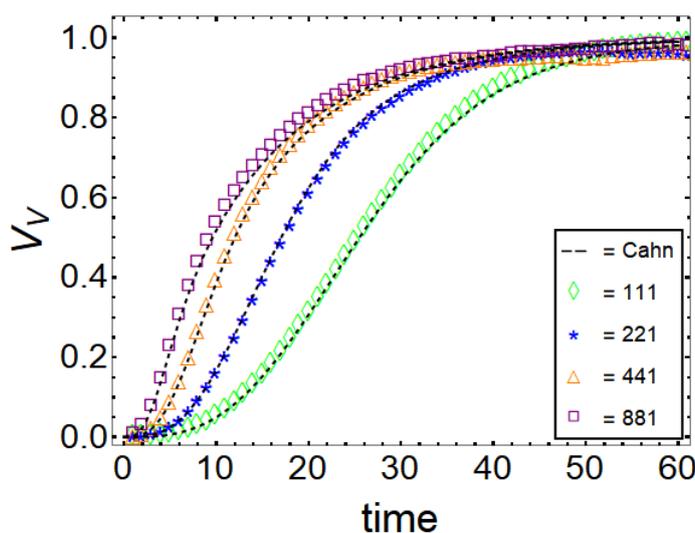


Figura 56 - Efeito da razão de aspecto e do número de núcleos por plano na cinética de transformação de elipsoides oblatos. Em cada Figura, as curvas mostram o efeito da relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o eixo mais curto dos elipsoides com 80 núcleos por plano.

A Figura 57 representa a cinética de transformação dos elipsoides prolatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios e 10 núcleos por plano. As curvas mostram o efeito da proporção do comprimento dos eixos mais longos para o comprimento do eixo mais curto do elipsoide. A Figura 58 e 59 apresentam a cinética de transformação dos elipsoides prolatos nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 20 núcleos por plano e núcleos por plano respectivamente.

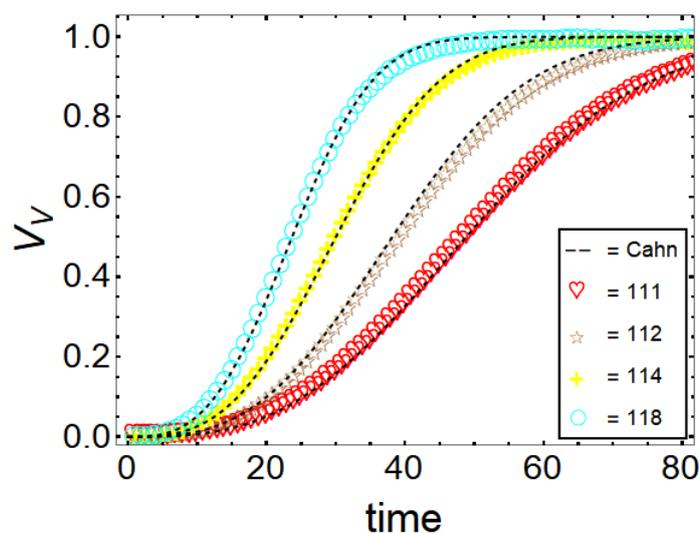


Figura 57 - Efeito da razão de aspecto e do número de núcleos por plano na cinética de transformação de elipsoides prolatos. Em cada Figura, as curvas mostram o efeito da relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o eixo mais curto dos elipsoides com 10 núcleos por plano.

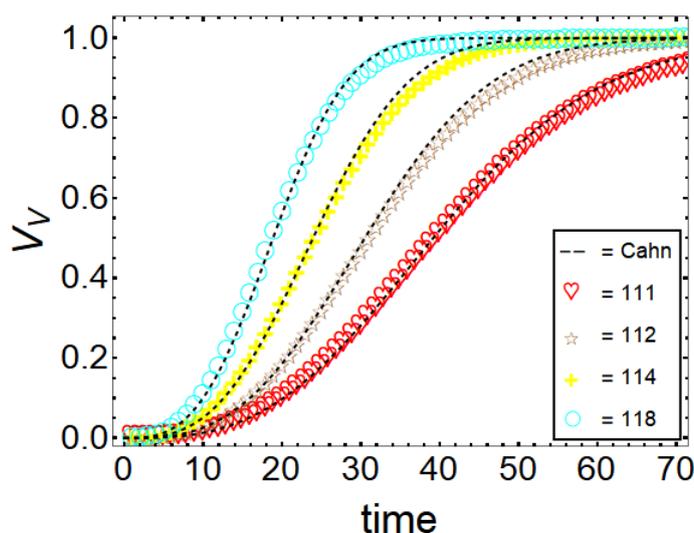


Figura 58 - Efeito da razão de aspecto e do número de núcleos por plano na cinética de transformação de elipsoides prolatos. Em cada Figura, as curvas mostram o efeito da relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o eixo mais curto dos elipsoides com 20 núcleos por plano.

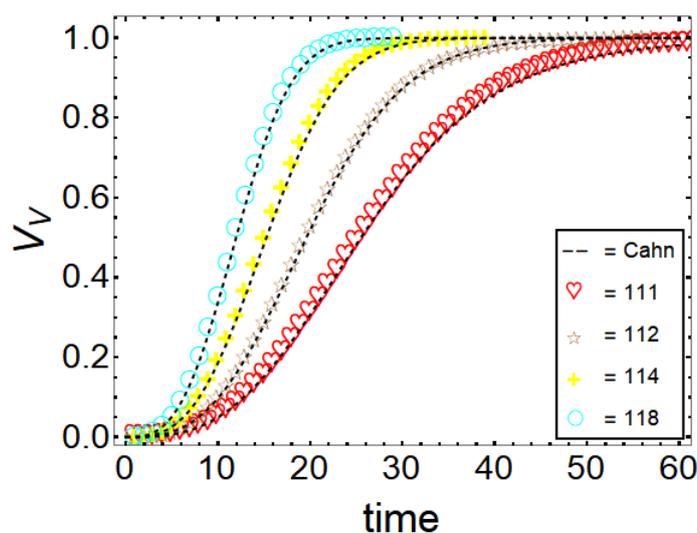


Figura 59 - Efeito da razão de aspecto e do número de núcleos por plano na cinética de transformação de elipsoides prolato. Em cada Figura, as curvas mostram o efeito da relação entre o comprimento dos eixos mais longos e o eixo mais curto dos elipsoides com 80 núcleos por plano.

As Figuras 53-59 mostram excelente concordância entre o modelo de Cahn modificado para elipsoides, a equação 37 e 38, com a simulação computacional. Este acordo é esperado se a simulação estiver correta, pois as Equações 37 e 38 são exatas. Na seção discussão, foi considerado os fatores que são essenciais neste tipo de simulação para garantir que a simulação dê um resultado preciso.

Como mencionado acima, as Figuras 53-59 ilustram principalmente o efeito de dois fatores: 1 - a forma do elipsoide, achatado contra prolato; 2 - o efeito do número de núcleos Figuras 53-59. A Figura 53 demonstra que o efeito de uma diminuição no número de núcleos por plano de 80 a 10 núcleos por plano tem um efeito mais substancial na cinética de transformação do que a forma do elipsoide, oblato, Figura 53a, ou prolato, Figura 53b. A Figuras 54, 55 e 56 mostram o efeito de um aumento no número de núcleos por plano de 10, 20 e 80 núcleos por plano, respectivamente para grãos com formato elipsoidal oblato. A transformação da cinética é significativamente mais rápida quando se tem mais núcleos por plano. Esses efeitos são esperados intuitivamente. A Figuras 57, 58 e 59 mostram o efeito de um aumento no número de núcleos por plano de 10, 20 e 80 núcleos por plano, respectivamente para grãos com formato elipsoidal prolato. As curvas para o caso do prolato obtiveram características análogas com o caso do oblato. O efeito mais interessante do número de núcleos é o seu efeito sobre a contiguidade mostrada na próxima seção.

7.3.4. Contiguidade

A contiguidade é um parâmetro metalográfico útil. No entanto, a contiguidade não é empregada com muita frequência, talvez porque requer a medição de ambos os dispositivos interfaces móveis e interfaces imóveis. Vandermeer dá uma perspicaz visão da contiguidade apoiada por resultados experimentais [43]. Pode-se constatar que a contiguidade foi usada em vários trabalhos de simulação computacional, alguns dos quais estão listados aqui.[23,35,40,44,60–64].

A Figura 60 representa a contiguidade de elipsoides oblato e prolato nucleados em 20 planos paralelos aleatórios. As curvas mostram o efeito da forma do elipsoide e o número de núcleos por plano na contiguidade.

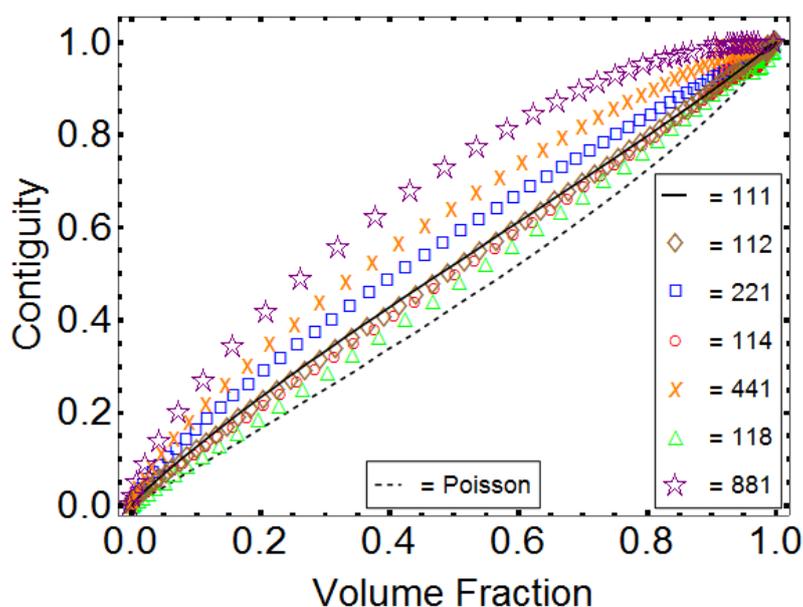


Figura 60 - Contiguidade de elipsoides oblatos e prolatos em função da fração volumétrica transformada. A linha tracejada é a linha teórica para a contiguidade das regiões esféricas nucleado no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. A linha sólida é a contiguidade simulada de esferas nucleadas em planos paralelos. Os símbolos correspondem a resultados da simulação computacional. Contiguidade de elipsoides nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 10 núcleos por cada plano. Adaptado de [59]

A Figura 61 representa a contiguidade de elipsoides oblato e prolato nucleados em 20 planos paralelos aleatórios e 20 núcleos por plano. A Figura 62 apresenta a contiguidade para o caso com 80 núcleos por plano.

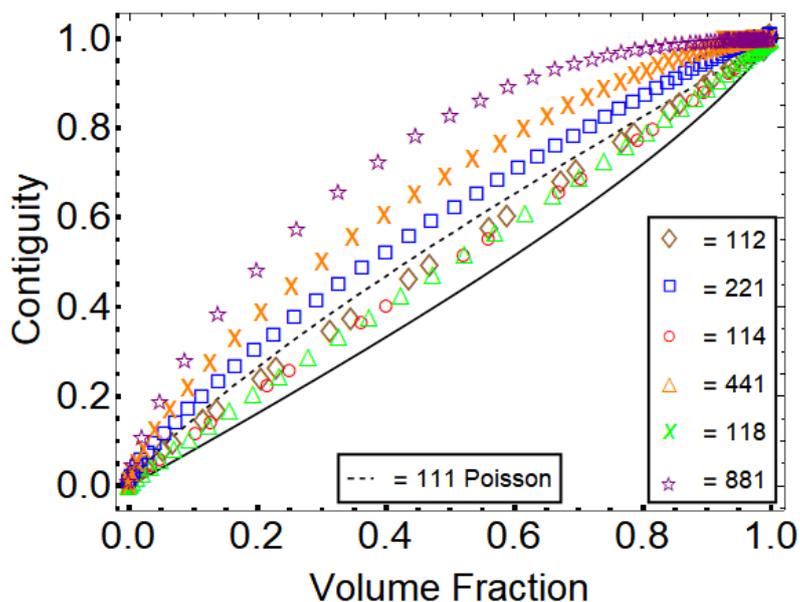


Figura 61 - Contiguidade de elipsoides oblato e prolato em função da fração volumétrica transformada. A linha tracejada é a linha teórica para a contiguidade das regiões esféricas nucleado no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. A linha sólida é a contiguidade simulada de esferas nucleadas em planos paralelos. Os símbolos correspondem a resultados da simulação computacional. Contiguidade de elipsoides nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 20 núcleos por cada plano.

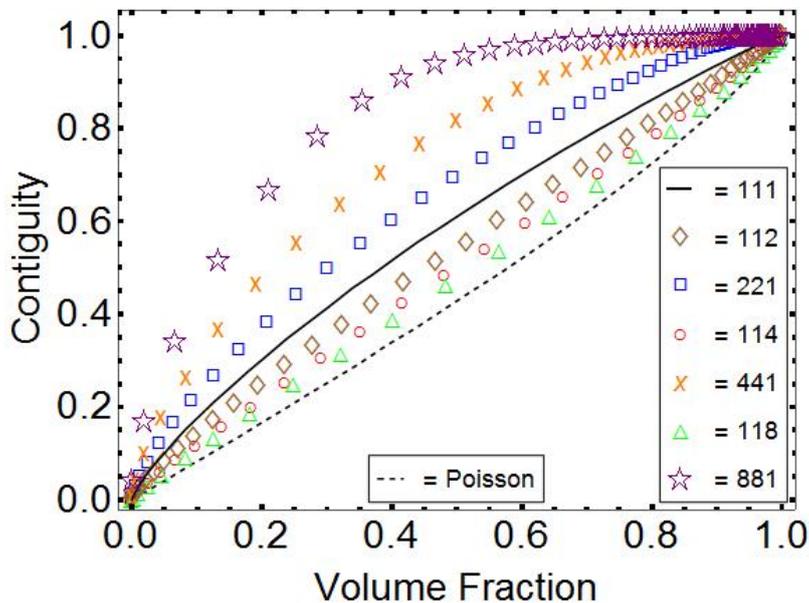


Figura 62 - Contiguidade de elipsoides oblato e prolato em função da fração volumétrica transformada. A linha tracejada é a linha teórica para a contiguidade das regiões esféricas nucleado no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. A linha sólida é a contiguidade simulada de esferas nucleadas em planos paralelos. Os símbolos correspondem a resultados da simulação computacional. Contiguidade de elipsoides nucleados em 20 planos paralelos aleatórios com 80 núcleos por cada plano. Adaptado de [59]

Em primeiro lugar, é conveniente explicar o significado da a linha tracejada em mais detalhes. A linha tracejada representa uma expressão exata para a contiguidade quando a nucleação é por saturação de sítios, e os núcleos estão localizados no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo[44]. Vandermeer[43] e Rios et al. [44] descobriram que quando há agrupamento, o choque ocorre mais cedo, e as curvas de contiguidade estão acima de Poisson. Além disso, como demonstrado por Ventura et al.[60], se a posição dos sítios de nucleação são arranjados periodicamente ou se aproximando de um arranjo periódico, o impacto ocorre mais tarde, e a contiguidade encontra-se abaixo da linha tracejada[60]. Quando as regiões de crescimento são elipsoides, sua contiguidade ainda cai na linha tracejada, desde que seus núcleos de sítios de nucleação estejam localizados no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo[35,40].

Os resultados mostram que quando os elipsoides são nucleados em planos paralelos, a contiguidade em todos os casos encontra-se acima da linha tracejada. Isso significa que a nucleação em planos paralelos tem um efeito de agrupamento. Na verdade, comparando os núcleos uniformes localizados aleatoriamente no espaço com núcleos localizados em planos paralelos, vê-se um efeito de agrupamento, como exemplificado em [62,63].

Em relação às Figuras 60-62, pode-se observar dois fatores que influenciam a contiguidade: a forma dos elipsoides e o número de núcleos por plano.

Os elipsoides oblatos e prolatos exibem um comportamento distinto. Nos elipsoides oblatos, o efeito de agrupamento é muito mais pronunciado do que nos elipsoides prolatos. O comportamento da contiguidade, como mencionado acima, está relacionado ao impacto. O impacto anterior causa um efeito de agrupamento, e as curvas de contiguidade ficam acima da curva da linha tracejada teórica. Os elipsoides oblatos têm seus eixos mais longos no plano. Portanto, os elipsoides oblatos colidem muito mais cedo do que os elipsoides prolatos que têm seus eixos menores no plano. O comportamento exibido nas Figuras 60-62 reflete isso. Os pontos simulados correspondentes aos oblatos, (estrelas nas Figuras 60-62), estão bem acima dos pontos simulados correspondentes aos prolatos, (triângulos nas Figuras 60-62). Este efeito é mais forte quando a relação entre o comprimento do eixo mais longo e o comprimento do eixo menor aumenta. Por exemplo, os pontos simulados dos elipsoides 881 são mais altos do que a curva teórica do que os pontos simulados nos

elipsoides 221. Observe que mesmo quando as esferas são nucleadas nos planos paralelos, linhas sólidas nas Figuras 60-62, uma ainda tem um efeito de agrupamento.

O número de núcleos por plano também é um fator essencial. Aumentar o número de núcleos por plano causa um choque. Claro, para uma determinada forma elipsoidal, o choque começará mais cedo para um maior número de núcleos por plano. A diferença entre as Figuras 60-62 causada pelo aumento do número de núcleos por plano de 10 para 80 é perceptível. O efeito do número de núcleos por plano é mais significativo para razões de maior comprimento ao dos eixos menores. Sendo possível comparar o comportamento de elipsoides 881 nas Figuras 60-62.

7.4. DISCUSSÃO

As Equações 29 e 30 são muito recentes. Villa e Rios [58] derivou pela primeira vez um modelo analítico produzindo a densidade de volume média, $V_v(tx)$, em vez da fração volumétrica. Detalhes matemáticos podem ser encontrados em Villa e Rios [58].

Primeiro, é necessário discutir os pontos técnicos que são essenciais para uma simulação correta. Na seção Metodologia, descreveu a simulação e mencionou que cada curva, por exemplo, a Figura 53a e 53b é o resultado médio de 100 simulações. No entanto, essas curvas não são apenas o resultado de 100 repetições de 20 planos e 10 núcleos por plano. Isto é um pouco mais complicado do que isso, e é descrito agora em detalhe. A primeira etapa é selecionar 20 planos. O ponto é que 20 é o valor médio de uma distribuição de Poisson. Portanto, deve-se gerar uma sequência de 100 números de Poisson com uma média de 20, por exemplo {17, 15, 20, 30, 16, 15, 17, 23, 19, 18, 17, 20, 16, 19, 19, 17, 29 ...}. Cada repetição usa um número de planos de Poisson, digamos, primeiro usa 17, segundo 15, terceiro 20, quarto 30 e assim por diante. Uma vez que o número de planos é escolhido, digamos 17 planos, esses planos paralelos são localizados aleatoriamente ao longo dos eixos X_3 . Depois disso, deve-se selecionar o número de núcleos por plano com um número médio de núcleos igual a 10.

Novamente, gera-se uma sequência de números de Poisson com média igual a 10, por exemplo, {10, 13, 7, 6, 9, 6, 8, ...}. Agora, para cada plano, toma-se o número

de núcleos de acordo com a sequência de números de Poisson. O primeiro plano de 10 núcleos, o segundo plano de 13 núcleos e assim por diante. Se isso não for feito, a simulação pode não coincidir com a solução analítica porque a solução analítica foi derivada para ambos os números de planos e o número de núcleos por plano obedecendo um processo de ponto de Poisson.

Observe que a derivação de Cahn não menciona nenhuma dessas considerações. Dentro dos casos mais simples, por exemplo, quando só tem a nucleação de esferas uniformes localizadas aleatoriamente no espaço, é possível obter bons resultados com um pequeno número de repetições. Mesmo apenas uma simulação em que o número de núcleos é igual ao valor médio da distribuição de Poisson pode dar um resultado aceitável. Mas sempre que se simula casos mais complexos em que mais de um processo de Poisson está presente, assim como a presente simulação, é imprescindível utilizar a metodologia descrita acima.

Outro ponto técnico que vale a pena comentar é o tamanho da matriz e tempo de processamento. Na maioria das simulações feito no grupo de pesquisa NMM do PPGEM-VR, descobrimos que uma matriz 300x300x300 foi o suficiente. No entanto, para elipsoides, o resultado não é tão bom por causa da grande área de interface dos elipsoides. Para descrever esta área com precisão, é necessária uma malha mais refinada, daí a necessidade de usar 500x500x500 ou até 1000x1000x1000, o que requer poder computacional, por isso as simulações foram realizadas em um supercomputador.

Aqui, obteve-se uma solução matemática exata para transformações em que elipsoides nucleados aleatoriamente em planos paralelos. Um policristal laminado fortemente deformado vai ter a maior parte de sua área interfacial paralela ao plano de laminação. Assim, para uma primeira aproximação, pode-se aproximar a nucleação nas interfaces deste policristal laminado por nucleação em planos paralelos aleatórios. Esta é uma interessante aplicação da nucleação de planos paralelos aleatórios.

À primeira vista, o principal resultado parece ser excessivamente restritivo. De mais interesse é a nucleação de planos aleatórios, como inicialmente pensado por Cahn. Como acima mencionado, Rios e Villa[25,26] demonstraram que, para o crescimento esférico, a expressão derivada para nucleação em planos paralelos aleatórios é o mesmo que a expressão para nucleação em planos aleatórios. Rios e Villa[25] confirmaram isso por simulação computacional.

Portanto, é razoável esperar que para o crescimento elipsoidal, a expressão para nucleação em planos paralelos aleatórios é a mesma para a expressão em planos aleatórios. Estritamente falando, isso não é inteiramente verdade. O problema é o mesmo para o crescimento elipsoidal nucleado em núcleos localizados no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson. É bem conhecido [35,40,51] que quando os elipsoides estão alinhados, isto é, seus eixos equivalentes são paralelos; existe uma expressão exata[40,58]. Em contraste, quando a orientação dos elipsoides é aleatório, a expressão exata não é mais válida. Isso é então por causa da questão do efeito blocking ou "bloqueio"[35,43]. Godiksen et al.[35] conduziu uma simulação computacional com orientação aleatória dos elipsoides. Eles determinaram que a expressão exata só é válida se a proporção dos eixos mais longos para os eixos mais curtos for igual ou menores que quatro.

Em resumo, o principal objetivo deste capítulo da tese foi simular as transformações nucleadas em planos paralelos aleatórios com crescimento elipsoidal. Então, para comparar as simulações com o novo modelo de Cahn modificado para elipsoides. Além disso, com base em trabalhos anteriores, pode ser proposto que a expressão seria idêntica à expressão para transformações nucleadas em planos aleatórios com planos aleatórios de crescimento elipsoidal. Infelizmente, embora isso seja válido para o crescimento esférico, para crescimento elipsoidal, deve-se considerar a questão do "bloqueio". O bloqueio ocorre quando os elipsoides estão localizados no espaço para, mas seus eixos não são paralelos, mas sim orientados aleatoriamente no espaço.

O bloqueio interfere na independência do crescimento de regiões individuais para que as expressões derivadas não sejam mais válidas. No entanto, a simulação computacional anterior por Godiksen et al. sugere que a expressão aqui apresentada, quando aplicada a planos aleatórios, é válido pelo menos para elipsoides que têm uma proporção do eixo mais longo para o mais curto igual a quatro[35,40].

7.5. CONCLUSÃO

Em artigos iniciais, Bradley et al.[52–54] demonstraram que uma ferrita alotriomorfa nucleada no contorno de grão é mais bem descrito por um elipsoide

achatado. No presente capítulo, seguiu-se esta ideia. Foi utilizado a simulação computacional e uma solução analítica exata para modelar a nucleação e crescimento de elipsoides em planos paralelos aleatórios. Obtendo as seguintes conclusões:

- A expressão analítica para transformações em que os elipsoides nucleados em planos paralelos aleatórios corroboram muito bem com a simulação computacional.
- A simulação computacional vai além do resultado analítico. A simulação computacional gerou microestruturas resultantes da nucleação e crescimento de elipsoides em planos paralelos aleatórios.
- A cinética de transformação da simulação computacional apresenta excelente concordância com análises das expressões exatas como era esperado. Não obstante, este bom acordo só pode ser obtido se o número de núcleos e o número de núcleos por planos são escolhidos de acordo com um processo de Poisson. Além disso, cada resultado exibido nas Figuras é uma média de 100 simulações.
- A contiguidade mostrou-se muito útil para entender o efeito das formas dos elipsoides e o número de núcleos por plano nas microestruturas. A contiguidade revelou uma tendência de "agrupamento" típico da nucleação em contornos de grão.
- Conforme discutido em detalhes, a expressão derivada para planos paralelos aleatórios também é válida para nucleação em planos aleatórios. No entanto, para elipsoides, devido a questão do "bloqueio", é razoável esperar que o resultado seja válido para elipsoides em que a proporção do eixo mais longo para o mais curto é igual ou menor de quatro [35]. Para elipsoides em que a proporção do eixo mais longo para o mais curto é maior do que quatro, a expressão analítica ainda pode ser aplicada. No entanto, a expressão analítica vai ser progressivamente menos precisa quando a proporção do eixo mais longo para o eixo mais curto torna-se maior.

8. ESTUDO COMPARATIVO DO MODELO ANALÍTICO COM A SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA NUCLEAÇÃO NAS INTERFACES

No presente capítulo, simulações computacionais são realizadas de modo a estudar a transformação de fase nos contornos de grãos equiaxiais e nos contornos deformados. Os grãos equiaxiais são representados por poliedros de Poisson-Voronoi e os grãos deformados por elipsoides de diferentes razões de aspecto. Os resultados são comparados como os modelos analíticos de JMAK e CAHN.

Transformações de nucleação e crescimento são predominantes em materiais no estado sólido. Uma das mais importantes maneiras de modelar essas reações é por meio da abordagem proposta por Johnson-Mehl, Avrami e Kolmogorov[1–5], também chamada de Teoria de JMAK. Essa teoria assume uma distribuição da nucleação aleatória, crescimento dos núcleos com velocidade constante, forma dos grãos esférica e homogeneidade energética na matriz [42]

Todavia, a maior parte das transformações de interesse dos materiais metálicos ocorre por nucleação heterogênea, como, por exemplo, nos contornos de grãos e nas inclusões[65]. Tais sítios de nucleação são regiões preferenciais para a nucleação em materiais policristalinos por terem um maior nível de energia armazenada. Esses sítios podem ser introduzidos no material, em processos em que haja, uma temperatura ou gradiente de deformação[66]. Sendo possível a sua observação no processo de recristalização, após uma deformação plástica seguida do recozimento.

Um exemplo deste fenômeno, é o processo de recristalização na laminação controlada. O principal objetivo da laminação controlada é refinar a microestrutura e, assim, aumentar tanto a resistência quanto a tenacidade do aço laminado a quente. A diferença entre os aços laminados a quente convencionalmente para os que

sofreram laminação controlada está no fato de que a nucleação da ferrita ocorre exclusivamente nas interfaces do grão da austenita para a laminação a quente convencional, enquanto, durante a laminação controlada a nucleação da ferrita ocorre também no interior do grão austenítico, levando a uma estrutura de grão mais refinada [15].

Em uma série de trabalhos clássicos, Johnson-Mehl, Avrami e Kolmogorov[1–5] desenvolveram uma expressão para a cinética de transformação de fase em que os núcleos estão dispostos aleatoriamente no espaço. Recentemente, Rios e Villa [44] revisitaram o modelo JMAK e o colocaram em bases matemáticas mais rigorosas. Assim, locais “uniformemente aleatórios” podem ser mais precisamente definidos por um processo de ponto de Poisson. O processo de ponto de Poisson homogêneo resulta na mesma expressão obtida por JMAK. Em diversos trabalhos, Rios e Villa[6] obtiveram expressões para situações nas quais a nucleação difere da suposta por JMAK, por exemplo, processo de Poisson não homogêneo, nucleação quando os núcleos estão agrupados (clusters), quando os núcleos ocorrem na superfície e no interior de placas finas, fios finos e pós de pequenas dimensões, dentre outros.

J. W. Cahn [24] derivou expressões para a cinética de transformação quando a nucleação ocorre nos contornos de grão. Obtendo a equação (6) para o caso de saturação de sítios. Onde S_V^{Planos} é a área das interfaces por unidade de volume e λ_s é o número de núcleos por unidade de área de interfaces.

8.1. METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Foi utilizada a metodologia do Cone Causal [39] para a simulação das reações de nucleação e crescimento. Em todos os casos utilizou-se nucleação por saturação de sítios. A matriz compreendeu 300x300x300 células cúbicas[29]. Todos os resultados apresentados representam uma média de 50 simulações.

Foi simulado o crescimento de uma nova fase nos contornos de grão de uma matriz de elipsoides. A matriz inicial composta de elipsoides foi escolhida de modo a representar grãos deformados, conforme representação gráfica das Figuras 63 e 64. O número de elipsoides foi mantido igual a 128 em todos os casos[41].

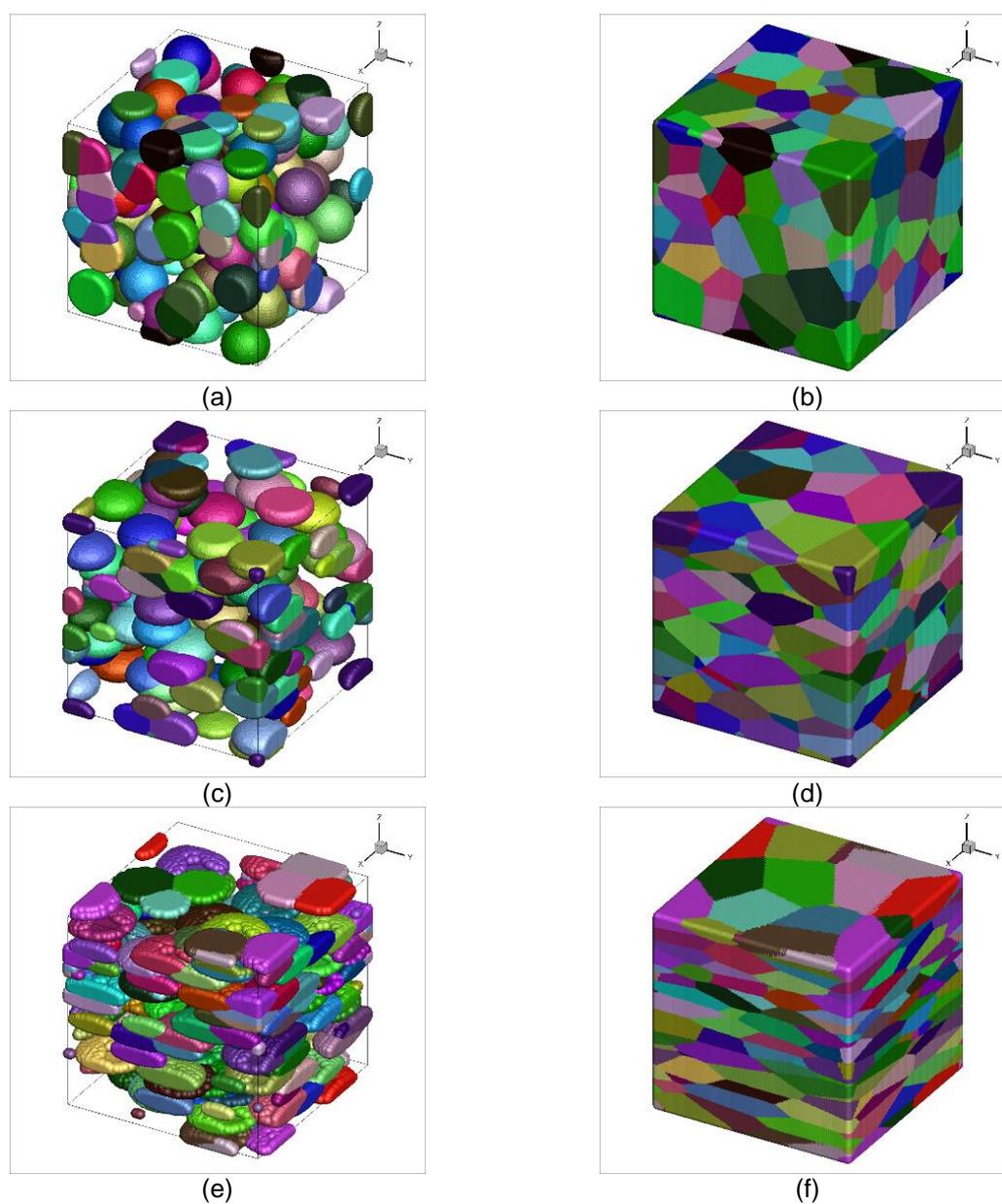


Figura 63 - Matriz inicial com 128 núcleos, com razão de aspecto: (a) 1:1:1, (b) 1:1:1, (c) 2:2:1, (d) 2:2:1, (e) 4:4:1 e (f) 4:4:1.

A partir da matriz inicial, foi simulado o crescimento de uma nova fase nucleada nas suas interfaces, Figura 65. As simulações mantiveram o número de núcleos da nova fase em: 250, 707, 1507 e núcleos para os elipsoides com razão de aspecto de: 2:2:1, 4:4:1, 8:8:1 e 16:16:1. O caso esférico também foi analisado.

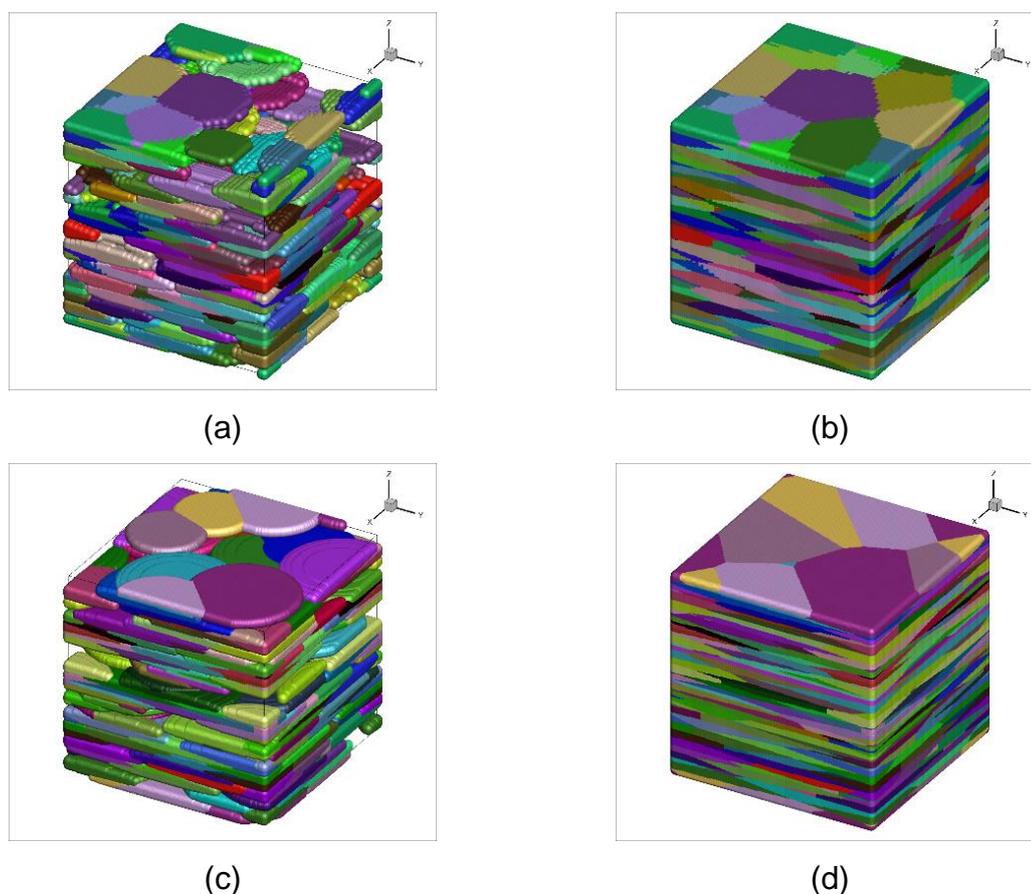


Figura 64 - Matriz inicial com 128 núcleos, com razão de aspecto: (a) 8:8:1, (b) 8:8:1, (c) 16:16:1, (d) 16:16:1.

A Figura 66 apresenta a evolução microestrutural da nucleação nas interfaces da matriz inicial 1:1:1. Foi realizado cortes em todas as seções da matriz com 3000 núcleos nas interfaces, na seção X, nos planos com 10%, 50% e 100% de transformação respectivamente, para cada razão. As interfaces da matriz inicial estão destacadas em preto e a distribuição dos núcleos estão nos contornos de grão validando o tipo de nucleação proposto. Como observado na Figura 65, com o aumento da razão de aspecto houve um alongamento dos grãos. Entretanto, a morfologia dos grãos nucleados nas interfaces das matrizes são equiaxiais. Deste modo, não houve uma mudança visível na morfologia dos grãos após o término da transformação, como visto nas microestruturas da Figura 66b.

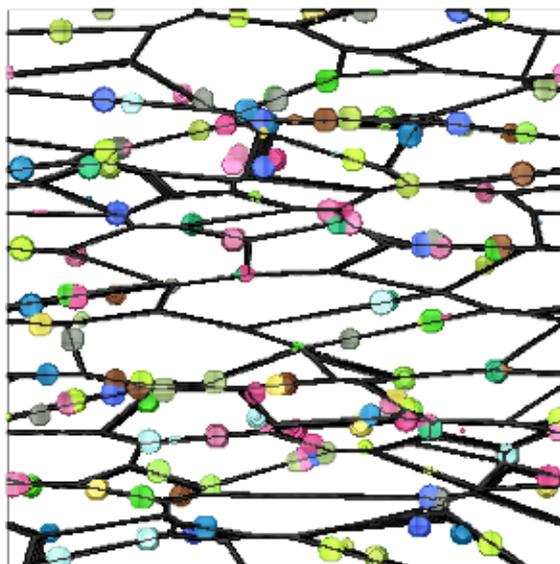


Figura 65 – Matriz inicial com razão de aspecto 2:2:1 com 3000 núcleos nas interfaces. Corte na seção X.

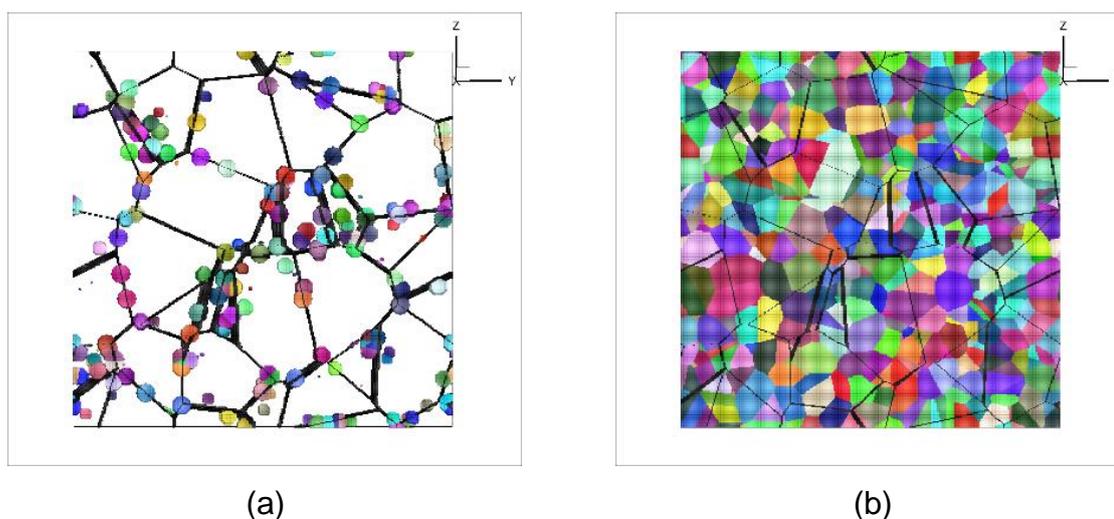


Figura 66 – Evolução da Matriz com 3000 núcleos, corte na seção X, com, $V_v = 0.1$ e $V_v = 1$. Com razão de aspecto: 1:1:1.

8.2. RESULTADOS

8.2.1 Evolução Microestrutural

Foram analisadas as situações com grãos com razões de aspecto: 1:1:1 quando a expressão usual se reduz ao crescimento esférico, Eq. (6), 2:2:1, 4:4:1, 8:8:1 16:16:1.

8.2.1.1. Simulação Computacional com 250 núcleos

As Figuras 67 e 68 apresentam a matriz totalmente transformada com 250 núcleos nas interfaces da matriz inicial com razão de aspecto de 1:1:1, 2:2:1, 4:4:1, 8:8:1 e 16:16:1. Como esperado, após a nucleação nas interfaces não é possível distinguir a razão de aspecto da matriz inicial pela visualização das microestruturas, pois o crescimento dos grãos nas interfaces ocorreu com o formato esférico. Por isso, os grãos apresentam um formato equiaxial nas microestruturas.

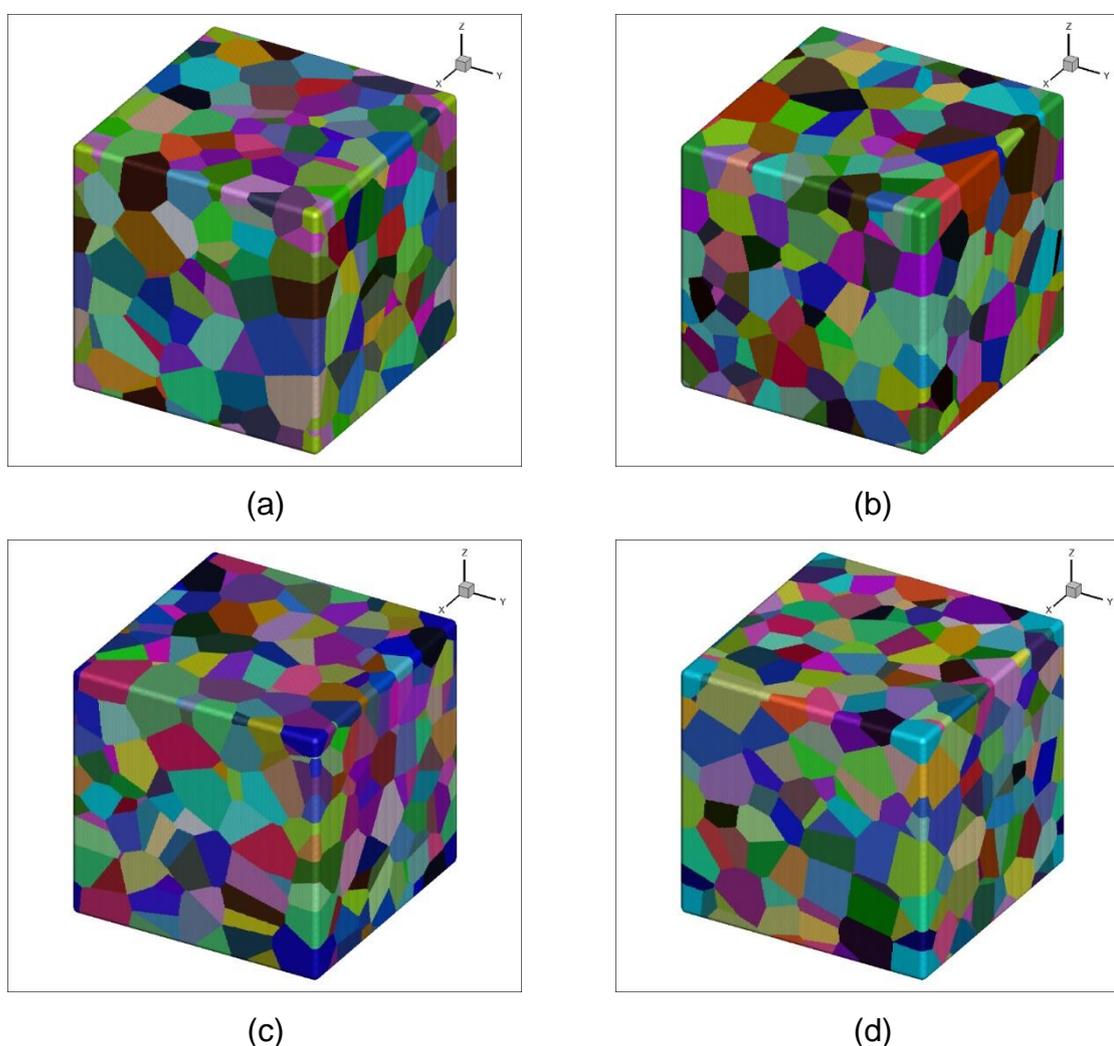


Figura 67 - Nucleação com 250 núcleos nas interfaces da matriz inicial com 128 núcleos, com razão de aspecto: (a) 2:2:1, (b) 4:4:1, (c) 8:8:1 e (d) 16:16:1.

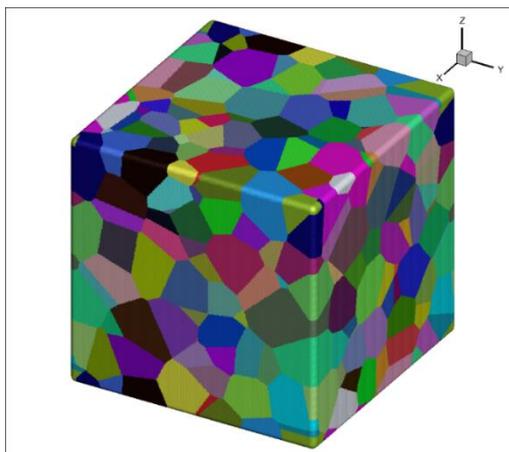


Figura 68 - Nucleação com 250 núcleos nas interfaces da matriz inicial com 128 núcleos, com crescimento esférico na matriz inicial.

8.2.1.2. Simulação Computacional com 707 núcleos

As Figuras 69 e 70 apresentam a matriz totalmente transformada com 707 núcleos nas interfaces da matriz inicial com razão de aspecto de 1:1:1, 2:2:1, 4:4:1, 8:8:1 e 16:16:1.

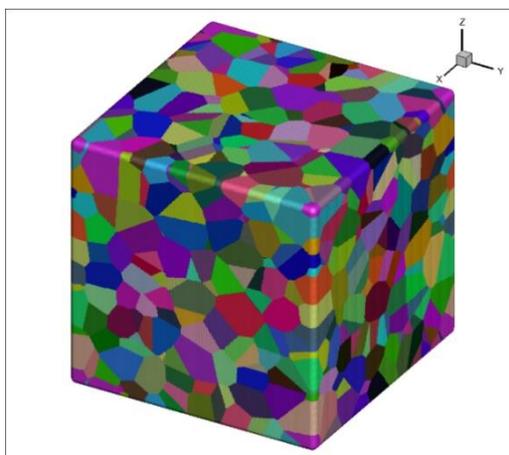


Figura 69 - Nucleação com 707 núcleos nas interfaces da matriz inicial com 128 núcleos, com crescimento esférico na matriz inicial.

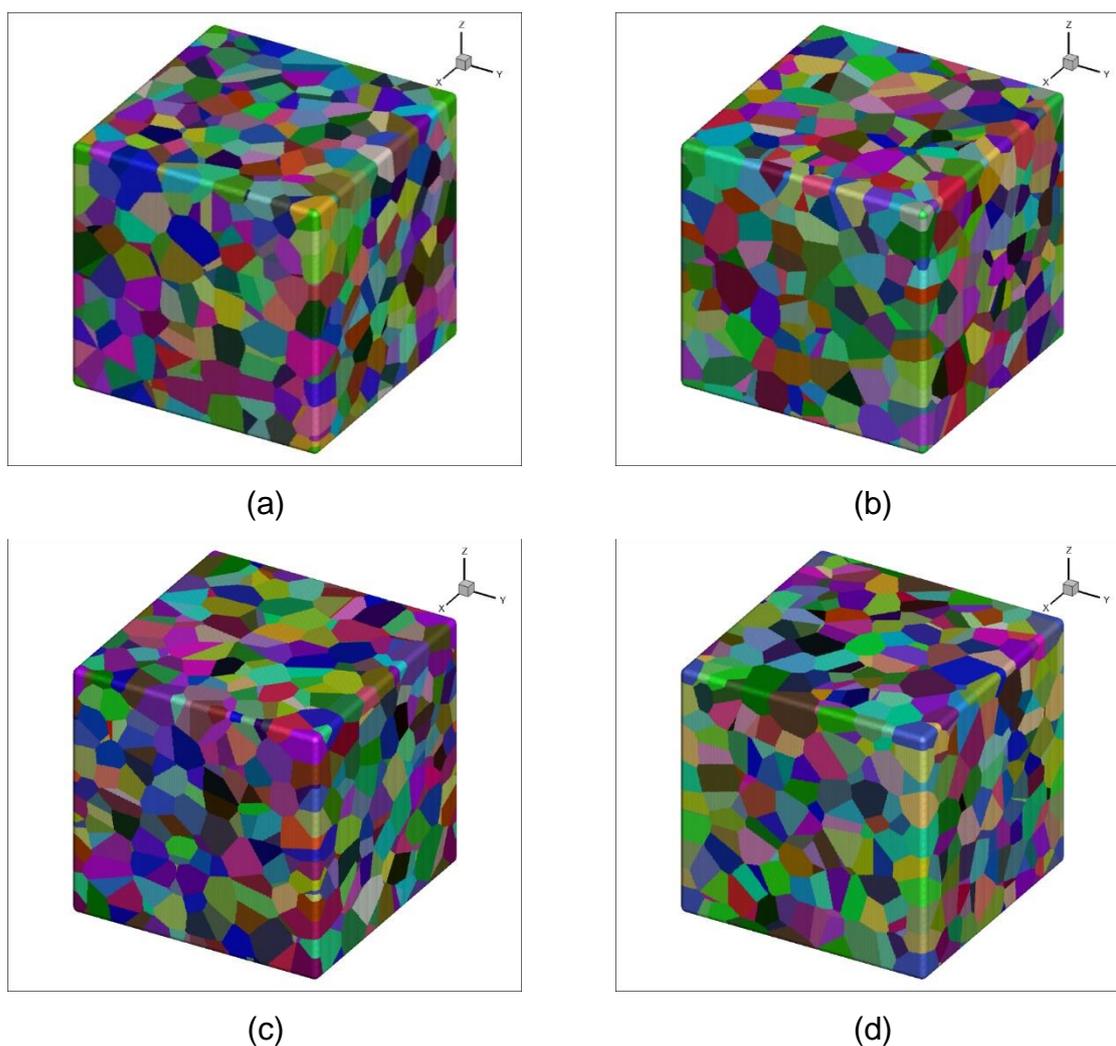


Figura 70 - Nucleação com 707 núcleos nas interfaces da matriz inicial com 128 núcleos, com razão de aspecto: (a) 2:2:1, (b) 4:4:1, (c) 8:8:1 e (d) 16:16:1.

8.2.1.3. Simulação Computacional com 1507 núcleos

As Figuras 71 e 72 apresentam a matriz totalmente transformada com 1507 núcleos nas interfaces da matriz inicial com razão de aspecto de 1:1:1, 2:2:1, 4:4:1, 8:8:1 e 16:16:1. Devido ao crescimento dos grãos com o formato esférico e a quantidade de núcleos na matriz, as microestruturas apresentaram grãos refinados.

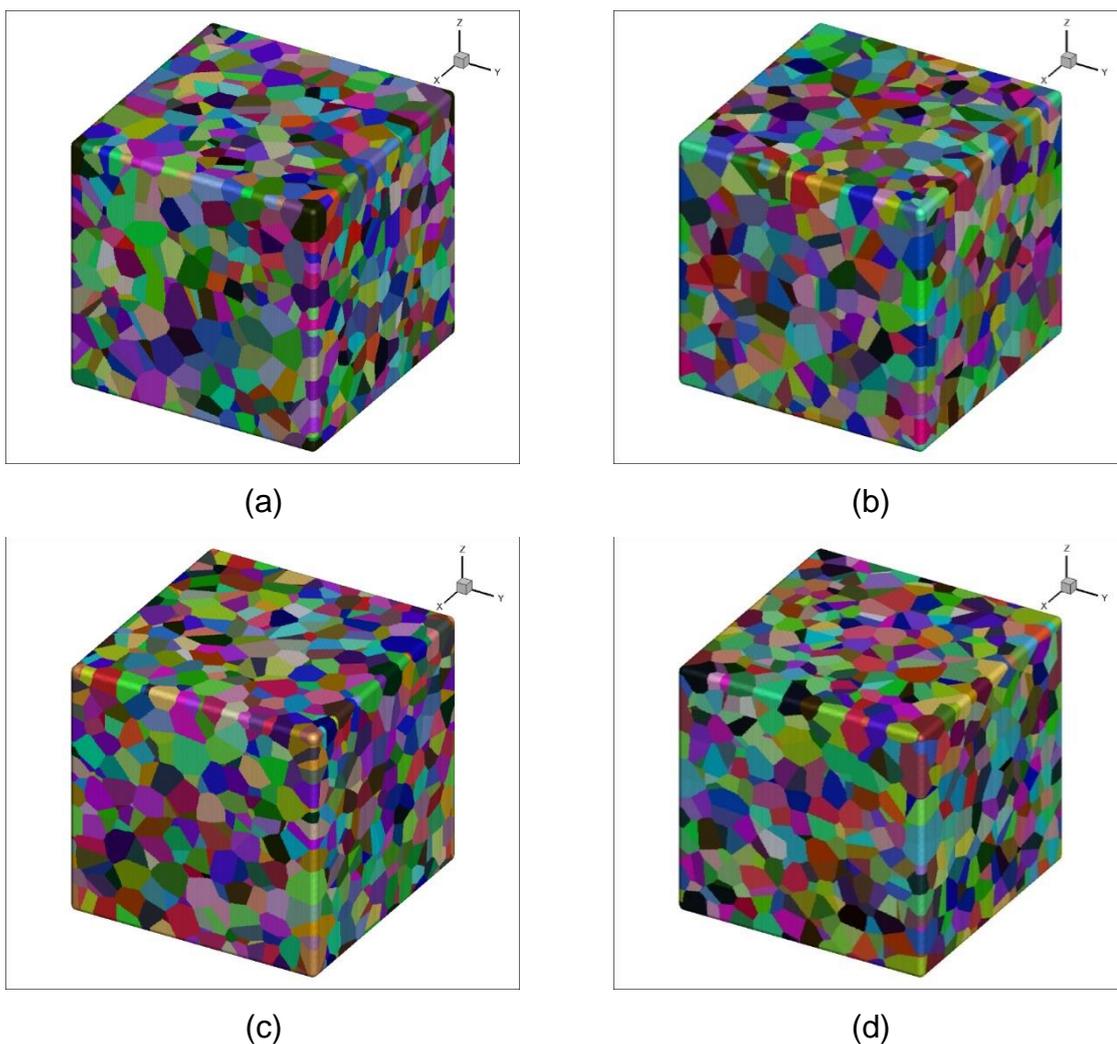


Figura 71 - Nucleação com 1507 núcleos nas interfaces da matriz inicial com 128 núcleos, com razão de aspecto: (a) 2:2:1, (b) 4:4:1, (c) 8:8:1 e (d) 16:16:1.

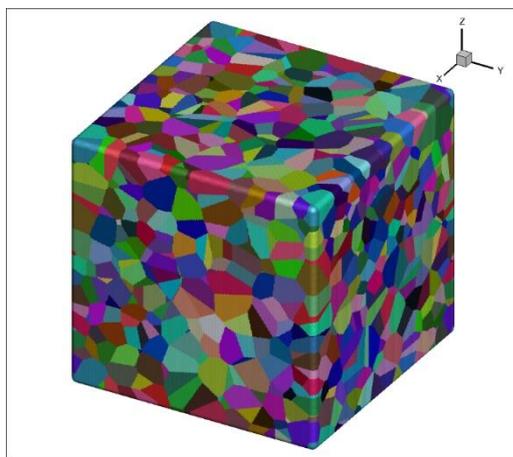


Figura 72 - Nucleação com 1507 núcleos nas interfaces da matriz inicial com 128 núcleos, com crescimento esférico na matriz inicial.

8.2.1.4. Simulação Computacional com 3000 núcleos

As Figuras 73 e 74 apresentam a matriz totalmente transformada com 3000 núcleos nas interfaces da matriz inicial com razão de aspecto de 1:1:1, 2:2:1, 4:4:1, 8:8:1 e 16:16:1. É possível observar um refinamento mais intenso dos grãos na microestrutura com o aumento da quantidade de núcleos.

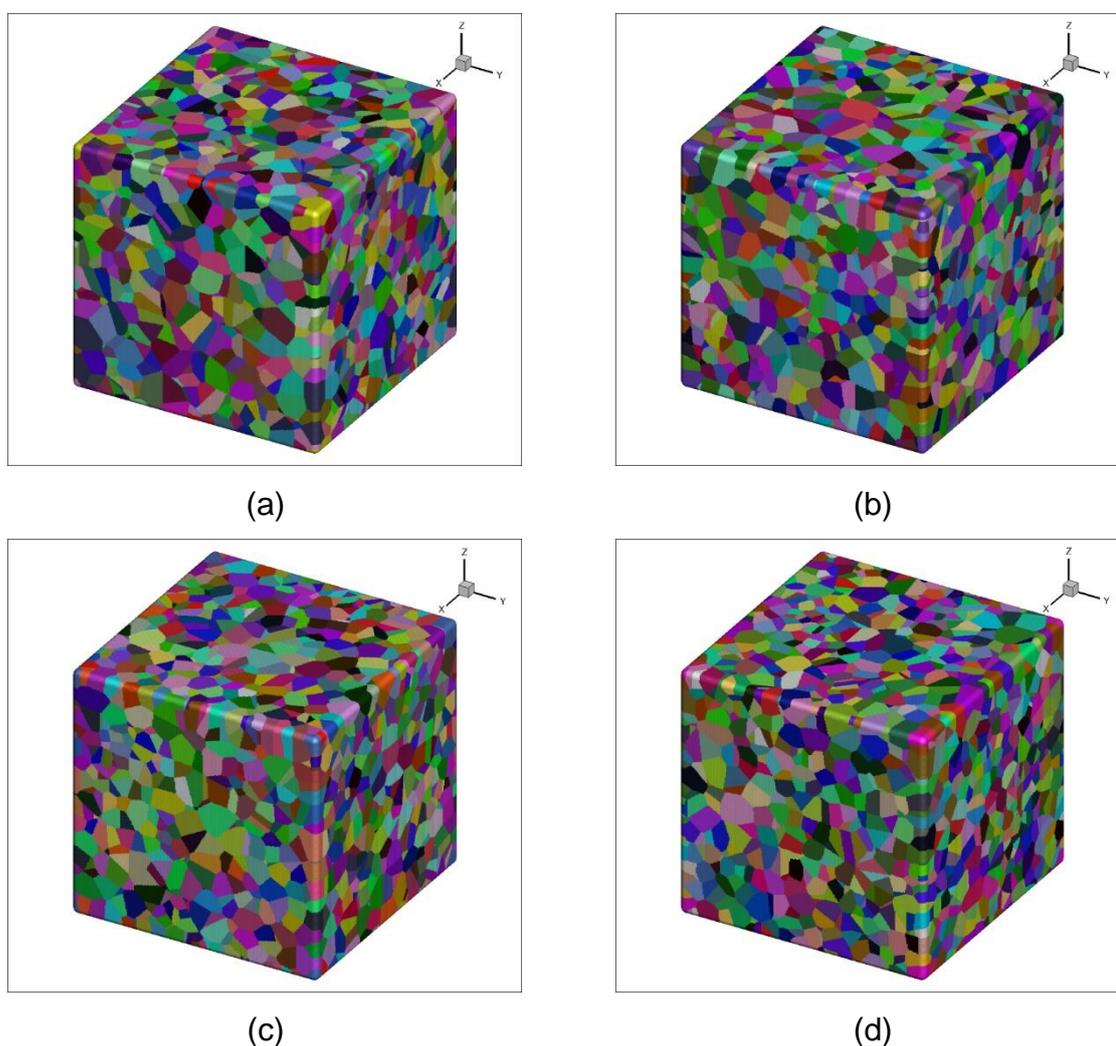


Figura 73 - Nucleação com 3000 núcleos nas interfaces da matriz inicial com 128 núcleos, com razão de aspecto: (a) 2:2:1, (b) 4:4:1, (c) 8:8:1 e (d) 16:16:1.

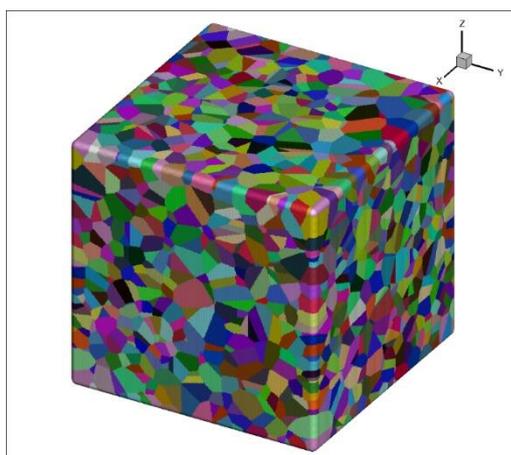


Figura 74 - Nucleação com 3000 núcleos nas interfaces da matriz inicial com 128 núcleos, com crescimento esférico na matriz inicial.

8.2.2. Cinética

8.2.2.1. Cinética da simulação computacional com 250 núcleos

As Figuras 75 e 76 apresentam a cinética de transformação dada pela fração volumétrica versus tempo para transformações da matriz com crescimento esférico e elipsoidal respectivamente para o caso com 250 núcleos. Visando maior confiabilidade das simulações, foram realizadas 50 simulações aleatórias nas interfaces da rede de poliedros de Voronoi.

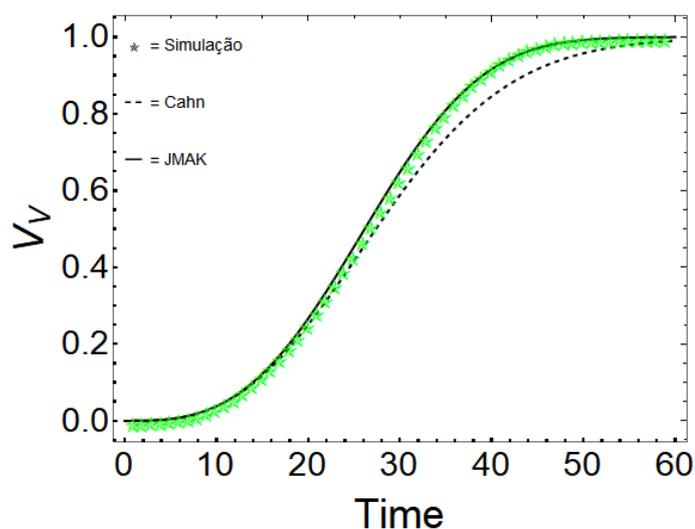


Figura 75 - Cinética de transformação da matriz com crescimento esférico com 250 núcleos nas interfaces.

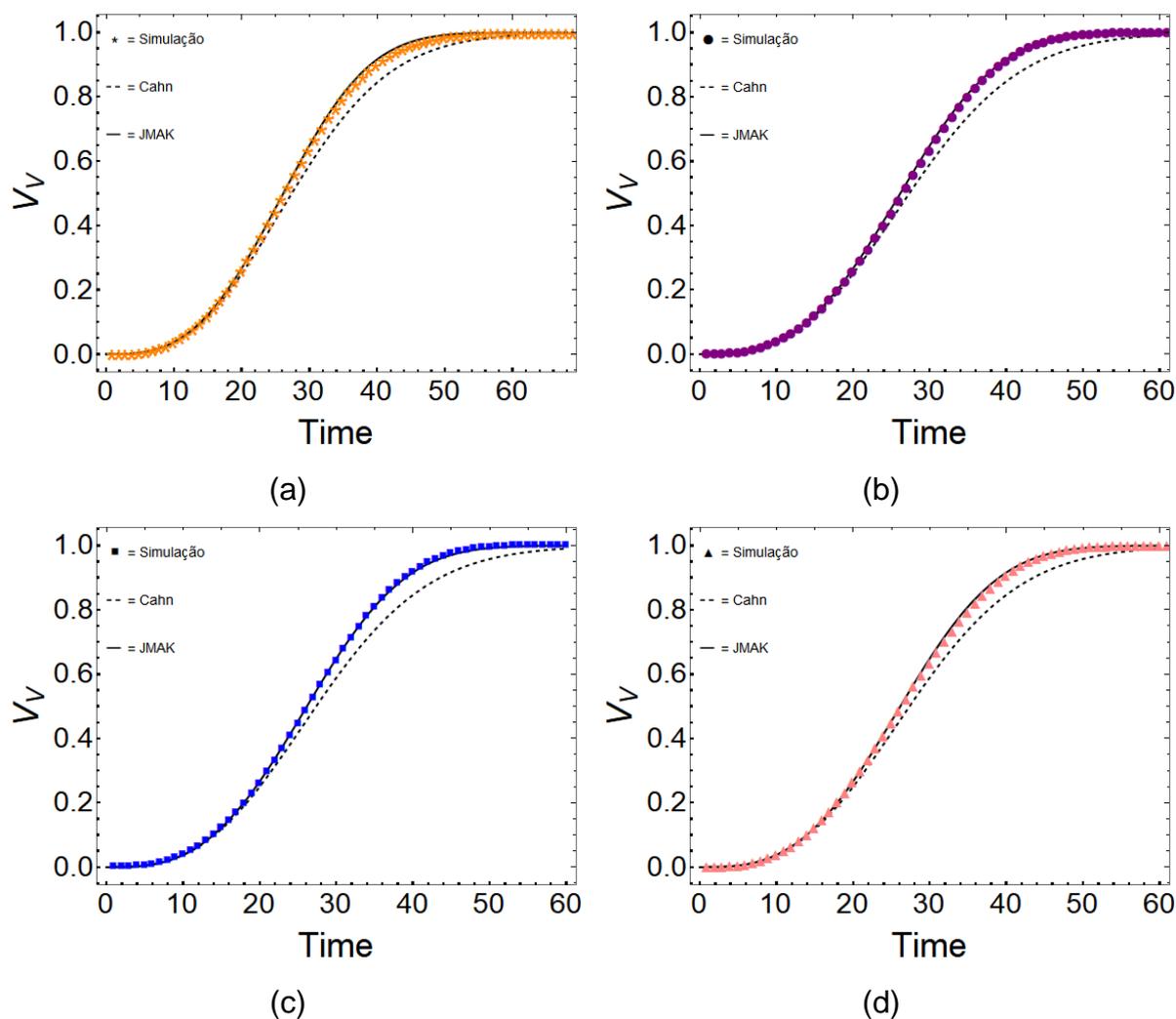


Figura 76 - Cinética de transformação da matriz com crescimento elipsoidal com 250 núcleos nas interfaces com razão de aspecto (a) 2:2:1, (b) 4:4:1, (c) 8:8:1 e (d) 16:16:1.

8.2.1.2 Cinética da simulação computacional com 707 núcleos

As Figuras 77 e 78 apresentam a cinética de transformação dada pela fração volumétrica versus tempo para transformações da matriz com crescimento esférico e elipsoidal respectivamente para o caso com 707 núcleos. Visando maior confiabilidade das simulações, foram realizadas 50 simulações aleatórias nas interfaces da rede de poliedros de Voronoi.

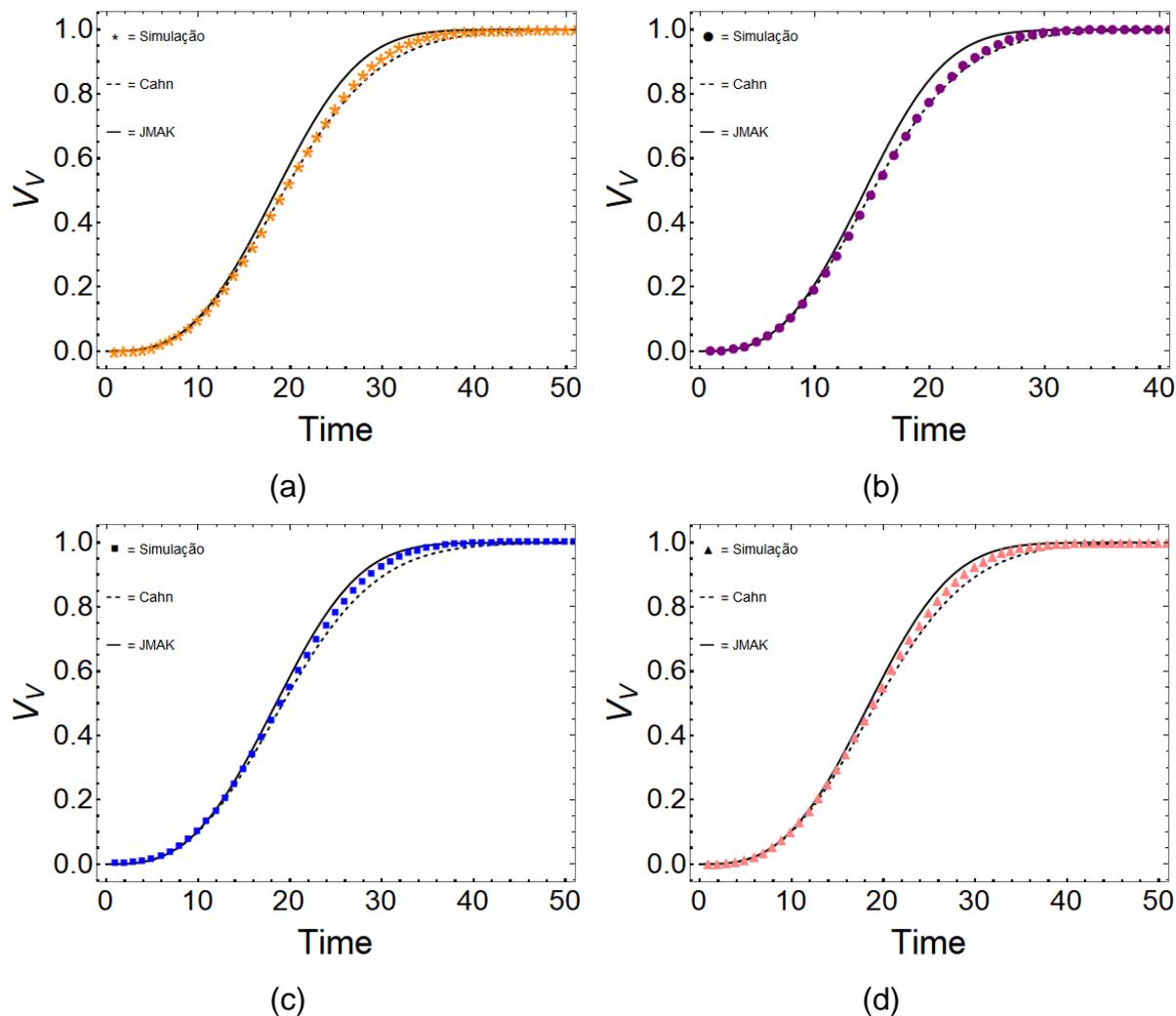


Figura 77 - Cinética de transformação da matriz com crescimento elipsoidal com 707 núcleos nas interfaces com razão de aspecto (a) 2:2:1, (b) 4:4:1, (c) 8:8:1 e (d) 16:16:1.

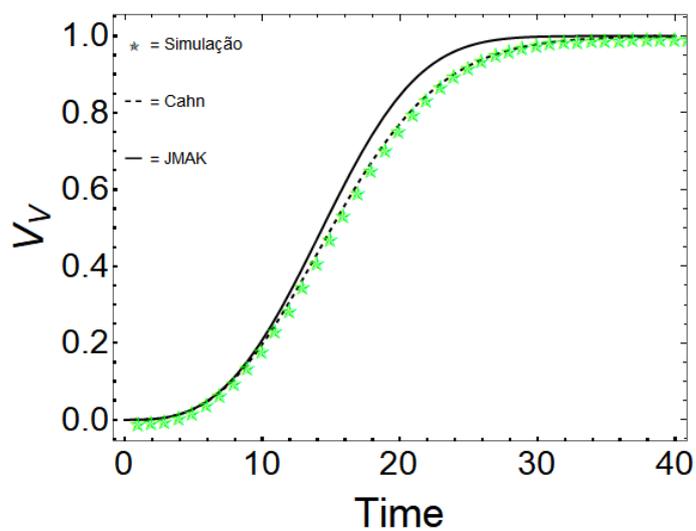


Figura 78 - Cinética de transformação da matriz com crescimento esférico com 707 núcleos nas interfaces.

8.2.1.3. Cinética da simulação computacional com 1507 núcleos

As Figuras 79 e 80 apresentam a cinética de transformação dada pela fração volumétrica versus tempo para transformações da matriz com crescimento esférico e elipsoidal respectivamente para o caso com 1507 núcleos.

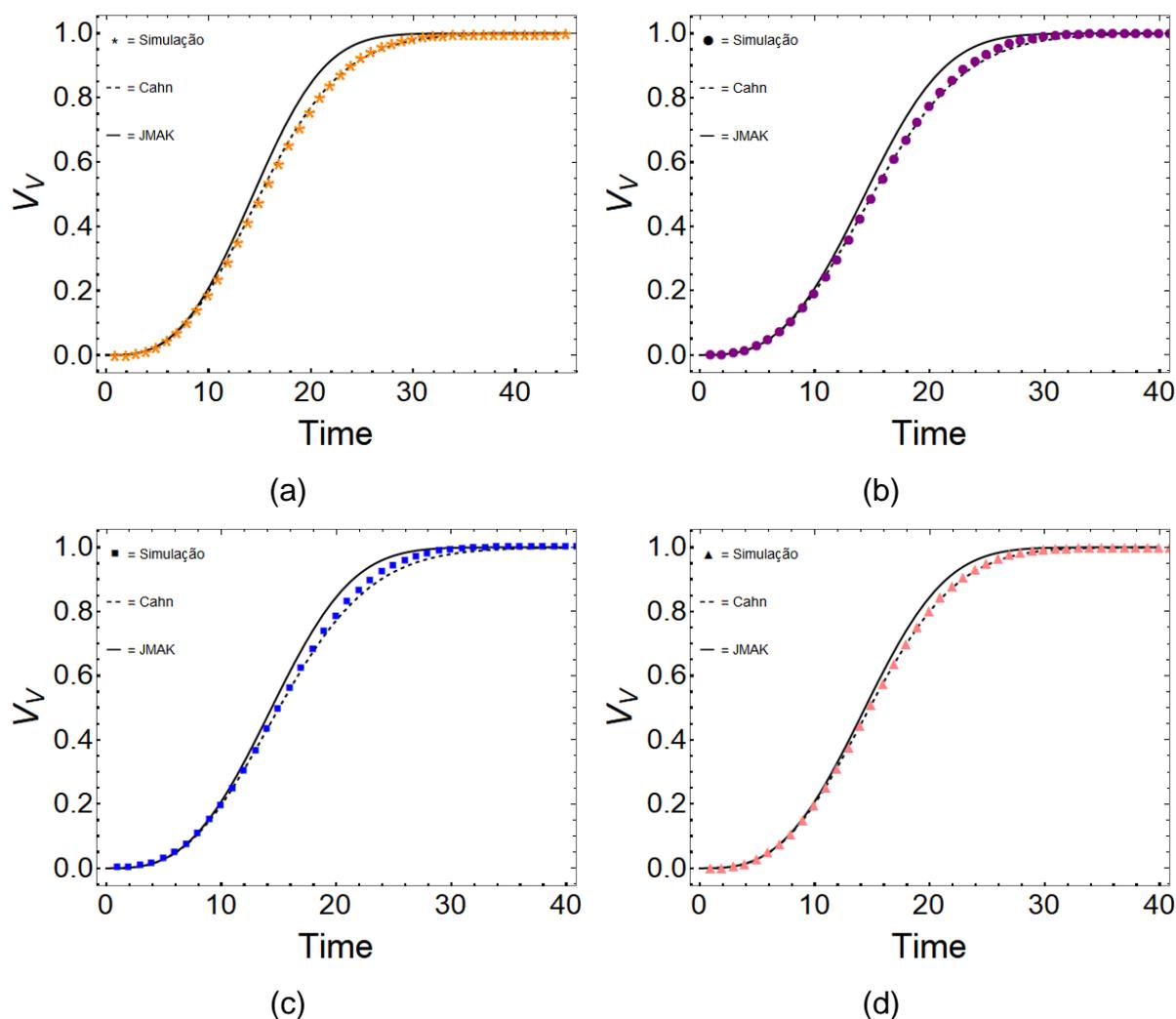


Figura 79 - Cinética de transformação da matriz com crescimento elipsoidal com 1507 núcleos nas interfaces com razão de aspecto (a) 2:2:1, (b) 4:4:1, (c) 8:8:1 e (d) 16:16:1.

Observou-se que a quantidade de núcleos presente na matriz, interferiu nas curvas simuladas. Para o caso com poucos núcleos, Figura 76, a curva simulada corrobora com o modelo de JMAK, pois os núcleos possuem uma característica de aleatoriedade na matriz.

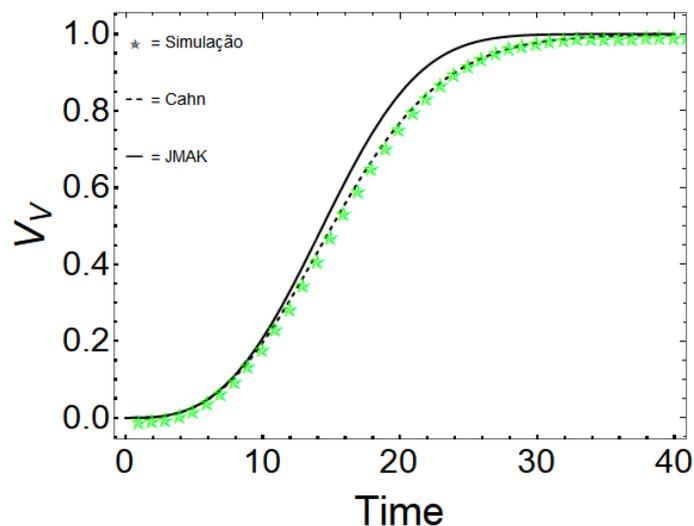


Figura 80 - Cinética de transformação da matriz com crescimento esférico com 1507 núcleos nas interfaces.

8.2.1.4. Cinética da simulação computacional com 3000 núcleos

As Figuras 81 e 82 apresentam a cinética de transformação dada pela fração volumétrica versus tempo para transformações da matriz com crescimento esférico e elipsoidal respectivamente para o caso com 3000 núcleos.

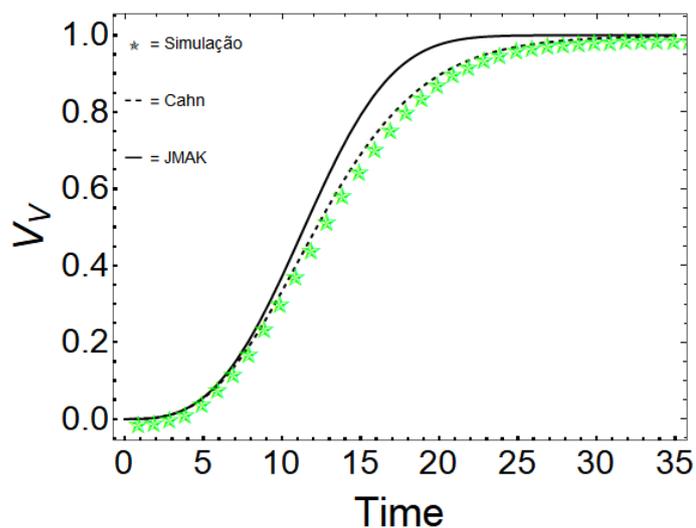


Figura 81 - Cinética de transformação da matriz com crescimento esférico com 250 núcleos nas interfaces.

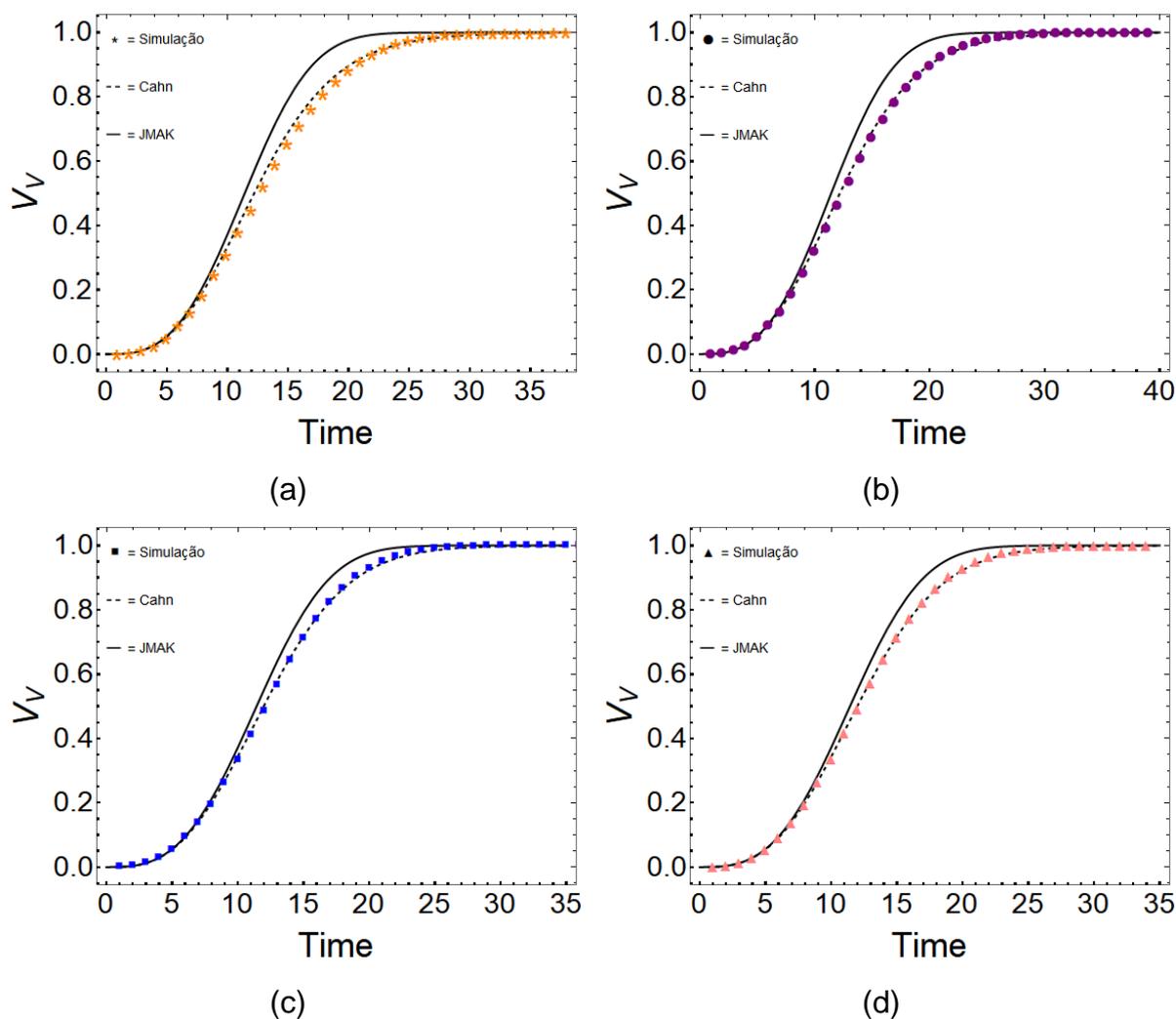


Figura 82 - Cinética de transformação da matriz com crescimento elipsoidal com 3000 núcleos nas interfaces com razão de aspecto (a) 2:2:1, (b) 4:4:1, (c) 8:8:1 e (d) 16:16:1.

8.2.2. Contiguidade

Como já observado nos capítulos anteriores a contiguidade representa a quantidade de grãos vizinhos da mesma fase, ou a continuidade de cada fase.

As Figuras 83-86 representam a contiguidade de elipsoides oblatos com 250, 707, 1507 e 3000 núcleos nas interfaces, respectivamente. As curvas mostram o efeito da forma dos elipsoides na contiguidade.

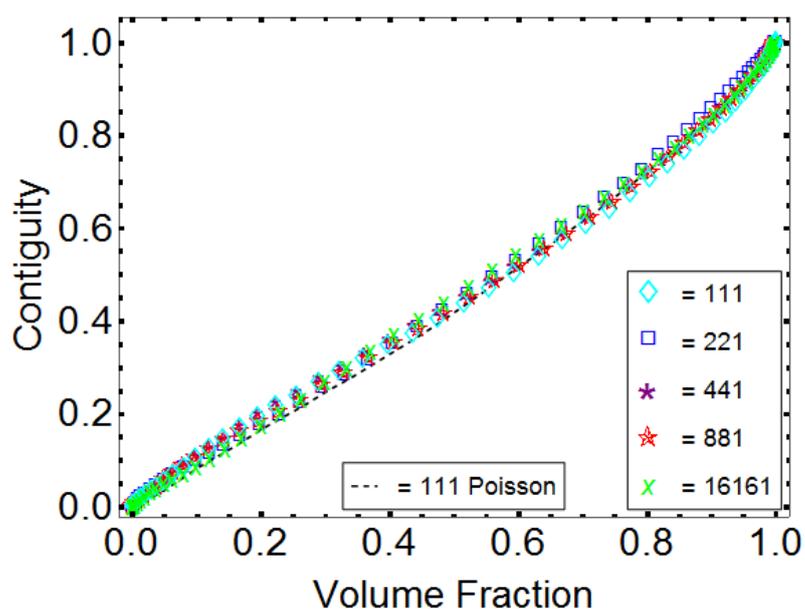


Figura 83 - Contiguidade de elipsoides oblatos em função da fração volumétrica transformada com 250 núcleos. A linha tracejada é a linha teórica para a contiguidade das regiões esféricas nucleado no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Os símbolos correspondem a resultados da simulação computacional nas interfaces das matrizes com elipsoides de diferentes formas.

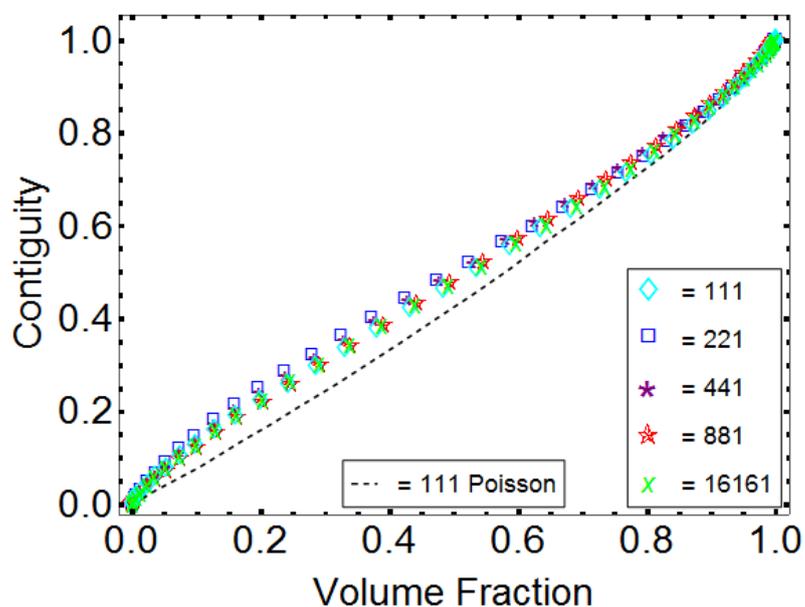


Figura 84 - Contiguidade de elipsoides oblatos em função da fração volumétrica transformada com 707 núcleos. A linha tracejada é a linha teórica para a contiguidade das regiões esféricas nucleado no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Os símbolos correspondem a resultados da simulação computacional nas interfaces das matrizes com elipsoides de diferentes formas.

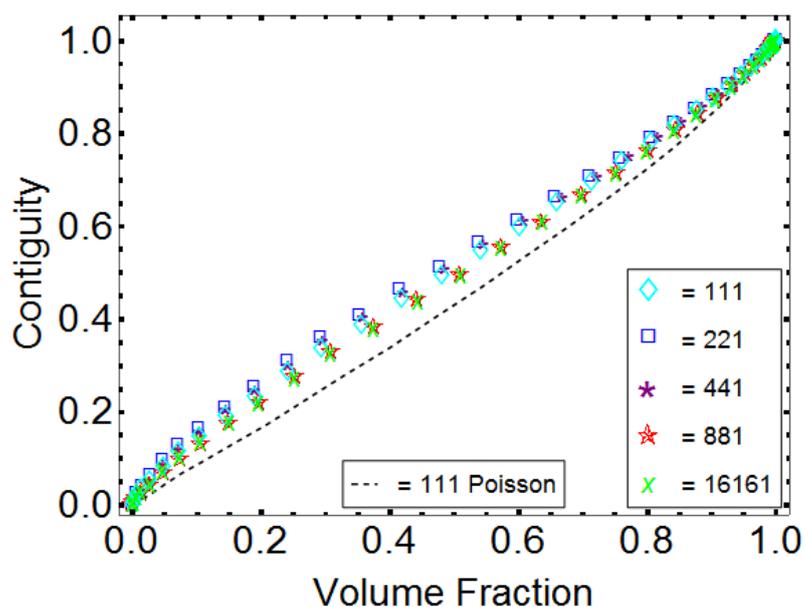


Figura 85 - Contiguidade de elipsoides oblatos em função da fração volumétrica transformada com 1507 núcleos. A linha tracejada é a linha teórica para a contiguidade das regiões esféricas nucleado no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Os símbolos correspondem a resultados da simulação computacional nas interfaces das matrizes com elipsoides de diferentes formas.

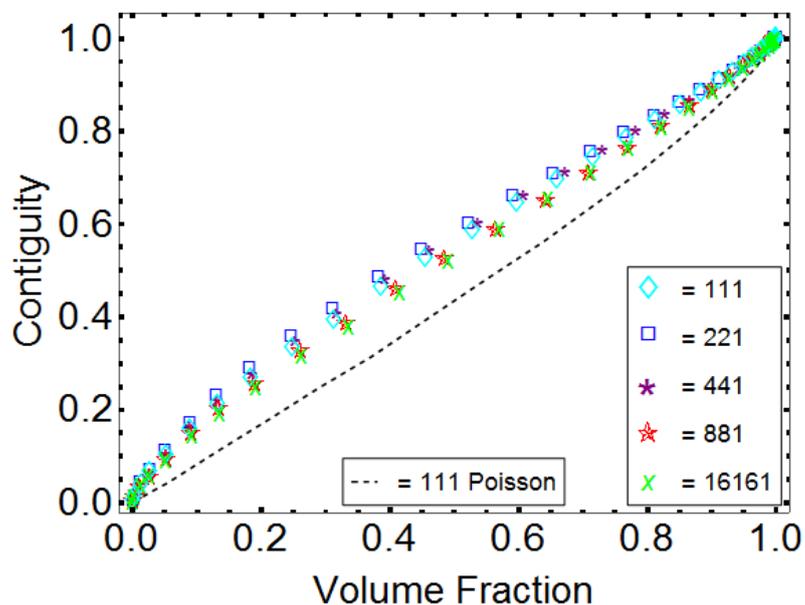


Figura 86 - Contiguidade de elipsoides oblatos em função da fração volumétrica transformada com 3000 núcleos. A linha tracejada é a linha teórica para a contiguidade das regiões esféricas nucleado no espaço de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Os símbolos correspondem a resultados da simulação computacional nas interfaces das matrizes com elipsoides de diferentes formas.

8.3. DISCUSSÃO

Os grãos recristalizados nucleados nas interfaces da matriz inicial são representados por poliedros de Poisson-Voronoi. A escolha desse poliedro é pelo fato dele resultar de um crescimento em formato esférico, com o mesmo tamanho em todas as direções satisfazendo a suposição do formato esféricos dos grãos na teoria de JMAK. Sabe-se que os grãos reais não são exatamente poliedros de Voronoi, devido a isso era esperado um pequeno desvio da curva simulada comparada com Cahn e JMAK. Mas foi possível observar que em todos os casos houve um bom acordo das curvas simuladas com os modelos analíticos.

Nas Figuras 68-74, observou-se um refinamento dos grãos com o aumento de núcleos na matriz. Os grãos obtiveram formato equiaxial como esperado, já que a morfologia dos grãos nas interfaces para todos os casos foi esférica. Após a nucleação nas interfaces não foi possível distinguir a razão de aspecto da matriz inicial utilizada por causa da morfologia dos grãos nas interfaces da matriz.

A cinética de transformação da matriz para o caso com 250 núcleos na matriz, Figuras 75 e 76, apresentaram um resultado distinto dos demais casos. As curvas da simulação computacional corroboraram com o modelo de JMAK. Esse fenômeno pode ser justificado pela baixa quantidade de núcleos utilizada, favorecendo a distribuição aleatória nas interfaces do poliedro, característica base do modelo de JMAK. E quanto maior o número de núcleos, menor é a aleatoriedade dos grãos, devido a diminuição da área interfacial decorrente do maior número de núcleos. Por isso, neste caso as curvas simuladas tendem a corroborar com a curva do modelo de JMAK.

Comparando as curvas simuladas das Figuras 75 e 76 com as Figuras 77 e 78, houve um decréscimo no tempo para transformação. Observou-se que a medida em que houve um aumento na quantidade de núcleos, obteve-se menos espaço para o crescimento dos grãos, desta forma ocorre um encontro mais rápido entre os grãos.

A partir das simulações com 707 núcleos observou-se a perda da característica de aleatoriedade nas curvas simuladas para todos os casos, Figuras 77-82. As Figuras 77-82 mostram excelente concordância entre o modelo de Cahn mostram excelente concordância entre o modelo de Cahn. Este acordo é esperado se a

simulação estiver correta, pois a Equação 6 é exata. A repetição de 50x em cada caso também contribui neste tipo de simulação para garantir que a simulação dê um resultado preciso.

A contiguidade é a medida que quantifica o “impingement” ocorrido pelo contato dos grãos dentro da matriz 3D. As Figuras 83-86 apresentam um gráfico da contiguidade medida ao longo do volume total em função da fração transformada. A Figura 83-86 ilustra a nucleação nas interfaces das matrizes com razão de aspecto: 2:2:1, 4:4:1, 8:8:1 e 16:16:1. A contiguidade com matriz esférica está representada por losangos. A linha tracejada representa a nucleação de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo.

As Figuras 83-86 demonstram que a curva de contiguidade de uma transformação nucleada nas interfaces das matrizes com razão de aspecto: 2:2:1, 4:4:1, 8:8:1 e 16:16:1 encontra-se acima da curva da contiguidade de uma transformação nucleada de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. A contiguidade é considerada um parâmetro confiável para determinar o arranjo de grãos no espaço em relação uns aos outros[43].

Observou-se que ao aumentar a quantidade de grãos nucleados nas interfaces, houve um pequeno distanciamento das curvas simuladas em comparação com a curva da contiguidade de uma transformação nucleada de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo.

De acordo com Vandermeer[43], quando a curva da contiguidade de uma transformação está acima da linha para nucleação homogênea do processo de ponto de Poisson, este indica que os núcleos tendem a se agrupar. Quando os núcleos se formam no contorno de grão de um policristal, eles formam um cluster, e sua transformação subsequente tem uma curva de contiguidade acima dessa de um processo de ponto de Poisson homogêneo. Deste modo, as curvas de contiguidade simuladas obtiveram o comportamento esperado.

8.4. CONCLUSÕES

A simulação computacional e os modelos analíticos foram utilizadas para estudar o efeito da nucleação nos contornos de grãos na matriz com crescimento esférico e elipsoidal. As principais conclusões são:

- A distribuição dos núcleos ocorreu nas interfaces da matriz inicial.
- A cinética de transformação da matriz com crescimento esférico e crescimento elipsoidal com a quantidade de núcleos nas interfaces obtiveram curvas semelhantes de acordo com a quantidade de núcleos na matriz.
- As simulações com 3000 núcleos apresentaram uma microestrutura com grãos bastante refinados.
- As microestruturas das matrizes totalmente transformada para todos os casos apresentaram uma morfologia dos grãos semelhantes, não havendo uma mudança drástica entre as microestruturas.
- As simulações com 250 núcleos apresentaram um bom acordo com a curva do modelo analítico de JMAK.
- As simulações com 707, 1507 e 3000 núcleos apresentaram um bom acordo com a curva do modelo analítico de Cahn.
- Nas Figuras 83-86 foi possível observar a contiguidade em relação à fração volumétrica. Os dados da matriz esférica e todos os elipsoides caem na mesma curva. A curva de contiguidade para nucleação nas interfaces das matrizes com razão de aspecto: 2:2:1, 4:4:1, 8:8:1 e 16:16:1 cai acima da curva de contiguidade para nucleação de acordo com um processo de ponto de Poisson homogêneo. Este comportamento indica que a nucleação nas interfaces da matriz introduziu um efeito de agrupamento dos núcleos.

9. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Simulações computacionais e métodos analíticos foram empregados para o estudo de transformações nucleadas em contornos anisotrópicos, sem possível comparar as simulações com o modelo de JMAK[1-5], Cahn[24] e Rios e Vila[6]. A primeira transformação considerada foi a construção de uma matriz deformada com grãos alongados semelhante a um policristal com microestrutura anisotrópica após ser submetido a um trabalho mecânico. Como segundo passo, considerou o formato dos grãos como elipsoides com uma variação na razão de aspecto para análise do estudo, obtendo resultados referente a generalização do crescimento elipsoidal dos grãos na matriz. A terceira transformação foi a nucleação de elipsoides em planos paralelos, obtendo uma simulação computacional de transformações nucleadas em contornos de grãos que crescem como elipsoides. Por fim, foi considerado a nucleação nas interfaces de uma matriz deformada, nucleando nas interfaces de uma matriz constituída por grãos elipsoidais oblatos, grãos “panqueca”, com diferentes razões de aspecto. A partir dos resultados obtidos nesta tese conclui-se que:

- Obteve-se um modelo computacional para as transformações de fase em uma matriz com grãos elipsoidais. Esse código computacional se mostrou robusto e conseguiu simular com fidelidade diversas situações, inclusive nucleação nas interfaces de uma matriz altamente deformada (matriz com razão de aspecto 16:16:1).

- Simulou-se a situação na qual o policristal foi deformado de tal forma que os grãos estejam alongados. As equações generalizadas, Eq. (16) e Eq. (17), aplica-se à nucleação de elipsoides de acordo com um processo de ponto de Poisson não homogêneo. As equações gerais (16) e (17), conseguiram preservar a forma conveniente da equação para o crescimento esférico.
- A expressão analítica para transformações em que os elipsoides nucleados em planos paralelos aleatórios corroboraram muito bem com a simulação computacional. A cinética de transformação da simulação computacional apresenta excelente concordância com análises das expressões exatas como era esperado. A contiguidade revelou uma tendência de "agrupamento" típico da nucleação em contornos de grão.
- O capítulo 8 unificou as metodologias empregadas nos capítulos anteriores. Foi considerado uma matriz com grãos elipsoidais para posteriormente ser nucleados grãos esféricos nas interfaces desta matriz. Notou-se que houve uma distinção do comportamento da cinética de transformação para o caso com 250 núcleos com os demais casos. Observou uma característica de aleatoriedade da curva simulada, que por isso corroborou com o modelo analítico de JMAK. Os demais casos perderam essa característica devido a quantidade de núcleos, corroborando as curvas com o modelo analítico de Cahn.

10. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

- Aprofundar o estudo da nucleação nas interfaces de elipsoides, capítulo 8, variando a quantidade de núcleos e a forma dos elipsoides (prolatos).
- Com a parceria do Centro de Computação de Ciência de Materiais, Instituto de Pesquisa de Materiais, da Universidade de Tohoku para o uso do supercomputador MASAMUNE-IMR (Super sistema de computação para simulações de Multi-escala avançada do Instituto de Materiais de Pesquisa de Próxima Geração). Em particular, aos professores Yayoi Terada e Tetsuo Mohri pela colaboração através do Programa de pesquisa Tohoku (GIMRT). Será possível dar continuidade aos estudos sobre o crescimento de grãos elipsoidais em matrizes com tamanhos de 500x500x500 e 1000x1000x1000 células cúbicas. Também será possível um aumento considerável na quantidade de grãos nucleados na matriz devido ao poder computacional. Estudar a forma dos elipsoides de acordo com a metodologia descrita em [67]. Para a análise de materiais, uma abordagem paramétrica razoável está intimamente relacionada a uma deformação homogênea. Para o cálculo será considerado primeiro a análise linear[67].
- Estudar a nucleação simultânea nos contornos e no interior dos grãos elipsoidais.

11. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] JOHNSON, W. A. e MEHL, R. F. Reaction Kinetics in Processes of Nucleation and Growth. **Transactions Metallurgical Society, A.I.M.E**, v. 135, p. 416–441, 1939.
- [2] AVRAMI, M. Kinetics of Phase Change. I General Theory. **The Journal of Chemical Physics**, v. 7, n. 12, p. 1103, 1939.
- [3] AVRAMI, M. Kinetics of Phase Change II. Transformation – Time Relations for Random Distribution of Nuclei. **Journal of Chemical Physics**, v. 8, p. 212–224, 1940.
- [4] AVRAMI, M. Granulation, Phase Change, and Microstructure Kinetics of Phase Change. III. **The Journal of Chemical Physics**, v. 9, n. 2, p. 177, 1941.
- [5] KOLMOGOROV, A. N. On the Statistical Theory of Metal Crystallization. **Isvetiia Akademii Nauk, SSSR-Seriia Matematicheskaiia**, v. 1, p. 335–359, 1937.
- [6] RIOS, P. R. e VILLA, E. Transformation kinetics for inhomogeneous nucleation. **Acta Materialia**, v. 57, n. 4, p. 1199–1208, 2009.

- [7] LI, G.C., et al. Comparison of Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) kinetics with a phase field simulation for polycrystalline solidification., **Acta Materialia**. v.55, p. 825-832, 2007.
- [8] HANSEN, N. Cold deformation microstructure, **Mater. Sci. Technol.** v.6, 1990.
- [9] HUMPHREYS, F.J, HATHERLY, M. The Deformed State, **Recryst. Relat. Annealing Phenom.** 2. ed., 2004.
- [10] HUMPHREYS, F.J, HATHERLY, M. Deformation Textures, **Recryst. Relat. Annealing Phenom.** p. 67–89, 2004.
- [11] GORELIK, S. S. Recrystallization in Metals and Alloys. **MIR Publishers Moscow**. 1981.
- [12] SANDIM, H.R.Z. Heterogeneidades de deformação. Textura e relações de orientação. **1° Work. sobre Textura São Paulo EPUSP**. São Paulo:USP, 2003, 19–34p.
- [13] **PADILHA, A. F., SICILIANO Jr., F. Encruamento, Recristalização, Crescimento de Grão e Textura.** São Paulo: ABM, 2005.
- [14] HUMPHREYS, F.J, HATHERLY, M. The structure and energy of grain, **Recryst. Relat. Annealing Phenom.** 91–119, 2004.
- [15] TANAKA, T. Controlled rolling of steel plate and strip, **Int. Met. Rev.** v. 26, 1981.
- [16] HANSEN, N. Deformation microstructures, **Scr. Metall. Mater.** v. 27, p.1447–1452, 1992.

- [17] HUMPHREYS, F.J., HATHERLY, M. The Deformed State, **Recryst. Relat. Annealing Phenom. 2. ed.**, p. 12, 2004.
- [18] MATHIEU, J.P., et al. A new design for equal channel angular extrusion, **J. Mater. Process. Technol.** p. 29–33, 2006.
- [19] SHEPILOV, M.P., BAIK, D.S. Computer simulation of crystallization kinetics for the model with simultaneous nucleation of randomly-oriented ellipsoidal crystals, **J. Non. Cryst. Solids.** p. 141–156, 1994.
- [20] RIBEIRO, T.C.S.R. *Simulação computacional da microestrutura das transformações por nucleação e crescimento*. 2011. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2006.
- [21] VANDERMEER, R.A. MASUMURA, R.A. RATH, B.B. Microstructural paths of shape-preserved nucleation and growth transformations, **Acta Metall. Mater.** v.39, p. 383–389, 1991.
- [22] ALVES, A. L. M., ASSIS, W. L. S., RIOS, P. R. Computer simulation of sequential transformations. *Acta Materialia*, v. 126, p. 451–468, 2017.
- [23] RIOS, P.R., et al. Inhomogeneous poisson point process nucleation: comparison of analytical solution with cellular automata simulation., **Mater. Res.** p. 219–224, 2009.
- [24] CAHN, J. W. The Time Cone Method for Nucleation and Growth Kinetics on a Finite Domain. **Materials Research Society Symposium - Proceedings**, v. 398, p. 425–437, 1996.

- [25] RIOS, P.R., et al. Kinetics of transformations nucleated on random parallel planes: Analytical modelling and computer simulation, **Model. Simul. Mater. Sci. Eng.** v.20, 2012.
- [26] VILLA, E. RIOS, P.R. Transformation kinetics for nucleation on random planes and lines, **Image Anal. Stereol.** p. 153–165, 2011.
- [27] ASSIS, W.L.S. *Modelamento Numérico de Nucleação e Crescimento via Autômato Celular.* 2010. Tese (Doutorado) - Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2010.
- [28] ALVES, A. L. M. *Simulação Computacional de Reações com Nucleação e Crescimento de Fases Simultâneas e Sequenciais pelo Método do Cone Causal.* 2015. 148f. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2015.
- [29] ASSIS, W.L.S. *Investigação do efeito da nucleação, da velocidade de crescimento e da distribuição da energia armazenada na recristalização pelo método do autômato celular em três dimensões.* 2006. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2006.
- [30] DA FONSECA, G.D. *Comparação do modelo analítico com a simulação computacional da nucleação nos contornos de grão.* 2016. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2016.
- [31] FURUKAWA, M., et al. An investigation of the deformation process during equal-channel angular pressing of an aluminum single crystal, **Mater. Sci. Eng.** p. 194–200, 2005.

- [32] SHIN, D.H., et al. Microstructure development during equal-channel angular pressing of titanium, **Acta Mater.** v.51, p. 983–996, 2005.
- [33] OYAMA, T., WATANABE, C., MONZEN, R. Growth kinetics of ellipsoidal ω -precipitates in a Ti–20 wt%Mo alloy under compressive stress, **J. Mater. Sci.** v.51, p. 8880–8887, 2016.
- [34] WEINBERG, M.C., BIRNIE, D.P. Transformation kinetics for randomly oriented anisotropic particles, **J. Non. Cryst. Solids.** p. 161–166, 1995.
- [35] GODIKSEN, R.B., et al. Three-dimensional geometric simulations of random anisotropic growth during transformation phenomena. **Scr. Mater.** v.58, p. 279–282, 2008.
- [36] CHIU SN, M.J., STOYAN, D., KENDALL, W.S. Stochastic geometry and its applications. **Chichester - United Kingdom Wiley.** p. 544, 2013.
- [37] LOKOVIC, K.S., BERGMANN, R.B, Nonequilibrium grain rates, size distribution with generalized growth and nucleation, **J. Mater. Res.** v.28, p. 1407–1412, 2013.
- [38] LOKOVIC, K.S., BERGMANN, R.B. The Grain Size Distribution Rate., in Crystallization Processes With Anisotropic Growth. **MRS Proceedings.** p 1245, 2010.
- [39] CAHN, J. W. The Time Cone Method for Nucleation and Growth Kinetics on a Finite Domain. **Materials Research Society Symposium - Proceedings**, v. 398, p. 398:425, 1995.

- [40] DE SÁ, G.M.S., et al. Generalizing ellipsoidal growth, **Mater. Res.** v.22, 2019
- [41] LYRIO, M.S., et al. Simulação computacional de transformações com nucleação e velocidade não homogêneas. **ABM Proc.**, São Paulo:ABM, 2019.
- [42] DE SÁ, G.M.S., et al. Estudo comparativo do modelo analítico com a simulação computacional da nucleação nas interfaces. **ABM Proc.**, São Paulo:ABM, 2019.
- [43] VANDERMEER, R.A. Microstructural descriptors and the effects of nuclei clustering on recrystallization path kinetics, **Acta Mater.** p.1449–1457, 2005.
- [44] RIOS, P.R., et al. Impingement function for nucleation on non-random sites, **Acta Mater.** v.55, p. 4339–4348, 2007.
- [45] VANDERMEER, R.A., RATH, B.B. Modeling recrystallization kinetics in a deformed iron single crystal, **Metall. Trans. A.** v.20, p. 391–401, 1989.
- [46] VILLA, E., RIOS, P.R. Transformation kinetics for nucleus clusters, **Acta Mater.** v.57, p. 3714–3724, 2009.
- [47] RIOS, P.R. Transformation kinetics for surface and bulk nucleation, **Acta Mater.** p. 2752–68, 2010.
- [48] DA FONSECA, G. D. et al. Computer simulation of site saturation and constant nucleation rate transformations on a network of Kelvin polyhedra, **Journal of Materials Research and Technology**, v.8, p. 4534–4539, 2019.
- [49] BARMAK, K. A. Commentary on: “Reaction Kinetics in Processes of Nucleation and Growth”. **Metallurgical and Materials Transactions B-process**

Metallurgy and Materials Processing Science. p. 2711–2, 2010.

- [50] JÄGLE, E.A., MITTEMEIJER, E.J. The kinetics of grain-boundary nucleated phase transformations: simulations and modelling. **Acta Mater.** v.59, p. 5775-86, 2011.
- [51] VANDERMEER, R.A., MASUMURA, R.A. Microstructural paths of shape-preserved nucleation and growth transformations. **Acta Met. Mater.** v.39, p. 383–9, 1991.
- [52] BRADLEY, J.R., AARONSON, H.I. The stereology of grain boundary allotriomorphs. **Metall Trans. A.** v.8, p. 317-22, 1977.
- [53] BRADLEY, J.R., RIGSBEE, J.M. Growth kinetics of Metall, grain boundary ferrite allotriomorphs in Fe-C alloys. **Trans, A, Phys Met. Mater Sci.** p. 323–33, 1977.
- [54] BRADLEY, J.R., AARONSON, H.I. Growth kinetics of grain boundary ferrite allotriomorphs in Fe-C-X alloys. **Metall Trans. A.** v.12, p. 1729–1741, 1981.
- [55] ENOMOTO, M., AARONSON, H.I. Nucleation kinetics of proeutectoid Metall, ferrite at austenite grain boundaries in Fe-C-X alloys. **Trans, A, Phys Met. Mater Sci.** p. 1385–97, 1986.
- [56] ENOMOTO, M., TANAKA, T., AARONSON, H.I. Nucleation kinetics of Fe-C-Mn-X₂, proeutectoid ferrite at austenite grain boundaries in alloys, **Met. Trans. A.** p. 561–80, 1995.
- [57] OBARA. T., et al. Proceedings of an Transformations., international conference on solid-solid phase. **Metall. Soc. AIME.** p. 1105–09, 1982.

- [58] VILLA, E., RIOS, P.R. On volume and surface densities of dynamical germ-grain models with ellipsoidal growth: a rigorous approach with applications to Materials Science. **Stoch. Anal. Appl.** v.38, p. 1134–1155, 2020.
- [59] DE SÁ, G.M.S., et al. Analytical modeling and computer simulation of the transformation of ellipsoids nucleated on random parallel planes. **Mater. Res.** v.23, 2020.
- [60] VENTURA, H., et al. Influence of Microstructure, an exclusion radius around each nucleus on the and transformation kinetics. **Materialia.** p. 167–75, 2018.
- [61] VENTURA, H., et al. Computer simulation in 3D of a phase transformation by simple sequential inhibition process. **J. Mater. Res. Technol.** p. 152–61, 2020.
- [62] RIOS, P.R., et al. Analytical expression for the evolution of interfacial area density between transformed grains during nucleation and growth transformations, **Scr. Mater.** v.54, p. 1509–1513, 2006.
- [63] SALAZAR, T.C., ASSIS, W.L.S., RIOS, P.R. Simulation of recrystallization in iron single crystals. **Mater Res.** p. 109–15, 2008.
- [64] DA FONSECA, G. D. e colab. Microstructural descriptors to characterize computer simulated microstructures generated by nucleation on a Kelvin polyhedra network. **Journal of Materials Research and Technology.** v. 7, n. 3, p. 337–341, 2018.
- [65] HUMPHREYS, F.J., HATHERLY, M. The Structure and Energy of Grain Boundaries. **Recryst. Relat. Annealing Phenom.** p. 91–119, 2004

- [66] SONG, G., RETTENMAYR, X., Liu, M. 3D simulation study of inhomogeneous In, microstructure and its evolution (advantages of visual simulation technique stereological analysis). **Image anal Stereol.** p. 163–169, 2003.
- [67] JOACHIM, O., MÜCKLICH, F. **Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science.** 2. ed. New York: LTD, 2000.

12. APÊNDICES

12.1. TRABALHOS PUBLICADOS DURANTE O DESENVOLVIMENTO DESTA TESE

12.1.1. Artigos completos publicados em periódicos

1. LYRIO, MARIANA SIZENANDO; **DE SÁ, GABRIELLA MARIA SILVEIRA**; VENTURA, Harison da Silva; ASSIS, WESLLEY LUIZ DA SILVA; VILLA, ELENA; RIOS, PAULO RANGEL. Transformations with inhomogeneous nucleation and growth velocity. **Journal of Materials Research and Technology-JMR&T**, v. 9, p. 9868-9881, 2020.
2. **SÁ, GABRIELLA MARIA SILVEIRA DE**; VENTURA, Harison da Silva; ASSIS, WESLLEY LUIZ DA SILVA; VILLA, ELENA; RIOS, PAULO RANGEL. Analytical Modeling and Computer Simulation of the Transformation of Ellipsoids Nucleated on Random Parallel Planes. **MATERIALS RESEARCH**, v. 23, p. 1, 2020.
3. LYRIO, MARIANA SIZENANDO; ALVES, ANDRÉ LUIZ MORAES; **SÁ, GABRIELLA MARIA SILVEIRA DE**; VENTURA, Harison da Silva; ASSIS, WESLLEY LUIZ DA SILVA; RIOS, PAULO RANGEL. Comparison of transformations with inhomogeneous nucleation and transformations with inhomogeneous growth velocity. **Journal of Materials Research and Technology-JMR&T**, p. 4682-4686, 2019.
4. VENTURA, Harison da Silva; **SÁ, GABRIELLA MARIA SILVEIRA DE**; DUARTE, ALINE CRISTINE LEMOS; ASSIS, WESLLEY LUIZ DA SILVA;

RIOS, PAULO RANGEL. Original Article Computer simulation in 3D of a phase transformation nucleated by simple sequential inhibition process. **Journal of Materials Research and Technology-JMR&T**, p. 152-161, 2019.

5. **SÁ, GABRIELLA MARIA SILVEIRA DE**; LYRIO, MARIANA SIZENANDO; ALVES, ANDRÉ LUIZ MORAES; VENTURA, Harison da Silva; ASSIS, WESLLEY LUIZ DA SILVA; VILLA, ELENA; RIOS, PAULO RANGEL. Generalizing Ellipsoidal Growth. **MATERIALS RESEARCH**, v. 22, p. e20190235, 2019.

12.1.2. Trabalhos completos publicados em anais de congressos

1. SANTOS, A. G. C.; VENTURA, H. S.; LYRIO, MARIANA SIZENANDO; MOREIRA, F. N.; **SÁ, GABRIELLA MARIA SILVEIRA DE**; ASSIS, WESLLEY L.S. Modelamento computacional de uma matriz 3D de aço inoxidável duplex e seu limite de resistência a tração em função da evolução da fase sigma. In: **74º Congresso Anual da ABM**, 2019, São Paulo. ABM Proceedings, 2019.
2. **SA, G. M. S.**; VENTURA, H. S.; LYRIO, M. S.; SANTOS, A. G. C.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Estudo comparativo do modelo analítico com a simulação computacional da nucleação nas interfaces. In: **74º Congresso Anual da ABM**, 2019, São Paulo. ABM Proceedings, 2019.
3. LYRIO, M. S.; VENTURA, H. S.; **SÁ, GABRIELLA MARIA SILVEIRA DE**; ASSIS, W. L. S.; RIOS, PAULO R. Simulação computacional de transformações com nucleação e velocidade não homogêneas. In: **74º Congresso Anual da ABM**, 2019, São Paulo. ABM Proceedings, 2019.
4. VENTURA, Harison da Silva; DUARTE, ALINE CRISTINE LEMOS; ALVES, ANDRÉ LUIZ MORAES; FONSECA, GUILHERME DIAS DA; **SÁ, GABRIELLA MARIA SILVEIRA DE**; SIQUEIRA, FELIPE DA SILVA; ASSIS, WESLLEY LUIZ DA SILVA; RIOS, PAULO RANGEL. Efeito da densidade de núcleos na microestrutura e na cinética de transformação de fase com zona de exclusão em 2D. In: **73º Congresso Anual da ABM**, 2018, São Paulo. ABM Proceedings. São Paulo: Editora Blucher, 2018. p. 2628.
5. **SA, G. M. S.**; ALVES, ANDRÉ L.M.; FONSECA, G. D.; VENTURA, H. S.; SIQUEIRA, F. S.; SANTOS, J. M.; GARCIA, L. G. C.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, PAULO R. Comparação entre os efeitos da nucleação não homogênea e da velocidade não homogênea via cone causal. In: **73º Congresso Anual da ABM**, 2018, São Paulo. ABM Proceedings, 2018.

12.1.3. Resumos publicados em anais de congressos

1. FONSECA, G. D.; ALVES, A. L. M.; TOLEDO, P. V. V.; SIQUEIRA, F. S.; LYRIO, M. S.; **SÁ, G. M. S.**; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Comparação do modelo analítico de JMAK com a simulação da taxa constante de nucleação em uma matriz poliédrica. In: **23º Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais**, Foz do Iguaçu, 2018.
2. **SÁ, G. M. S.**; VENTURA, H. S.; SIQUEIRA, F. S.; FONSECA, G. D.; ALVES, A. L. M.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Simulação computacional de nucleação em planos paralelos. In: **23º Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais**, Foz do Iguaçu, 2018.

12.1.3.1. Resumos expandidos publicados em anais de congressos

1. **SÁ, G. M. S.**; SANTOS, D. G. S.; ASSIS, W. L. S.; RIOS, P. R. Estudo da simulação computacional da nucleação nas interfaces. In: **II Simpósio de Engenharia Metalúrgica e de Materiais Sul Fluminense**, 2020, Volta Redonda, 2020.