



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

Dissertação de Mestrado

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE TRANSFORMAÇÕES SIMULTÂNEAS NOS VÉRTICES E NAS FACES DOS GRÃOS DE UMA TESSELAÇÃO DE POISSON-VORONOI

ALUNO: DANIEL GOMES DE
SOUZA DOS SANTOS

ORIENTADOR: PROF. Ph.D.
PAULO RANGEL RIOS

COORIENTADOR: PROF. D.Sc.
WESLEY LUIZ DA SILVA
ASSIS

Volta Redonda
2022

DANIEL GOMES DE SOUZA DOS SANTOS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica, da Universidade Federal Fluminense, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Metalúrgica.

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

**SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE TRANSFORMAÇÕES
SIMULTÂNEAS NOS VÉRTICES E NAS FACES DOS
GRÃOS DE UMA TESSELAÇÃO DE POISSON-VORONOI**

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

Coorientador: **Prof. D.Sc. Wesley Luiz da Silva Assis**

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

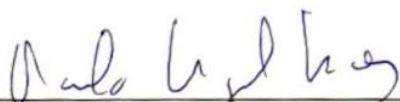
Volta Redonda
2022

DANIEL GOMES DE SOUZA DOS SANTOS

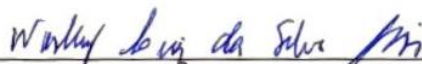
**SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE TRANSFORMAÇÕES
SIMULTÂNEAS NOS VÉRTICES E NAS FACES DOS
GRÃOS DE UMA TESSELAÇÃO DE POISSON-VORONOI**

Aprovado em 25 de agosto de 2022.

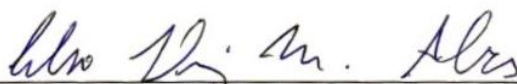
BANCA EXAMINADORA



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



Prof. D.Sc. Wesley Luiz da Silva Assis - **Coorientador**
UFF – Universidade Federal Fluminense



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



Prof. D.Sc. Bruno Amaral Pereira
Bruno A Pereira Consultoria

Ficha catalográfica automática - SDC/BEM
Gerada com informações fornecidas pelo autor

S237s Santos, Daniel Gomes de Souza dos
SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE TRANSFORMAÇÕES SIMULTÂNEAS NOS
VÉRTICES E NAS FACES DOS GRÃOS DE UMA TESSELAÇÃO DE POISSON-
VORONOI / Daniel Gomes de Souza dos Santos ; Paulo Rangel
Rios, orientador ; Wesley Luiz da Silva Assis, coorientador.
Volta Redonda, 2022.
125 f. : il.

Dissertação (mestrado)-Universidade Federal Fluminense,
Volta Redonda, 2022.

DOI: <http://dx.doi.org/10.22409/PPGEM.2022.m.15546520736>

1. Simulação por Computador. 2. Transição de Fase. 3.
Modelamento Matemático. 4. Produção intelectual. I. Rios,
Paulo Rangel, orientador. II. Assis, Wesley Luiz da Silva,
coorientador. III. Universidade Federal Fluminense. Escola de
Engenharia Industrial e Metalúrgica de Volta Redonda. IV.
Titulo.

CDD -

Aos meus familiares e aos amigos que me
acompanharam neste grande desafio.

AGRADECIMENTOS

Agradeço acima de tudo a Deus, pela vida e por ter me capacitado a chegar até aqui e me orientado em todos os momentos de minha vida.

Aos meus pais e meus irmãos, meus primeiros professores, aqueles que me ensinaram a ser quem eu sou e a sempre buscar dar o melhor de mim, independentemente das condições em que estivesse, aqueles que sempre fizeram de tudo para que eu tivesse as melhores condições para me dedicar aos estudos. A vocês, palavras não são suficientes para expressar essa gratidão.

A todo o povo brasileiro pagador de impostos, por ter contribuído com minha formação acadêmica.

À CAPES, pela concessão da bolsa de Mestrado.

Agradeço ao professor Paulo Rangel Rios, pela recepção em seu grupo de pesquisa, pela orientação e por ter compartilhado tantos conhecimentos comigo. Especialmente, por toda a compreensão e incentivo para conclusão desta dissertação, demonstrando ser um amigo, e muito mais do que um orientador acadêmico, para seus alunos.

Ao professor Wesley Luiz da Silva Assis, por ter me orientado antes mesmo de iniciar o mestrado, ao recomendar que eu me inscrevesse no processo seletivo, e por ter me auxiliado a dar continuidade à dissertação no papel de coorientador.

Aos colegas do Núcleo de Modelamento Microestrutural (NMM), pelo apoio, companheirismo e suporte oferecidos e pelo conhecimento compartilhado.

Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica (PPGEM), pelo conhecimento transmitido pelo corpo docente e pela excelente organização do colegiado, garantindo um aprendizado de excelência.

Aos professores, funcionários e colegas da Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda da Universidade Federal Fluminense (UFF-EEIMVR).

Agradeço, de coração, aos meus grandes amigos Caio Costa Abrantes Ferreira, que sempre se mostrou disposto a me ajudar, foi um grande auxiliador no desenvolvimento desta dissertação e se tornou um irmão durante este período, e Yasmim Rocha Gonçalves, por me acompanhar e apoiar nos momentos mais difíceis desta trajetória.

*“Whenever more than one type of site is active,
the impingement problem is considerably more
complicated.”*

(John W. Cahn)

RESUMO

As transformações de fase no estado sólido desempenham um papel essencial em Metalurgia e Materiais. A compreensão deste conceito permite o desenvolvimento de novos materiais e o aperfeiçoamento dos materiais existentes. A maioria das transformações no estado sólido se dá em duas etapas: a nucleação e o crescimento. A nucleação em um material policristalino pode iniciar em sítios aleatoriamente distribuídos no espaço, mas ocorre preferencialmente, em 3D, nas faces, arestas e vértices do policristal. A nucleação das transformações nestes locais é competitiva e pode ocorrer simultaneamente em todos os sítios. Muitos estudos de transformações de fase por nucleação e crescimento consideram a formação de apenas uma fase, entretanto, duas ou mais transformações podem ocorrer simultaneamente ou sequencialmente, casos que são geralmente observados nos materiais. Em 2011, Rios e Villa desenvolveram um método analítico para modelar situações em que mais de uma transformação ocorre simultaneamente ou sequencialmente. O modelamento computacional permite variar grandezas difíceis de serem controladas experimentalmente. Neste trabalho, foram realizadas simulações computacionais de transformações simultâneas, em 3D, nucleadas nos vértices e faces de um policristal, bem como em sítios aleatórios no espaço distribuídos segundo um processo de ponto de Poisson. A representação do policristal é feita por uma tesselação de Poisson-Voronoi gerada através do método do Cone Causal. As transformações simuladas também tiveram seu crescimento modelado pelo método do cone causal. Os resultados obtidos apresentaram boa concordância com os modelos analíticos existentes para as condições consideradas. Corroborando com trabalhos anteriores, o modelo da cinética formal apresentou excelente concordância com as simulações nucleadas em sítios aleatórios da matriz. Foi observado que as reações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi podem ser descritas satisfatoriamente pela equação de Cahn. As reações nucleadas nos vértices da tesselação de Poisson-Voronoi necessitaram ser ajustadas matematicamente, pois não apresentaram boa concordância com os modelos analíticos existentes. O princípio da superposição, utilizado por Rios e Villa, apresentou robustez no modelamento da transformação total das reações simultâneas para os casos de nucleação em sítios aleatórios e faces e de nucleação em vértices e faces. Em todos os casos simulados, a análise da contiguidade demonstrou grande relevância na interpretação dos resultados de cinética das reações.

Palavras-chave: Transformações de Fase, Poisson-Voronoi, Reações Simultâneas, Interfaces.

ABSTRACT

Solid-state phase transformations play an essential role in Metallurgy and Materials. Understanding this concept allows the development of new materials and the improvement of existing materials. Most solid-state transformations occur in two stages: nucleation and growth. Nucleation in a polycrystalline material can start at sites randomly distributed in space, but it occurs favorably, in 3D, on the faces, edges and vertices of the polycrystal. The nucleation of transformations at these sites is competitive and can occur simultaneously at all sites. Many studies of phase transformations by nucleation and growth consider the formation of only one phase, however, two or more transformations can occur simultaneously or sequentially, cases that are generally observed in materials. In 2011, Rios and Villa developed an analytical method to model situations in which more than one transformation occurs simultaneously or sequentially. Computational modeling makes it possible to vary quantities that are difficult to control experimentally. In this work, computer simulations of simultaneous 3D transformations were performed, nucleated at the vertices, and faces of a polycrystal, as well as at random sites in space distributed according to a Poisson point process. The representation of the polycrystal is made by a Poisson-Voronoi tessellation generated through the Causal Cone method. The simulated transformations also had their growth modeled by the causal cone method. The results obtained showed good agreement with the existing analytical models for the conditions considered. Corroborating with previous works, the formal kinetics model showed excellent agreement with simulations nucleated at random sites in the matrix. It was observed that the nucleated reactions on the faces of a Poisson-Voronoi tessellation can be described satisfactorily by the Cahn equation. The nucleated reactions at the vertices of Poisson-Voronoi tessellation needed to be mathematically adjusted, as they did not show good agreement with the existing analytical models. The superposition principle, used by Rios and Villa, showed strength in the modeling of the total transformation of the simultaneous reactions for the cases of nucleation in random sites and faces and of nucleation in vertices and faces. In all simulated cases, the contiguity analysis showed great relevance in the interpretation of reaction kinetics results.

Key words: Phase Transformations, Poisson-Voronoi, Simultaneous Reactions, Interfaces.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Transformação da austenita num agregado ferrita-M23C6 numa liga Fe-10%pesoCr-0,2%pesoC segundo Rios e Honeycombe: (a) Agregado nucleado nos vértices de um grão crescendo de forma esférica a 775°C; (b) Agregado nucleado nas faces dos grãos formando uma rede contínua a 700°C.....	22
Figura 2 – Representação do <i>impingement</i> durante uma simulação em três dimensões. As linhas em vermelho destacam os locais em que o <i>impingement</i> ocorre em um estágio intermediário da reação.....	26
Figura 3 – Representação esquemática da superposição de duas reações independentes.	30
Figura 4 – Representação esquemática do <i>impingement</i> e da ausência de uma superposição entre as duas reações independentes.....	32
Figura 5 – Representação de núcleos sorteados segundo um processo de ponto de Poisson (a) homogêneo e (b) não-homogêneo.	34
Figura 6 - Contiguidade versus Fração Volumétrica para nucleações periódica, aleatória e em cluster.	35
Figura 7 – Representação de uma nucleação em cluster.	36
Figura 8 – Valores de Contiguidade versus Fração Volumétrica obtidos para diferentes processos de nucleação em cluster e para um processo de nucleação uniformemente aleatório, representando o modelo da cinética formal de JMAK.	36
Figura 9 – Representação de uma nucleação periódica.....	37
Figura 10 – Contiguidade versus Fração Volumétrica de reações nucleadas por processo de ponto de Poisson, distribuição periódica e sequencialmente.....	37
Figura 11 – Vários estágios do crescimento para formar uma tesselação de Voronoi planar, com os pontos geradores e os contornos sendo representados.....	39
Figura 12 – Função de correlação de pares (<i>Pair Correlation Function</i>) do processo de ponto dos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi (a) bidimensional; (b) tridimensional. ...	40
Figura 13 – Fluxograma esquemático do código computacional utilizado nas simulações.....	43
Figura 14 – Representação do método do cone causal em 2D: (a) $t = 1$, (b) $t = 2$, (c) $t = 3$, onde há a transformação da célula que é o centro da circunferência.	46
Figura 15 – Representação das condições de contorno em: (a) faces, (b) arestas, (c) vértices.....	47
Figura 16 – Exemplo de uma tesselação de Poisson-Voronoi utilizada como matriz inicial das simulações. Cada grão é representado por uma cor.....	48
Figura 17 – Exemplo de uma Matriz 5 x 5 contendo dois grãos diferentes.	49

Figura 18 – Representação da matriz base com o contorno de grão visível. (a) Fase não transformada em vermelho; contorno de grão em azul. (b) Grãos em diversas cores; contorno de grão em azul, entre os grãos.	50
Figura 19 – Representação das arestas de uma rede de poliedros de Voronoi, obtida por um método numérico, através da biblioteca Vor++.	51
Figura 20 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas em sítios aleatórios de uma matriz, para $N = 200$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.	55
Figura 21 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas em sítios aleatórios da matriz, para $N = 197,64$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	56
Figura 22 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas em sítios aleatórios de uma matriz, para $N = 394$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.	57
Figura 23 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas em sítios aleatórios da matriz, para $N = 406,84$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	58
Figura 24 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas em sítios aleatórios de uma matriz, para $N=582$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.	59
Figura 25 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas em sítios aleatórios da matriz, para $N = 600$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	60
Figura 26 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas em sítios aleatórios de uma matriz, para $N=1085$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.	61
Figura 27 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas em sítios aleatórios da matriz, para $N = 960,5$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	62
Figura 28 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 269$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.	64

Figura 29 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 181,72$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	65
Figura 30 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 424$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.....	66
Figura 31 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 329,58$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	67
Figura 32 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 622$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.....	68
Figura 33 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 661,22$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	69
Figura 34 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 1215$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.....	70
Figura 35 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 1303,54$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	71
Figura 36 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 3368$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.....	72
Figura 37 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 3241,40$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	73
Figura 38 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 6473$. (a) Seção 2D do plano	

médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.....	74
Figura 39 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 6438,54$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	75
Figura 40 – Contiguidade versus VV das reações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi para diferentes intensidades do processo de ponto de Poisson homogêneo. 77	
Figura 41 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 50$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.	78
Figura 42 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 48,22$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	79
Figura 43 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 196$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.	80
Figura 44 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 196,08$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	81
Figura 45 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 396$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.	82
Figura 46 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 386,04$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	83
Figura 47 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 513$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.	84

Figura 48 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 576,24$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	85
Figura 49 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 1115$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.	86
Figura 50 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 974,20$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	87
Figura 51 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $NSA = 115$ e $NF = 115$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.	91
Figura 52 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $NSA = 188,76$ e $NF = 188,76$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	92
Figura 53 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $NSA = 243$ e $NF = 486$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.	93
Figura 54 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $NSA = 201,06$ e $NF = 402,12$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	94
Figura 55 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $NSA = 210$ e $NF = 630$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.	95
Figura 56 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $NSA = 188,98$	

e $NF = 566,94$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	96
Figura 57 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $NSA = 263$ e $NF = 1315$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.	97
Figura 58 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $NSA = 186,48$ e $NF = 932,40$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	98
Figura 59 – Representação gráfica da microestrutura demonstrando os contornos e as morfologias características de cada fase. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 100% de transformação em 3D.	99
Figura 60 – Gráfico de Contiguidade versus VV para os diferentes coeficientes de nucleação da reação: (a) nucleada nas faces. (b) nucleada em sítios aleatórios da matriz. (c) total.	101
Figura 61 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $NX = 133$ e $NF = 133$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.	103
Figura 62 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $NX = 196,86$ e $NF = 196,86$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	104
Figura 63 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $NX = 175$ e $NF = 350$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.	105
Figura 64 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $NX = 183,34$ e $NF = 366,68$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	106
Figura 65 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $NX = 175$ e	

$NF = 525$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.....	107
Figura 66 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $NX = 193,26$ e $NF = 578,78$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	108
Figura 67 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $NX = 164$ e $NF = 825$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.....	109
Figura 68 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $NX = 192,36$ e $NF = 961,80$. (a) VV versus Tempo. (b) SV versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus VV	110
Figura 69 – Representação gráfica da microestrutura demonstrando os contornos e as morfologias características de cada fase. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 100% de transformação em 3D.....	111
Figura 70 – Fração volumétrica transformada da reação total (linha contínua), da reação da fase nucleada nas faces (linha tracejada) e da reação nucleada nos vértices (linha pontilhada) para o caso em que $x = 1$, utilizando (a) a equação de Cahn para a reação nucleada nas faces e ajuste para a equação nucleada nos vértices. (b) ajuste para ambas as reações.	113
Figura 71 – Fração volumétrica transformada da reação total (linha contínua), da reação da fase nucleada nas faces (linha tracejada) e da reação nucleada nos vértices (linha pontilhada) para o caso em que $x = 5$, utilizando (a) a equação de Cahn para a reação nucleada nas faces e ajuste para a equação nucleada nos vértices. (b) ajuste para ambas as reações.	113
Figura 72 – Gráfico de Contiguidade versus VV para os diferentes coeficientes de nucleação da reação: (a) nucleada nas faces. (b) nucleada nos vértices. (c) total.	115

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Parâmetros da simulação utilizados nas simulações individuais.....	52
Tabela 2 – Parâmetros da simulação utilizados nas simulações individuais simultâneas.....	52
Tabela 3 – Parâmetros cinéticos dos ajustes realizados para as simulações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi.....	76
Tabela 4 – Parâmetros cinéticos dos ajustes realizados para as simulações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi.....	114

LISTA DE ABREVIATURAS, SIGLAS E SÍMBOLOS

JMAK	Johnson, Mehl, Avrami e Kolmogorov
CC	Cone Causal
3D	Três dimensões
2D	Duas dimensões
V_V	Fração volumétrica
t	Tempo
V_E	Volume estendido
k	Constante de forma das partículas na equação de Avrami
n	Constante de Avrami
G	Velocidade de crescimento
N_V	Número de núcleos por unidade de volume
S_V	Área interfacial por unidade de volume
S_V^{planos}	Área por unidade de volume dos planos aleatórios
λ_S	Número de núcleos nos planos por unidade de área
θ^t	Região transformada
\cup	União
\cap	Interseção
\mathbb{P}	Probabilidade
\prod	Produtório
V_V^*	Fração volumétrica experimental
S_V^*	Área interfacial por unidade de volume experimental
\mathbb{R}^3	Conjunto dos números reais em três dimensões
Y	Processo de ponto de Poisson
A_i	Subconjuntos disjuntos e compactos em \mathbb{R}^3
X_i	Localização dos pontos
\mathcal{B}	Conjunto de Borel
Λ	Intensidade de N
λ	Função de intensidade do processo de Poisson
C_β	Contiguidade da fase β
$S_V^{\alpha\beta}$	Fração de área interfacial $\alpha - \beta$ por unidade de volume
$S_V^{\beta\beta}$	Fração de área interfacial $\beta - \beta$ por unidade de volume

mm	Milímetro
R	Raio
x	Coefficiente de nucleação
N_i	Quantidade de núcleos de uma fase produto
Q_v	Quantidade de vértices da matriz inicial
C	Fator de correção
N	Número de Núcleos
SA	Sítios Aleatórios – Pontos distribuídos segundo um processo de ponto de Poisson
N_{SA}	Número de núcleos sorteados em sítios aleatórios
N_X	Número de núcleos posicionados nos vértices de uma tesselação
N_F	Número de núcleos sorteados nas faces de uma tesselação

SUMÁRIO

1. Introdução	21
2. Objetivos.....	24
2.1 Objetivo Geral	24
2.2 Objetivos Específicos	24
3. Revisão Bibliográfica	25
3.1 Transformações de Fase	25
3.2 Modelo da Cinética Formal	25
3.3 Generalizações do Modelo de JMAK.....	28
3.3.1 Nucleação nos Contornos de Grão	28
3.3.2 Transformações Simultâneas	29
3.4 Processo de Ponto de Poisson.....	32
3.4.1 Contiguidade.....	34
3.4.2 Nucleação em Cluster	35
3.4.3 Nucleação Periódica	37
3.5 Formas de Representação do Grão	38
3.5.1 Características de uma Tesselação de Poisson-Voronoi.....	38
3.6 Descritores Microestruturais.....	41
3.6.1 Caminho Microestrutural.....	41
4. Materiais e Métodos.....	42
4.1 Modelo Computacional	43
4.1.1 Método do Cone Causal.....	45
4.1.2 Condição de Contorno	47
4.1.3 Tesselação de Poisson-Voronoi.....	47
4.1.4 Identificação de Contornos	48
4.1.5 Definição de Parâmetros de Simulação	51
4.1.6 Fator de Correção para S_V Simulado	52

5. Resultados e Discussão	53
5.1 Reações individuais nucleadas em sítios aleatórios de um policristal.....	54
5.1.1 Reações Nucleadas em Sítios Aleatórios com Coeficiente de Nucleação $x = 1$..	54
5.1.2 Reações Nucleadas em Sítios Aleatórios com Coeficiente de Nucleação $x = 2$..	57
5.1.3 Reações Nucleadas em Sítios Aleatórios com Coeficiente de Nucleação $x = 3$..	59
5.1.4 Reações Nucleadas em Sítios Aleatórios com Coeficiente de Nucleação $x = 5$..	61
5.1.5 Estudo das Simulações Individuais Nucleadas em Sítios Aleatórios de uma Matriz	
62	
5.2 Reações individuais nucleadas nos vértices de um policristal.....	63
5.2.1 Reações Nucleadas nos Vértices de uma Matriz Inicial contendo 30 grãos.....	64
5.2.2 Reações Nucleadas nos Vértices de uma Matriz Inicial contendo 50 grãos.....	66
5.2.3 Reações Nucleadas nos Vértices de uma Matriz Inicial contendo 100 grãos.....	68
5.2.4 Reações Nucleadas nos Vértices de uma Matriz Inicial contendo 200 grãos.....	70
5.2.5 Reações Nucleadas nos Vértices de uma Matriz Inicial contendo 500 grãos.....	72
5.2.6 Reações Nucleadas nos Vértices de uma Matriz Inicial contendo 1000 grãos.....	74
5.2.7 Estudo das Simulações Individuais Nucleadas nos Vértices de um Policristal.....	75
5.3 Reações individuais nucleadas nas faces de um policristal	77
5.3.1 Reações com Coeficiente de Nucleação $x = 1/4$	78
5.3.2 Reações com Coeficiente de Nucleação $x = 1$	80
5.3.3 Reações com Coeficiente de Nucleação $x = 2$	82
5.3.4 Reações com Coeficiente de Nucleação $x = 3$	84
5.3.5 Reações com Coeficiente de Nucleação $x = 5$	86
5.3.6 Estudo das Simulações Individuais Nucleadas nas Faces de um Policristal	87
5.4 Reações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de um policristal	90
5.4.1 Reações com Coeficiente de Nucleação $x = 1$ nas Faces.....	91
5.4.2 Reações com Coeficiente de Nucleação $x = 2$ nas Faces.....	93
5.4.3 Reações com Coeficiente de Nucleação $x = 3$ nas Faces.....	95

5.4.4	Reações com Coeficiente de Nucleação $x = 5$ nas Faces.....	97
5.4.5	Estudo das Simulações Simultâneas Nucleadas em Sítios Aleatórios e nas Faces de um Policristal.....	99
5.5	Reações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de um policristal	102
5.5.1	Reações com Coeficiente de Nucleação $x = 1$ nas Faces.....	102
5.5.2	Reações com Coeficiente de Nucleação $x = 2$ nas Faces.....	105
5.5.3	Reações com Coeficiente de Nucleação $x = 3$ nas Faces.....	107
5.5.4	Reações com Coeficiente de Nucleação $x = 5$ nas Faces.....	109
5.5.5	Estudo das Simulações Simultâneas Nucleadas nos Vértices e nas Faces de um Policristal.....	111
6.	Conclusões	116
7.	Sugestões para Trabalhos Futuros	117
8.	Referências Bibliográficas	118

1. INTRODUÇÃO

O estudo das transformações de fase é essencial no campo de metalurgia e materiais. Transformações de fase podem ser observadas desde os materiais mais simples aos mais complexos, mostrando-se fundamental para o desenvolvimento de novos materiais e aperfeiçoamento dos materiais já conhecidos. Sabe-se que as propriedades de um material são diretamente influenciadas por sua microestrutura, portanto, o conhecimento dos mecanismos de transformação de fase permite um melhor controle microestrutural e, conseqüentemente, das propriedades finais do material. A recristalização, apesar de não ser uma transformação de fase propriamente dita, em geral é tratada da mesma forma que as transformações de fase, uma vez que seu mecanismo é bastante semelhante ao das transformações por nucleação e crescimento [1].

Nas transformações de nucleação e crescimento, a nucleação se caracteriza pelo surgimento de novas regiões, isto é, das regiões transformadas, a partir da matriz não transformada. O crescimento corresponde ao aumento de tamanho destas novas regiões até que a transformação se complete.

Entre as décadas de 1930 e 1940, os trabalhos de Johnson e Mehl [2], Kolmogorov [3] e Avrami [4] – [6] deram origem ao modelo da cinética formal, também conhecido como modelo ou teoria de JMAK, no qual foi considerado que a nucleação ocorria de maneira aleatoriamente uniforme. Este modelo visa a descrição do comportamento de transformações de fase por nucleação e crescimento, que corresponde ao tipo de transformação no estado sólido apresentado pela grande maioria dos materiais. O modelo não supõe mecanismos físicos para as reações de nucleação e crescimento, apenas determinada taxa de nucleação e localização espacial dos núcleos.

A utilização do modelo de JMAK em reações nas quais os sítios de nucleação são distribuídos não aleatoriamente pode resultar em valores errôneos. Assim, é necessário expandir o alcance das teorias analíticas exatas e estender o tratamento por JMAK, permitindo o estudo de nucleações diferentes da suposta nos trabalhos originais.

A maior parte dos estudos sobre transformações por nucleação e crescimento considera apenas a formação de uma única fase a partir da fase matriz. Entretanto, em alguns casos, pode ocorrer o surgimento de duas novas fases a partir da fase matriz. Se as duas (ou mais) novas fases surgem ao mesmo tempo, tem-se a chamada transformação simultânea, isto é, ambas as fases nucleiam no mesmo instante e crescem simultaneamente.

No trabalho de Rios e Villa [1], foi desenvolvido um novo método, matematicamente exato, para o modelamento de situações em que mais de uma transformação ocorre simultânea ou sequencialmente. Por meio de simulações computacionais, é possível o estudo da evolução e visualização das microestruturas das transformações, como verificado por Oliveira [7] e Alves [8].

Nem sempre a distribuição dos núcleos no espaço é uniforme. Uma situação clássica é quando se tem um policristal e os núcleos podem se formar nos pontos quádruplos (vértices), junções triplas (arestas) ou interfaces (faces) dos grãos ou quando se observa deformação heterogênea nos materiais. Uma representação desta situação foi observada experimentalmente por Rios e Honeycombe [9], num estudo que avalia o efeito do nióbio na decomposição da austenita numa liga de aço. Na Figura 1(a), pode ser observado um agregado nucleado nos vértices de um grão crescendo de forma esférica a 775°C . Enquanto, na Figura 1(b), podem ser vistos agregados nucleados nas faces de grãos formando uma rede contínua a 700°C .

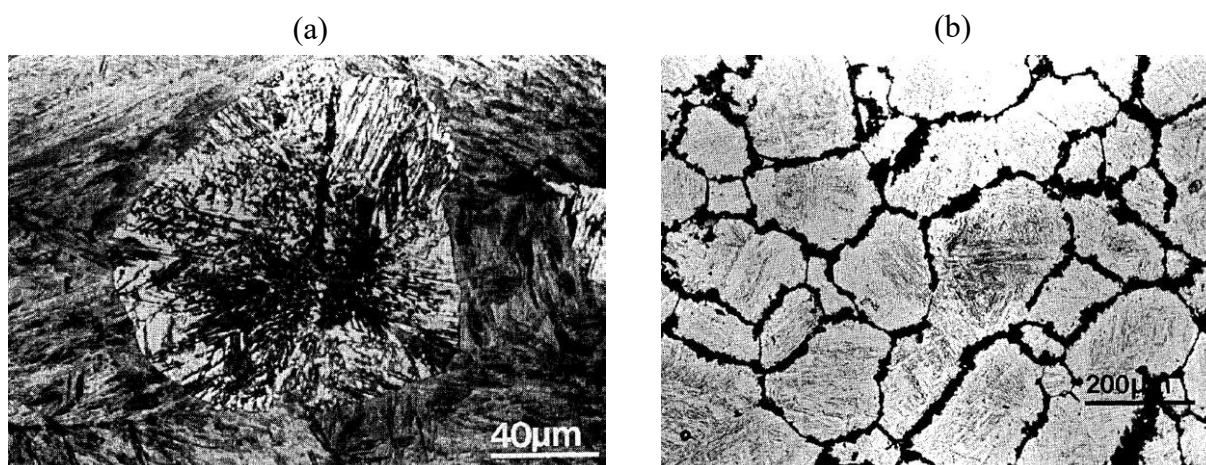


Figura 1 – Transformação da austenita num agregado ferrita- M_{23}C_6 numa liga Fe-10%pesoCr-0,2%pesoC segundo Rios e Honeycombe: (a) Agregado nucleado nos vértices de um grão crescendo de forma esférica a 775°C ; (b) Agregado nucleado nas faces dos grãos formando uma rede contínua a 700°C .

O primeiro a modelar a nucleação nestes sítios preferenciais foi J.W. Cahn [10] e esta situação foi posteriormente revisitada, utilizando métodos matemáticos modernos, por Rios e Villa [11] e Rios *et al.* [12].

O modelamento microestrutural das reações permite a variação de grandezas e propriedades como: quantidade de núcleos, distribuição espacial dos núcleos e velocidade de crescimento. Isto é, fatores que não são facilmente controlados experimentalmente podem ser variados na simulação para verificar sua relevância na coerência dos resultados quando comparados com os modelos analíticos.

O desenvolvimento de modelos computacionais está relacionado à facilidade de prever e estudar fenômenos e processos que demandariam muito tempo e elevado custo em comparação a meios experimentais. Além disso, por mais importante que seja ter uma descrição analítica precisa da transformação, tais descrições analíticas possuem certas limitações práticas. Pode-se ressaltar como limitações das descrições analíticas o fato de elas trabalharem com valores médios e, o que é mais importante, não permitirem a representação da microestrutura. Deste modo, a combinação de simulação computacional e descrição analítica dos fenômenos demonstra ser uma poderosa ferramenta no estudo e compreensão da evolução microestrutural.

Neste trabalho foram realizadas simulações computacionais de transformações de fase individuais e simultâneas nucleadas em sítios aleatórios de uma matriz, bem como em vértices e faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi. Utilizou-se o método do Cone Causal (CC) [13] para simular as reações de nucleação e crescimento. Assim, é possível comparar os resultados obtidos pela simulação computacional com a solução analítica, possibilitando a confirmação de que as simulações se comportam conforme o previsto no campo analítico.

2. OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

Estudar a cinética de transformações de fase em 3D, nas quais os núcleos estejam localizados em sítios aleatórios, nos vértices ou nas faces de um policristal para reações individuais e, simultaneamente, em sítios aleatórios e nas faces de um policristal ou nos vértices e nas faces de um policristal, sendo o policristal representado por uma tesselação de Poisson-Voronoi.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Modelar uma tesselação de Poisson-Voronoi em uma matriz cúbica;
- Identificar locais específicos da tesselação modelada para nuclear em seus vértices e suas faces;
- Estudar os efeitos da cinética das transformações de nucleação e crescimento nos vértices e nas faces de um sistema;
- Estudar a influência da variação do número de núcleos nas faces;
- Comparar os resultados computacionais com modelos analíticos, a fim de assegurar a validade das simulações.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 TRANSFORMAÇÕES DE FASE

Inicialmente, é importante compreender o conceito de fase para que as transformações de fase possam ser abordadas. J.W. Christian [14] define que “um conjunto de átomos ou moléculas que atingiu o equilíbrio sob dadas condições externas consiste em uma ou mais regiões homogêneas e fisicamente distintas.” Estas regiões são denominadas fases, e esta definição está em concordância com a conceituação de Gibbs para fases, como argumentam Rios e Padilha [15].

As transformações de fase podem ocorrer na maioria dos materiais, visando a diminuição da energia interna dos materiais, isto é, a obtenção de um estado de equilíbrio termodinâmico. Elas podem se apresentar na forma de transições de estado físico ou podem ocorrer no mesmo estado físico. As transformações de fase tratadas ocorrem no estado sólido, fenômeno que ocorre comumente nos materiais metálicos.

Rios e Padilha [15] afirmam que a maior parte das transformações de interesse em sólidos é heterogênea, ou seja, transformações em que existe um nítido movimento de uma interface entre as regiões transformada e não transformada.

Considera-se que essas transformações podem ocorrer em duas etapas. Na primeira etapa, denominada nucleação, tem-se que uma nova região transformada é gerada a partir de sítios de nucleação. Na segunda etapa, denominada crescimento, a nova fase cresce às custas da antiga pela migração das interfaces entre as fases, e o crescimento ocorre a partir da transferência de átomos individuais através das interfaces. Os núcleos, inicialmente pequenos na região transformada, crescem consumindo a matriz original, não transformada, até que a transformação se complete.

A força matriz para a transformação está relacionada a uma diferença de potencial químico existente entre a matriz original e a região transformada [15], ou seja, a fase presente originalmente no material e a nova fase que surge pela transformação.

3.2 MODELO DA CINÉTICA FORMAL

A teoria desenvolvida por Johnson e Mehl [2], Kolmogorov [3] e Avrami [4]–[6], referenciada como modelo de JMAK ou modelo da cinética formal a partir deste ponto, representa a fundamentação da teoria cinética formal aplicada até os dias atuais, modelando a

cinética das regiões transformadas por reações de nucleação e crescimento. Ela foi desenvolvida visando representar transformações de fase em condições isotérmicas, porém, também é aplicada para transformações em condições não isotérmicas. O modelo não considera os mecanismos físicos de nucleação e crescimento, ou seja, é um modelo desenvolvido para representar tais etapas como um conjunto de operações coerentes à sua definição e não necessariamente avaliar os parâmetros termodinâmicos destas definições, considerando uma determinada taxa de nucleação e a localização geométrica dos núcleos.

Essa teoria é utilizada para transformações de materiais metálicos e não metálicos [11], [16]. Deste modo, podem ser abordadas situações em que a nucleação e crescimento têm um significado puramente “operacional”, não sendo obrigatoriamente reações de nucleação e crescimento. Além disso, diversos fenômenos podem ser modelados pelo modelo da cinética formal e podem ser encontrados na literatura, como transformações austenita-perlita [2], recristalização [17]–[19], crescimento de grão anormal de BaTiO₃ [20], “espalhamento de martensita” [21], [22] e cristalização de polímeros [23].

O modelo de JMAK considera a transformação de uma fase matriz, α , em uma nova fase transformada, β , pelas etapas nucleação e crescimento. A cinética global medida da fração volumétrica transformada, $V_V(t)$, é obtida como função do tempo de reação, t . O crescimento é interrompido em determinada direção quando ocorre o *impingement*, isto é, a interferência ou o impedimento entre as regiões que crescem. Uma das principais contribuições dessa teoria é a resolução do problema do *impingement*. Na Figura 2, pode ser observada uma representação do crescimento de novas regiões transformadas e do efeito de *impingement* sobre elas.

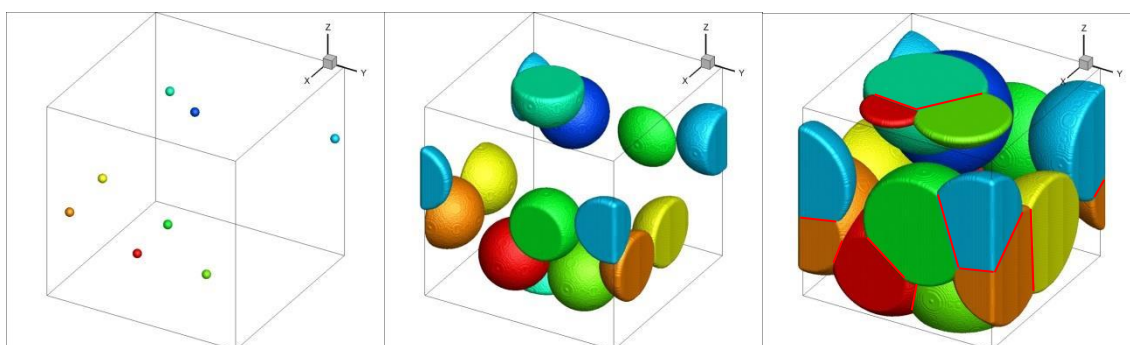


Figura 2 – Representação do *impingement* durante uma simulação em três dimensões. As linhas em vermelho destacam os locais em que o *impingement* ocorre em um estágio intermediário da reação.

Fonte: Adaptado de Fonseca [24].

Ignorando-se o efeito do *impingement* e considerando que as fases transformadas crescem sem interferência, até mesmo um grão crescendo para dentro dos grãos vizinhos, obtém-se o preenchimento total do espaço amostral e um valor numérico que represente o volume ocupado por esses grãos. Esse volume é maior que o volume efetivamente transformado e é denominado “volume estendido”, V_E [17], [25].

O modelo de JMAK permite o cálculo do volume realmente transformado, através da expressão exata que relaciona a fração volumétrica real, V_V , ao volume estendido, V_E , como pode ser visto na Equação (1):

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

Uma forma mais geral desta expressão pode ser encontrada na Equação (2), chamada de forma generalizada de JMAK ou de Equação de Avrami. Neste caso, associa-se a fração volumétrica transformada com a constante de forma das partículas, k , que crescem em função do tempo de reação, t , e com a constante de Avrami, n .

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

O modelo de JMAK considera que a nucleação ocorre de maneira uniformemente aleatória, isto é, os núcleos estão dispostos aleatoriamente no espaço, de modo que a posição de um não interfira na posição dos demais. O processo de nucleação pode ocorrer através de uma taxa de nucleação constante ou por saturação de sítios. A nucleação por saturação de sítios sugere que todos os todos os núcleos já estão presentes no tempo inicial, $t = 0$. Enquanto a taxa de nucleação constante apresenta um número de núcleos novos por unidade de tempo por unidade de volume constante [26]. Para saturação de sítios, a constante de Avrami tem valor $n = 3$ [14].

Foram consideradas apenas reações nucleadas por saturação de sítios. Além do mais, considerou-se que a transformação ocorre em meio infinito, as regiões crescem com o formato esférico, a taxa de crescimento, G , é constante e N_V é o número de núcleos por unidade de volume. Esta expressão aplicada à Equação (1) ou as considerações aplicadas à Equação (2), resulta na expressão analítica exata para o cálculo da fração volumétrica de uma fase transformada para nucleação por saturação de sítios, que está apresentada na Equação (3).

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

As considerações adotadas são feitas para que reações estejam de acordo com as condições que o modelo de JMAK adota para as transformações. Estas condições estão apresentadas a seguir:

- As transformações devem ocorrer em um meio infinito;
- os núcleos devem estar distribuídos aleatoriamente no espaço;
- os núcleos possuem forma geométrica similar e seu crescimento cessa quando ocorre duas ou mais interfaces se encontram, isto é, quando ocorre o *impingement*;
- o crescimento deve ser isotrópico.

O modelo de JMAK utiliza apenas com a fração volumétrica transformada como parâmetro de descrição microestrutural. Partindo deste modelo, DeHoff [27] estendeu estudo de JMAK, no qual foi introduzido um novo parâmetro microestrutural, a área interfacial por unidade de volume, S_V . Além disso, outras extensões do modelo da cinética formal foram feitas para uma maior generalização das transformações consideradas. As generalizações relevantes que foram consideradas estão apresentadas na seção seguinte.

3.3 GENERALIZAÇÕES DO MODELO DE JMAK

Apesar de possuir fundamentações importantes, a teoria de JMAK não contempla condições que se apliquem a todas as transformações. Por exemplo, a localização espacial dos sítios de nucleação pode ocorrer de diversas maneiras [10], [12], [28]–[30] e a possibilidade de nucleação de mais de uma fase produto partindo dos estudos iniciais de JMAK [1], [7], [8], [31].

Assim, com base nos estudos propostos referentes a transformações com nucleação nos contornos de grão, bem como às transformações simultâneas e sequenciais, estes casos são estudados buscando comparar resultados de simulações computacionais com os modelos analíticos desenvolvidos previamente.

3.3.1 Nucleação nos Contornos de Grão

Em um dos trabalhos mais clássicos dos estudos da metalurgia, Cahn [10], partindo de princípios da cinética formal, apresenta um modelo de equação para sistemas em que a nucleação ocorre nos contornos de grão. Deste modo, a nucleação deixa de ocorrer em sítios

aleatórios e passa a ocorrer em locais específicos, que podem ser considerados mais propícios ao surgimento de núcleos nas transformações de fase.

Neste modelo, considera-se que a nucleação ocorre em um policristal constituído de grãos equiaxiais e as faces, as arestas e os vértices deste policristal são tomados como sítios de nucleação. Estes locais escolhidos por Cahn, em materiais policristalinos, são os sítios preferenciais para nucleação. Foi proposto por ele que as faces dos grãos podem ser tratadas como planos aleatórios, as arestas, como linhas aleatórias e os vértices, como pontos uniformemente aleatórios no espaço.

Rios *et al.* [12] revisitaram o trabalho clássico de Cahn [10] e obtiveram uma expressão para a cinética de transformação quando a nucleação ocorre em planos paralelos distribuídos aleatoriamente no espaço, demonstrando que os planos não precisam ser aleatórios no espaço e comprovando que o trabalho de Cahn é mais abrangente do que ele acreditava ser.

No trabalho de Rios *et al.* [12] foram considerados dois modos de nucleação: saturação de sítios e taxa de nucleação constante. Nos dois processos de nucleação a velocidade é constante e igual para todos os núcleos até o fim da simulação. A expressão encontrada para a nucleação em planos aleatórios para o caso de saturação de sítios é apresentada na Equação (4).

$$V_V(t) = 1 - \exp\left(-2S_V^{planos} Gt \int_0^1 [1 - \exp(-\pi\lambda_S G^2 t^2 (1 - z^2))] dz\right) \quad (4)$$

Onde S_V^{planos} corresponde à área por unidade de volume dos planos aleatórios e λ_S é o número núcleos nos planos por unidade de área.

3.3.2 Transformações Simultâneas

Uma outra generalização a ser considerada nas transformações de fase corresponde ao surgimento de mais de uma fase produto. Geralmente, o modelamento trata apenas da transformação de uma fase matriz em uma única fase produto, ou o crescimento de regiões recristalizadas consumindo uma matriz deformada. Entretanto, com o desenvolvimento de novos materiais, podem surgir situações em que a matriz transforma-se gerando duas ou mais distintas fases produto, podendo se formar simultaneamente ou sequencialmente.

Rios e Villa [1] propõem um modelo analítico considerando que as transformações ocorram de maneira independente. Alves, Assis e Rios [8] realizam simulações, via cone causal, obtendo boa concordância entre os resultados e demonstrando a relevância e confiabilidade do modelo proposto por Rios e Villa.

É de notável importância, a constatação de que, quando duas reações forem consideradas independentes, o princípio da superposição abordado por Rios e Villa [1] permite a utilização de modelos analíticos desenvolvidos para transformações que modelam a formação de uma única fase produto, o que possibilita a obtenção de um modelo para os casos em que duas ou mais fases produto são formadas, simultaneamente ou sequencialmente.

Uma representação gráfica da superposição de duas reações independentes pode ser observada na Figura 3, em que as regiões transformadas são indicadas por Θ_1^t e Θ_2^t e seus respectivos contornos por $\partial\Theta_1^t$ (linha contínua) e $\partial\Theta_2^t$ (linha tracejada). Além disso, as frações volumétricas são representadas por V_{V1} e V_{V2} , bem como as densidades volumétricas de área interfacial são representadas por S_{V1} e S_{V2} para as reações 1 e 2 respectivamente.

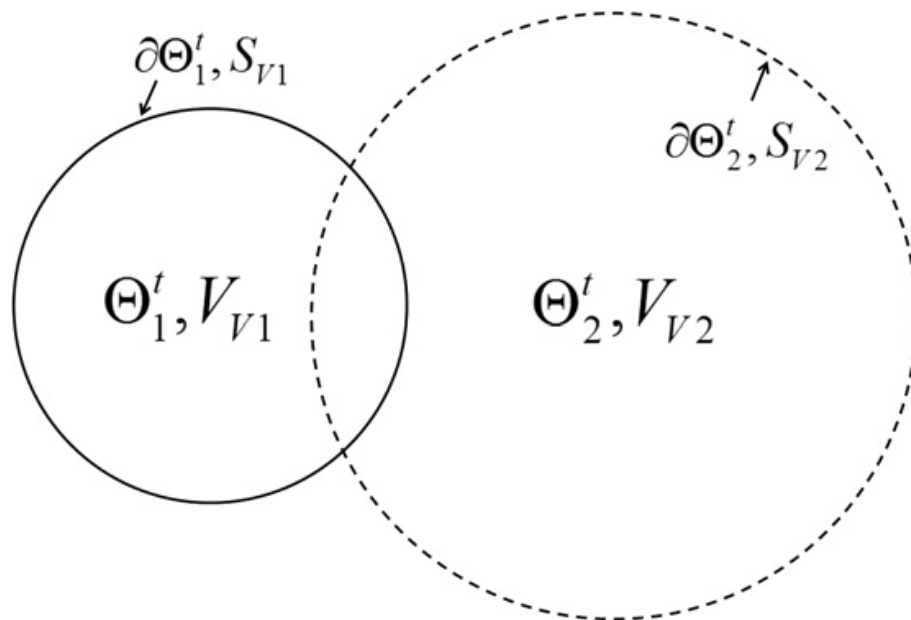


Figura 3 – Representação esquemática da superposição de duas reações independentes.

Fonte: Rios e Villa [1].

Deste modo, a região transformada total será representada pela união destes conjuntos, ou seja, $\Theta_1^t \cup \Theta_2^t$. E a região em que as transformações se sobrepõem é representada pela interseção das regiões transformadas, isto é, $\Theta_1^t \cap \Theta_2^t$.

Rios e Villa [1] demonstram que é vantajoso tratar estes conceitos com o formalismo matemático, pois a fração volumétrica, $V_V(t, x)$, pode ser identificada como a probabilidade de um determinado ponto x pertencer à região transformada no tempo t , como apresentado na Equação (5):

$$V_V(t, x) = \mathbb{P}(x \in \Theta^t) \quad (5)$$

Logo, a probabilidade do ponto x não pertencer à região transformada é dada pela Equação (6):

$$1 - V_V(t, x) = \mathbb{P}(x \notin \Theta^t) \quad (6)$$

Se o ponto x não pertence a nenhuma região transformada, tem-se, para duas reações, o que é apresentado na Equação (7):

$$\mathbb{P}(x \notin \Theta^t) = \mathbb{P}(\{x \notin \Theta_1^t\} \cap \{x \notin \Theta_2^t\}) \quad (7)$$

A independência entre as reações, garante que a probabilidade de que um ponto x não pertence a nenhuma região transformada no instante t é igual ao produtório das probabilidades individuais de que ele não pertença a cada região transformada, o que está representado matematicamente em termos gerais na Equação (8).

$$\mathbb{P}(\{x \notin \Theta_1^t\} \cap \dots \cap \{x \notin \Theta_n^t\}) = \prod_{i=1}^n \mathbb{P}(x \notin \Theta_i^t) \quad (8)$$

Consequentemente, a probabilidade de que um ponto pertença à região transformada, ou seja, a fração volumétrica transformada, pode ser calculada conforme exposto na Equação (9).

$$V_V(t, x) = 1 - \prod_{i=1}^n (1 - V_{Vi}(t, x)) \quad (9)$$

Com esse princípio, obtém-se tanto parâmetros globais assim como parâmetros individuais de cada fase produto ao longo da transformação. O modelo generalizado das transformações simultâneas e sequencias pode ser visto no trabalho de Rios e Villa [1].

Rios e Villa [1] diferenciam as grandezas teóricas, esquematizadas na Figura 3, das grandezas experimentais, aquelas medidas de uma microestrutura transformada, e apresentam uma forma de relacioná-las. Isto permite que seja encontrada uma expressão que representa a fração transformada de cada reação a partir das expressões analíticas que as representam e da expressão para a reação total, apresentada na (9).

Na Figura 4, pode ser observada uma representação esquemática dessas grandezas experimentais nos termos abordados por Rios e Villa [1]. As regiões transformadas 1 e 2 são representadas por Θ_1^{*t} e Θ_2^{*t} e seus respectivos contornos por $\partial\Theta_1^t$ (linha contínua) e $\partial\Theta_2^t$ (linha tracejada). As frações volumétricas experimentais das reações 1 e 2 são representadas,

respectivamente, por V_{V1}^* e V_{V2}^* , assim como as densidades volumétricas de área interfacial experimentais são representadas por S_{V1}^* e S_{V2}^* .

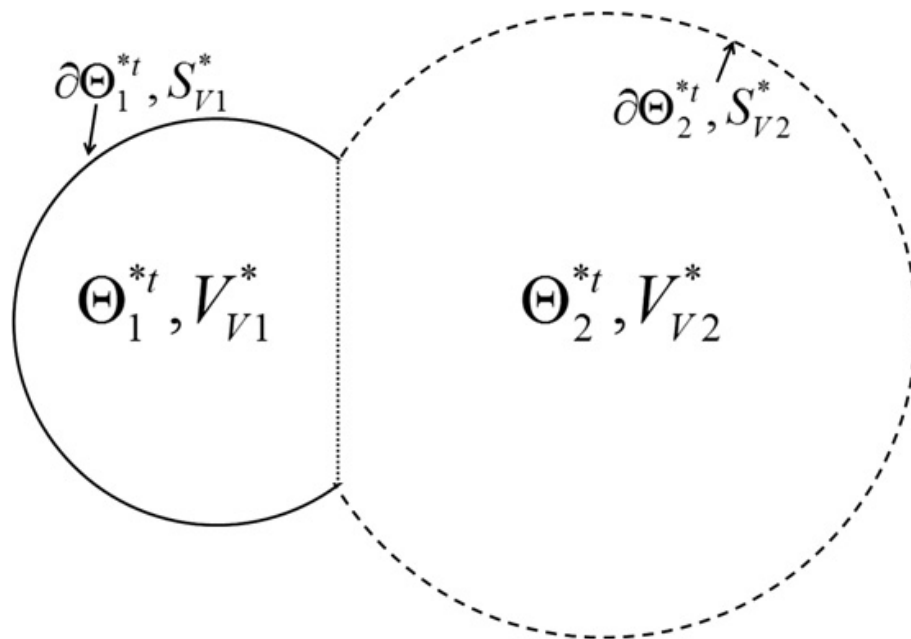


Figura 4 – Representação esquemática do *impingement* e da ausência de uma superposição entre as duas reações independentes.

Fonte: Rios e Villa [1].

Assim, pode ser vista na Equação (10) uma expressão para o cálculo da fração volumétrica experimental de cada reação i , V_{Vi}^* , a partir das frações volumétricas teóricas de cada reação, V_{Vi} , ou seja, os modelos analíticos que regem as transformações, e da fração transformada total, V_V .

$$V_{Vi}^*(t, x) = \int_0^t \frac{1 - V_V(s, x)}{1 - V_{Vi}(s, x)} \frac{\partial V_{Vi}(s, x)}{\partial s} ds \quad (10)$$

3.4 PROCESSO DE PONTO DE POISSON

Como apresentado na seção 3.2, o modelo da cinética formal considera que a nucleação ocorre de maneira uniformemente aleatória no espaço, de modo que cada sítio de nucleação seja independente dos demais. Segundo Chiu *et al.* [32], a hipótese mais importante do processo de ponto de Poisson é a dispersão independente dos pontos. Para garantir que essa condição seja satisfeita, utiliza-se o processo de ponto de Poisson para representar a nucleação [11].

Como apresentado por Rios e Villa [11], um processo de ponto em \mathbb{R}^d é uma sequência de pontos $\{X_i\}_i$ localizados aleatoriamente em \mathbb{R}^d de acordo com uma determinada lei de probabilidade. Pode ser descrito pelo processo de contagem, Y , associado à sequência $\{X_i\}$, definido como sendo $Y(A) :=$ a quantidade de X_i s que pertence a $A, \forall A \in \mathcal{B}_{\mathbb{R}^d}$.

Para qualquer A fixo, $N(A)$ é uma variável aleatória e $\mathbb{E}[Y(A)]$ representa o número médio de pontos X_i em A . A medida de Λ em \mathbb{R}^d é definida como apresenta a Equação (11).

$$\Lambda(A) := \mathbb{E}[N(A)], \forall A \in \mathcal{B}_{\mathbb{R}^d} \quad (11)$$

Onde Λ é chamado de intensidade de Y .

Se no caso é considerado um processo de nucleação por saturação de sítios, então, ele pode ser modelado pelo processo de ponto em \mathbb{R}^d e, portanto, os pontos X_i serão núcleos que surgem em $t = 0$. Para núcleos que surgem independentemente um do outro, a nucleação pode ser modelada pelo processo de ponto de Poisson [11], [33].

De sua definição matemática formal, segue-se que este processo é exclusivamente determinado pela sua medida de intensidade. Particularmente, para um processo de ponto de Poisson Y com intensidade Λ , a probabilidade \mathbb{P} , que exatamente k núcleos são gerados em um subconjunto A de \mathbb{R}^d é dada pela Equação (12).

$$\mathbb{P}(Y(A) = k) = \exp\left(-\Lambda(A) \frac{\Lambda(A)^k}{k!}\right) \quad (12)$$

Sempre que Λ admite densidade, ou seja, se existe uma função $\lambda: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}_+$, tal que a Equação (13) se aplica, então Y é dito ser um processo de ponto de Poisson com intensidade λ . Como consequência, λ é uma função não negativa em \mathbb{R}^d .

$$\Lambda(A) = \int_A \lambda(x) dx \quad \forall A \in \mathcal{B}_{\mathbb{R}^d} \quad (13)$$

Caso λ seja constante, tem-se que λ é igual ao número de núcleos por unidade de volume e Y é chamado de processo de ponto de Poisson homogêneo. Caso λ não seja constante, tem-se que $\lambda(x)dx$ é igual ao número de núcleos em uma região espacial infinitesimal dx e Y é chamado de processo de ponto de Poisson não-homogêneo.

É possível observar na Figura 5 a representação de pontos sorteados seguindo uma distribuição de Poisson para ambos os casos homogêneo, na Figura 5(a), e não-homogêneo, em que a densidade de pontos aumenta conforme o avanço no eixo z , na Figura 5(b).

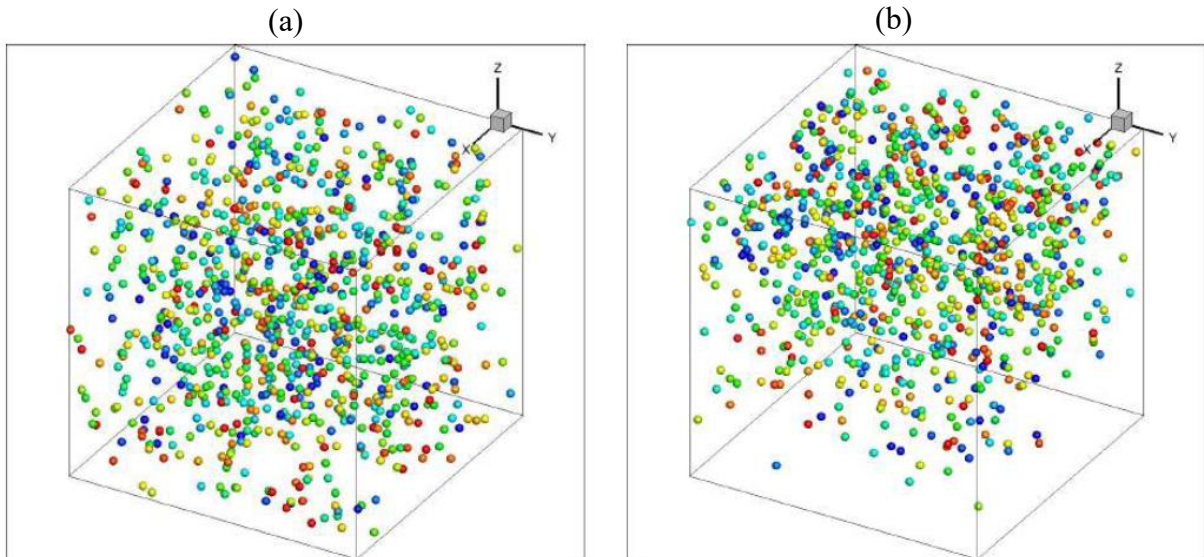


Figura 5 – Representação de núcleos sorteados segundo um processo de ponto de Poisson (a) homogêneo e (b) não-homogêneo.

Fonte: Adaptado de Ignácio [34].

3.4.1 Contiguidade

Como define Vandermeer [35], a contiguidade é uma relação existente entre a fração de área interfacial entre os grãos da nova fase nucleada por unidade de volume e a fração de área interfacial entre os grãos da nova fase e os grãos da fase matriz por unidade de volume. Para o caso 3D, a contiguidade pode ser calculada como apresentado na Equação (14):

$$C_{\beta} = \frac{2S_V^{\beta\beta}}{2S_V^{\beta\beta} + S_V^{\alpha\beta}} \quad (14)$$

Onde $S_V^{\beta\beta}$ representa a fração de área interfacial entre os grãos da nova fase nucleada por unidade de volume e $S_V^{\alpha\beta}$, a fração de área interfacial entre os grãos da nova fase e os grãos da fase matriz por unidade de volume.

Este parâmetro é um valioso recurso na avaliação do efeito do *impingement* dos grãos no interior da matriz. De acordo com Vandermeer [35], a contiguidade permite a detecção de desvios da aleatoriedade causados pela nucleação.

Por exemplo, tomando a contiguidade medida para o processo de ponto de Poisson como referência, ou seja, um processo nucleado de forma uniformemente aleatória: valores de contiguidade que ficam “acima” da curva obtida para Poisson sugerem a existência de um

agrupamento dos núcleos em determinada região da matriz; por outro lado, valores que ficam “abaixo” indicam que existe uma separação entre os núcleos, isto é, existe um distanciamento diferente do observado para o processo de ponto de Poisson.

Na Figura 6, adaptada de Rios *et al.* [36], observa-se que a contiguidade da nucleação em cluster fica acima da curva de uma nucleação uniformemente aleatória, enquanto a contiguidade de uma nucleação periódica fica abaixo.

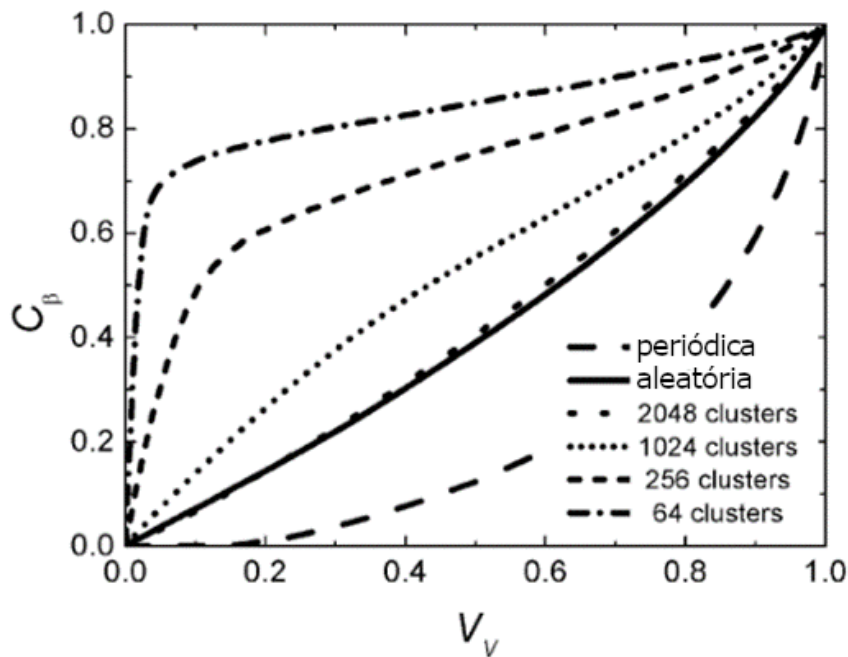


Figura 6 - Contiguidade versus Fração Volumétrica para nucleações periódica, aleatória e em cluster.

Fonte: Adaptado de Rios *et al.*[36].

3.4.2 Nucleação em Cluster

Um exemplo de uma nucleação não aleatória é aquela chamada de nucleação em cluster, que pode ser vista na Figura 7, na qual os núcleos da nova fase surgem agrupados em uma região preferencial da matriz, como por exemplo uma banda de deformação [37].

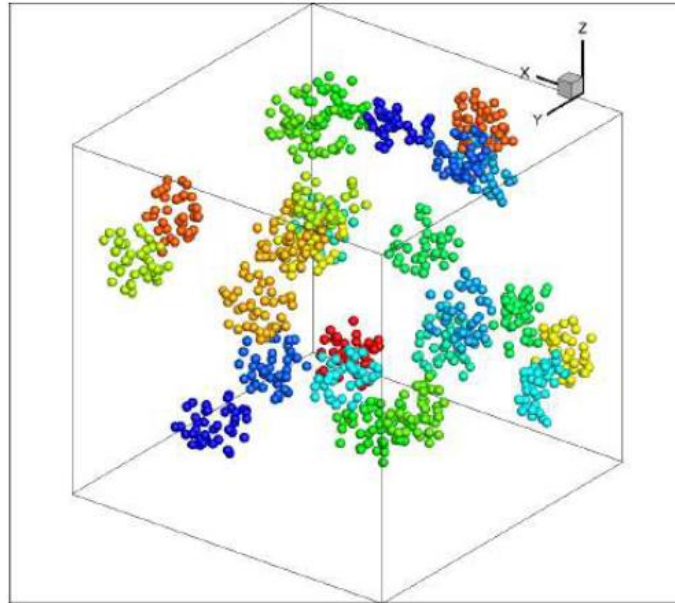


Figura 7 – Representação de uma nucleação em cluster.

Fonte: Adaptado de Ignácio [34].

Para modelar esse tipo de nucleação, Villa e Rios elaboram um modelo analítico para situações nas quais a nucleação ocorre na forma de clusters esféricos [35], [37]. Na Figura 8, é possível observar o comportamento da contiguidade obtido por Ignácio [34] para simulações de nucleação em cluster, demonstrando que os valores encontrados ficam acima da curva obtida para uma nucleação uniformemente aleatória.

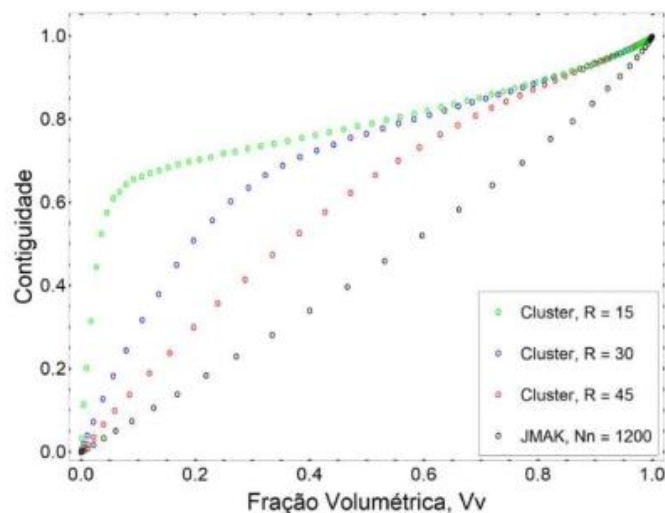


Figura 8 – Valores de Contiguidade versus Fração Volumétrica obtidos para diferentes processos de nucleação em cluster e para um processo de nucleação uniformemente aleatório, representando o modelo da cinética formal de JMAK.

Fonte: Ignácio [34].

3.4.3 Nucleação Periódica

Uma outra nucleação não aleatória é aquela em que a distância entre um núcleo arbitrário na matriz e os núcleos vizinhos é sempre a mesma, ou seja, os pontos estão organizados periodicamente na matriz, como pode ser visto na Figura 9.

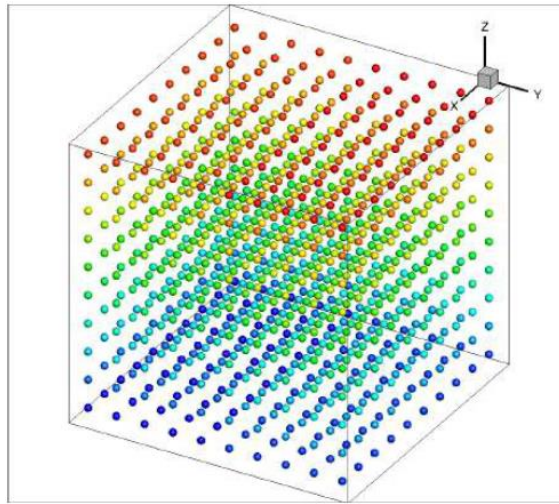


Figura 9 – Representação de uma nucleação periódica.

Fonte: Adaptado de Ignácio [34].

Ventura [29] apresenta que o efeito do *impingement* em reações nucleadas por distribuições periódicas ocorre tardiamente se comparado com transformações nucleadas por um processo de ponto de Poisson, isto pode ser observado pelo comportamento da linha cinza na Figura 10, que representa a contiguidade para uma nucleação distribuída periodicamente.

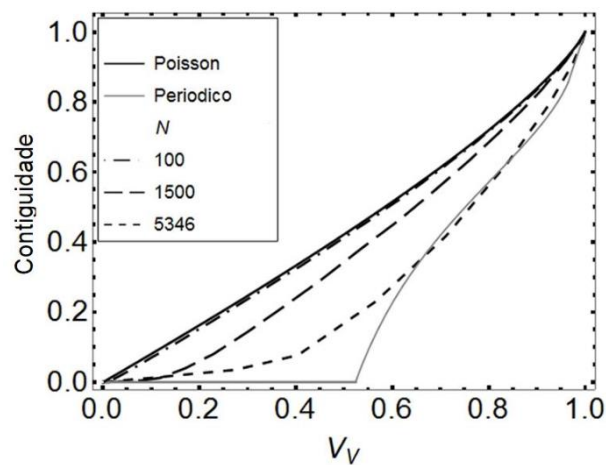


Figura 10 – Contiguidade versus Fração Volumétrica de reações nucleadas por processo de ponto de Poisson, distribuição periódica e sequencialmente.

Fonte: Ventura [29].

O comportamento que pode ser observado neste caso é diferente do que foi apresentado na Figura 6 e isto é justificado pelos diferentes métodos utilizados para a simulação das etapas de nucleação e crescimento nas simulações, bem como pelos diferentes parâmetros de simulação utilizados. Rios *et al.* [36] utilizaram o modelo do Autômato Celular e Ventura [29] utilizou o modelo do Cone Causal. As diferenças das técnicas para a representação do crescimento acabam afetando a representação da contiguidade, bem como o distanciamento entre os núcleos, pois a influência do *impingement* será diferente.

3.5 FORMAS DE REPRESENTAÇÃO DO GRÃO

Como apresentam Rios e Padilha [15], uma grande parte dos materiais cristalinos utilizados em engenharia é policristalina. O agregado policristalino é constituído por grãos, que consistem em pequenos cristais que possuem uma orientação cristalográfica semelhante. A região de transição entre um grão e outro é chamada de contorno de grão. Isto é, entre os grãos com diferentes orientações cristalográficas, existe o contorno de grão, uma fronteira de dimensões de poucas dezenas de micrometros. Cada grão que constitui um agregado policristalino pode ser tratado como um poliedro.

A fim de representar estruturas encontradas na realidade, diversos modelos são desenvolvidos [32]. Tais modelos apresentam determinadas características que melhor se adequam à representação desejada. Deste modo, podem ser encontrados trabalhos que utilizam destas variadas representações na busca de resultados coerentes. Por exemplo, no trabalho de Jäggle e Mittemeijer [38], utiliza-se uma matriz inicial obtida a partir de uma simulação de crescimento de grão pelo modelo de Monte Carlo. No trabalho de Fonseca *et al.* [24], [28], a matriz inicial é representada por uma rede de poliedros de Kelvin.

Outro modelo utilizado para a representação dos grãos é o das tesselações de Poisson-Voronoi [32], [39], [40], que tem por característica uma distribuição monomodal de tamanho médio de grão com uma menor dispersão, quando comparado a modelos como o de Monte Carlo.

3.5.1 Características de uma Tesselação de Poisson-Voronoi

As tesselações de Voronoi apresentam uma vasta gama de utilização nos estudos de estruturas organizadas como células, como constatam Ohser e Mücklich [39]. Eles apresentam algumas condições que caracterizam o crescimento de uma tesselação de Voronoi, sendo estas:

- O crescimento é iniciado em pontos, isto é, centros de cristalização ou sítios de nucleação;
- Todas as células começam a crescer no mesmo instante;
- Todas as células crescem da mesma maneira. O crescimento é independente direcionalmente e ocorre para todas as células a uma mesma taxa constante;
- Se as células entram em contato entre si durante o crescimento, elas inibem seus avanços naqueles pontos. Os pontos de contato formam os contornos das células.
- Os contornos das células não se deslocam.
- O crescimento continua até que todo o plano ou espaço seja preenchido.

A Figura 11 contém uma representação esquemática do processo de crescimento seguindo as condições apresentadas anteriormente, que representam severas restrições para o processo de crescimento. Essas condições são satisfatoriamente cumpridas por materiais, demonstrando que as tesselações de Voronoi são úteis para modelar microestruturas monofásicas.

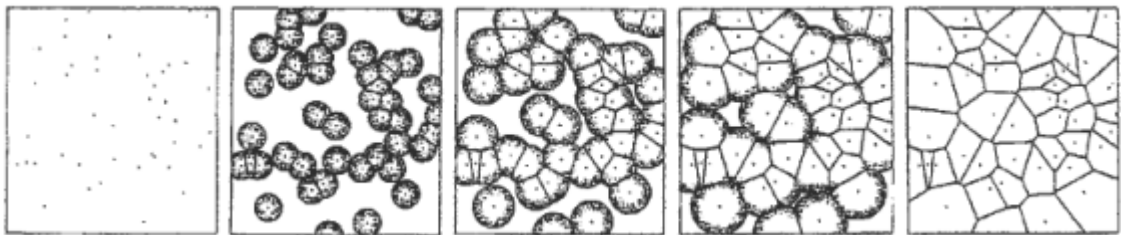


Figura 11 – Vários estágios do crescimento para formar uma tesselação de Voronoi planar, com os pontos geradores e os contornos sendo representados.

Fonte: Ohser e Mücklich[39].

Considerando-se que os pontos onde o crescimento é iniciado sejam provenientes de um processo de ponto de Poisson, apresentado na seção 3.4, a tesselação correspondente é chamada de tesselação de Poisson-Voronoi. Estas tesselações possuem a intensidade do processo de ponto, λ , como seu único parâmetro, permitindo o cálculo de suas propriedades a partir deste valor.

Dentre as tesselações de Voronoi, a tesselação de Poisson-Voronoi é de fundamental importância. Ela foi o modelo mais avaliado e que possui o maior conjunto de resultados a respeito da distribuição da quantidade de células [39]. Sua utilização não se limita à

representação de materiais policristalinos monofásicos, também compreende estudos sobre física teórica, propriedades de materiais e até mesmo redes de telecomunicação [40].

Considerando a utilização da tesselação de Poisson-Voronoi como microestrutura matriz para uma transformação de fases, é importante ressaltar uma característica de um de seus sítios de preferenciais de nucleação em especial, os vértices. Chiu *et al.* [32] apresentam, como pode ser visto na Figura 12, uma análise da disposição dos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi em comparação a pontos distribuídos por um processo de ponto de Poisson. A linha contínua em azul representa a função de correlação de pares (*Pair Correlation Function*) conforme calculada por Heinrich *et al.* [41] para o processo de ponto dos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, enquanto a linha tracejada representa a função de correlação de pares do processo de ponto de Poisson.

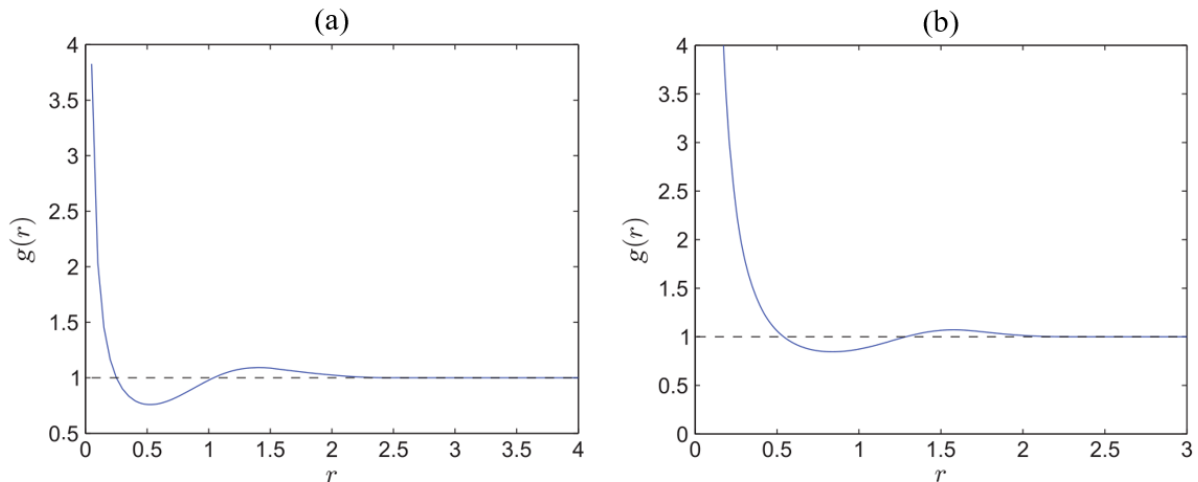


Figura 12 – Função de correlação de pares (*Pair Correlation Function*) do processo de ponto dos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi (a) bidimensional; (b) tridimensional.

Fonte: Chiu *et. al* [32].

Esta divergência entre os processos de ponto é um indicativo de que a utilização dos vértices da tesselação de Poisson-Voronoi como sítios de nucleação num processo de transformação de fases não pode ser representada pelo modelo da cinética formal.

3.6 DESCRITORES MICROESTRUTURAIIS

3.6.1 Caminho Microestrutural

O caminho microestrutural é a representação da densidade da área interfacial por unidade de volume em função da fração volumétrica transformada [35], [42]. Conforme argumenta Dehoff [27], toda reação descreve um caminho único no espaço. Este parâmetro tem sido vastamente empregado para a caracterização de diferentes tipos de transformações.

Para o caso em que é considerada nucleação com processo de ponto de Poisson homogêneo e saturação de sítios em 3D, Rios e Villa [11] demonstraram que o caminho microestrutural pode ser escrito como apresentado na Equação (15):

$$S_V^{\alpha\beta}(V_V) = (36\pi N_V)^{\frac{1}{3}}(1 - V_V) \left(\ln \frac{1}{1 - V_V} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (15)$$

4. MATERIAIS E MÉTODOS

Esta dissertação trata de simulação computacional e modelamento analítico. As simulações computacionais foram feitas de cinco maneiras, sendo estas: 1) Reações individuais nucleadas em sítios aleatórios da matriz; 2) Reações individuais nucleadas nos vértices de um policristal; 3) Reações individuais nucleadas nas faces de um policristal; 4) Reações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de um policristal; 5) Reações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de um policristal. O modelamento analítico foi baseado nos modelos de J.W. Cahn [10] e Rios e Villa [1].

O código computacional foi escrito empregando-se a linguagem Fortran 2003 e compilando-se pelo *Microsoft Visual Studio*[®] em sua versão 2019, utilizando o método de paralelização em Open MP. A visualização das microestruturas geradas foi obtida com o programa *ParaView*[®] e os gráficos foram gerados por meio do programa *Wolfram Mathematica 12*[®].

Através do método do Cone Causal [13], [33], com as devidas correções apresentadas por [19], implementado no código em Fortran, foram realizadas as simulações computacionais. Este método é explicado na seção 4.1.1. Conforme demonstrado em trabalhos anteriores [30], [43] [29], [44], a matriz que representa um material a ser transformado foi dimensionada em 300 x 300 x 300 células cúbicas, sendo considerados comprimento, altura e largura de 1 mm de comprimento. Como resultado, o domínio simulado tem um volume de 1 mm³. Por conveniência, as unidades foram omitidas no decorrer do texto.

Visando-se obter uma distribuição estatística de valores encontrados, foram realizadas 50 simulações para cada um dos casos estudados e os resultados, apresentados através de gráficos, foram calculados a partir da média dos resultados individuais de cada simulação. As representações gráficas das microestruturas simuladas foram obtidas a partir de uma simulação arbitrária do tipo de nucleação sendo avaliado.

Todos os processamentos das simulações de nucleação e crescimento foram feitos em uma das estações do servidor do Núcleo de Modelamento Microestrutural (NMM), da Universidade Federal Fluminense (UFF), cujas configurações são: dois processadores físicos Intel Xeon E5-2650 v3 @ 2.30GHz, 128GB de memória RAM e 2TB de armazenamento em disco rígido, rodando o sistema operacional Windows Server 2012 R2.

De posse dos resultados das simulações, é possível realizar a comparação destes com as expressões analíticas por meio do *software Wolfram Mathematica*, que permite plotar os gráficos das expressões analíticas em conjunto com os resultados das simulações, bem como a

visualização do crescimento das microestruturas simuladas através do *software ParaView*, que utiliza os arquivos de saída gerados a determinados valores de fração volumétrica estabelecidas no algoritmo possibilitando a visualização dos grãos em estágios parciais do crescimento.

Em relação ao pós-processamento, que exige menos capacidade de processamento, foi utilizado um dos computadores do NMM que possui as seguintes configurações: processador Intel Core i7-4770 @ 3.40GHz, 32GB de memória RAM e 2 TB de armazenamento em disco rígido, rodando o sistema operacional Windows 10 Pro em sua versão 21H2.

4.1 MODELO COMPUTACIONAL

O código computacional de Ventura [29] foi adaptado para que os contornos de grão fossem encontrados e utilizados como sítios de nucleação em um segundo processo de nucleação e crescimento presente no algoritmo, visando representar da melhor maneira o fenômeno estudado e, conseqüentemente, ser validado pelos modelos analíticos. Um fluxograma contendo as etapas da simulação pode ser observado na Figura 13.

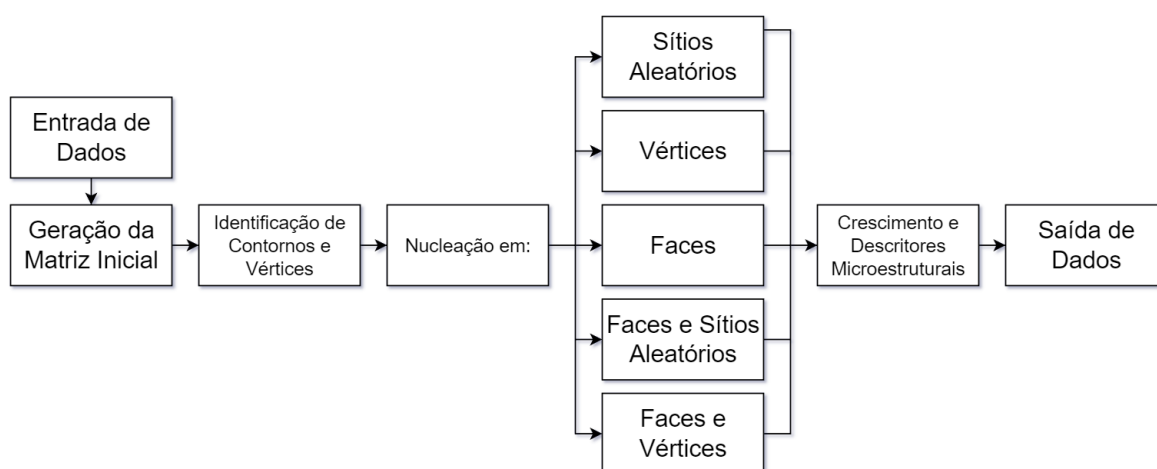


Figura 13 – Fluxograma esquemático do código computacional utilizado nas simulações.

Fonte: O autor.

Na entrada de dados do programa são inseridos todos os parâmetros que são considerados na simulação como: o tamanho da matriz; a quantidade de núcleos da matriz inicial; a velocidade de crescimento das fases; os sítios de nucleação, que podem: ser sítios aleatórios da matriz, vértices ou faces; o coeficiente do número de vértices da matriz inicial; as frações volumétricas a serem plotadas e outros.

O início da simulação ocorre com a formação da matriz base, que é alocada na memória do computador. Após esta etapa, é executado um processo de nucleação, que ocorre por

saturação de sítios, isto é, a alocação simultânea de valores para sítios aleatórios da matriz. Esta nucleação ocorre conforme um processo de ponto homogêneo de Poisson. Finalizada a nucleação, é iniciado o crescimento das fases através do método do Cone Causal, que ocorre até que toda a matriz tenha se transformado.

Da matriz totalmente transformada, obtém-se uma tesselação de Poisson-Voronoi, a qual é submetida ao código computacional de identificação dos contornos dos poliedros gerados, que representam os contornos de grão. A partir das informações obtidas do processamento da matriz inicial, é realizado o processo de nucleação e crescimento, que pode ocorrer segundo uma das cinco formas apresentadas na seção 4.

Para todos os cinco casos, foi adotada a identificação dos vértices da matriz inicial, visto que a sua quantidade de vértices é utilizada como parâmetro de entrada para a nucleação. A identificação dos contornos é explicada na seção 4.1.4, sendo ela fundamental na definição dos sítios de nucleação processo de nucleação e crescimento.

As nucleações realizadas sobre a matriz inicial ocorrem seguindo estas configurações:

- 1) Sítios aleatórios da matriz: A quantidade de vértices da matriz inicial é utilizada apenas como parâmetro de entrada para a etapa de nucleações. Assim, o número de vértices multiplicado pelo coeficiente informado na Entrada de Dados é utilizado como número de núcleos, que serão sorteados de maneira uniformemente aleatória.
- 2) Vértices de um policristal: Após o processamento da matriz inicial, seus vértices são utilizados como sítios de nucleação. Isto é, cada vértice da matriz inicial será um sítio de nucleação da etapa de nucleação e crescimento.
- 3) Faces de um policristal: Após o processamento da matriz inicial, suas interfaces são utilizadas como sítios de nucleação, representando as faces dos grãos que constituem o policristal. A quantidade de núcleos corresponde ao número de vértices da matriz inicial multiplicado pelo coeficiente informado na Entrada de Dados.
- 4) Sítios aleatórios e nas faces de um policristal: Os procedimentos das configurações “1” e “3” ocorrem simultaneamente para as duas fases, sendo a quantidade de vértices da matriz inicial utilizada como número de núcleos para a fase nucleada em sítios aleatórios e, para a fase nucleada nas faces, o número de grãos corresponde à quantidade de vértices *multiplicada* pelo coeficiente adotado na Entrada de Dados.
- 5) Vértices e nas faces de um policristal: Analogamente ao processo anterior, a nucleação é feita simultaneamente para duas fases seguindo os procedimentos das configurações “2” e “3”, respectivamente, para as fases nucleadas nos vértices e nas faces da tesselação de Poisson-Voronoi proveniente da matriz inicial.

Ao fim das transformações, tem-se a geração dos dados que são utilizados para a representação gráfica das simulações e para o estudo das reações, que ocorre na Saída de dados. Dentre estes: tempo de reação, frações volumétricas transformadas (V_{V1} , V_{V2}). Ao término das simulações, são gerados os arquivos com as médias dos resultados. Também são gerados os dados que são utilizados para a visualização das microestruturas e sua evolução. Nesta etapa, foi efetuada uma otimização dos arquivos de saída, possibilitando uma redução de aproximadamente 50% no tamanho dos arquivos de representação das microestruturas, acelerando o tempo de escrita e leitura destes, bem como o tempo para geração das representações no *ParaView*.

4.1.1 Método do Cone Causal

No processo de nucleação é por saturação de sítios, após a alocação dos núcleos é o processo de crescimento destes até que ocorra a completa transformação na matriz. Neste trabalho adota-se o método do cone causal para a simulação do processo de crescimento.

Este método é definido como a região no espaço-tempo em que pelo menos um evento de nucleação tem que ocorrer para cobrir o ponto x no tempo [11], [19], ou seja, essa região é uma esfera de raio, R , centrada em um ponto x qualquer na matriz, que será transformado se houver pelo menos um núcleo dentro dessa esfera.

À medida que o tempo progride, acontecendo cada iteração de tempo, o raio, R , da esfera aumenta, possibilitando uma maior probabilidade da presença de núcleos para transformar o ponto x . Na Figura 14, pode ser vista uma representação do método do Cone Causal em 2D, esquematizando o comportamento do algoritmo, que ocorre analogamente em 3D nas simulações realizadas.

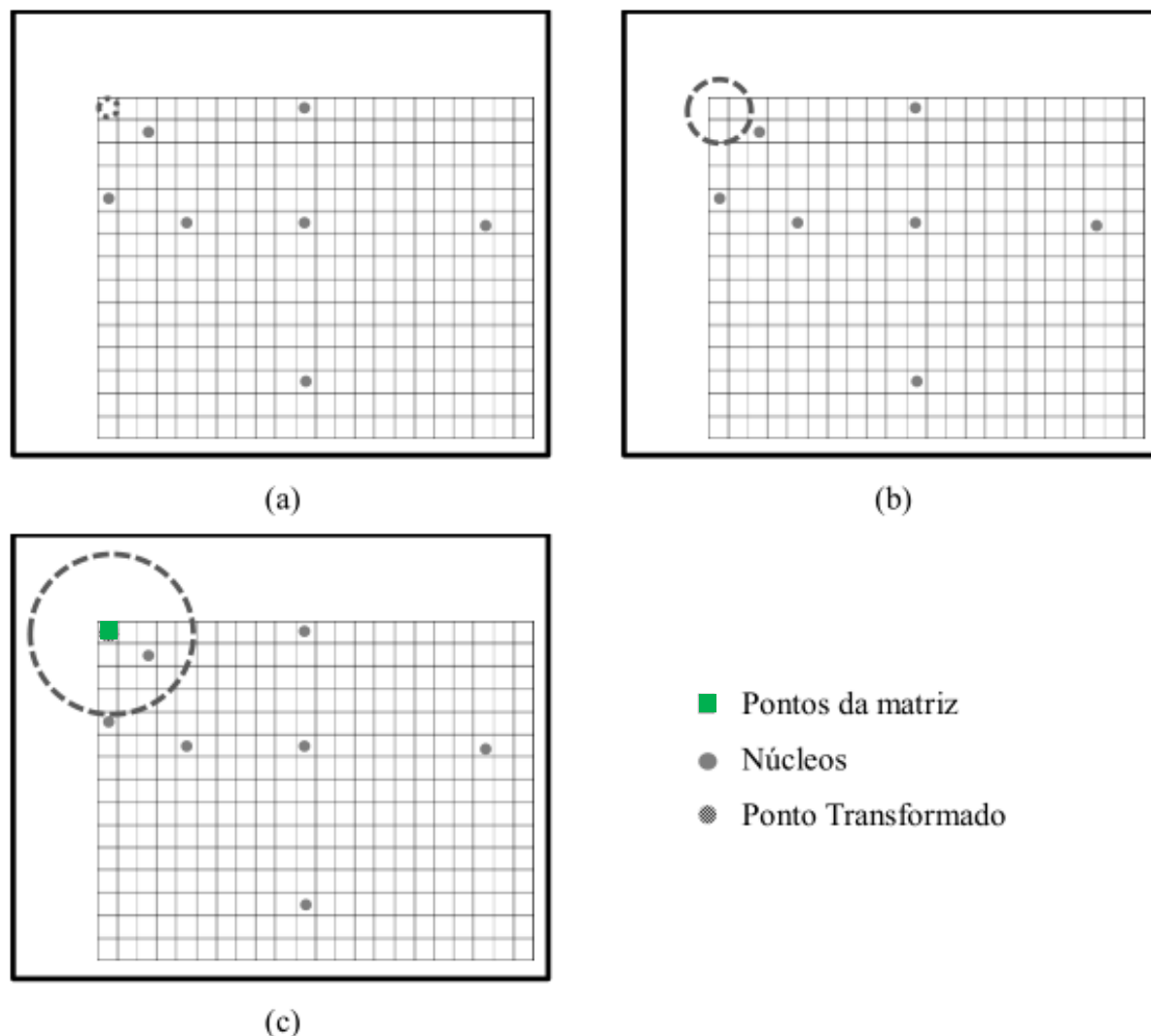


Figura 14 – Representação do método do cone causal em 2D: (a) $t = 1$, (b) $t = 2$, (c) $t = 3$, onde há a transformação da célula que é o centro da circunferência.

Fonte: Adaptado de Alves [31].

A evolução da simulação se dá através das iterações ao longo do tempo. Para cada iteração, o programa analisa todos os pontos da matriz para a verificação de quais serão transformados. A paralelização em *Open MP* foi aplicada nesta etapa do processo, visando maior agilidade nas simulações, distribuindo a análise das células da matriz entre os núcleos dos processadores do computador. Devido ao elevado número de informações que compõem as matrizes de dados da simulação, a paralelização é essencial para a realização de um elevado número de iterações, bem como de simulações. Assim, a realização das 50 simulações para cada caso avaliado só é possível em tempo hábil devido ao uso da paralelização.

A maneira com que essa verificação ocorre é através do cálculo da distância da esfera em relação ao núcleo, se a distância entre núcleo e esfera for menor que zero, significa que o

núcleo está dentro da esfera, e, portanto, aquele ponto passa a ser considerado um ponto de região transformada.

4.1.2 Condição de Contorno

Para as simulações, foram utilizadas condições de contorno periódicas, pois a matriz simulada é de tamanho limitado [45]. Deste modo, mesmo em capacidade limitada de representação, o modelo será capaz de simular uma matriz infinita, como se os grãos estivessem interagindo com vizinhos exteriores ao cubo da matriz original. Na Figura 15 é mostrado um exemplo gráfico das condições adotadas.

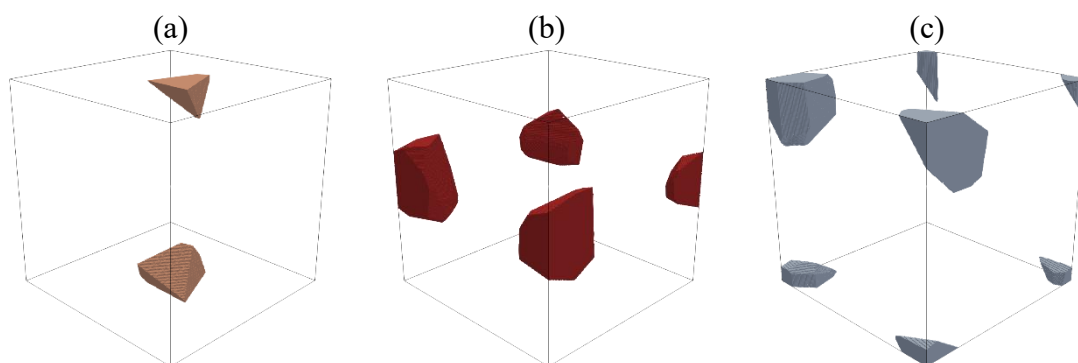


Figura 15 – Representação das condições de contorno em: (a) faces, (b) arestas, (c) vértices.

Fonte: O autor.

Um grão quando atinge uma face continua crescendo na face contrária como é visto na Figura 15(a). Na Figura 15(b) é representado o crescimento nas arestas, quando o grão atinge uma aresta, ele continua crescendo nas arestas opostas. Na Figura 15(c), por sua vez, é mostrado quando um grão atinge um vértice, o seu crescimento, portanto, continua em todos os outros vértices, à medida que ocorre a evolução do tempo.

4.1.3 Tesselação de Poisson-Voronoi

Partindo de uma simulação com nucleação por Processo de Ponto de Poisson e fazendo com que as regiões transformadas cresçam completamente, obtém-se uma tesselação de Poisson-Voronoi. Esta estrutura desenvolvida é submetida a um algoritmo que encontra a localização dos contornos de grão, assim, permitindo o posicionamento dos núcleos das fases produtos, a serem desenvolvidas na nova simulação de nucleação e crescimento.

Para todos os casos de nucleação em sítios aleatórios citados na seção 4 e explicitados nos casos 1, 3, 4 e 5 no item 4.1, foi utilizada uma quantidade de 30 núcleos na matriz inicial, obtendo-se uma matriz transformada similar à que pode ser vista na Figura 16. Para os casos de vértices da configuração de nucleação 2 apresentada no item 4.1, foi necessário utilizar outras quantidades de núcleos na matriz inicial, a fim de se obter diferentes quantidades de vértices na matriz inicial.

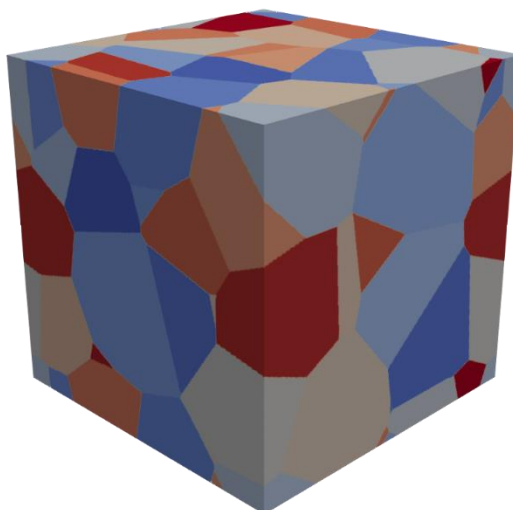


Figura 16 – Exemplo de uma tesselação de Poisson-Voronoi utilizada como matriz inicial das simulações. Cada grão é representado por uma cor.

Fonte: O autor.

4.1.4 Identificação de Contornos

A distribuição dos núcleos na matriz e, posteriormente, o crescimento dos grãos, se dá pela alocação de valores numéricos às células da matriz. Assim, é possível fazer uma varredura da matriz em busca dos locais em que esses valores se alteram, isto é, as interfaces entre grãos distintos. Quando a varredura identifica uma alteração no valor que vinha sendo lido, identifica aquela célula da matriz como uma posição de contorno de grão, armazenando esta informação em uma matriz que é utilizada para nucleação nas faces.

Arbitrariamente, o processo pode ser descrito como uma varredura em busca de valores diferentes na matriz inicial, a partir de uma vetorização dessa matriz. Isto é, a cada entrada da matriz é atribuído um valor numérico inteiro que identifica aquela posição de n dimensões, possibilitando que as informações pertinentes a uma posição da matriz, dependente de n valores, possam ser relacionadas à posição de um vetor, dependendo de apenas 1 valor.

Considerando-se uma célula arbitrária da matriz, o algoritmo verifica se os valores presentes nas células ao seu entorno possuem o mesmo valor, sendo estas 26 células para o caso 3D. Caso o valor seja o mesmo, aquela posição do vetor não é armazenada. Por outro lado, quando os valores que identificam os grãos são diferentes, aquela posição do vetor é armazenada em uma “matriz” de contornos, que será verificada caso haja nucleação nas faces.

Na Figura 17, pode ser observada uma representação de uma matriz 2D arranjada em 5x5 células, a partir da qual é possível entender o modo como a matriz de contornos é produzida. Tomando-se, por exemplo, a entrada da segunda linha e segunda coluna da matriz, a varredura avalia se o valor presente nas 8 células em seu entorno é igual ao valor da célula em análise.

Considerando uma leitura feita primeiramente na direção I e posteriormente na direção II, o valor vetorizado da célula da segunda linha e segunda coluna será 7, pois já foram percorridas as 5 posições da primeira linha e a primeira posição da segunda linha. Quando é realizada a varredura das células ao entorno desta posição, verifica-se que todos os vizinhos possuem o mesmo valor, logo, a posição 7 do vetor não é armazenada. Por outro lado, a posição 8, diretamente à direita da posição anterior, possui 3 células vizinhas com valores diferentes. Portanto, ela é armazenada na matriz de contornos como um dos pontos de interface.

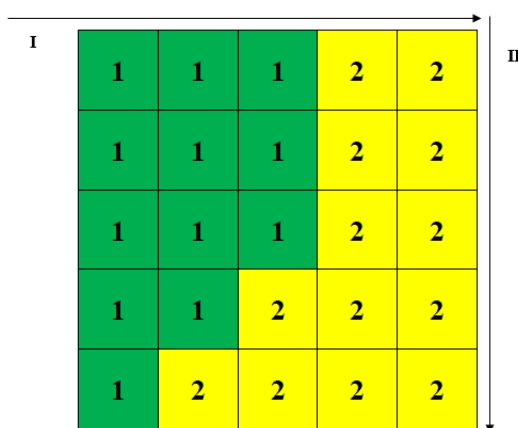


Figura 17 – Exemplo de uma Matriz 5 x 5 contendo dois grãos diferentes.

Fonte: O autor.

Como sítios pertencentes a vértices e arestas também compõem as faces dos poliedros, as posições identificadas pelo algoritmo são suficientes para a simulação da nucleação nas faces. Na Figura 18, é possível observar a disposição do contorno de grão entre os grãos de uma matriz inicial. Os segmentos em azul representam as interfaces existentes entre os grãos, posições que são utilizadas como sítios de nucleação nos casos em que ocorre nucleação nas faces.

(a)

(b)

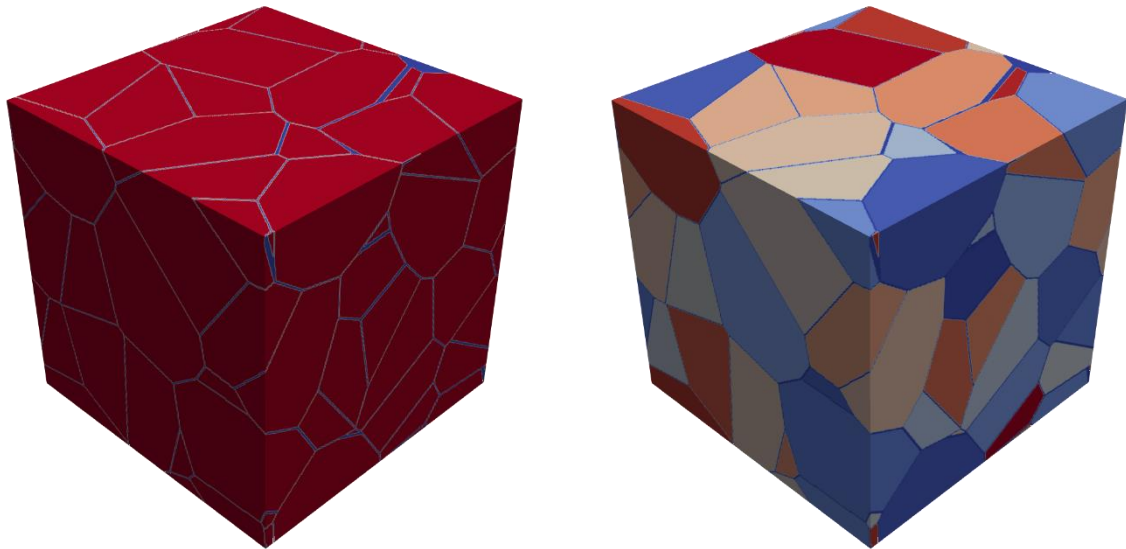


Figura 18 – Representação da matriz base com o contorno de grão visível. (a) Fase não transformada em vermelho; contorno de grão em azul. (b) Grãos em diversas cores; contorno de grão em azul, entre os grãos.

Fonte: O autor.

Entretanto, esse método se mostra ineficaz na identificação de cada tipo de contorno dos poliedros que representam o agregado policristalino, não sendo possível diferenciar vértices, faces e arestas através dos valores encontrados na matriz de contornos. Sendo assim, foi necessária a utilização de outra metodologia na busca da localização dos vértices e arestas.

Através do método numérico utilizado na biblioteca *Voro++*, utilizada anteriormente por Ferreira [46] o resultado obtido é exato, pois utiliza a localização dos núcleos de cada grão para identificar matematicamente cada tipo de contorno. Na Figura 19, observa-se a representação das arestas que compõem os grãos da geometria. Por ser utilizada uma metodologia diferente, a representação dos arquivos é muito diferente, não sendo possível realizar uma comparação visual direta da similaridade entre ambas.

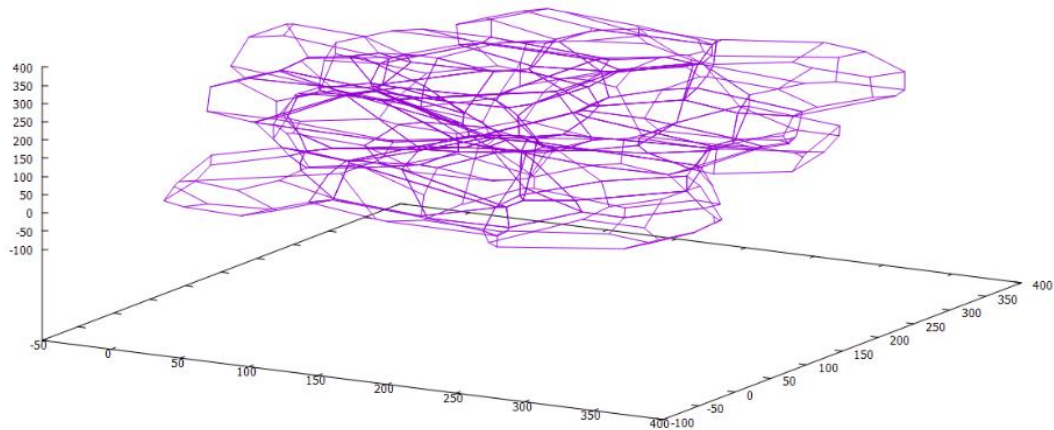


Figura 19 – Representação das arestas de uma rede de poliedros de Voronoi, obtida por um método numérico, através da biblioteca Voro++.

Fonte: O autor.

4.1.5 Definição de Parâmetros de Simulação

Geometricamente, em três dimensões, uma aresta é definida como a junção de duas ou mais faces, bem como um vértice é a junção de ao menos três arestas. Deste modo, sabe-se que o espaço ocupado pelas faces de um policristal apresenta uma magnitude muito superior ao espaço ocupado pelos vértices.

De modo a ser levada em consideração essa grande diferença em sítios de nucleação disponíveis, foi utilizado um coeficiente que relaciona a quantidade de vértices obtidos na matriz inicial com a quantidade de núcleos da fase produto sendo avaliada, visando encontrar quantidades de núcleos apropriadas às equações analíticas que modelam esses fenômenos. Assim, foi considerada a equação (16), em que x é um parâmetro variável a fim de avaliar-se o comportamento das reações, denominado coeficiente de nucleação. Onde N_i é a quantidade de núcleos da fase produto e Q_v é a quantidade de vértices da matriz base.

$$N_i = x \cdot Q_v \quad (16)$$

Assim, a quantidade de vértices encontrados na matriz inicial é utilizada como um dos parâmetros de entrada da simulação independentemente do tipo de nucleação adotada. Os casos de nucleação aleatória e nas faces utilizam o parâmetro x variando entre 1, 2, 3 e 5 na definição da sua quantidade de núcleos. Por outro lado, o mesmo procedimento não pode ser adotado para a nucleação nos vértices. Logo, esse tipo de nucleação utiliza apenas $x = 1$, representando que

todos os vértices encontrados na matriz inicial se tornam novos núcleos na segunda reação de nucleação e crescimento.

Uma forma esquematizada dos parâmetros utilizados nas simulações individuais pode ser vista na Tabela 1.

Tabela 1 – Parâmetros da simulação utilizados nas simulações individuais.

Sítios de Nucleação	Coefficiente de Nucleação	Quantidade de Vértices	Número de núcleos da fase produto, N
Sítios Aleatórios	1, 2, 3,5	200	200 a 1000
Vértices	1	200 a 6000	200 a 6000
Faces	¼, 1, 2, 3, 5	200	50 a 1000

Fonte: O autor.

Na Tabela 2, podem ser vistos os parâmetros de entrada utilizados na simulação de reações simultâneas.

Tabela 2 – Parâmetros da simulação utilizados nas simulações individuais simultâneas.

Sítios de Nucleação	Coefficiente de Nucleação	Quantidade de Vértices N_{SA} e N_X	Número de núcleos nas faces, N_F
Sítios Aleatórios e Faces	1, 2, 3, 5	200	200 a 1000
Vértices e Faces	1, 2, 3,5	200	200 a 1000

Fonte: O autor.

4.1.6 Fator de Correção para S_V Simulado

Alves [19], [31] demonstrou que existe equivalência entre o volume analítico de uma forma geométrica e o volume desta mesma forma geométrica simulado pelo método do cone causal em uma matriz composta por um número finito de células cúbicas. Por outro lado, o mesmo não pode ser afirmado sobre a área interfacial simulada, o que ocorre porque a superfície simulada computacionalmente é composta por células cúbicas e, portanto, irregular.

Desta forma, a área superficial simulada acaba sendo maior que a área superficial analítica. A metodologia proposta por Alves [31] foi adotada, obtendo-se diferentes valores do fator de correção para cada simulação realizada, resultando em $C \approx 1,5$, devido às propriedades matemáticas simulação. Assim, demonstra-se a boa coerência entre os resultados computacionais e os resultados calculados analiticamente quando um fator de correção adequado é utilizado.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, são apresentados os resultados obtidos nas simulações e da análise destes, bem como a discussão de fatores pertinentes observados. A organização das seções foi feita de acordo com a metodologia apresentada no capítulo 4, sendo apresentadas as simulações de reações individuais nucleadas em sítios aleatórios na seção 5.1, as simulações de reações individuais nucleadas nos vértices de um policristal, na seção 5.2 e as simulações de reações individuais nucleadas nas faces de um policristal, na seção 5.3. Posteriormente, são apresentados os resultados de reações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de um policristal na seção 5.4 e, finalizando a apresentação dos resultados, são apresentadas as reações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de um policristal na seção 5.5.

Conforme pode ser observado na Equação (16), o parâmetro x é de fundamental importância na compreensão dos resultados, sendo utilizado nas simulações das seções 5.1, 5.3, 5.4 e 5.5 para representar o fator pelo qual a quantidade de vértices da matriz inicial, Q_v , é multiplicada a fim de obter-se o número de núcleos das nucleações realizadas em sítios aleatórios ou nas faces, conforme foi descrito no item 4.1.5.

Para todos os casos são apresentadas micrografias de uma seção 2D do plano médio das microestruturas simuladas, bem como a evolução microestrutural em 3D em três estágios distintos. A cinética da transformação pode ser observada nos gráficos de V_V versus Tempo para todos os casos, contendo a apresentação dos resultados da simulação e dos resultados esperados a partir das expressões analíticas. Também são avaliados os gráficos de S_V versus Tempo, que permite a análise do início do *impingement* na reação, os gráficos do caminho microestrutural, representado por S_V versus V_V e obtido através da Equação (15), e, por fim, os gráficos de Contiguidade versus V_V , que possibilitam a análise da influência da disposição espacial dos núcleos no desenvolvimento das reações.

Nos casos em que houve nucleação nos vértices, os modelos analíticos não apresentaram boa concordância na descrição dos dados da simulação, o que demonstrou a necessidade de realização de um ajuste matemático para a descrição destes dados. Os ajustes foram feitos sobre a Equação de Avrami, Equação (2), e foram descritos em mais detalhes nas seções 5.2, para o caso de nucleação individual nos vértices, e, na seção 5.5, são fornecidas mais informações sobre o ajuste que foi realizado para as reações simultâneas, nucleadas nos vértices e nas faces.

Assim, as linhas contínuas nos gráficos de V_V versus Tempo, S_V versus Tempo e caminho microestrutural na seção 5.2 foram obtidas através deste ajuste e de suas derivações.

Na seção 5.5, os ajustes feitos para as reações nucleadas nos vértices e nas faces são aplicados ao princípio da superposição para representar nos gráficos de V_V versus Tempo, S_V versus Tempo e caminho microestrutural as linhas pontilhadas e tracejadas respectivamente.

Os cálculos analíticos foram feitos com as médias dos resultados dos resultados de 50 simulações realizadas seguindo a configuração de nucleação apresentada no título dos tópicos.

5.1 REAÇÕES INDIVIDUAIS NUCLEADAS EM SÍTIOS ALEATÓRIOS DE UM POLICRISTAL

Partindo de uma tesselação de Poisson-Voronoi com 30 grãos, os vértices desta foram identificados e a nucleação ocorreu de maneira uniformemente aleatória, seguindo um processo de ponto homogêneo de Poisson, com a quantidade de núcleos obedecendo o proposto pela Equação (16).

5.1.1 Reações Nucleadas em Sítios Aleatórios com Coeficiente de Nucleação $x = 1$

Para um coeficiente $x = 1$, o número de núcleos sorteados em sítios aleatórios da matriz teve uma média de $N = 197,64$. Na Figura 20, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.1.5.

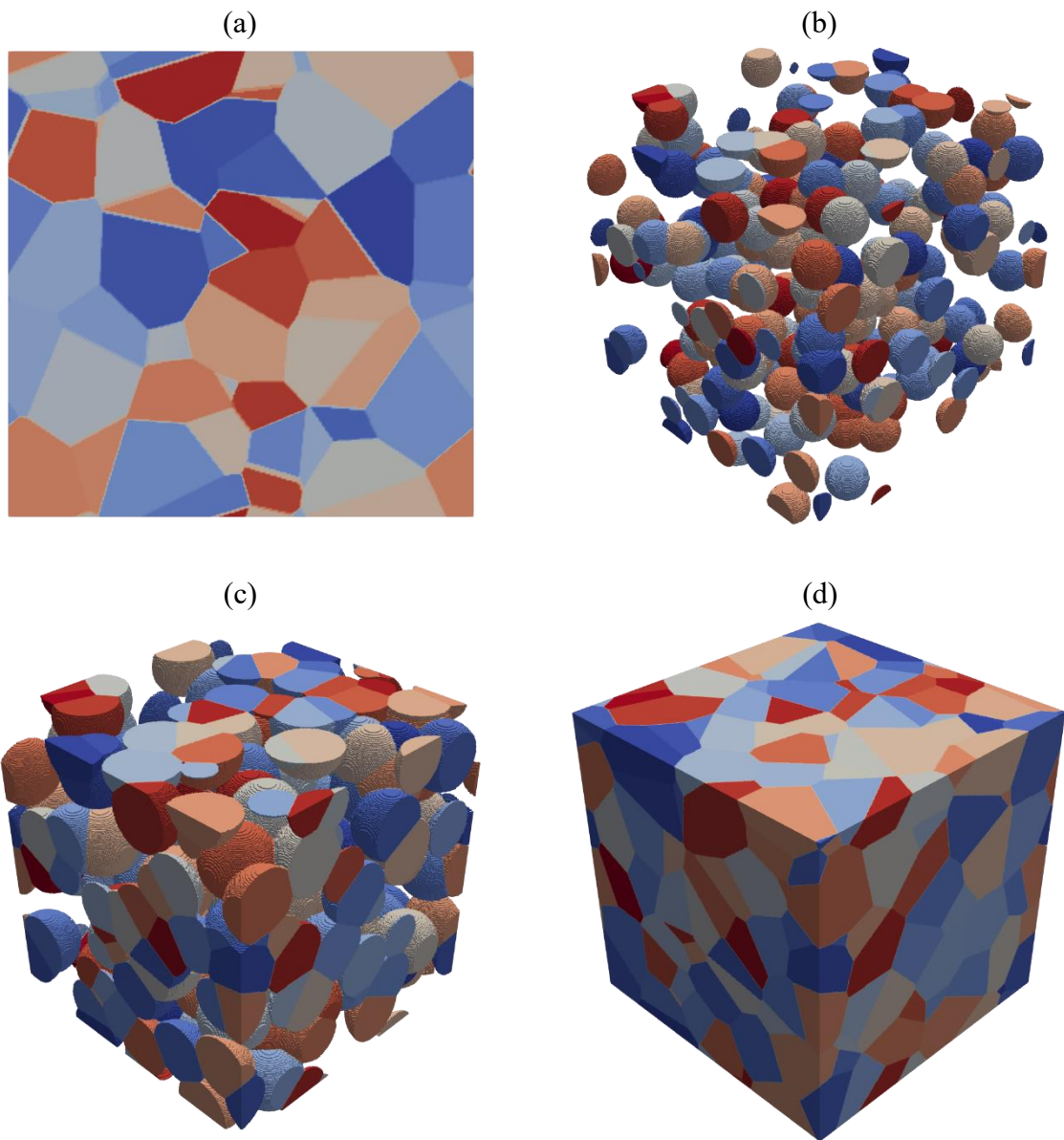


Figura 20 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas em sítios aleatórios de uma matriz, para $N = 200$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.

Fonte: O autor.

As médias dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 21, e são discutidas na seção 5.1.5. As linhas contínuas representam o modelo analítico exato de JMAK e os pontos circulares representam os dados de simulação da nucleação realizada em sítios aleatórios da matriz. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson e os pontos circulares representam os dados de contiguidade provenientes da simulação.

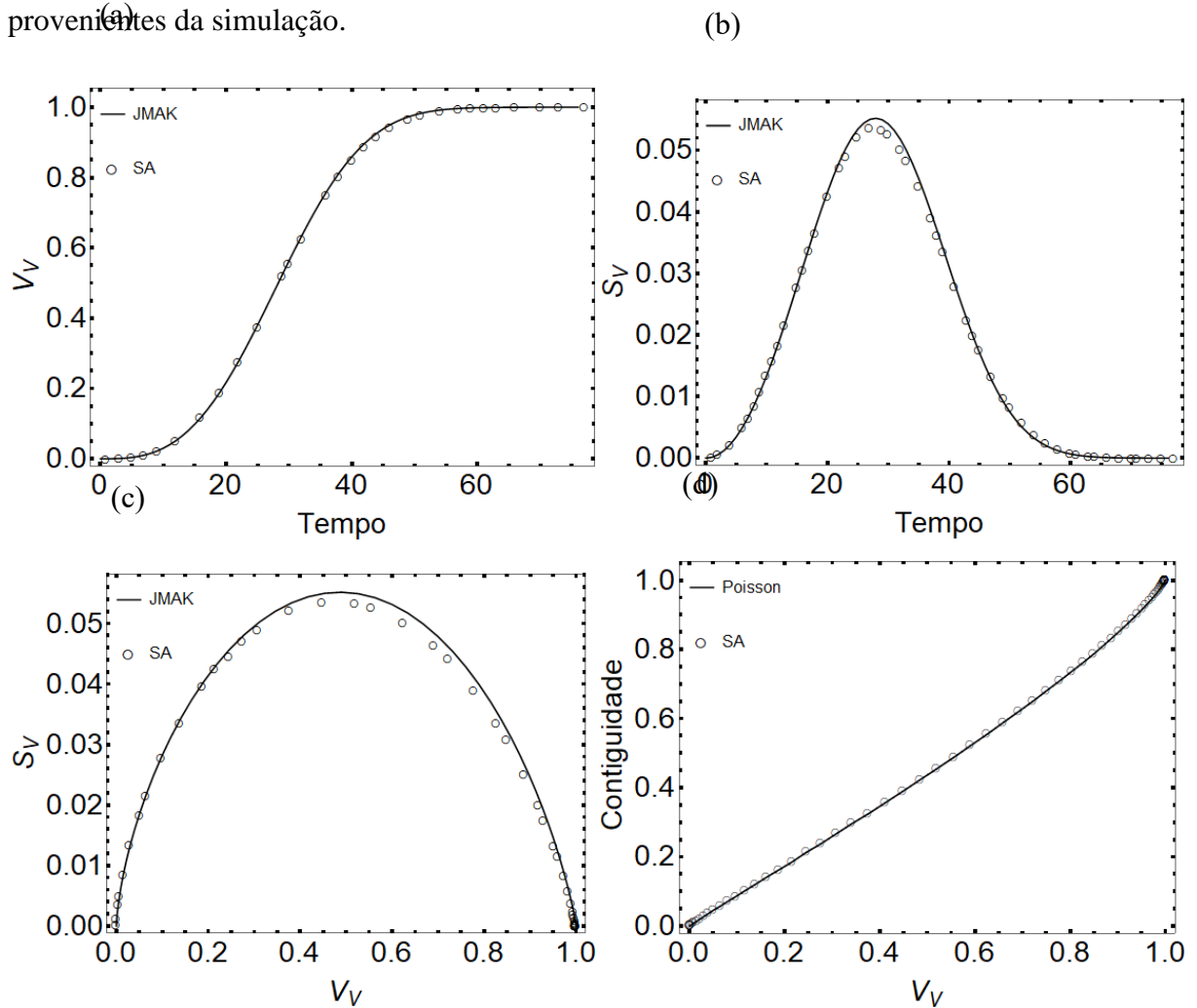


Figura 21 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas em sítios aleatórios da matriz, para $N = 197,64$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.1.2 Reações Nucleadas em Sítios Aleatórios com Coeficiente de Nucleação $\alpha = 2$

Para um coeficiente $\alpha = 2$, o número de núcleos sorteados em sítios aleatórios da matriz teve uma média de $N = 406,84$. Na Figura 22, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.1.5.

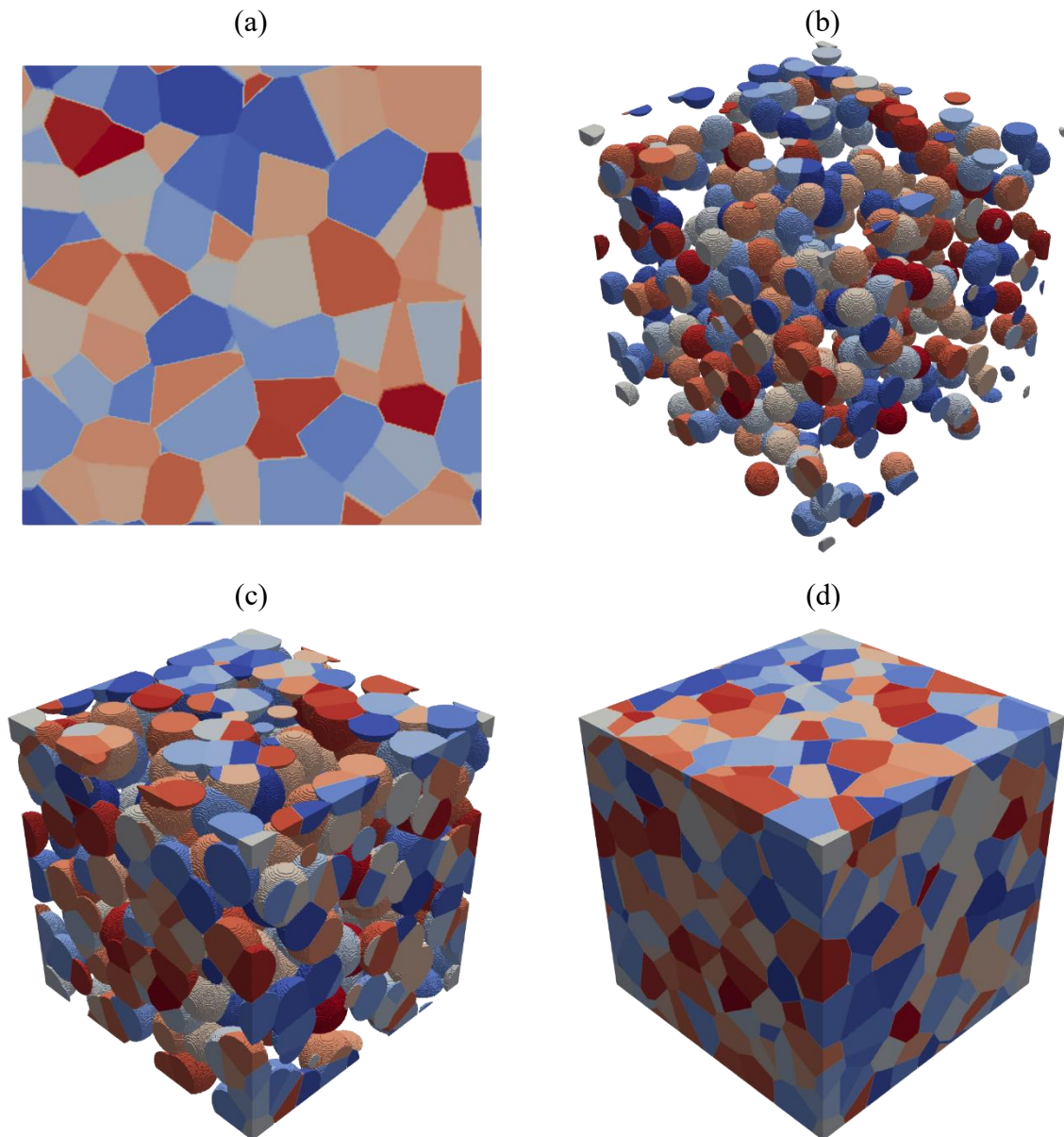


Figura 22 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas em sítios aleatórios de uma matriz, para $N = 394$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.

Fonte: O autor.

As médias dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 23, e são discutidas na seção 5.1.5. As linhas contínuas representam o modelo analítico exato de JMAK e os pontos circulares representam os dados de simulação da nucleação realizada em sítios aleatórios da matriz. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson e os pontos circulares representam os dados de contiguidade provenientes da simulação.

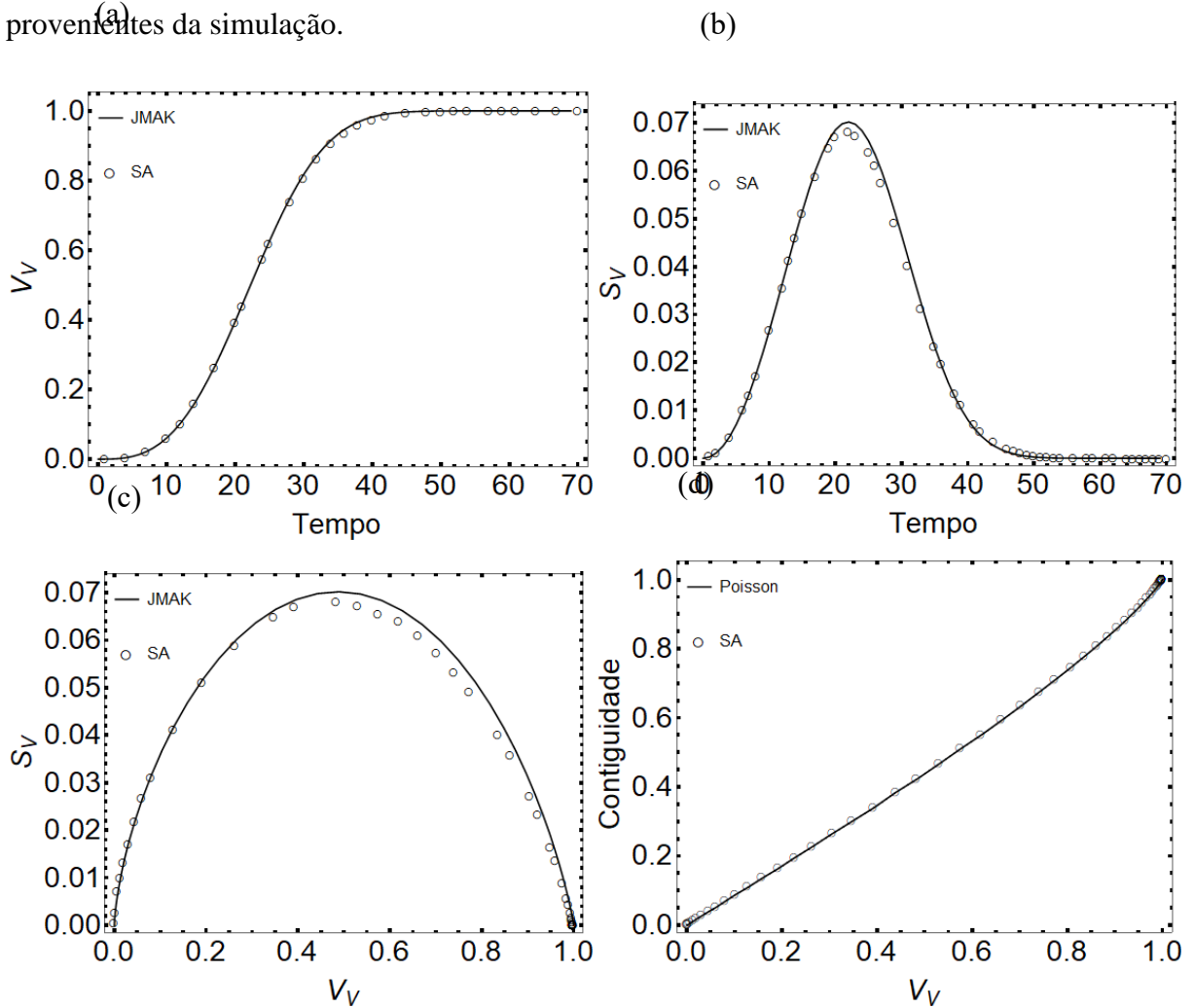


Figura 23 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas em sítios aleatórios da matriz, para $N = 406,84$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.1.3 Reações Nucleadas em Sítios Aleatórios com Coeficiente de Nucleação $\alpha = 3$

Para um coeficiente $\alpha = 3$, o número de núcleos sorteados em sítios aleatórios da matriz teve uma média de $N = 600$. Na Figura 24, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.1.5.

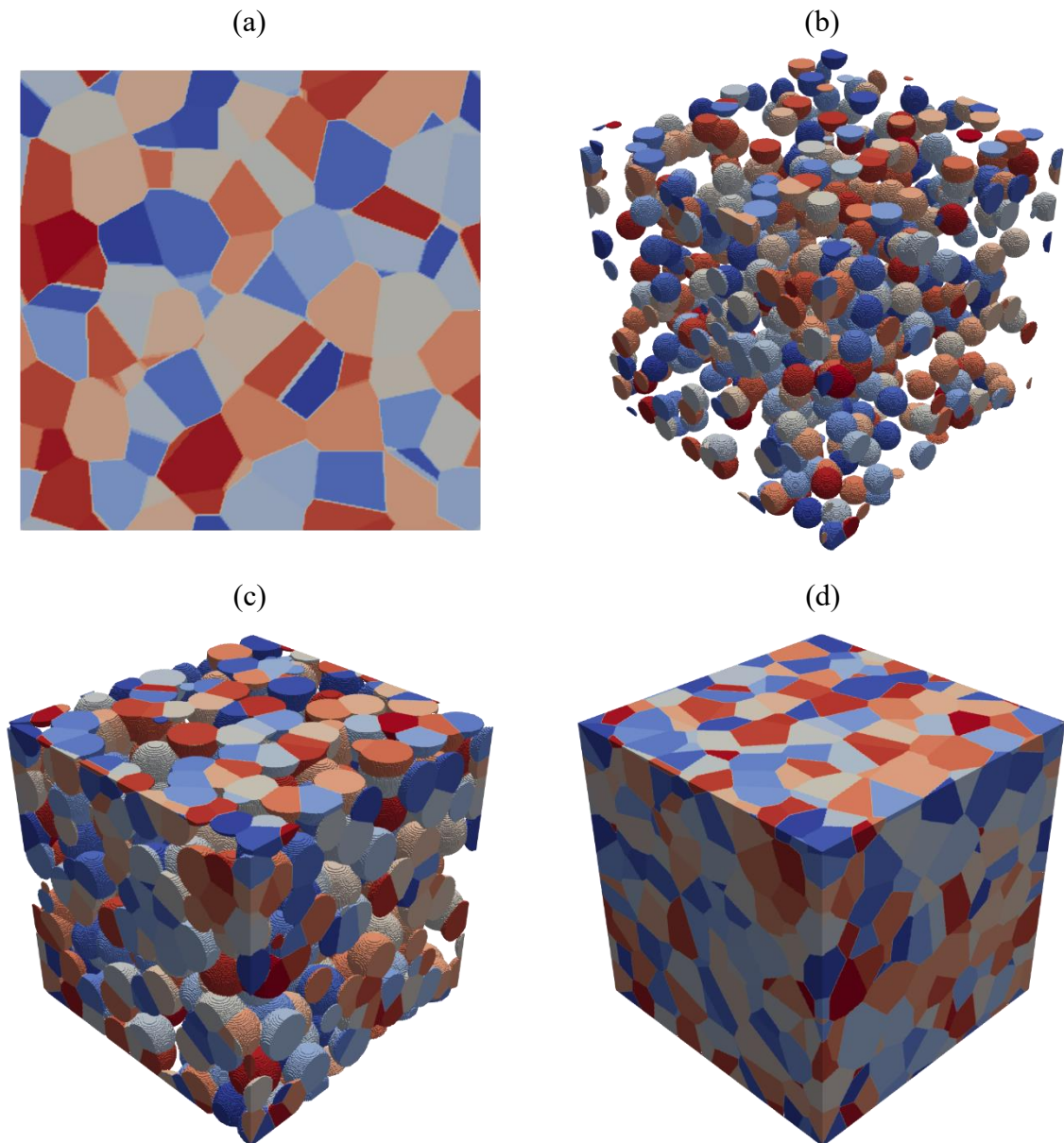


Figura 24 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas em sítios aleatórios de uma matriz, para $N=582$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.

Fonte: O autor.

A média dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 25, e são discutidas na seção 5.1.5. As linhas contínuas representam o modelo analítico exato de JMAK e os pontos circulares representam os dados de simulação da nucleação realizada em sítios aleatórios da matriz. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson e os pontos circulares representam os dados de contiguidade provenientes da simulação.

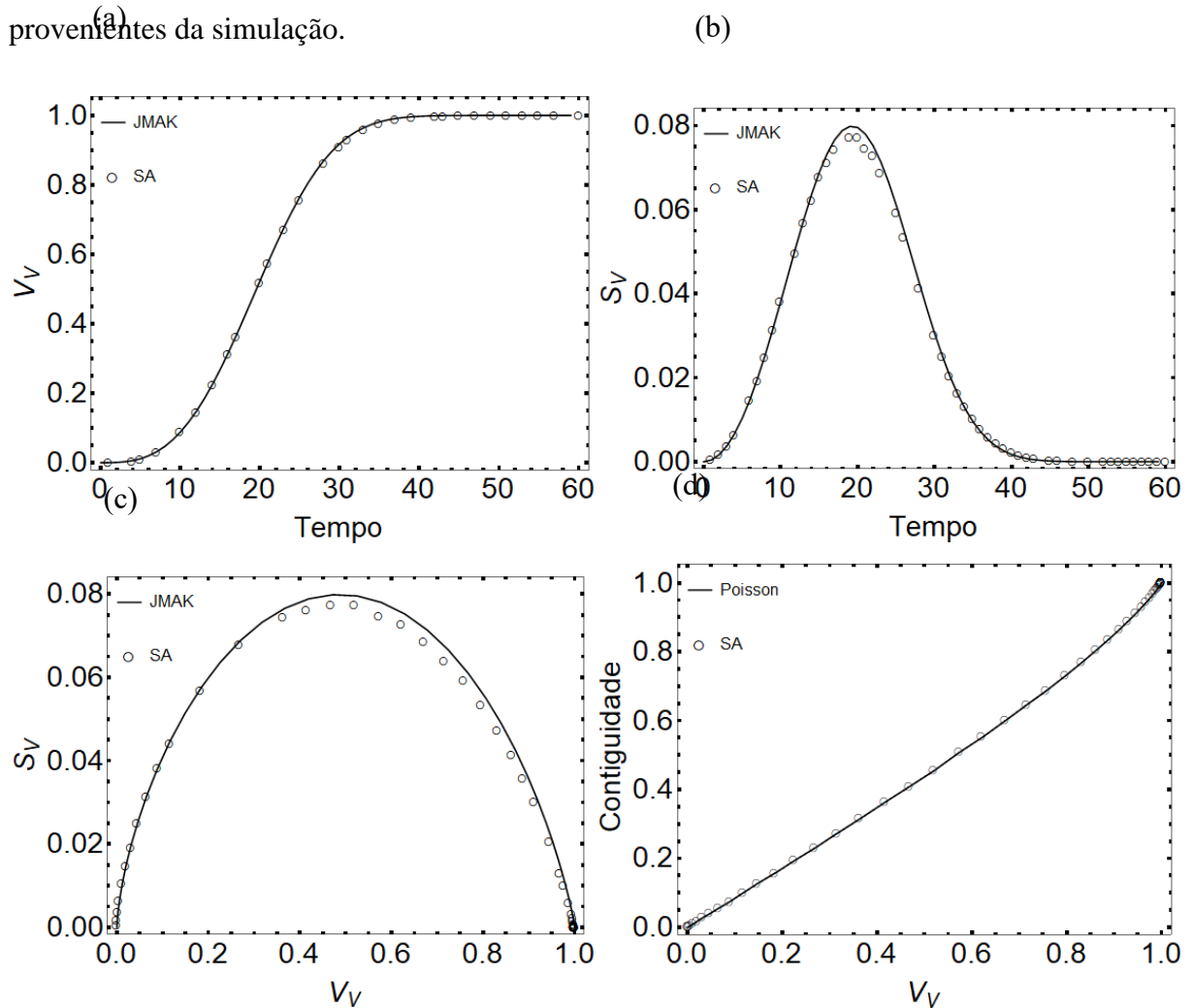


Figura 25 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas em sítios aleatórios da matriz, para $N = 600$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.1.4 Reações Nucleadas em Sítios Aleatórios com Coeficiente de Nucleação $\alpha = 5$

Para um coeficiente $\alpha = 5$, o número de núcleos sorteados em sítios aleatórios da matriz teve uma média de $N = 960,5$. Na Figura 26, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.1.5.

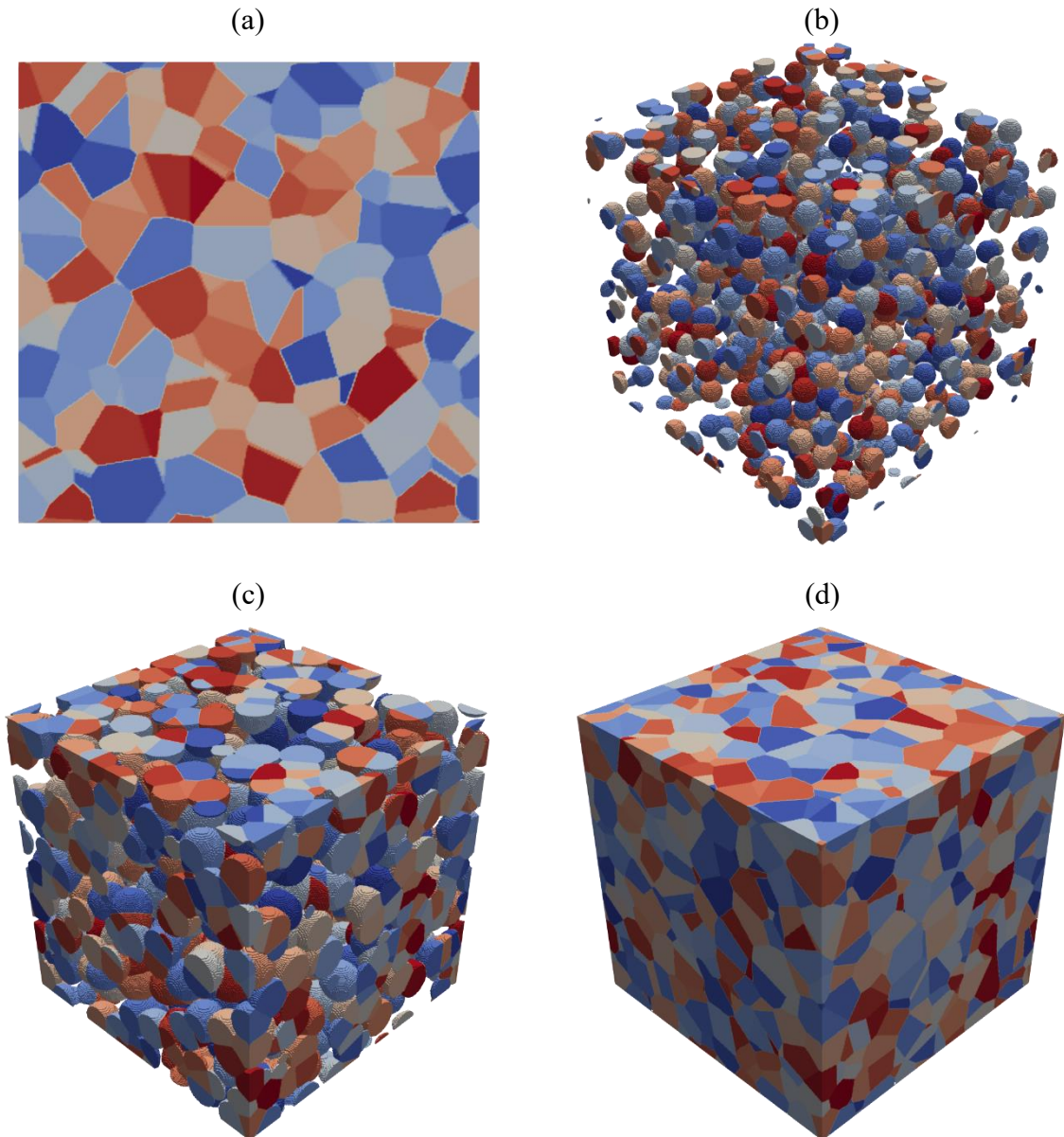


Figura 26 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas em sítios aleatórios de uma matriz, para $N=1085$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.

Fonte: O autor.

A média dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 27, e são discutidas na seção 5.1.5. As linhas contínuas representam o modelo analítico exato de JMAK e os pontos circulares representam os dados de simulação da nucleação realizada em sítios aleatórios da matriz. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson e os pontos circulares representam os dados de contiguidade provenientes da simulação.

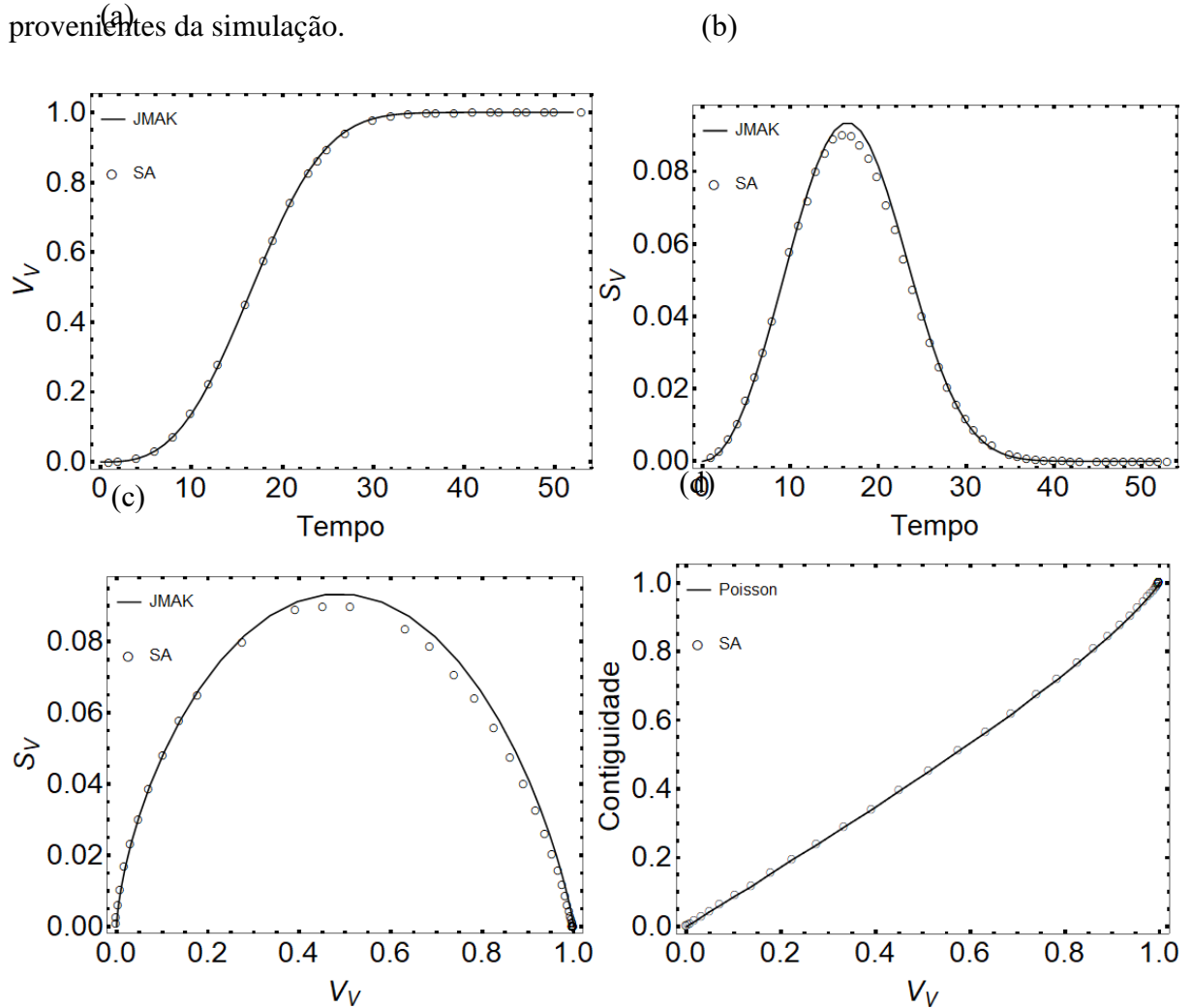


Figura 27 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas em sítios aleatórios da matriz, para $N = 960,5$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.1.5 Estudo das Simulações Individuais Nucleadas em Sítios Aleatórios de uma Matriz

As Figuras 20, 22, 24 e 26 mostram microestruturas típicas de transformações nucleadas em sítios resultantes de um processo de ponto homogêneo de Poisson

(uniformemente aleatórios), em conformidade com resultados obtidos previamente por Oliveira [7], Alves [19], [31] e Alves *et al.* [8], [47]

As Figuras 21, 23, 25 e 27 mostram a cinética em suas partes (a) e (b), o caminho microestrutural na parte (c) e a contiguidade na parte (d). Independentemente do número de núcleos utilizado na simulação, todas as curvas seguiram os modelos analíticos para este tipo de transformação. [2]–[6], [27], [48].

Neste caso, a boa concordância encontrada entre os modelos analíticos exatos e os resultados da simulação indica que a simulação é válida.

5.2 REAÇÕES INDIVIDUAIS NUCLEADAS NOS VÉRTICES DE UM POLICRISTAL

As reações desta seção foram simuladas para matrizes iniciais com diferentes quantidades de grãos, obtendo-se os resultados para uma distribuição da quantidade de vértices. Todos os vértices da tesselação de Poisson-Voronoi obtida a cada iteração foram utilizados como sítios de nucleação para a simulação de nucleação e crescimento.

Nesta seção, foi realizado um ajuste matemático para representar a evolução da fração volumétrica transformada em função do tempo de reação. O ajuste foi feito sobre a Equação de Avrami, Equação (2), e maiores detalhes são apresentados na seção 5.2.7.

5.2.1 Reações Nucleadas nos Vértices de uma Matriz Inicial contendo 30 grãos

Para os processos de ponto homogêneo de Poisson com intensidade 30, o número de núcleos teve uma média de $N = 181,72$. Na Figura 28, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.2.7.

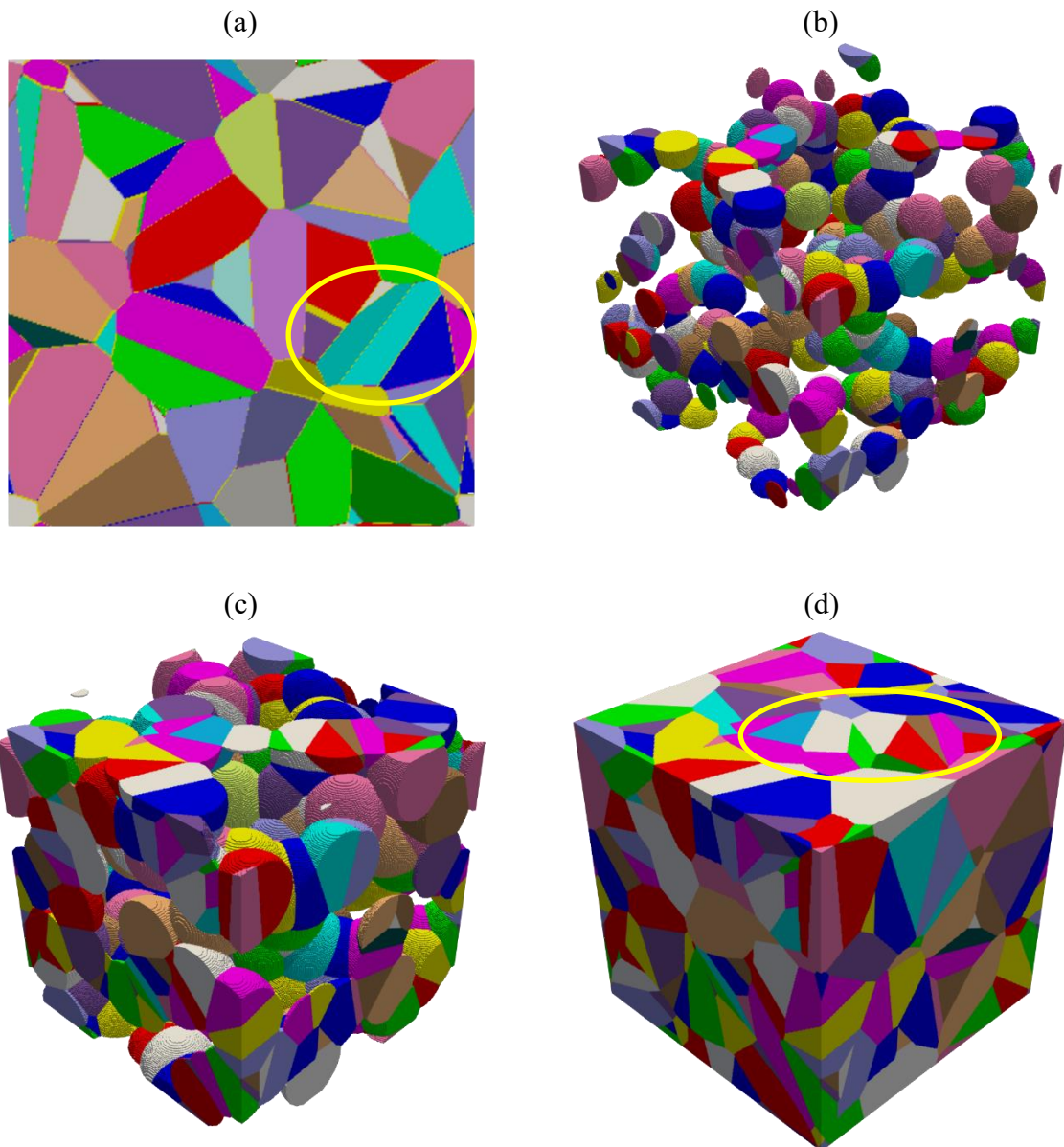


Figura 28 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 269$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.

Fonte: O autor.

As médias dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 29, e são discutidas na seção 5.2.7. As linhas contínuas representam a equação analítica obtida por ajuste dos dados de simulações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, a linha tracejada representa o modelo analítico exato de JMAK e os pontos triangulares representam os resultados da simulação. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson e os pontos triangulares representam os dados de contiguidade provenientes da simulação.

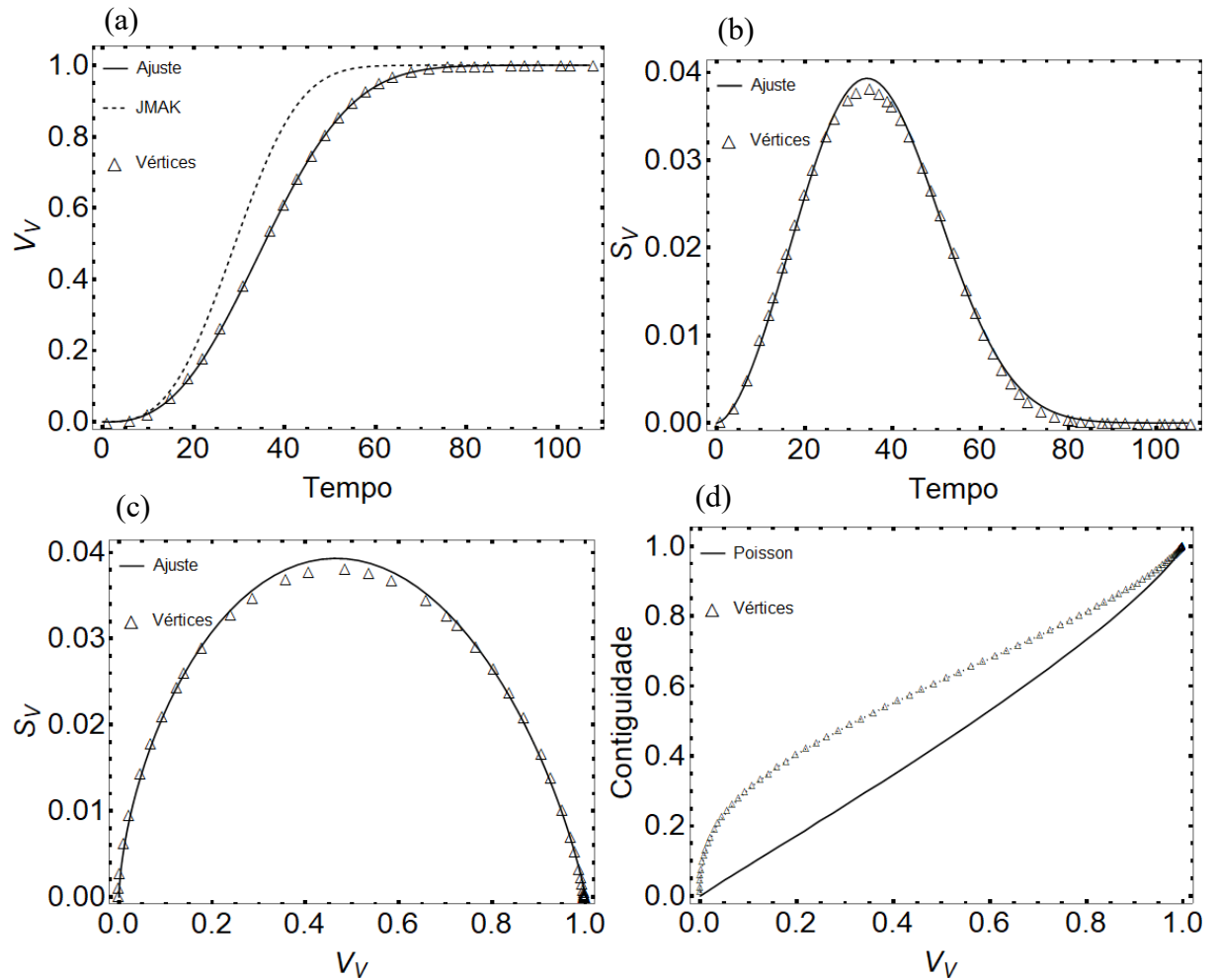


Figura 29 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 181,72$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.2.2 Reações Nucleadas nos Vértices de uma Matriz Inicial contendo 50 grãos

Para os processos de ponto homogêneo de Poisson com intensidade 50, o número de núcleos teve uma média de $N = 329,58$. Na Figura 30, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.2.7.

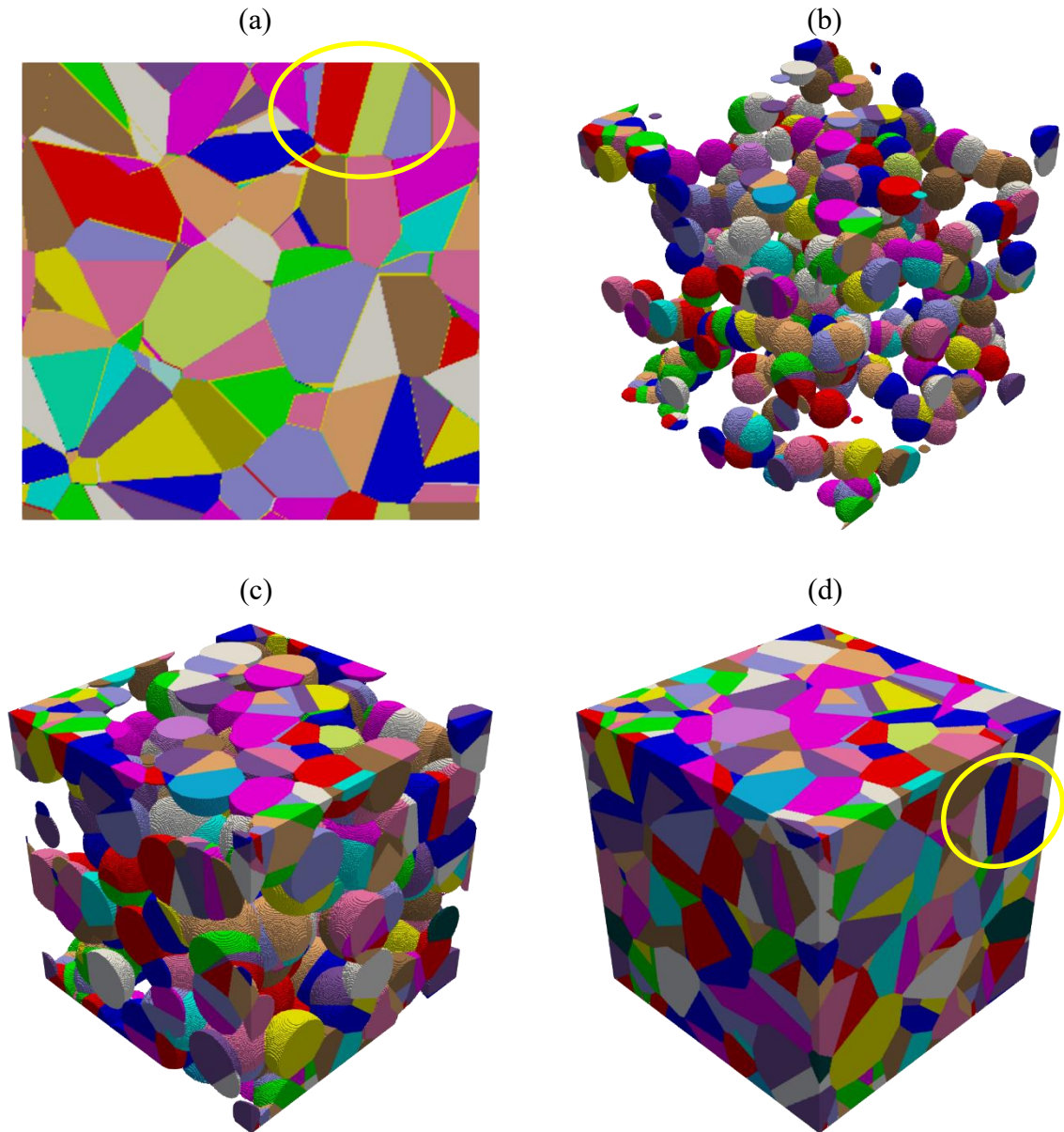


Figura 30 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 424$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.

Fonte: O autor.

As médias dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 31, e são discutidas na seção 5.2.7. As linhas contínuas representam a equação analítica obtida por ajuste dos dados de simulações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, a linha tracejada representa o modelo analítico exato de JMAK e os pontos triangulares representam os resultados da simulação. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson e os pontos triangulares representam os dados de contiguidade provenientes da simulação.

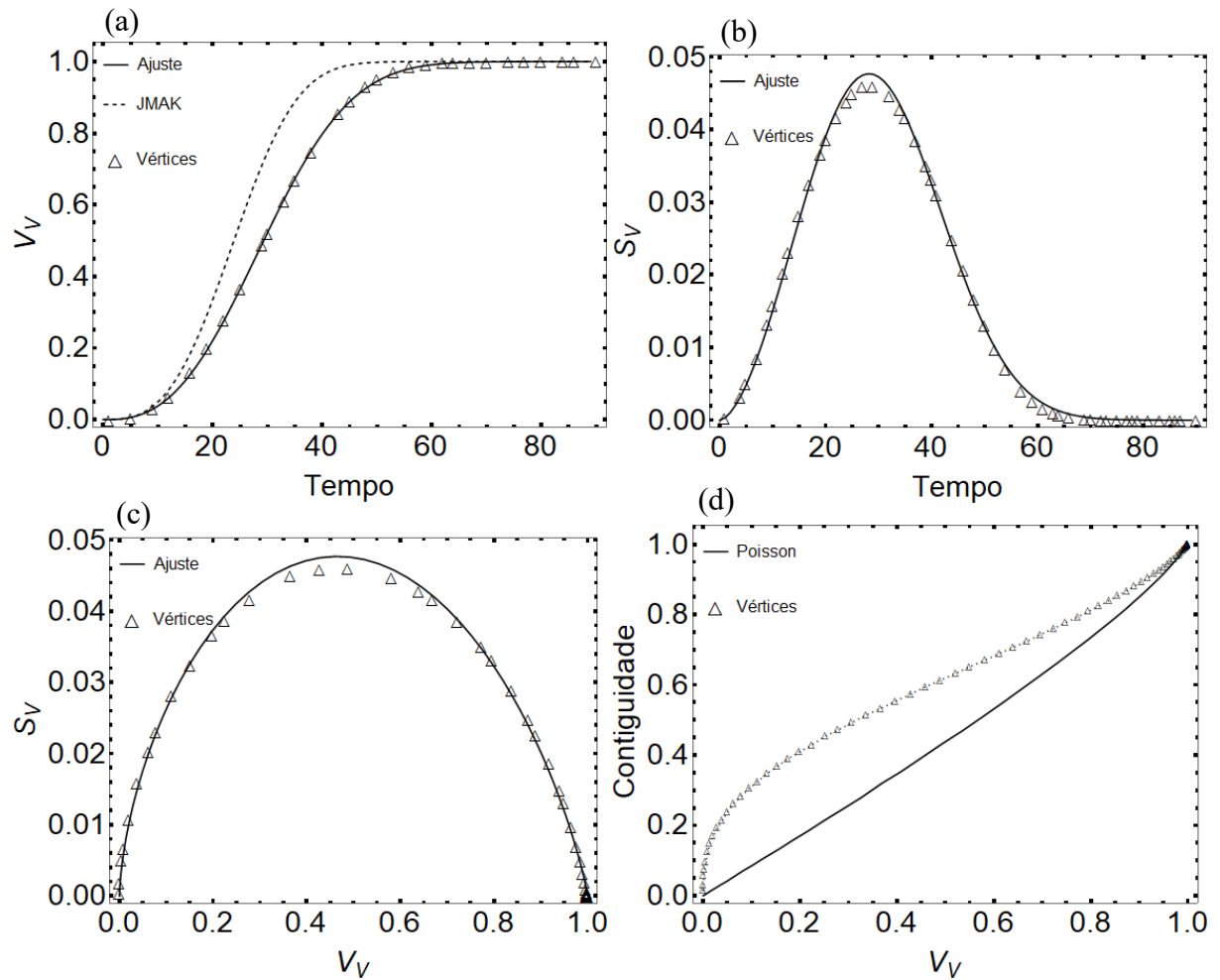


Figura 31 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 329,58$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.2.3 Reações Nucleadas nos Vértices de uma Matriz Inicial contendo 100 grãos

Para os processos de ponto homogêneo de Poisson com intensidade 100, o número de núcleos teve uma média de $N = 661,22$. Na Figura 32, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.2.7.

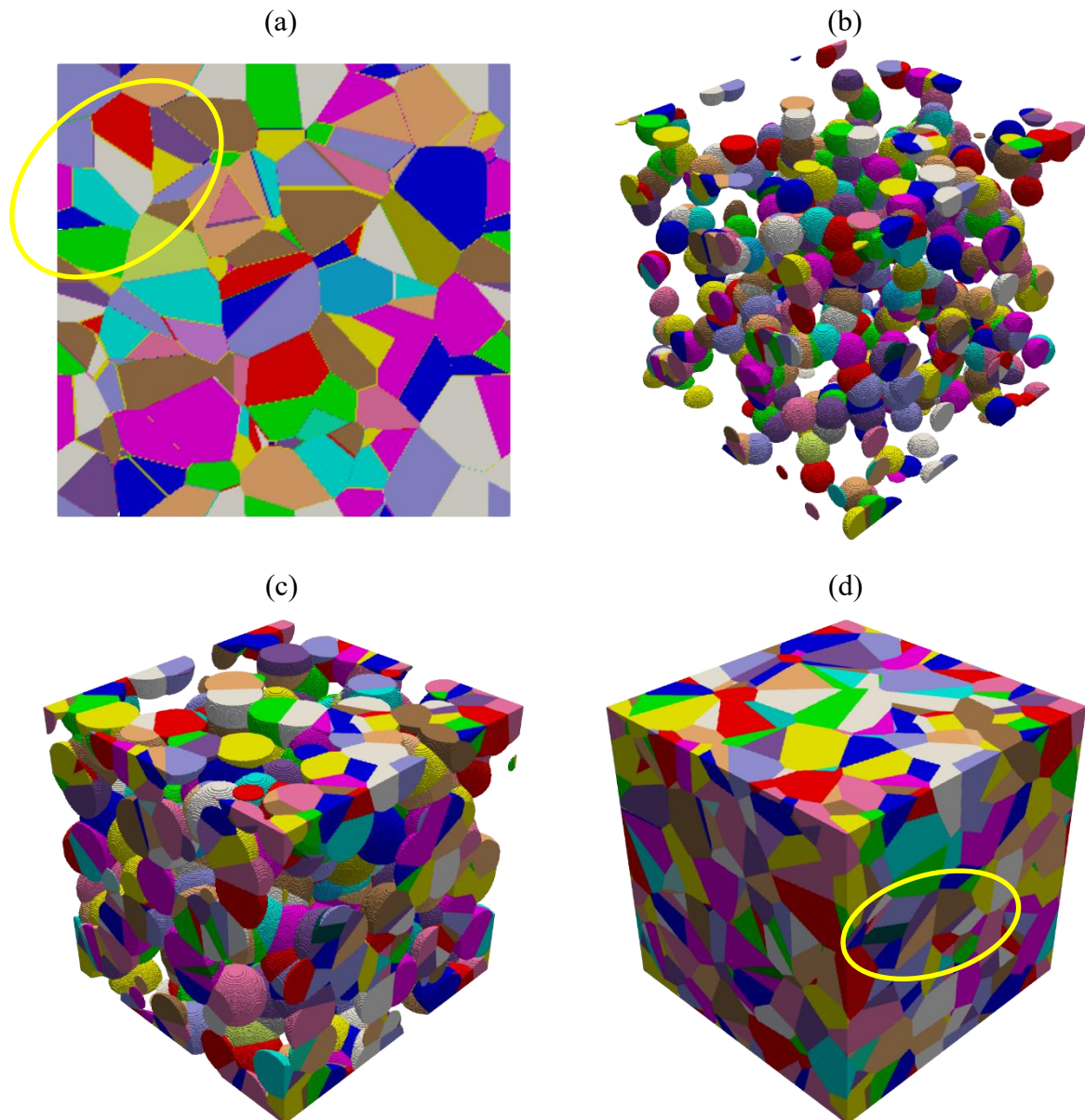


Figura 32 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 622$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.

Fonte: O autor.

As médias dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 33, e são discutidas na seção 5.2.7. As linhas contínuas representam a equação analítica obtida por ajuste dos dados de simulações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, a linha tracejada representa o modelo analítico exato de JMAK e os pontos triangulares representam os resultados da simulação. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson e os pontos triangulares representam os dados de contiguidade provenientes da simulação.

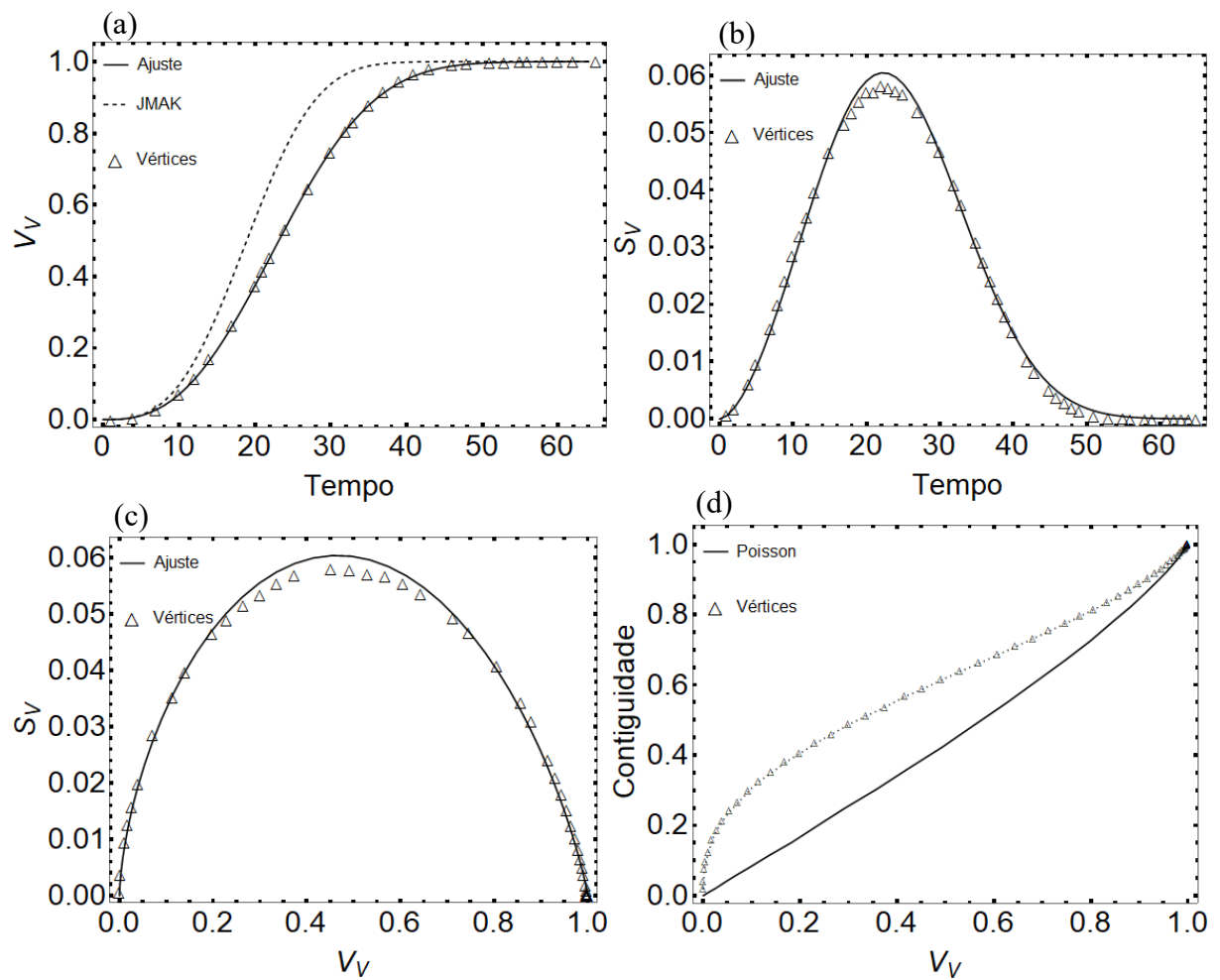


Figura 33 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 661,22$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.2.4 Reações Nucleadas nos Vértices de uma Matriz Inicial contendo 200 grãos

Para os processos de ponto homogêneo de Poisson com intensidade 200, o número de núcleos teve uma média de $N = 1303,54$. Na Figura 34, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.2.7.

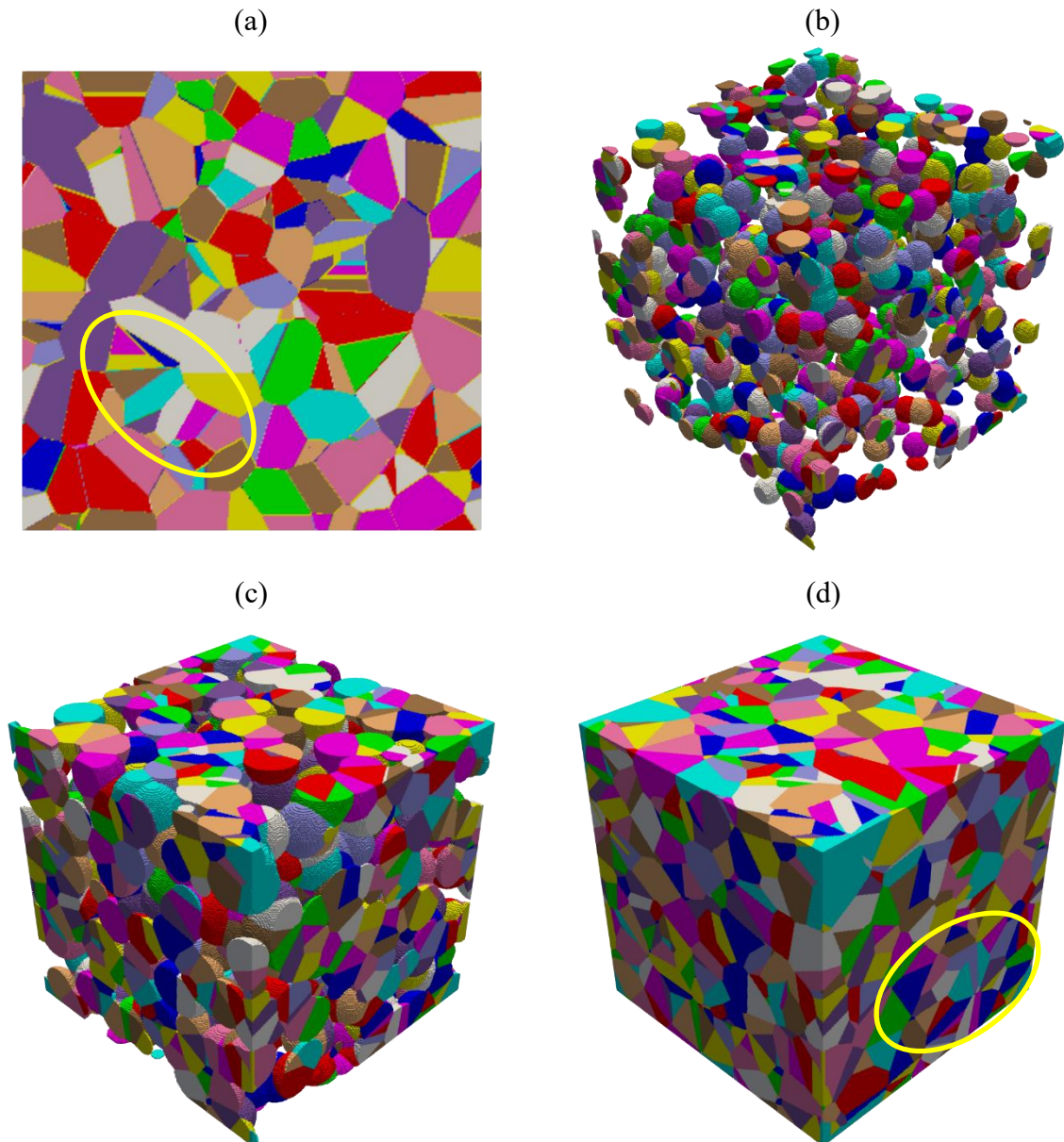


Figura 34 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 1215$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.

Fonte: O autor.

As médias dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 35, e são discutidas na seção 5.2.7. As linhas contínuas representam a equação analítica obtida por ajuste dos dados de simulações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, a linha tracejada representa o modelo analítico exato de JMAK e os pontos triangulares representam os resultados da simulação. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson e os pontos triangulares representam os dados de contiguidade provenientes da simulação.

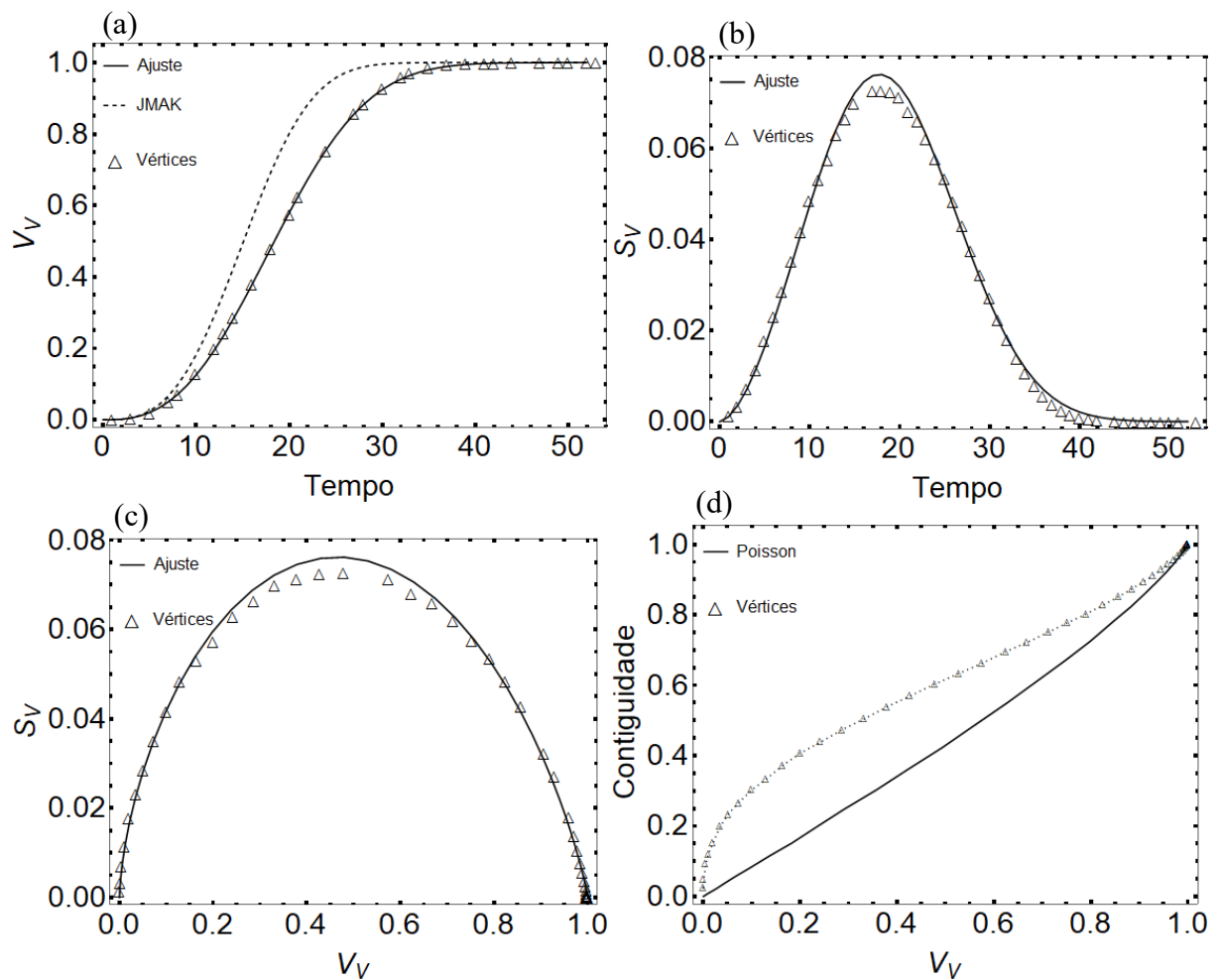


Figura 35 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 1303,54$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.2.5 Reações Nucleadas nos Vértices de uma Matriz Inicial contendo 500 grãos

Para os processos de ponto homogêneo de Poisson com intensidade 500, o número de núcleos teve uma média de $N = 3241,40$. Na Figura 36, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.2.7.

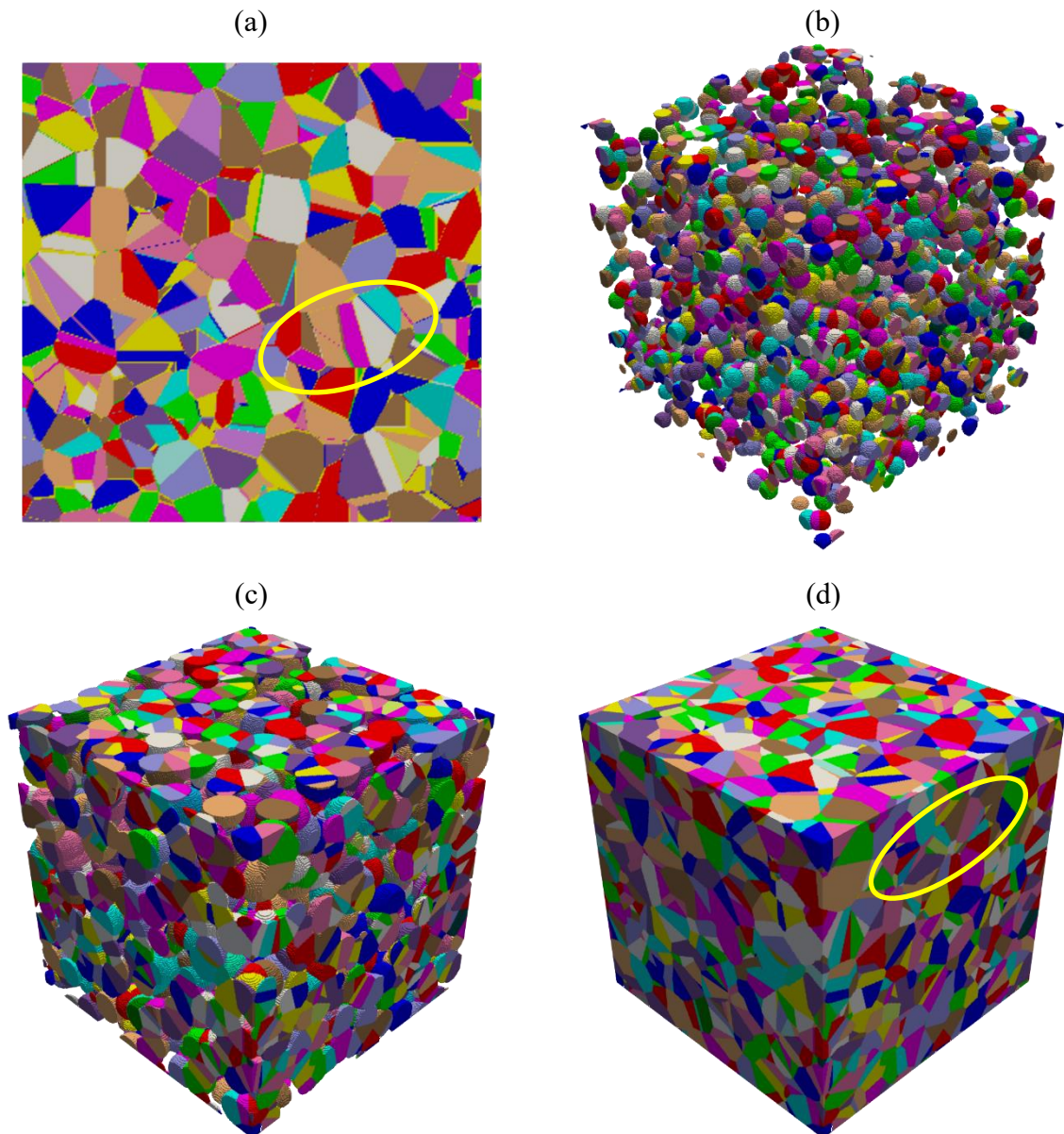


Figura 36 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 3368$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.

Fonte: O autor.

As médias dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 37, e são discutidas na seção 5.2.7. As linhas contínuas representam a equação analítica obtida por ajuste dos dados de simulações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, a linha tracejada representa o modelo analítico exato de JMAK e os pontos triangulares representam os resultados da simulação. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson e os pontos triangulares representam os dados de contiguidade provenientes da simulação.

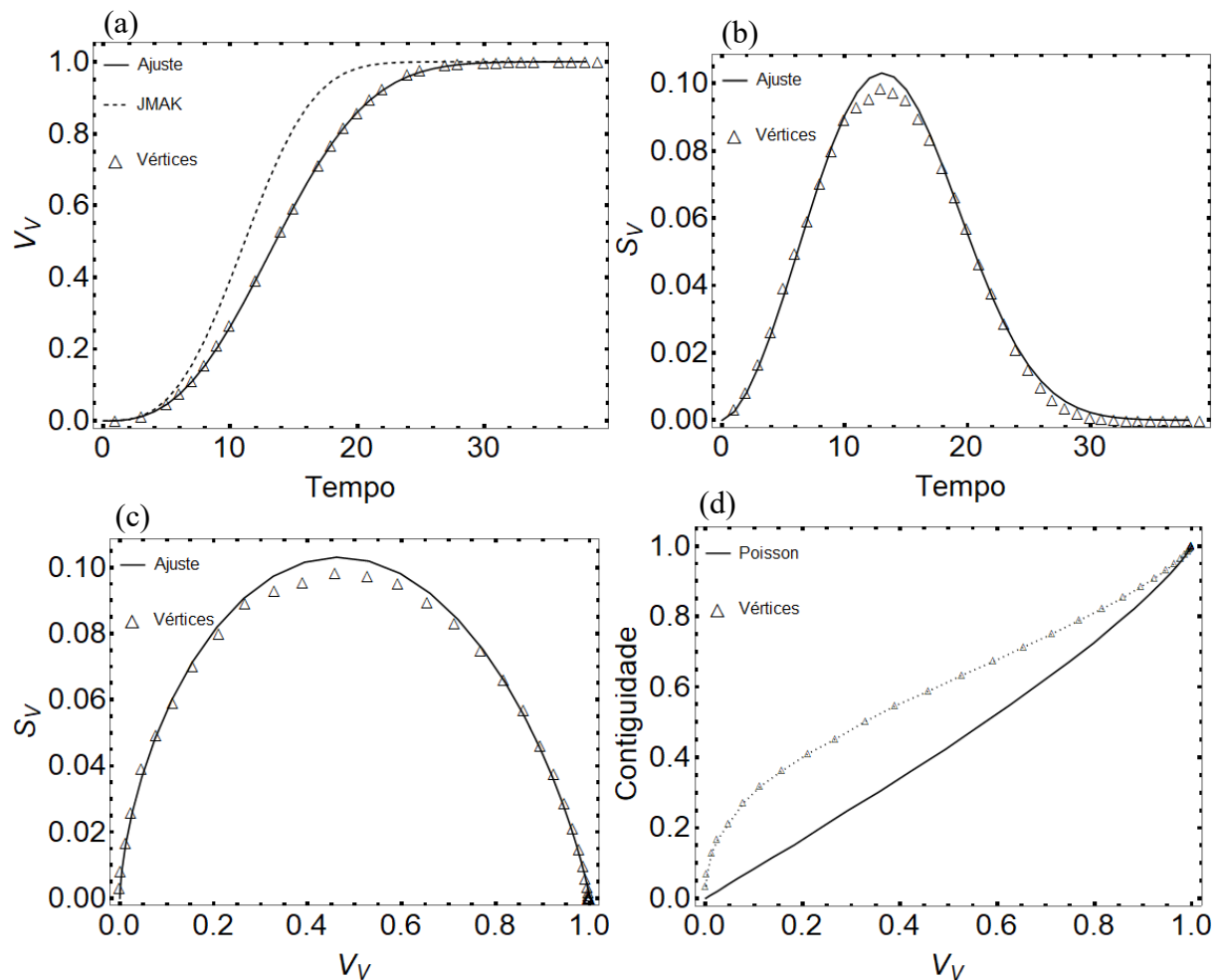


Figura 37 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 3241,40$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.2.6 Reações Nucleadas nos Vértices de uma Matriz Inicial contendo 1000 grãos

Para os processos de ponto homogêneo de Poisson com intensidade 1000, o número de núcleos teve uma média de $N = 6438,54$. Na Figura 38, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.2.7.

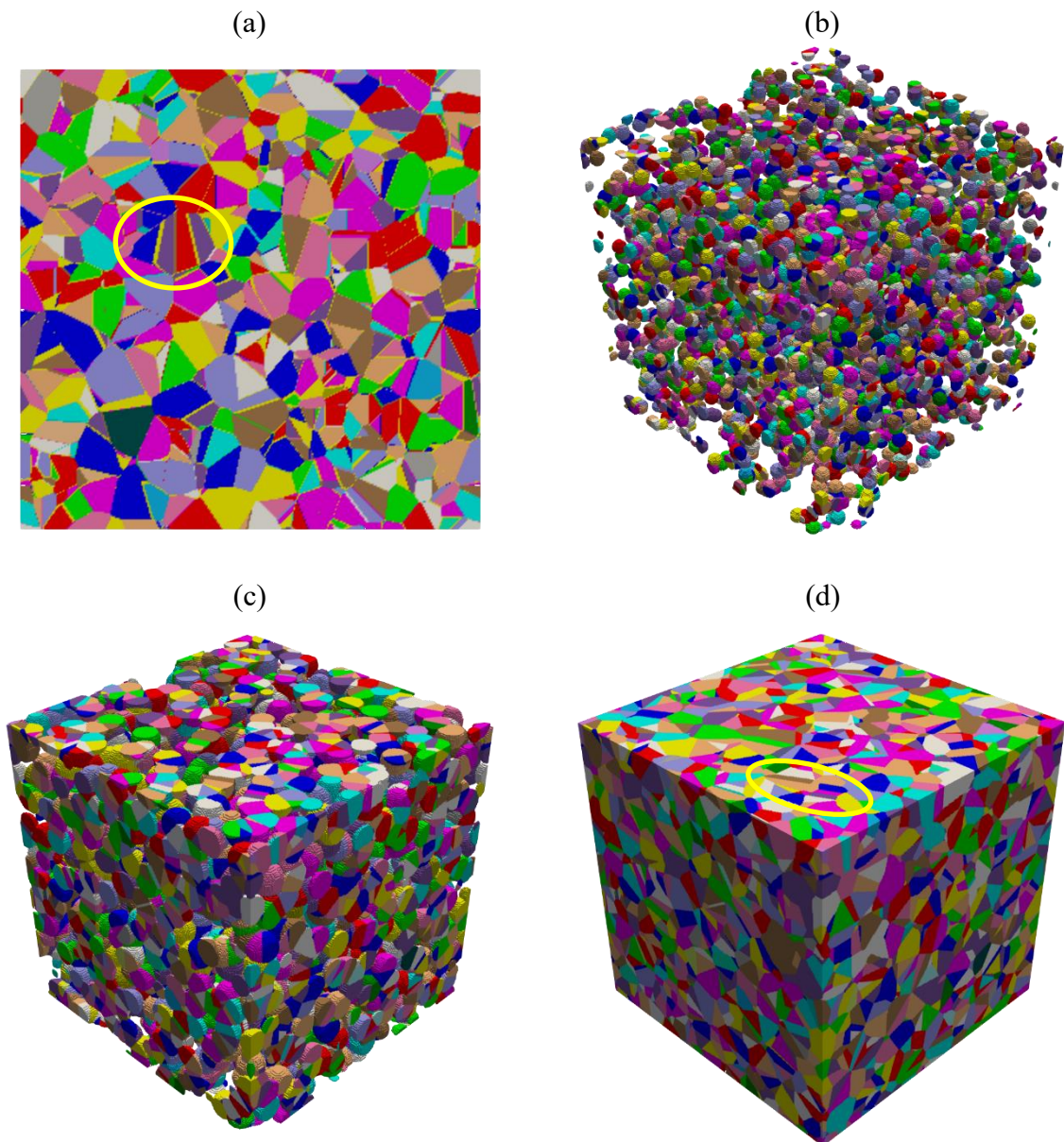


Figura 38 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 6473$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.

Fonte: O autor.

As médias dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 39, e são discutidas na seção 5.2.7. As linhas contínuas representam a equação analítica obtida por ajuste dos dados de simulações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, a linha tracejada representa o modelo analítico exato de JMAK e os pontos triangulares representam os resultados da simulação. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson e os pontos triangulares representam os dados de contiguidade provenientes da simulação.

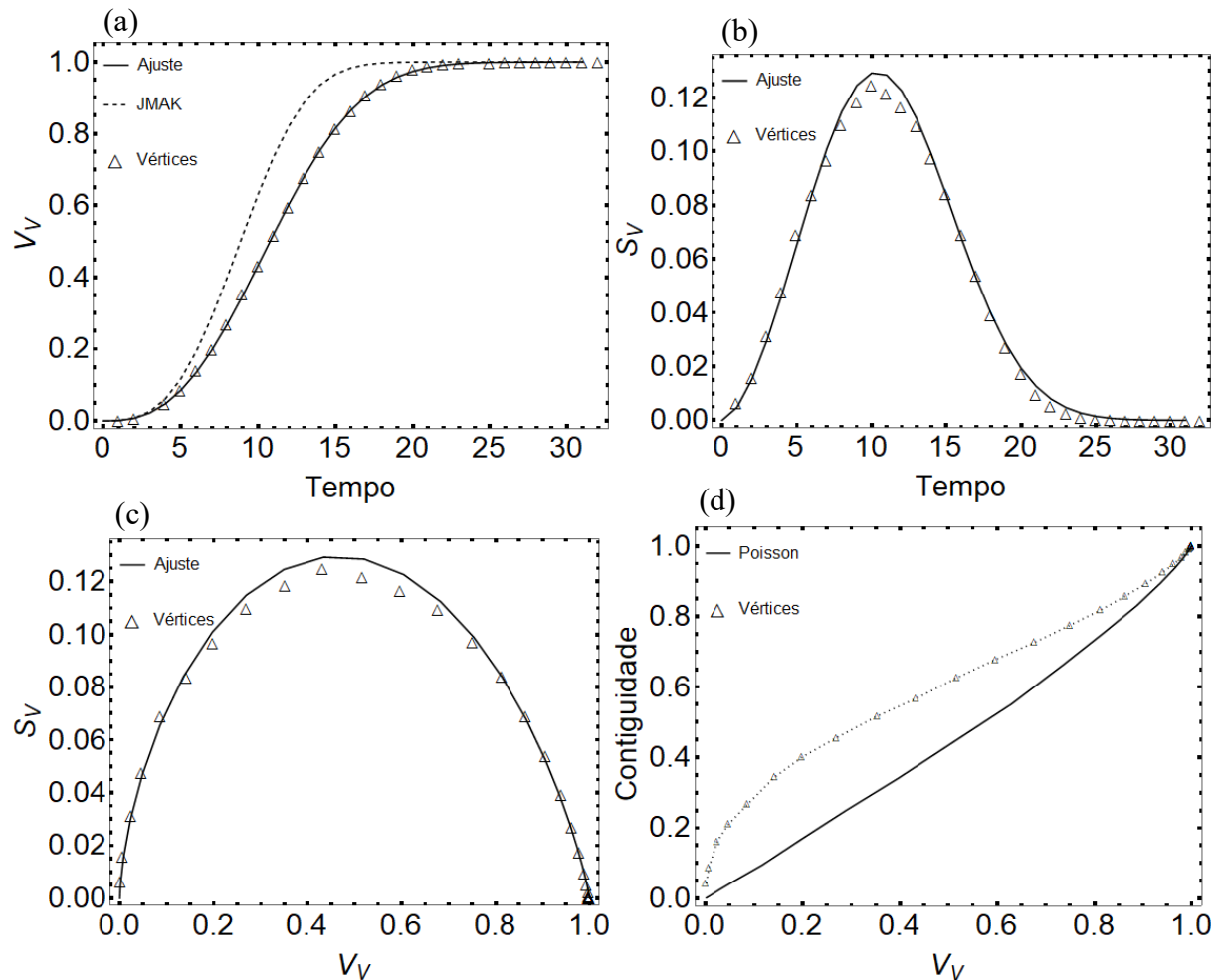


Figura 39 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 6438,54$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.2.7 Estudo das Simulações Individuais Nucleadas nos Vértices de um Policristal

Como pode ser visto nas Figuras 28, 30, 32, 34, 36 e 38, os grãos da microestrutura completamente transformada apresentam grãos equiaxiais e grãos alongados com

exemplificações destacadas em amarelo para todos os casos, indicando uma concentração na localização dos vértices, isto é, uma não aleatoriedade, como demonstrado por Heinrich *et al.* [41] e apresentado por Chiu *et al.* [32]. A inspeção visual sugere que as microestruturas são diferentes, mas é necessária uma análise quantitativa.

As figuras 29, 31, 33, 35, 37 e 39 mostram a cinética das reações em suas partes (a) e (b), o caminho microestrutural na parte (c) e a contiguidade na parte (d). Independentemente do número de núcleos utilizado na simulação, as curvas não estão de acordo com os modelos analíticos exatos, como demonstra a discrepância existente entre a curva do modelo de JMAK, representada pela linha tracejada, e os valores resultantes da simulação para a reação nucleada nos vértices, representada pelos triângulos. As linhas contínuas observadas nos gráficos foram resultado de ajuste. Os resultados desses ajustes são sumarizados na Tabela 3.

Tabela 3 – Parâmetros cinéticos dos ajustes realizados para as simulações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi.

Intensidade do Processo de Ponto, λ	k	n	R^2
30	$4,9469 \times 10^{-5}$	2,6754	0,9999
50	$8,2491 \times 10^{-5}$	2,6763	0,9999
100	$1,5215 \times 10^{-4}$	2,6816	0,9999
200	$2,7698 \times 10^{-4}$	2,6872	0,9999
500	$6,3863 \times 10^{-4}$	2,6808	0,9999
1000	$1,2049 \times 10^{-3}$	2,6743	0,9999

Fonte: O autor.

Nota-se que todos os ajustes obtiveram excelente concordância com os valores simulados, isto demonstra que a cinética das reações nucleadas em vértices de um policristal pode ser representada de maneira satisfatória quando os parâmetros ajustáveis da Equação de Avrami, apresentada na Equação (2).

Essa não concordância com os modelos analíticos exatos demonstra que os vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi não são um processo de ponto de Poisson (uniformemente aleatório). Isto está de acordo com resultados obtidos por estudos analíticos [32], [41]. Em particular, a contiguidade mostra isto muito bem.

Na parte (d) das Figuras 29, 31, 33, 35, 37 e 39, a linha sólida corresponde à contiguidade de uma transformação nucleada em sítios localizados no espaço de acordo com

um processo de ponto de Poisson e a linha pontilhada corresponde à contiguidade da transformação simulada, nucleada nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi. A diferença entre as duas linhas é marcante. Note que este resultado independe do número de núcleos utilizado, como pode ser observado na Figura 40.

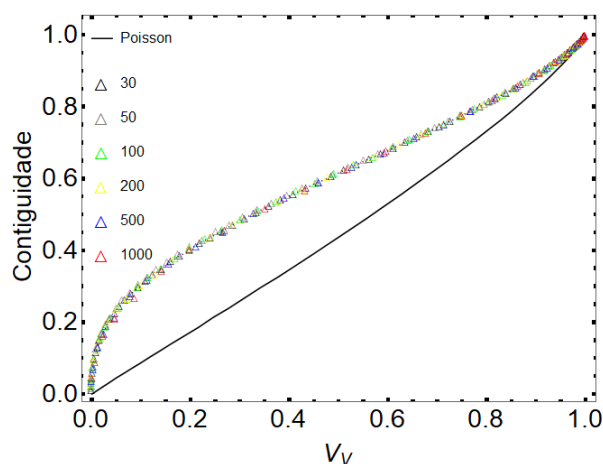


Figura 40 – Contiguidade versus V_V das reações nucleadas nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi para diferentes intensidades do processo de ponto de Poisson homogêneo.

Fonte: O autor.

Uma importante constatação permitida pela análise da Figura 40 é a caracterização do processo de ponto dos vértices. Note-se que os pontos ficaram sobrepostos, demonstrando que a nucleação nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi acontece da mesma maneira, independentemente da intensidade do processo de ponto de Poisson homogêneo que gerou a matriz inicial. A concentração dos pontos acima da curva de contiguidade do processo de ponto de Poisson, representada pela curva contínua, evidencia uma proximidade na disposição dos vértices da tesselação de Poisson-Voronoi, isto é, uma não-aleatoriedade no processo de ponto dos vértices da tesselação.

5.3 REAÇÕES INDIVIDUAIS NUCLEADAS NAS FACES DE UM POLICRISTAL

Partindo de uma tesselação de Poisson-Voronoi, obtida a partir de um processo de ponto homogêneo de Poisson de intensidade 30, foi realizada a varredura da matriz e identificação de suas interfaces, que foram utilizadas como possíveis sítios de nucleação para a etapa de nucleação e crescimento. A quantidade de núcleos obedeceu a abordagem apresentada na Equação (16), utilizando a quantidade de vértices da respectiva matriz inicial, Q_v , e o parâmetro x estabelecido para cada caso.

5.3.1 Reações com Coeficiente de Nucleação $\alpha = 1/4$

Para um coeficiente $\alpha = 1/4$, o número de núcleos sorteados nas faces da tesselação de Poisson-Voronoi teve uma média de $N = 48,22$. Na Figura 41, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.3.6.

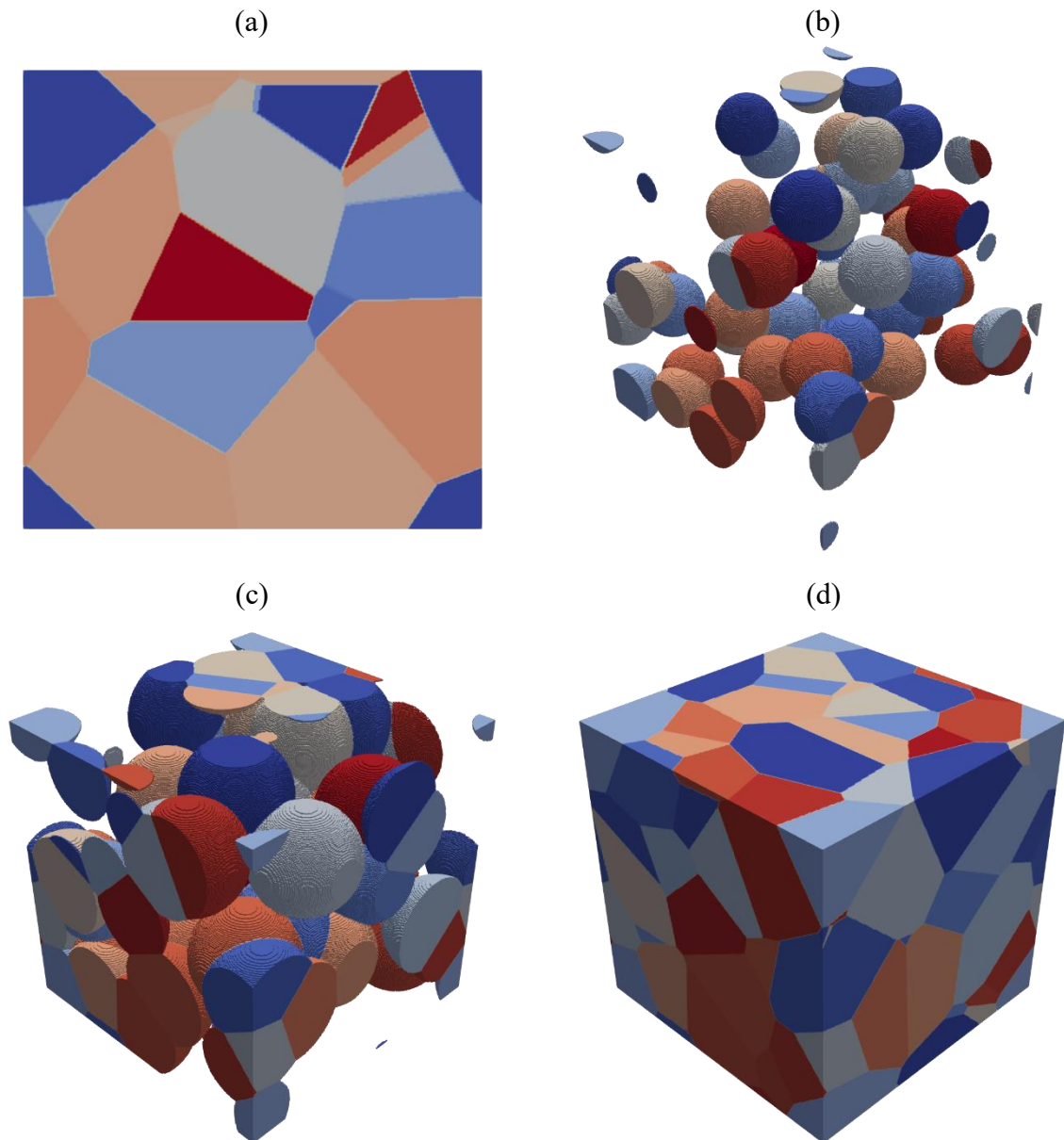


Figura 41 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 50$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.

Fonte: O autor.

As médias dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 42, e são discutidas na seção 5.3.6. As linhas contínuas representam o modelo analítico exato de JMAK e os pontos quadrados representam os dados de simulação provenientes da nucleação realizada nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson e os pontos quadrados representam os dados de contiguidade provenientes da simulação.

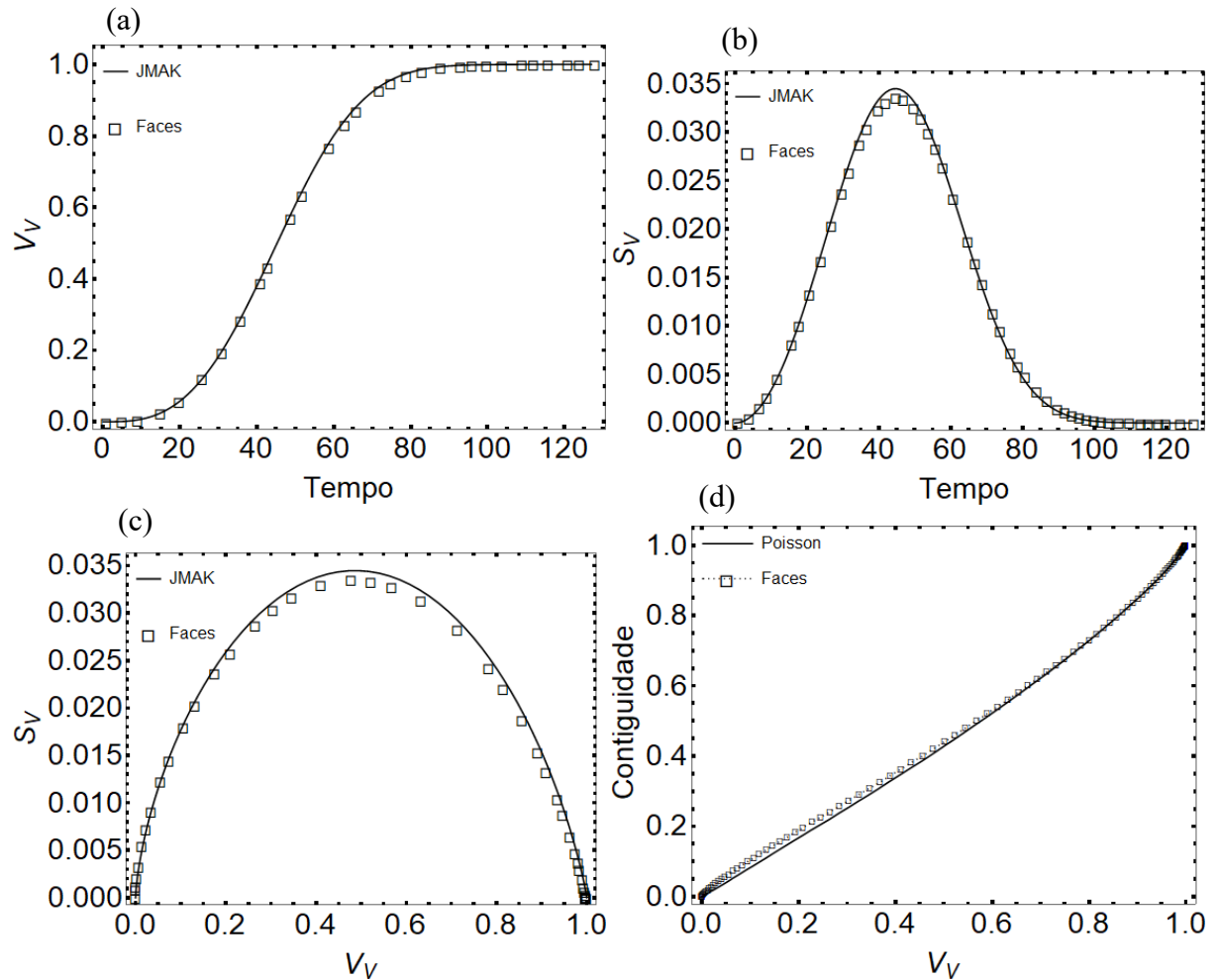


Figura 42 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 48,22$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.3.2 Reações com Coeficiente de Nucleação $\alpha = 1$

Para um coeficiente $\alpha = 1$, o número de núcleos sorteados nas faces da tesselação de Poisson-Voronoi teve uma média de $N = 196,08$. Na Figura 43, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.3.6.

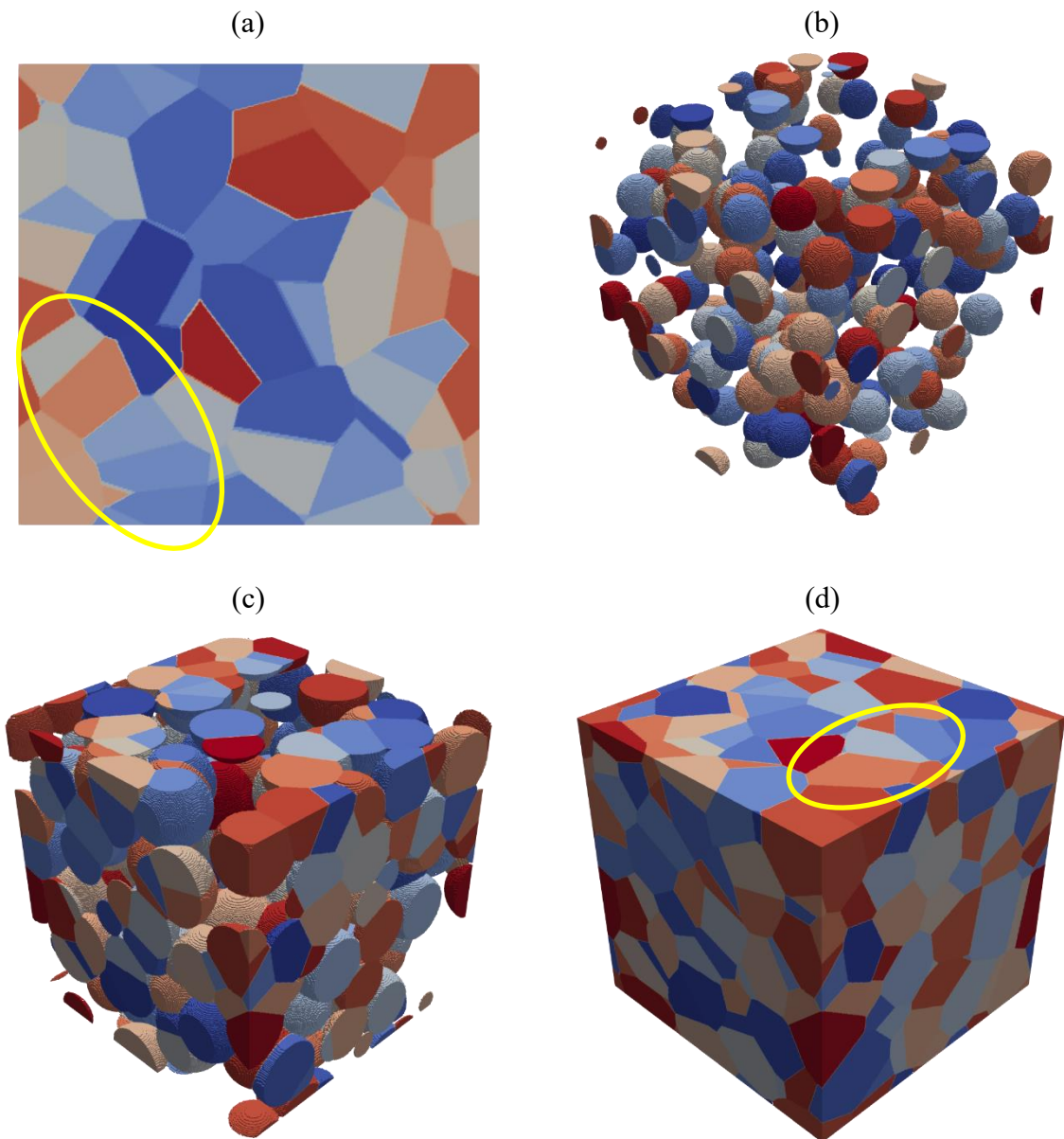


Figura 43 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 196$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.

Fonte: O autor.

As médias dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 44, e são discutidas na seção 5.3.6. As linhas contínuas representam o modelo analítico exato de Cahn e os pontos quadrados representam os dados de simulação provenientes da nucleação realizada nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson e os pontos quadrados representam os dados de contiguidade provenientes da simulação.

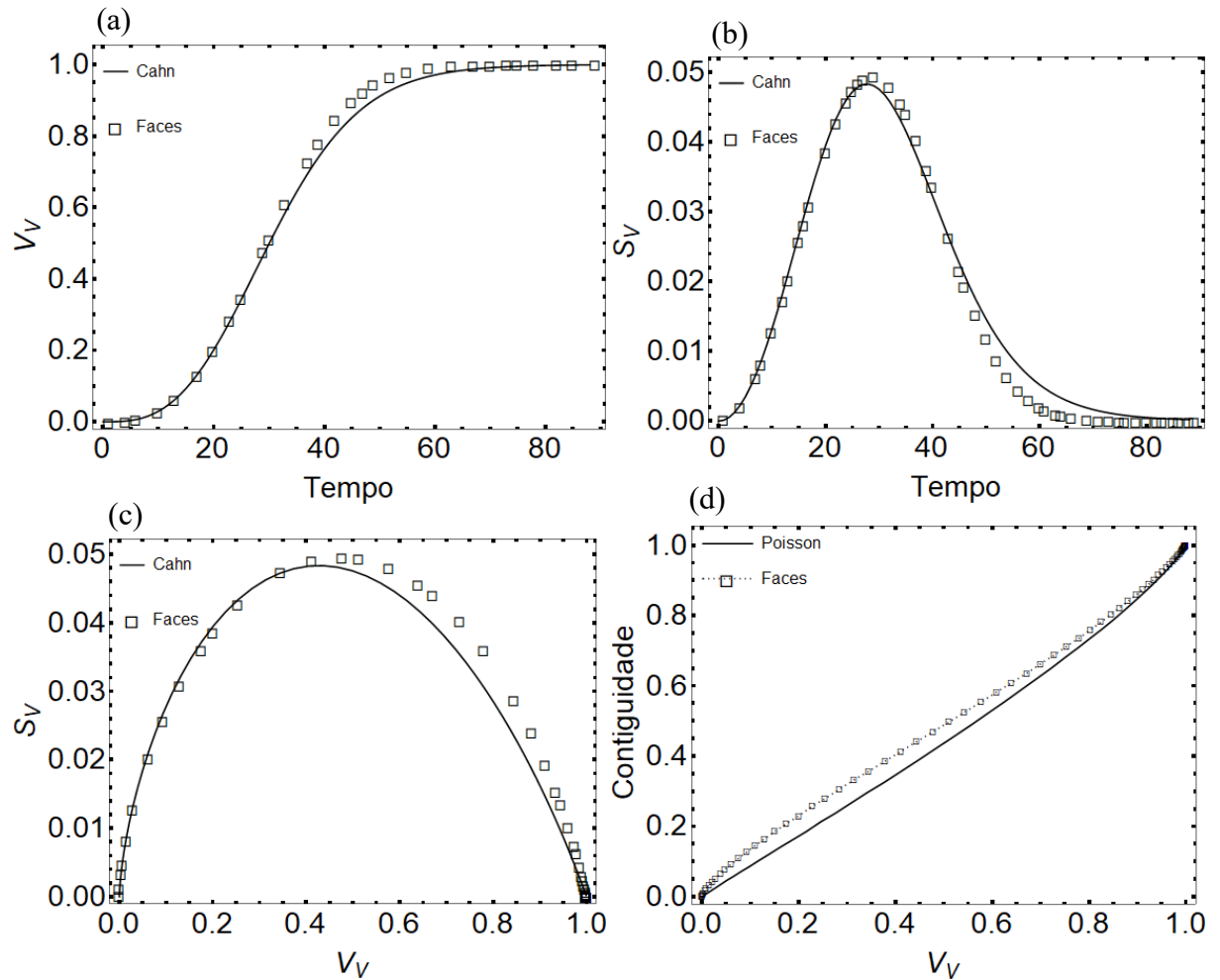


Figura 44 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 196,08$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.3.3 Reações com Coeficiente de Nucleação $\alpha = 2$

Para um coeficiente $\alpha = 2$, o número de núcleos sorteados nas faces da tesselação de Poisson-Voronoi teve uma média de $N = 386,04$. Na Figura 45, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.3.6.

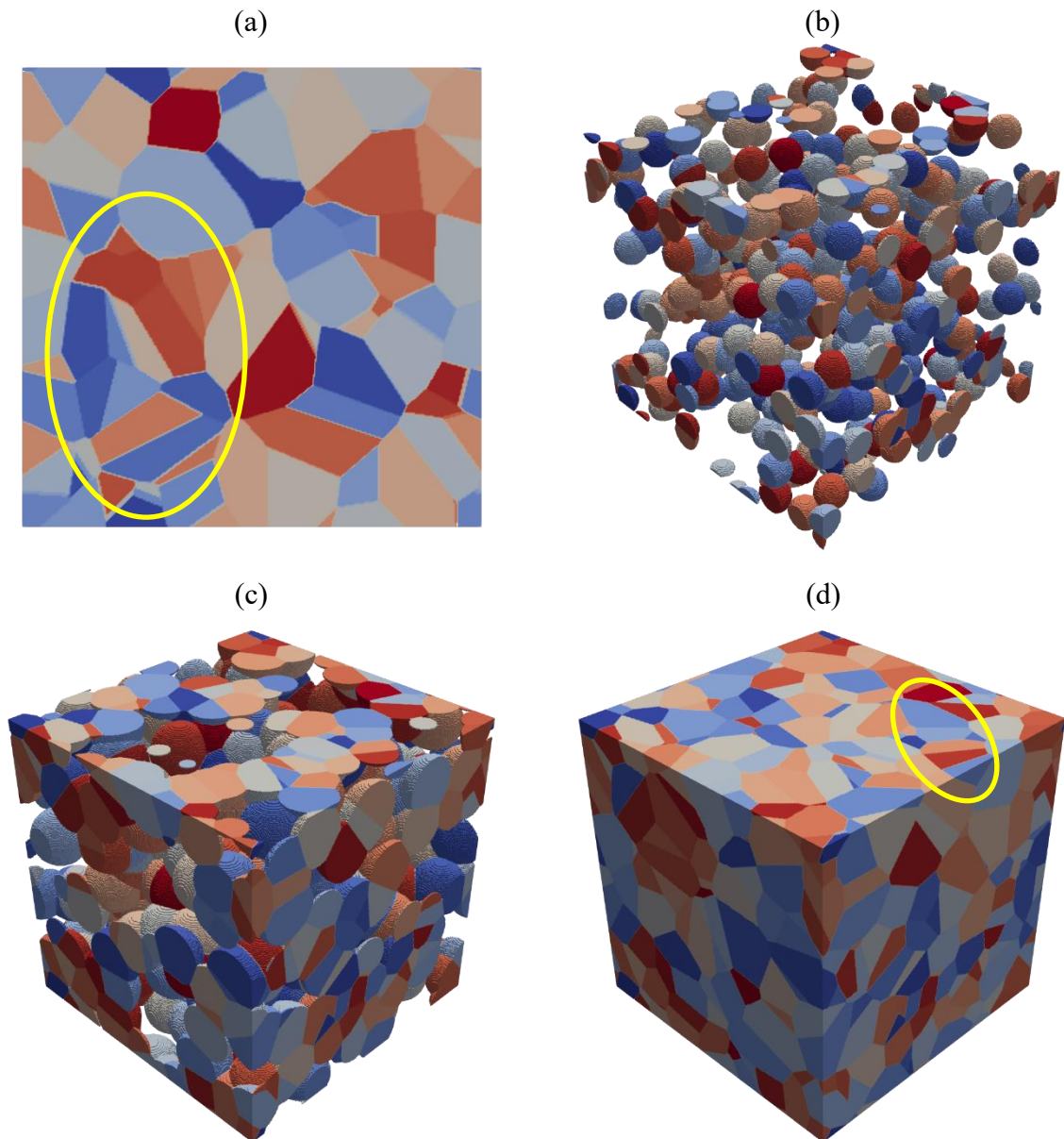


Figura 45 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 396$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.

Fonte: O autor.

As médias dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 46, e são discutidas na seção 5.3.6. As linhas contínuas representam o modelo analítico exato de Cahn e os pontos quadrados representam os dados de simulação provenientes da nucleação realizada nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson e os pontos quadrados representam os dados de contiguidade provenientes da simulação.

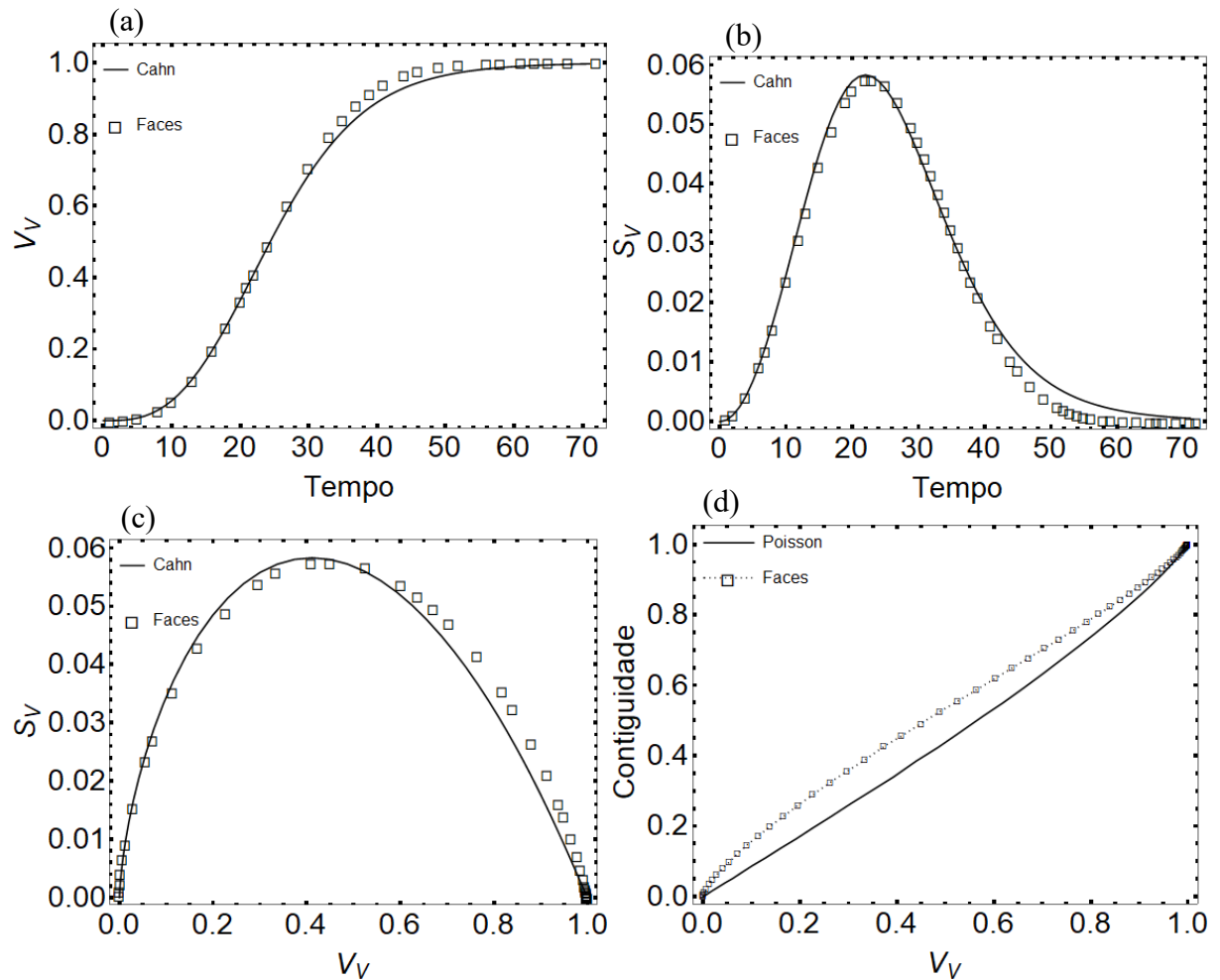


Figura 46 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 386,04$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.3.4 Reações com Coeficiente de Nucleação $\chi = 3$

Para um coeficiente $\chi = 3$, o número de núcleos sorteados nas faces da tesselação de Poisson-Voronoi teve uma média de $N = 576,24$. Na Figura 47, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.3.6.

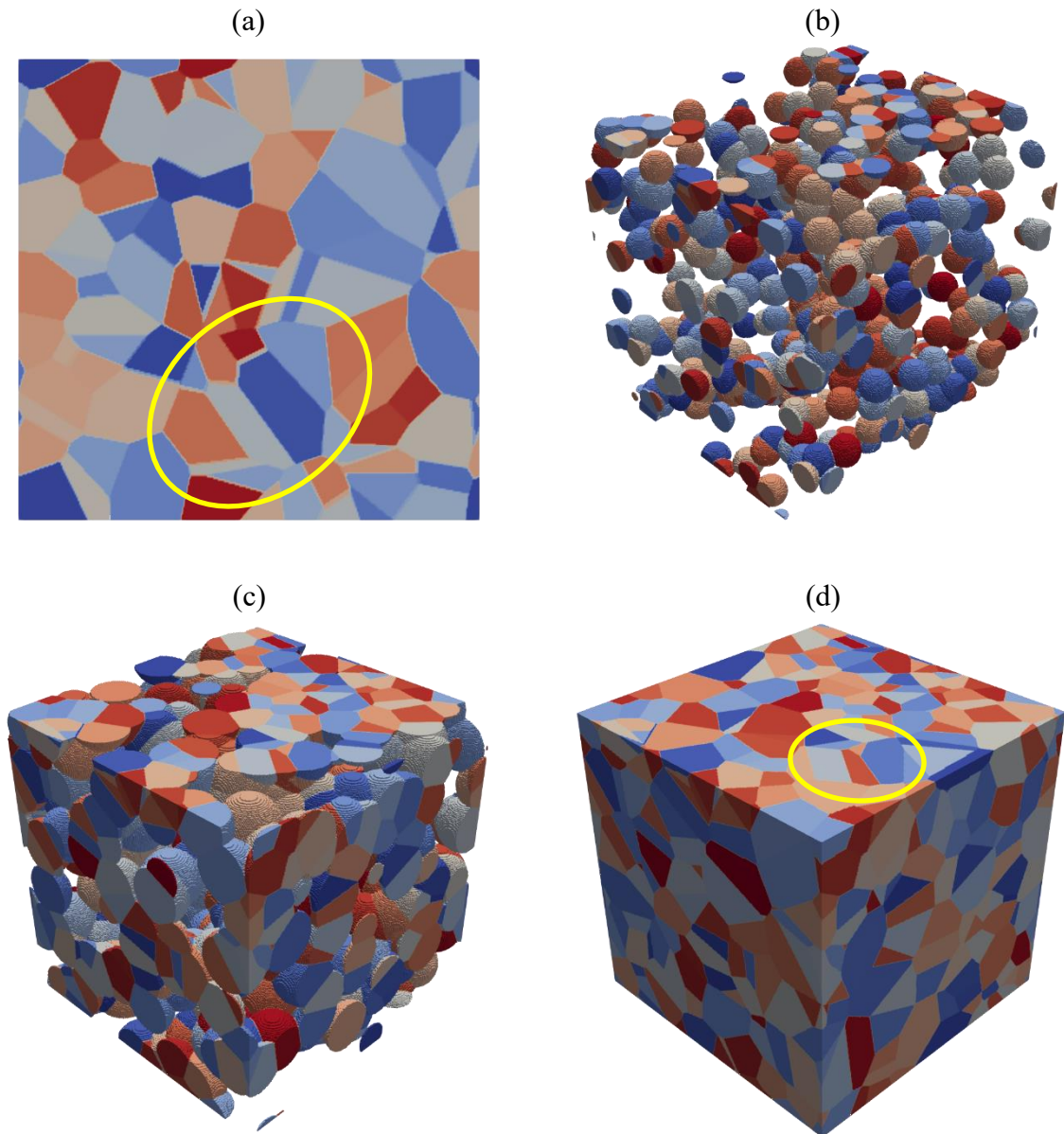


Figura 47 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 513$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.

Fonte: O autor.

As médias dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 48, e são discutidas na seção 5.3.6. As linhas contínuas representam o modelo analítico exato de Cahn e os pontos quadrados representam os dados de simulação provenientes da nucleação realizada nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson e os pontos quadrados representam os dados de contiguidade provenientes da simulação.

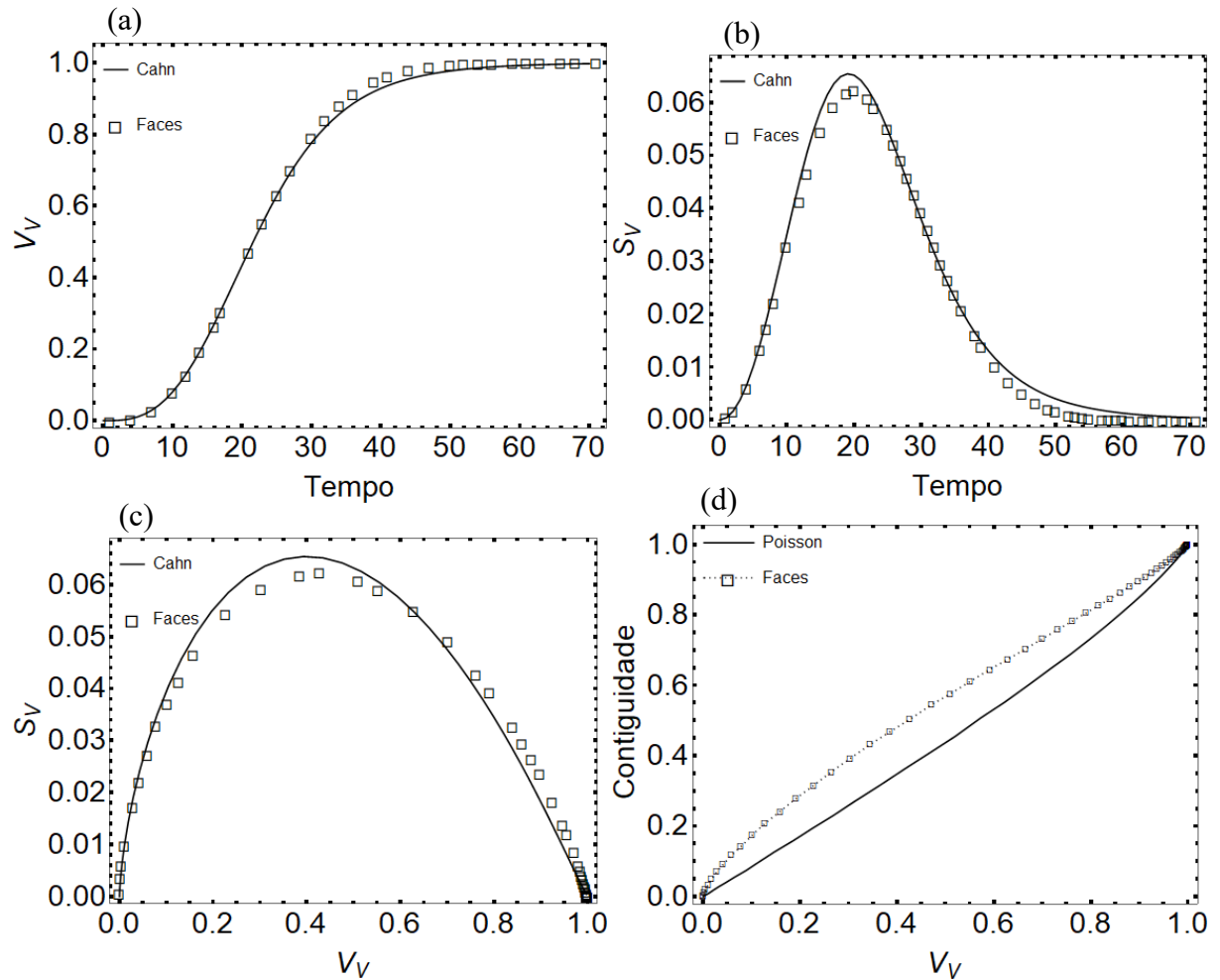


Figura 48 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 576,24$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.3.5 Reações com Coeficiente de Nucleação $\chi = 5$

Para um coeficiente $\chi = 5$, o número de núcleos sorteados nas faces da tesselação de Poisson-Voronoi teve uma média de $N = 974,20$. Na Figura 49, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.3.6.

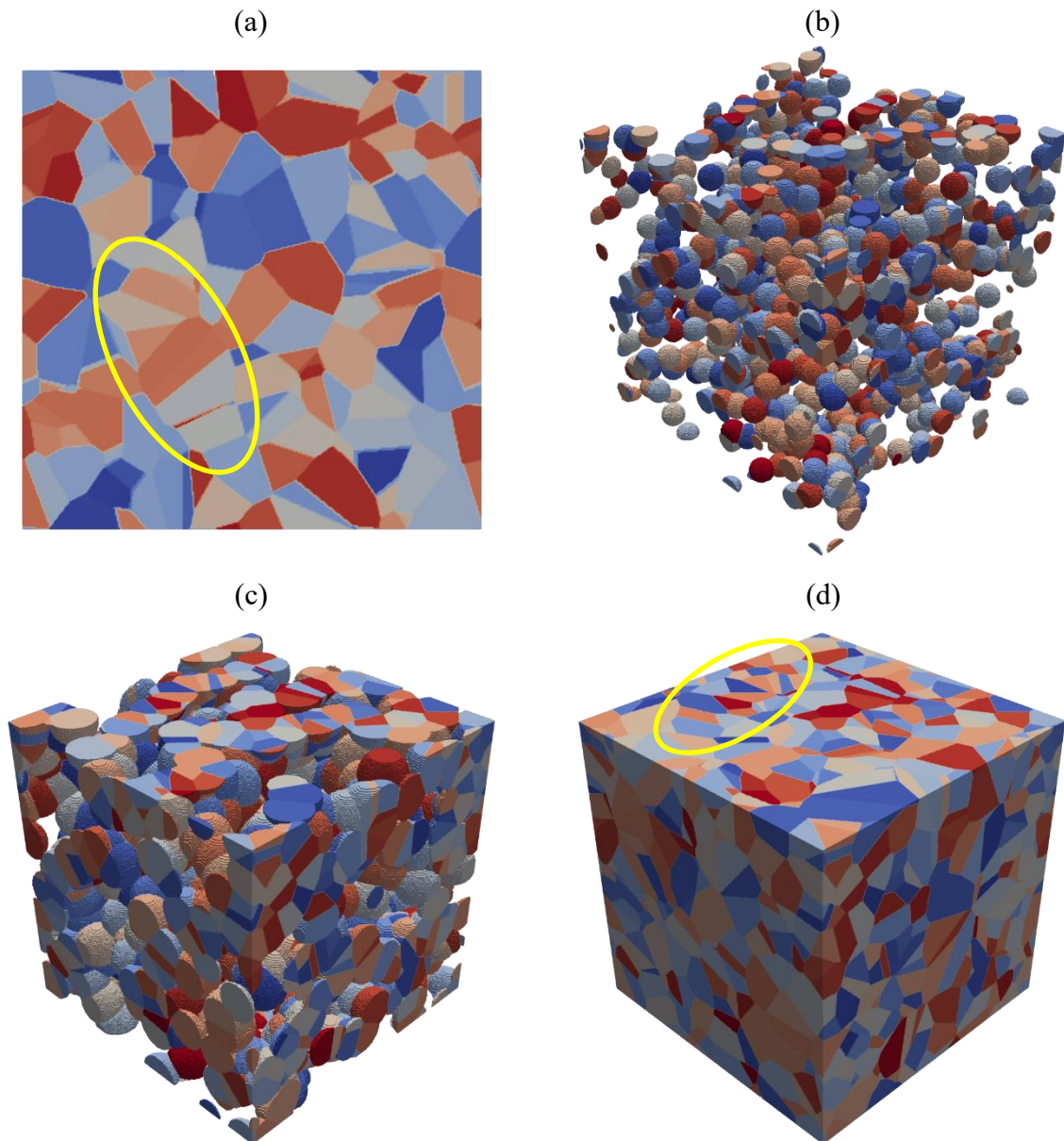


Figura 49 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 1115$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação. Destaques em amarelo ressaltando a presença de grãos alongados.

Fonte: O autor.

As médias dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 50, e são discutidas na seção 5.3.6. As linhas contínuas representam o modelo analítico exato de Cahn e os pontos quadrados representam os dados de simulação provenientes da nucleação realizada nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson e os pontos quadrados representam os dados de contiguidade provenientes da simulação.

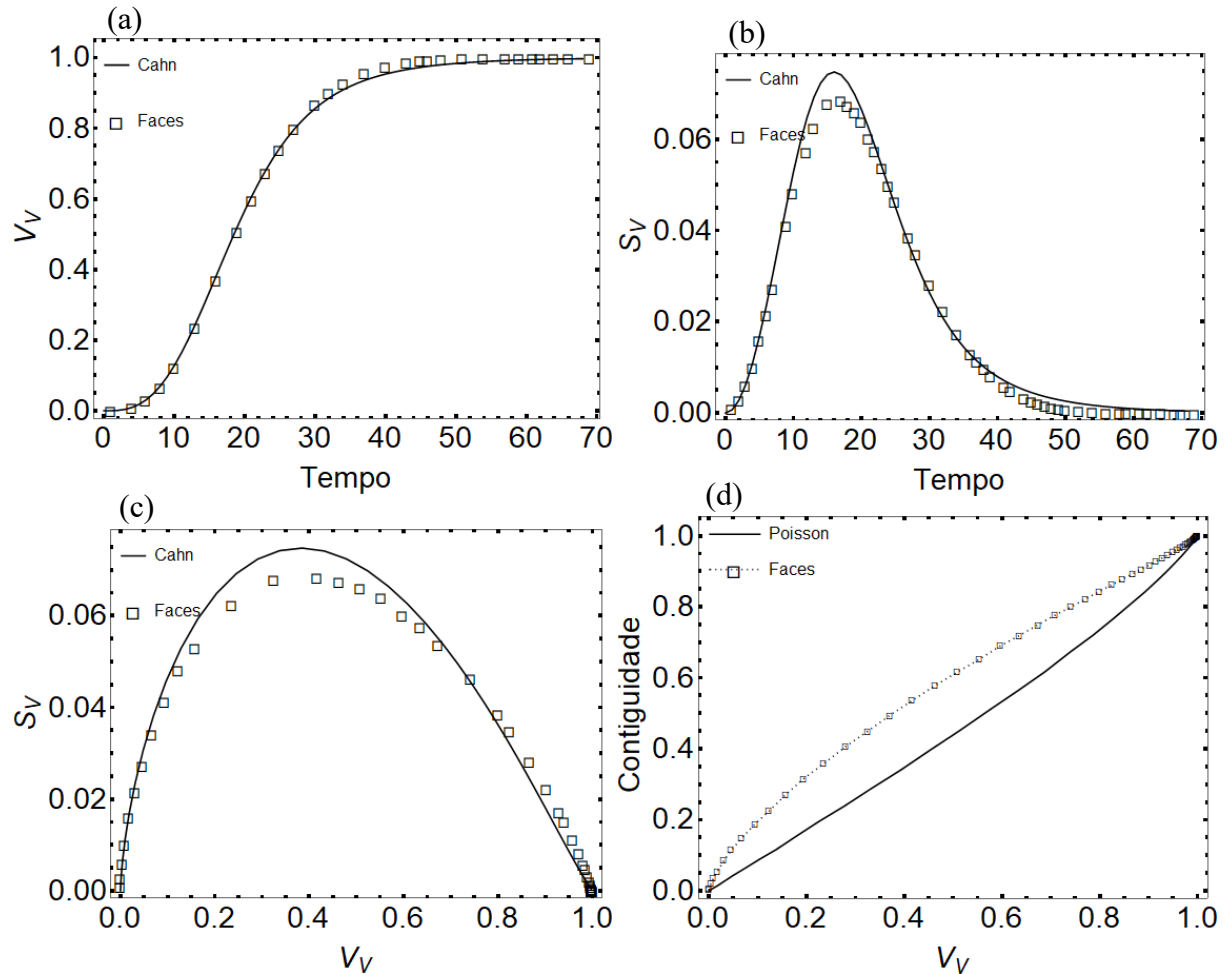


Figura 50 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, para $N = 974,20$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.3.6 Estudo das Simulações Individuais Nucleadas nas Faces de um Policristal

Os resultados obtidos no item 5.3.1 demonstram que, para uma baixa densidade de núcleos por unidade área, uma reação nucleada nas faces pode ser equiparada a uma reação

nucleada segundo um processo de ponto de Poisson homogêneo, isto é, podendo ser representado pelo modelo da cinética formal.

Observa-se que o processo de nucleação nas interfaces, como demonstrado por Fonseca *et al.* [24], [28], é descrito pela Equação (4), encontrada por Cahn [10] revisitado por Rios *et al.* [12].

$$V_V(t) = 1 - \exp\left(-2S_V^{planos} G t \int_0^1 [1 - \exp(-\pi\lambda_S G^2 t^2 (1 - z^2))] dz\right) \quad (17)$$

Ao considerar-se uma baixa quantidade de núcleos por unidade de área, tem-se: $\lambda_S \rightarrow 0$. Tomando $x \rightarrow 0$, considera-se que $1 - \exp(-x) \approx x$. Aplicando tais considerações na (4), obtém-se:

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

$$V_V(t) = 1 - \exp\left(-2S_V^{planos} \pi\lambda_S G^3 t^3 \int_0^1 (1 - z^2) dz\right)$$

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

Nota-se que $S_V^{planos} \lambda_S$ equivale a N_V , ou seja, o número de núcleos por unidade de volume. Logo, a Equação (18) pode ser escrita:

$$V_V(t) = 1 - \exp\left(-\frac{4}{3} \pi N_V G^3 t^3\right) \quad (18)$$

Portanto, para uma baixa quantidade de núcleos nas interfaces de um policristal, observa-se que a cinética da reação pode ser descrita pelo modelo de JMAK, visto que a Equação (18) é igual à Equação (3). Como pode ser visto nas Figura 42(a) e (b), os resultados da média de 50 simulações para uma baixa quantidade de núcleos nas faces da tesselação de Poisson-Voronoi, uma média de 48,22 núcleos, apresentam boa concordância com o modelo analítico da cinética formal. Além disso, na Figura 42(d), observa-se que a contiguidade para essa quantidade de núcleos assemelha-se à contiguidade de uma reação nucleada seguindo um processo de ponto de Poisson homogêneo.

A inspeção visual das micrografias, apresentadas nas Figuras 41, 43, 45, 47 e 49, permite a diferenciação entre a microestrutura gerada pelo caso em que $x = 1/4$, que acaba se assemelhando mais às microestruturas de reações nucleadas em sítios aleatórios da seção 5.1, e as microestruturas dos demais casos, com $x = 1, 2, 3$ ou 5 . Na Figura 41, pode ser visto que os grãos apresentam uma característica mais equiaxial, conforme os grãos das microestruturas da

seção 5.1. Enquanto nas Figuras 43, 45, 47 e 49 é possível notar, além da diminuição do tamanho médio de grão, a presença de uma maior quantidade de grãos alongados, ressaltados pelos destaques em amarelo, demonstrando o efeito da proximidade dos grãos nucleados nas faces. Ambos esses efeitos são observados com maior intensidade conforme a quantidade de núcleos aumenta.

Investigando este fenômeno analiticamente, é perceptível que o caminho microestrutural, representado na Figura 42(c), também se diferencia dos caminhos microestruturais apresentados na parte (c) das Figuras 44, 46, 48 e 50, que apresentam um leve desvio para a esquerda, demonstrando que o efeito do *impingement* afeta a transformação em valores mais baixos de fração transformada do que em reações nucleadas em sítios aleatórios.

Rios *et al.* [36] afirmam que é necessária uma análise adicional, utilizando também a contiguidade, para afirmar sobre a não-aleatoriedade de um processo. A parte (d) das Figuras 44, 46, 48 e 50, permite a visualização de um crescente distanciamento entre a contiguidade das reações nucleadas nas faces, representadas pelas linhas pontilhadas, e contiguidade de uma nucleação que segue um processo de ponto de Poisson homogêneo. Como foi apresentado na Figura 6, nota-se que este é um efeito característico da nucleação em clusters. Neste caso, é válido afirmar que a nucleação nas interfaces é caracterizada por um agrupamento dos núcleos, o que é observado mais claramente por uma maior quantidade de núcleos.

O estudo da cinética de reação, que pode ser visto nas partes (a) e (b) das Figuras 44, 46, 48 e 50, demonstra que a reação apresenta boa concordância com a Equação (4), isto é, a equação analítica exata de Cahn para nucleação nas interfaces de um policristal. Especificamente nas partes (b) e (c) destas figuras, observa-se uma discordância entre os resultados das simulações e os resultados analíticos esperados. Isto ocorre devido ao fato de o fator de correção ser calculado para um crescimento esférico, enquanto é possível observar na representação gráfica da evolução microestrutural que o *impingement* já afeta o crescimento desde os estágios iniciais, efeito este que se intensifica de modo proporcional ao aumento do número de núcleos. Deste modo, nota-se que para um elevado número de núcleos nas faces o crescimento deixa de ser esférico, logo, o fator de correção calculado conforme o método apresentado por Alves [31] não se aplica mais.

Diferentemente do que Fonseca [24] obteve para a nucleação nos contornos de uma rede de poliedros de Kelvin, a nucleação nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi demonstrou boa concordância com a equação analítica exata de Cahn para nucleação nos contornos de grão até mesmo para uma pequena quantidade de núcleos. Isto demonstra a relevância da aleatoriedade na distribuição dos planos, que não ocorre na rede de poliedros de

Kelvin, pois todos os grãos possuem o mesmo formato, gerando uma periodicidade na disposição dos planos.

5.4 REAÇÕES SIMULTÂNEAS NUCLEADAS EM SÍTIOS ALEATÓRIOS E NAS FACES DE UM POLICRISTAL

Nesta configuração de simulações, a tesselação de Poisson-Voronoi tomada por matriz inicial é obtida a partir de um processo de ponto homogêneo de Poisson de intensidade 30. A matriz é submetida aos algoritmos de identificação dos contornos, processo que determina a posição das interfaces e a quantidade de vértices. Após a identificação, a quantidade de vértices da matriz inicial é usada como o número de núcleos para a reação nucleada em sítios aleatórios da matriz e como a grandeza Q_v da Equação (16) para a definição da quantidade de núcleos da reação nucleada nas interfaces. A reação nucleada nas faces utiliza a localização das interfaces da matriz inicial para definir os sítios em que ela tem seus núcleos sorteados.

5.4.1 Reações com Coeficiente de Nucleação $\chi = 1$ nas Faces

Para um coeficiente $\chi = 1$, encontraram-se médias do número de núcleos para as reações em sítios aleatórios e nas faces, respectivamente, $N_{SA} = 188,76$ e $N_F = 188,76$. Na Figura 51, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, discutidas na seção 5.4.5.

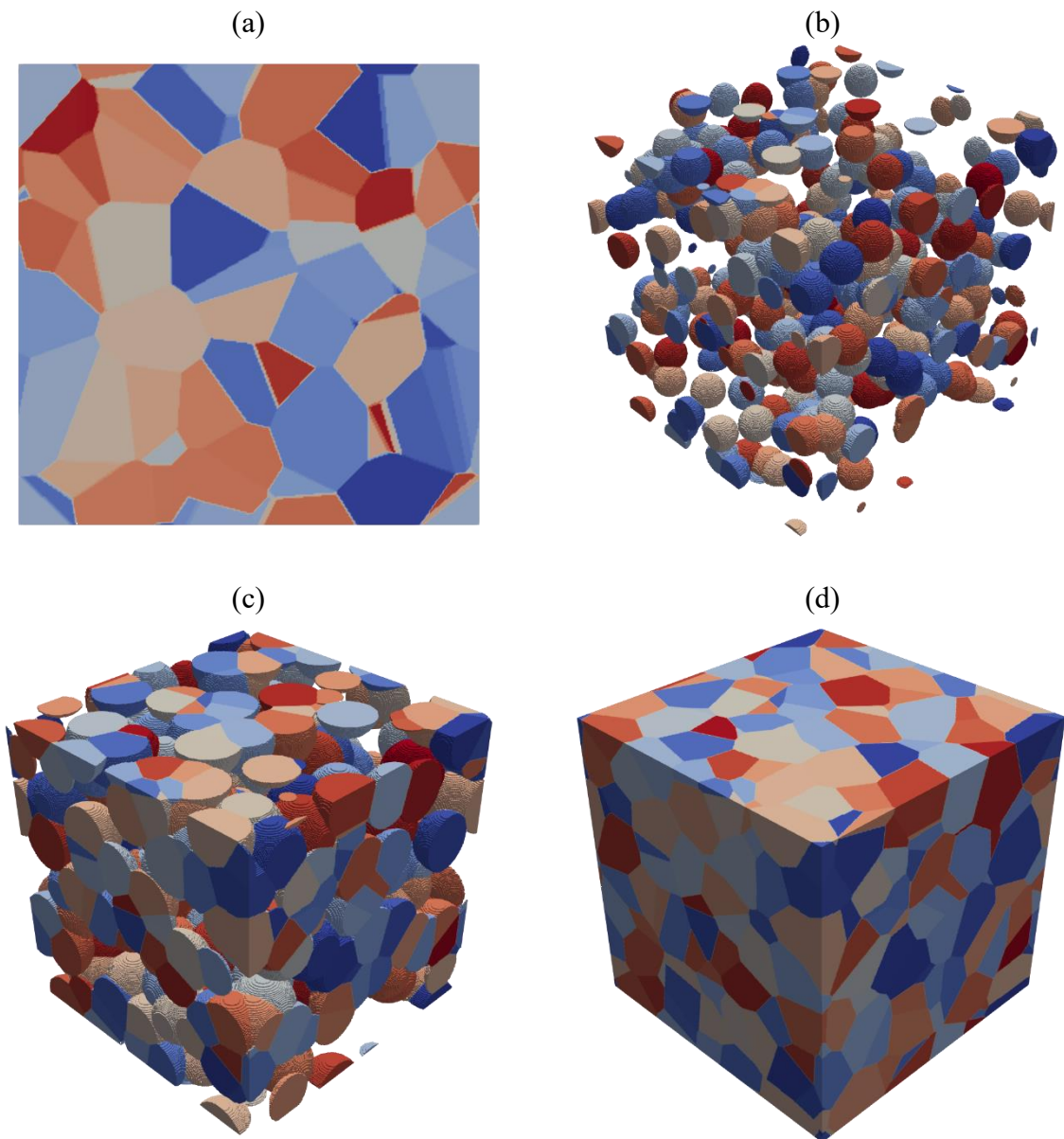


Figura 51 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $N_{SA} = 115$ e $N_F = 115$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.

Fonte: O autor.

A média dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 52 e são discutidas na seção 5.4.5. As linhas contínuas, tracejadas e pontilhadas representam, respectivamente, as expressões da reação total, da reação nucleada nas faces e da reação nucleada em sítios aleatórios obtidas pelo princípio da superposição. Os pontos em estrela, quadrado e círculo representam, respectivamente, os dados de simulação provenientes da reação total, da reação nucleada nas faces e da reação nucleada em sítios aleatórios. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson, a linha tracejada, os dados da contiguidade da reação nucleada nas faces, a linha pontilhada, os dados da contiguidade da reação nucleada em sítios aleatórios e a linha traço-ponto, os dados da contiguidade da contiguidade da reação total.

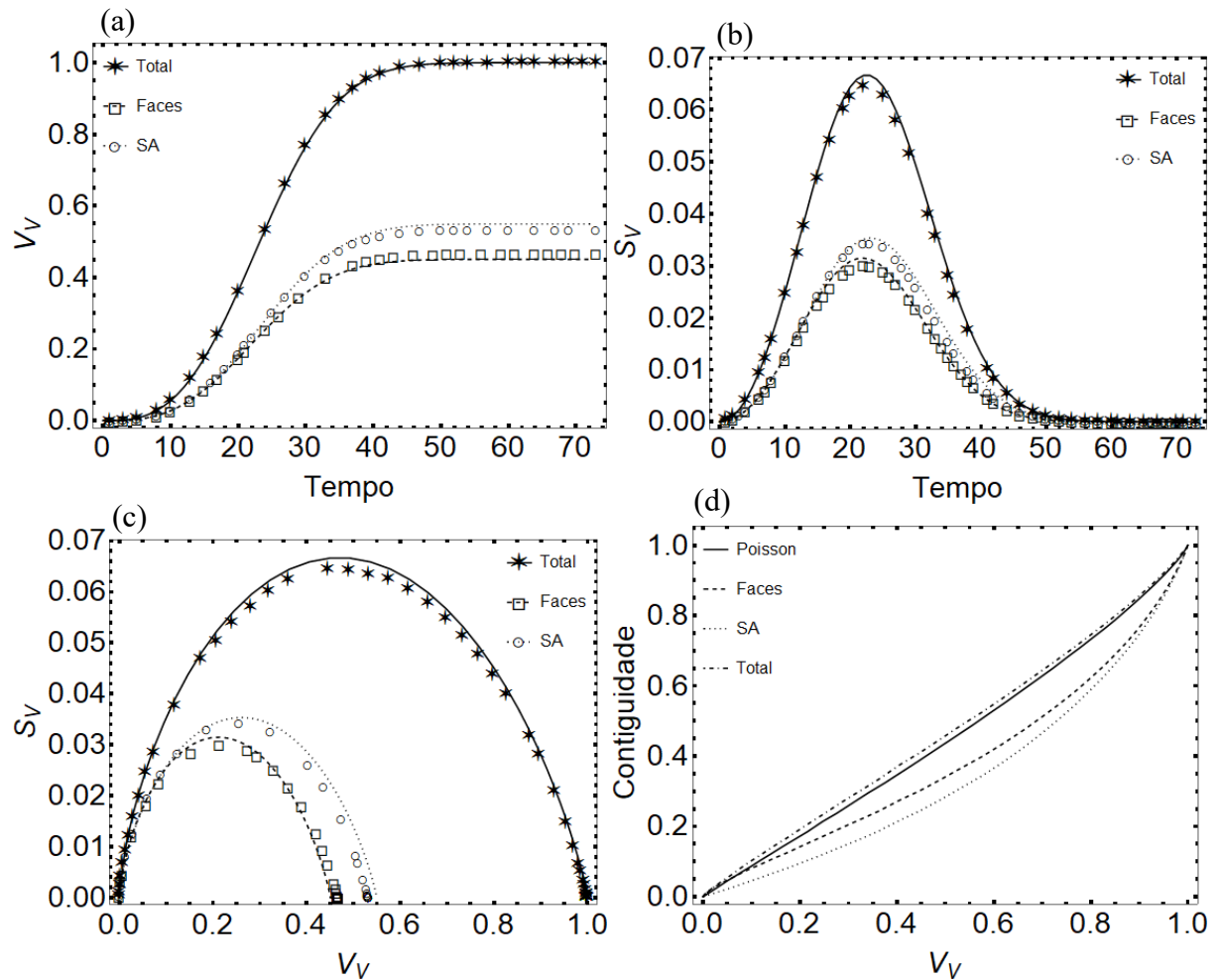


Figura 52 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $N_{SA} = 188,76$ e $N_F = 188,76$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.4.2 Reações com Coeficiente de Nucleação $\alpha = 2$ nas Faces

Para um coeficiente $\alpha = 2$, encontraram-se médias do número de núcleos para as reações em sítios aleatórios e nas faces de, respectivamente, $N_{SA} = 201,06$ e $N_F = 402,12$. Na Figura 53, é apresentada a evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.4.5.

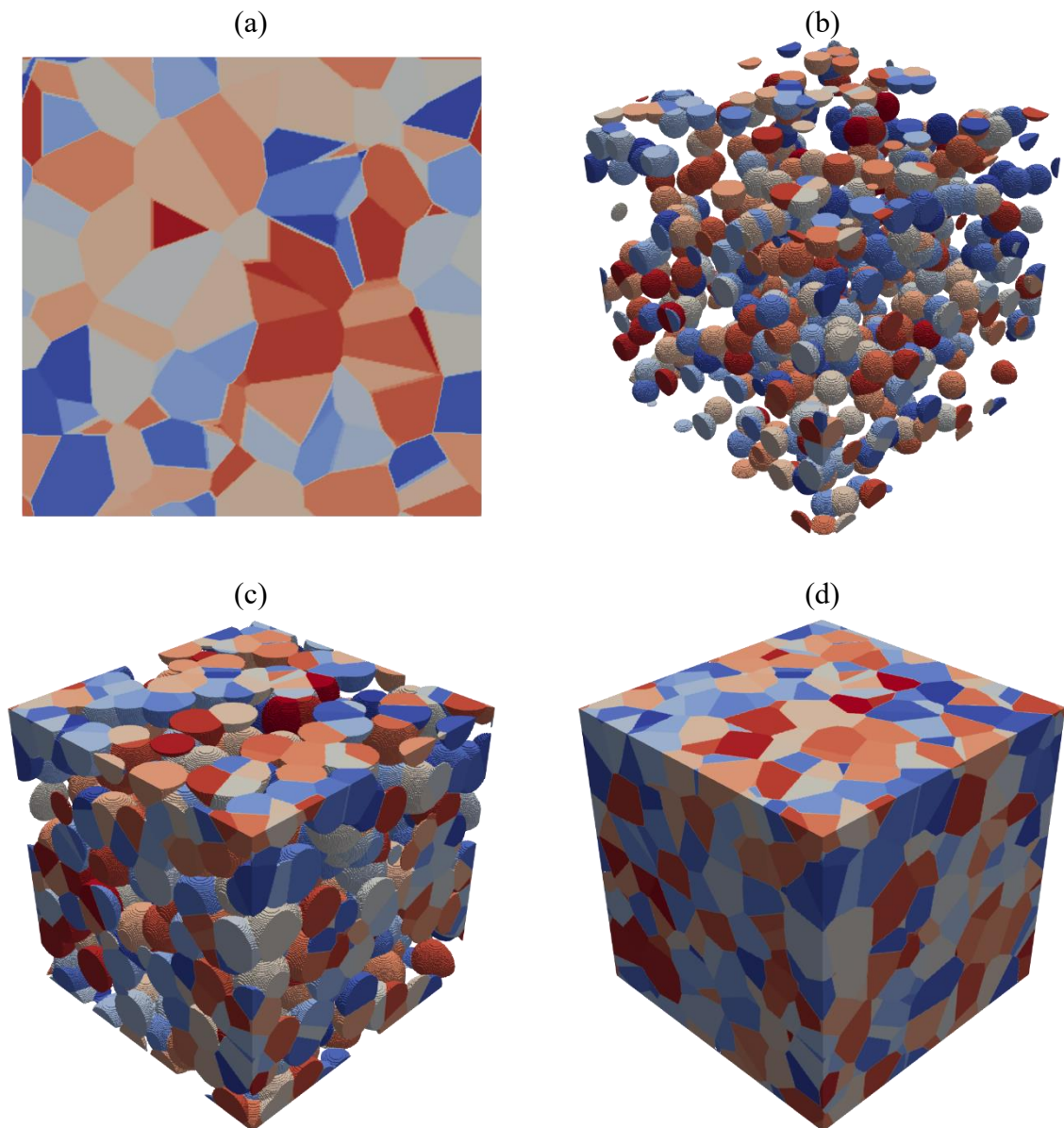


Figura 53 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $N_{SA} = 243$ e $N_F = 486$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.

Fonte: O autor.

A média dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 54 e são discutidas na seção 5.4.5. As linhas contínuas, tracejadas e pontilhadas representam, respectivamente, as expressões da reação total, da reação nucleada nas faces e da reação nucleada em sítios aleatórios obtidas pelo princípio da superposição. Os pontos em estrela, quadrado e círculo representam, respectivamente, os dados de simulação provenientes da reação total, da reação nucleada nas faces e da reação nucleada em sítios aleatórios. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson, a linha tracejada, os dados da contiguidade da reação nucleada nas faces, a linha pontilhada, os dados da contiguidade da reação nucleada em sítios aleatórios e a linha traço-ponto, os dados da contiguidade da contiguidade da reação total.

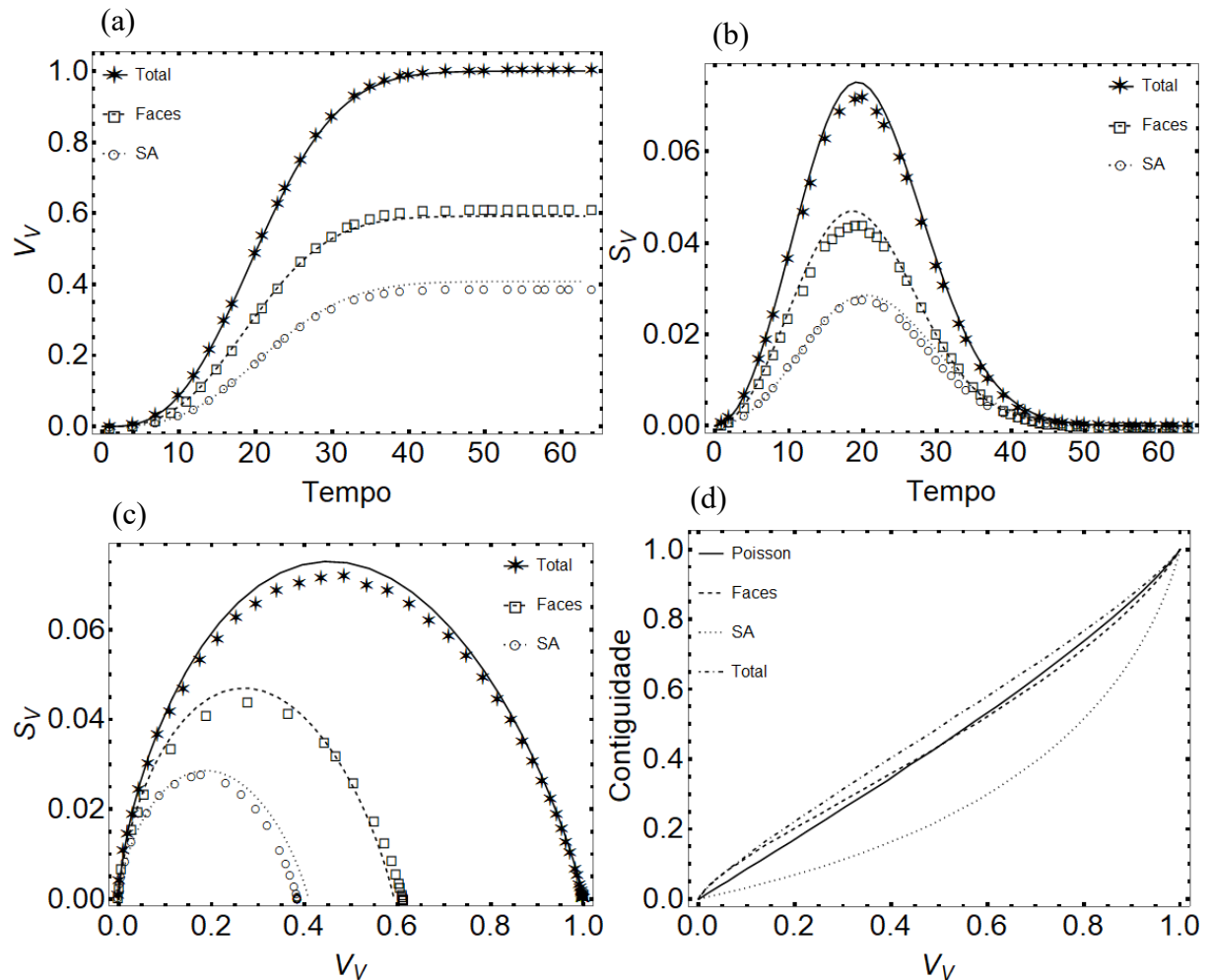


Figura 54 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $N_{SA} = 201,06$ e $N_F = 402,12$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.4.3 Reações com Coeficiente de Nucleação $\chi = 3$ nas Faces

Para um coeficiente $\chi = 3$, encontraram-se médias do número de núcleos para as fases nucleadas em sítios aleatórios da matriz e nas faces de, respectivamente, $N_{SA} = 188,98$ e $N_F = 566,94$. Na Figura 55, é apresentada a evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.4.5.

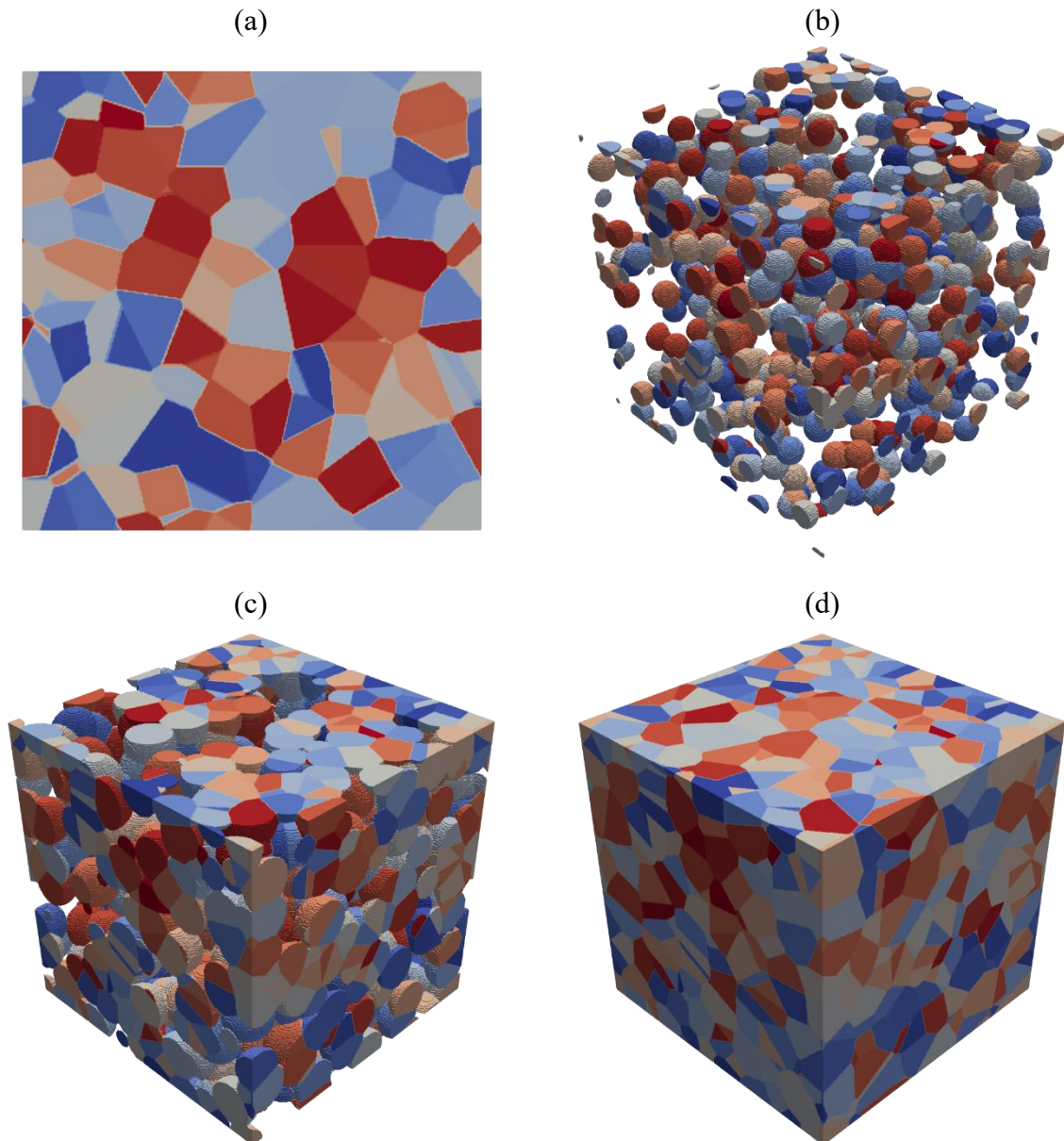


Figura 55 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $N_{SA} = 210$ e $N_F = 630$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.

Fonte: O autor.

A média dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 56 e são discutidas na seção 5.4.5. As linhas contínuas, tracejadas e pontilhadas representam, respectivamente, as expressões da reação total, da reação nucleada nas faces e da reação nucleada em sítios aleatórios obtidas pelo princípio da superposição. Os pontos em estrela, quadrado e círculo representam, respectivamente, os dados de simulação provenientes da reação total, da reação nucleada nas faces e da reação nucleada em sítios aleatórios. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson, a linha tracejada, os dados da contiguidade da reação nucleada nas faces, a linha pontilhada, os dados da contiguidade da reação nucleada em sítios aleatórios e a linha traço-ponto, os dados da contiguidade da contiguidade da reação total.

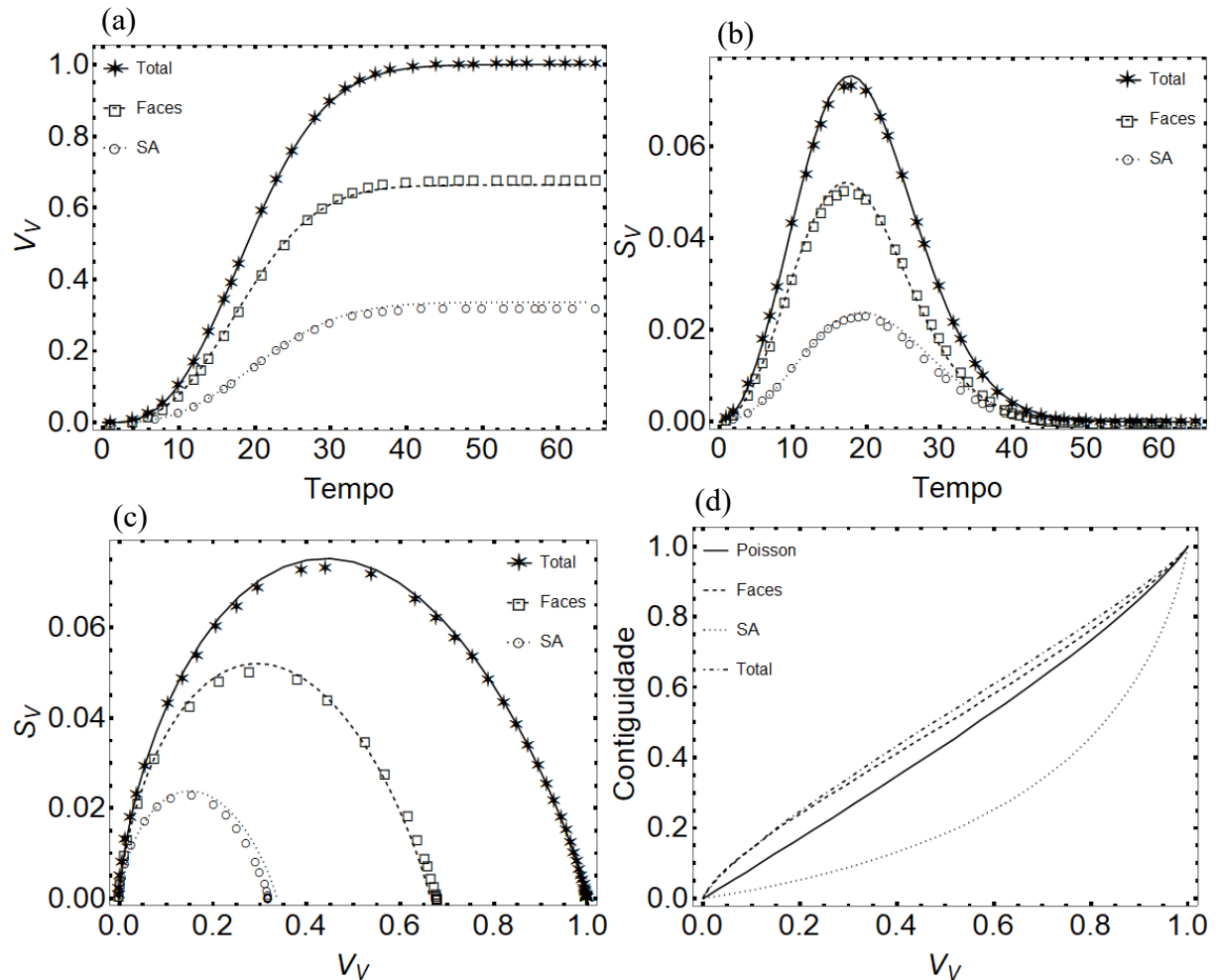


Figura 56 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $N_{SA} = 188,98$ e $N_F = 566,94$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.4.4 Reações com Coeficiente de Nucleação $\chi = 5$ nas Faces

Para um coeficiente $\chi = 3$, encontraram-se médias do número de núcleos para as fases nucleadas em sítios aleatórios da matriz e nas faces de, respectivamente, $N_{SA} = 186,48$ e $N_F = 932,40$. Na Figura 57, é apresentada a evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, que são discutidas na seção 5.4.5.

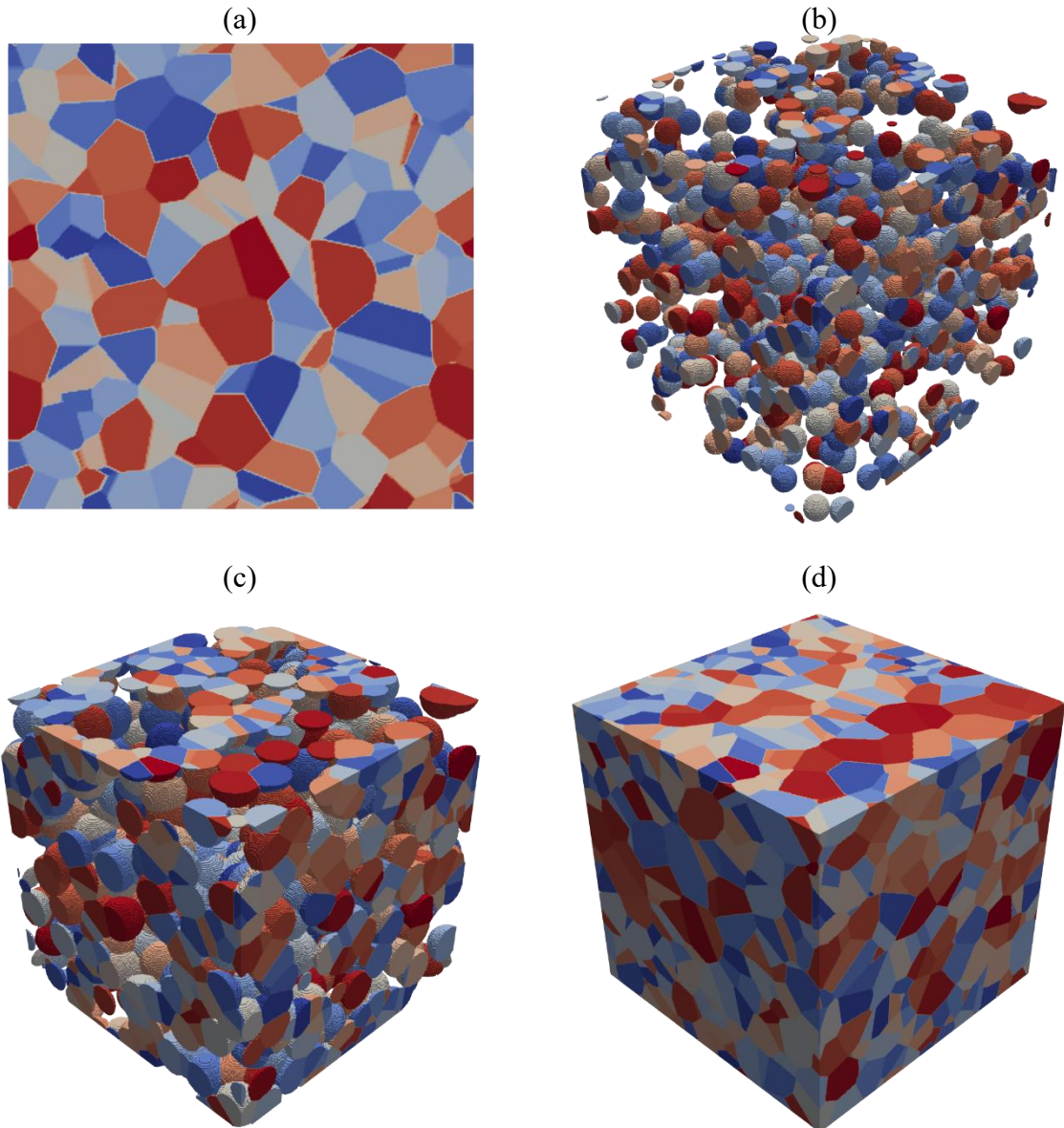


Figura 57 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $N_{SA} = 263$ e $N_F = 1315$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.

Fonte: O autor.

A média dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 58 e são discutidas na seção 5.4.5. As linhas contínuas, tracejadas e pontilhadas representam, respectivamente, as expressões da reação total, da reação nucleada nas faces e da reação nucleada em sítios aleatórios obtidas pelo princípio da superposição. Os pontos em estrela, quadrado e círculo representam, respectivamente, os dados de simulação provenientes da reação total, da reação nucleada nas faces e da reação nucleada em sítios aleatórios. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson, a linha tracejada, os dados da contiguidade da reação nucleada nas faces, a linha pontilhada, os dados da contiguidade da reação nucleada em sítios aleatórios e a linha traço-ponto, os dados da contiguidade da contiguidade da reação total.

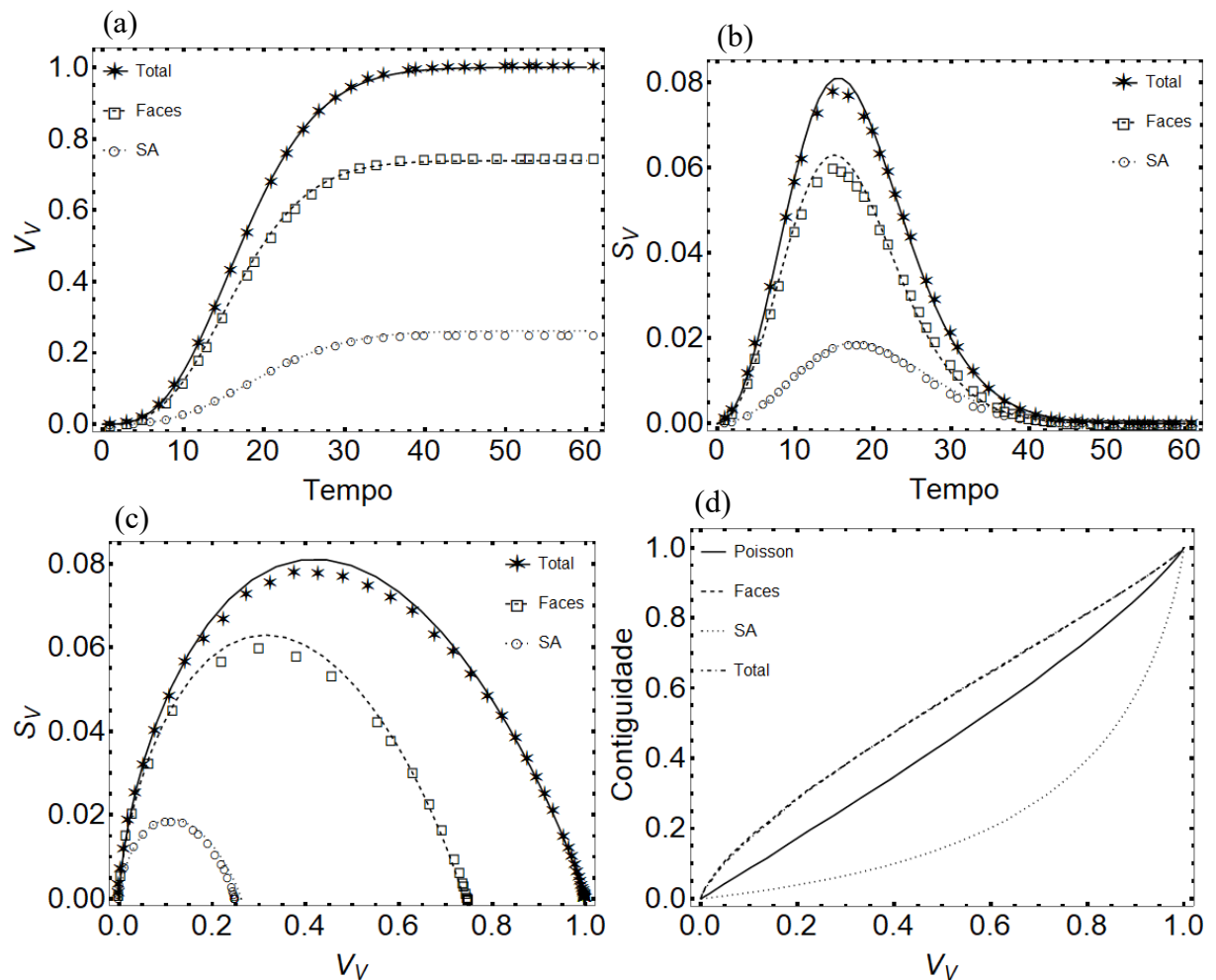


Figura 58 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $N_{SA} = 186,48$ e $N_F = 932,40$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.4.5 Estudo das Simulações Simultâneas Nucleadas em Sítios Aleatórios e nas Faces de um Policristal

A inspeção visual das micrografias, que podem ser vistas nas Figuras 51, 53, 55 e 57, permite a visualização do efeito do aumento da quantidade de núcleos nas faces da matriz inicial. Nota-se em todas as micrografias a presença de grãos equiaxiais e de grãos alongados, representando os grãos nucleados em sítios aleatórios da matriz e os grãos nucleados nas faces, respectivamente. A maior frequência de grãos alongados é proporcional ao aumento de núcleos nas faces é coerente aos resultados observados para as reações individuais nucleadas nas faces de um policristal, apresentadas e discutidas na seção 5.3.

Na Figura 59, é possível observar uma representação das fases e dos contornos de grão da microestrutura do caso $x = 5$ (apresentado no item 5.4.4). Os grãos em amarelo são aqueles nucleados seguindo um processo de ponto de Poisson homogêneo, enquanto os grãos em verde foram nucleados nas faces da tesselação de Poisson-Voronoi e os contornos de grão estão representados em azul.

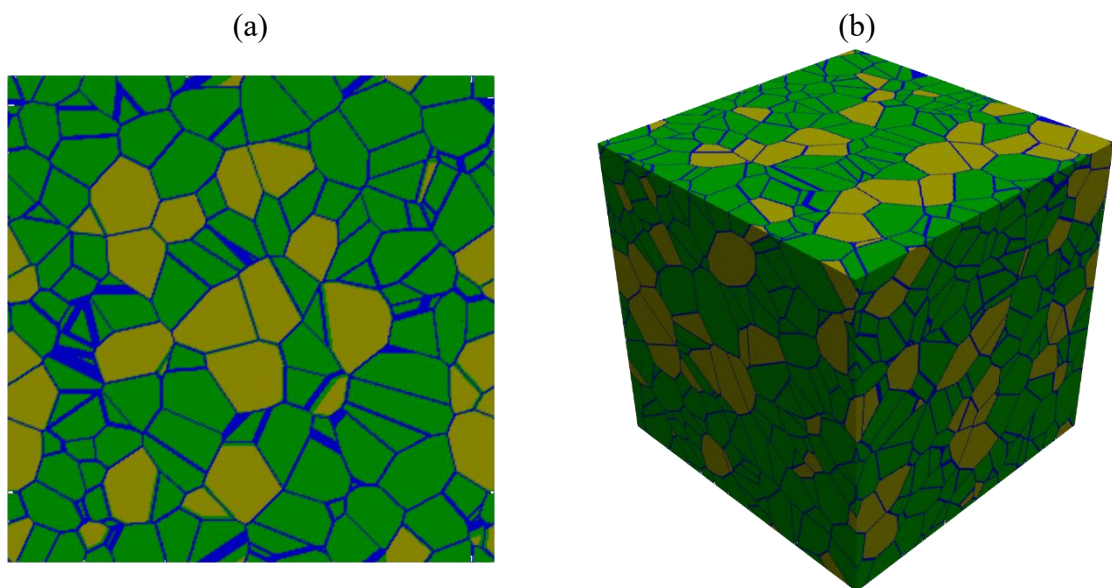


Figura 59 – Representação gráfica da microestrutura demonstrando os contornos e as morfologias características de cada fase. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 100% de transformação em 3D.

Fonte: O autor.

A redução do tamanho médio de grão e o aumento da frequência de grãos alongados, ocasionados pelo aumento da quantidade de grãos nas faces, interfere nas reações, mas não ao ponto de afetar a interdependência entre elas, como pode ser visto nos gráficos de V_V versus

Tempo, apresentados na parte (a) das Figuras 52, 54, 56 e 58, visto que o princípio da superposição de Rios e Villa [1] apresenta boa concordância com os resultados de simulação em todos os casos. O princípio da superposição é utilizado aplicando o modelo de JMAK [2]–[6] para a fase nucleada em sítios aleatórios da matriz e a equação de Cahn [10], [12] para a fase nucleada nas faces da matriz inicial.

Analogamente ao efeito observado nas reações individuais, o aumento do número de grãos ocasiona uma pequena discrepância entre os resultados de simulação e os modelos analíticos exatos nos gráficos de S_V versus Tempo e no caminho microestrutural, que podem ser vistos, respectivamente, nas partes (b) e (c) das Figuras 52, 54, 56 e 58. Apesar da discrepância, o caminho microestrutural também demonstra a interdependência das reações, através da observação de um leve desvio na curva da reação nucleada nas faces, que se mostra mais acentuada conforme sua quantidade de núcleos aumenta, e de uma forma constante para a reação nucleada em sítios aleatórios da matriz.

A análise da contiguidade, que pode ser observada na parte (d) das Figuras 52, 54, 56 e 58, permite observar como ocorre a interferência entre as reações e o efeito do aumento da quantidade de grãos da fase nucleada nas faces. Apesar de não afetar a cinética de reação e interdependência entre as reações, a contiguidade demonstra uma mudança característica no efeito da disposição dos núcleos durante a nucleação das fases transformadas. Para melhor visualização deste fenômeno, foi gerada a Figura 60, na qual é possível observar a alteração com maior clareza para as fases individualmente e para a reação total.

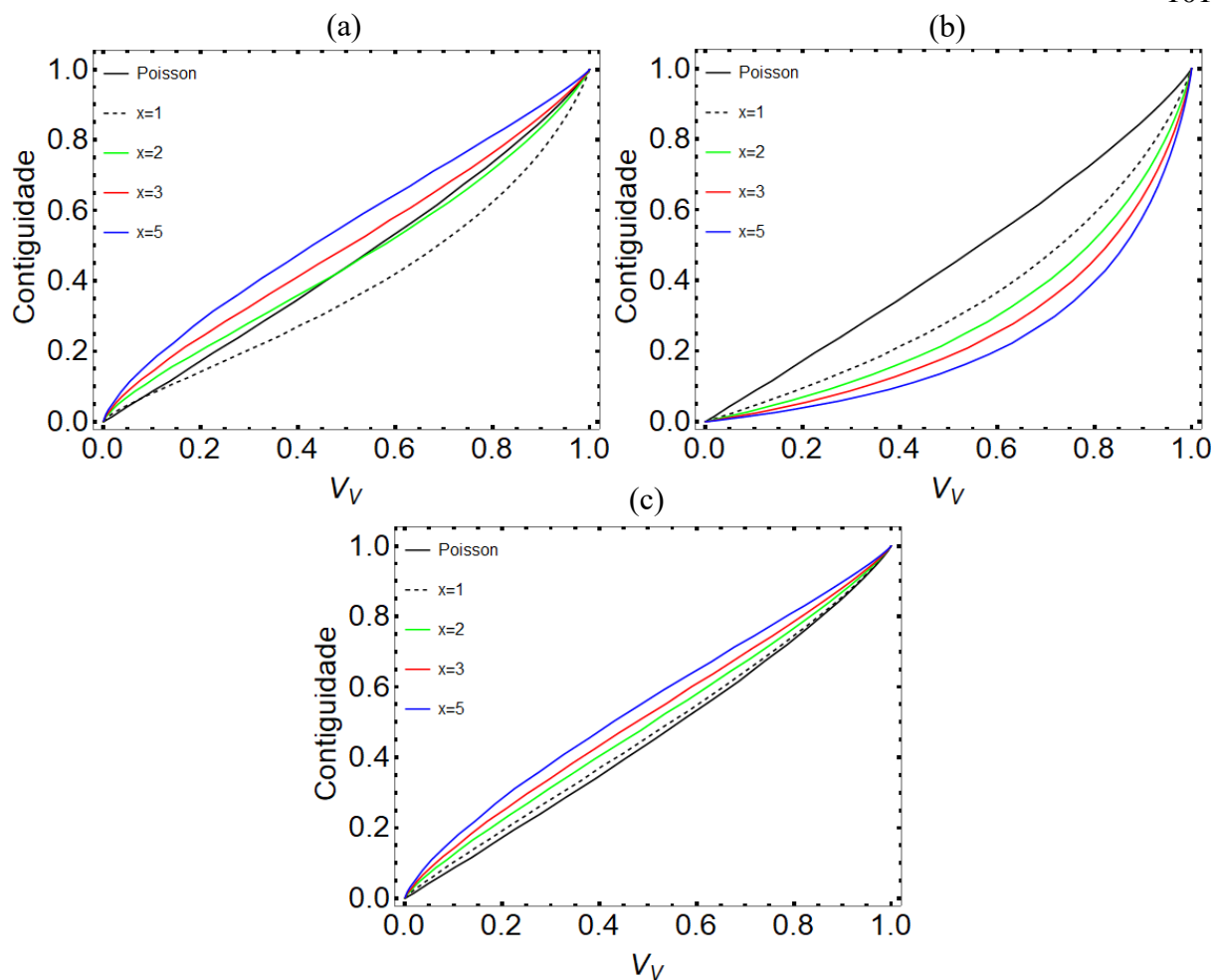


Figura 60 – Gráfico de Contiguidade versus V_V para os diferentes coeficientes de nucleação da reação: (a) nucleada nas faces. (b) nucleada em sítios aleatórios da matriz. (c) total.

Fonte: O autor.

As linhas tracejadas correspondem ao caso apresentado no item 5.4.1, demonstrando que os núcleos de ambas as fases possuem um distanciamento entre si e, conseqüentemente um *impingement* tardio, como pode ser visto nas partes (a) e (b) da Figura 60. Além disso, a reação total neste caso apresenta grande proximidade a uma reação nucleada segundo um processo de ponto de Poisson homogêneo. Conforme o coeficiente de nucleação, x , é aumentado, a fase nucleada nas faces apresenta maior predominância, o que é demonstrado pelas linhas tracejadas com marcadores quadrados e pontilhadas com marcadores circulares das partes (a), (b) e (c) das figuras 52, 54, 56 e 58. Isto é corroborado pela contiguidade, como pode ser constatado na Figura 60, em que pode ser observada a crescente semelhança entre o perfil da contiguidade total, representada na parte (c), e o perfil da contiguidade da reação nucleada nas faces do policristal, representada na parte (a). A representação mostrada na Figura 58(d) demonstra a forte predominância da fase nucleada nas faces, pois a linha tracejada e a linha traço-ponto estão sobrepostas.

5.5 REAÇÕES SIMULTÂNEAS NUCLEADAS NOS VÉRTICES E NAS FACES DE UM POLICRISTAL

Analogamente à configuração anterior, a tesselação de Poisson-Voronoi tomada por matriz inicial é obtida a partir de um processo de ponto homogêneo de Poisson de intensidade 30. Neste caso, a varredura da matriz identifica a quantidade e localização dos vértices, ambas utilizadas como sítios de nucleação para uma das fases, enquanto quantidade de vértices, Q_v , é aplicada na Equação (16) para a definição da quantidade de núcleos da reação nucleada nas interfaces da tesselação, também identificadas na varredura da matriz.

5.5.1 Reações com Coeficiente de Nucleação $\alpha = 1$ nas Faces

Para um coeficiente $\alpha = 1$, foram encontradas médias do número de núcleos para as reações nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi de, respectivamente, $N_x = 196,86$ e $N_F = 196,86$. Na Figura 61, podem ser observadas representações gráficas da evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, discutidas na seção 5.5.5.

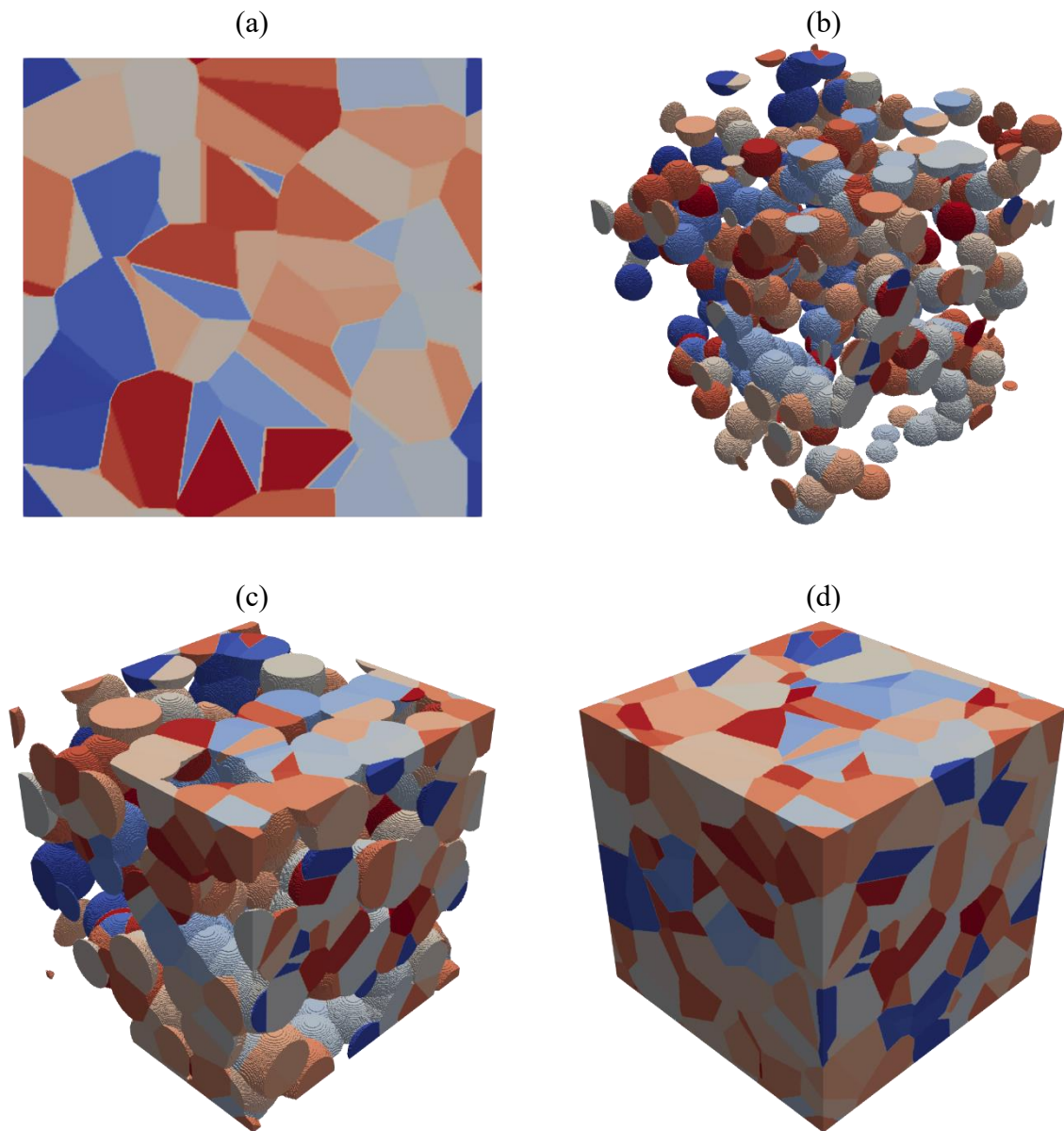


Figura 61 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $N_X = 133$ e $N_F = 133$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.

Fonte: O autor.

A média dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 62 e são discutidas na seção 5.5.5. As linhas contínuas, tracejadas e pontilhadas representam, respectivamente, as expressões da reação total, da reação nucleada nas faces e da reação nucleada em sítios aleatórios obtidas pelo princípio da superposição. Os pontos em estrela, quadrado e triângulo representam, respectivamente, os dados de simulação provenientes da reação total, da reação nucleada nas faces e da reação nucleada nos vértices da matriz inicial. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson, a linha tracejada, os dados da contiguidade da reação nucleada nas faces, a linha pontilhada, os dados da contiguidade da reação nucleada nos vértices e a linha traço-ponto, os dados da contiguidade da reação total.

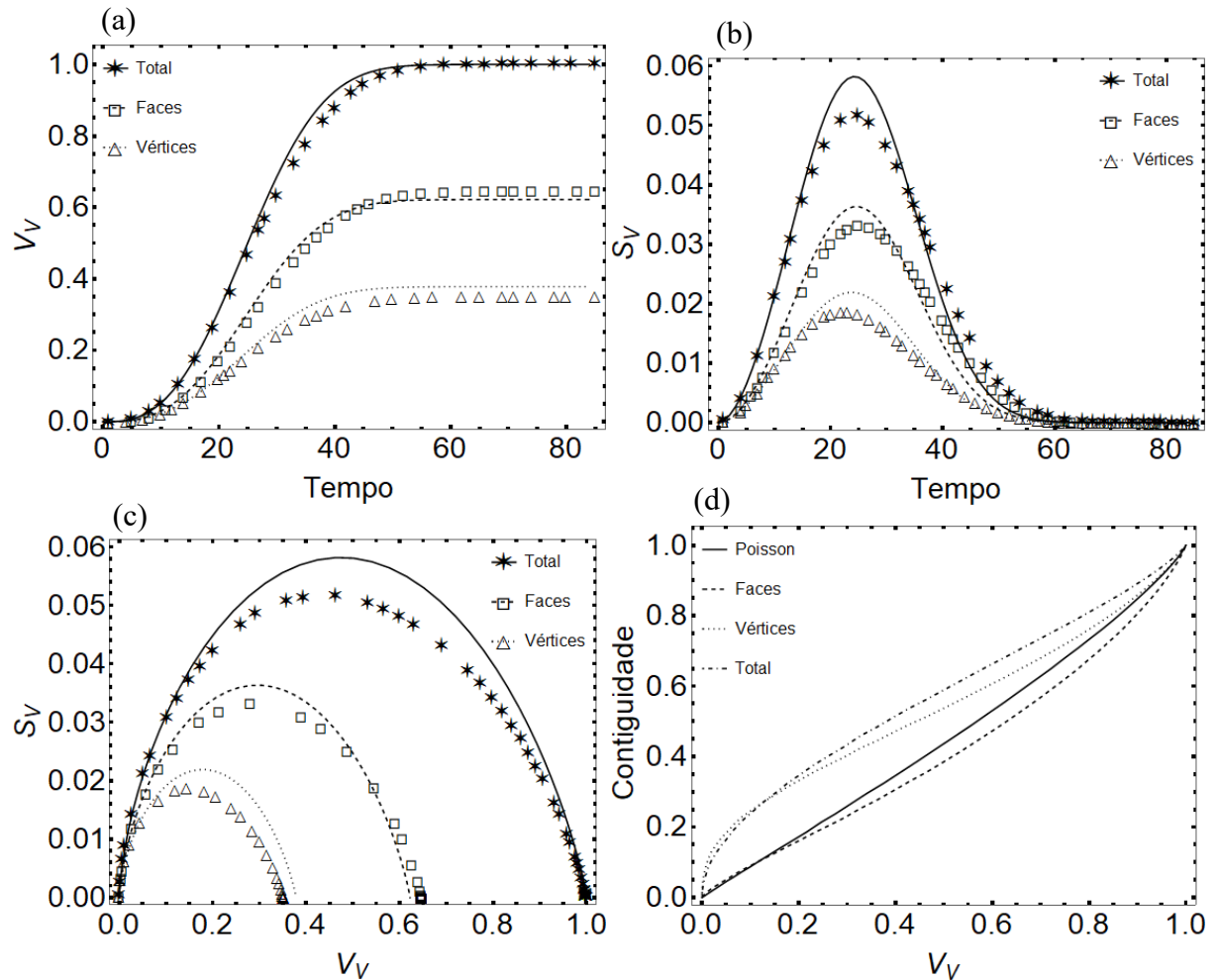


Figura 62 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $N_X = 196,86$ e $N_F = 196,86$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.5.2 Reações com Coeficiente de Nucleação $\alpha = 2$ nas Faces

Para um coeficiente $\alpha = 2$, foram encontradas médias do número de núcleos para as reações nucleadas nos vértices e nas faces de, respectivamente, $N_X = 183,34$ e $N_F = 366,68$. Na Figura 63, é apresentada a evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados extraídos de uma das simulações realizadas, discutidas na seção 5.5.5.

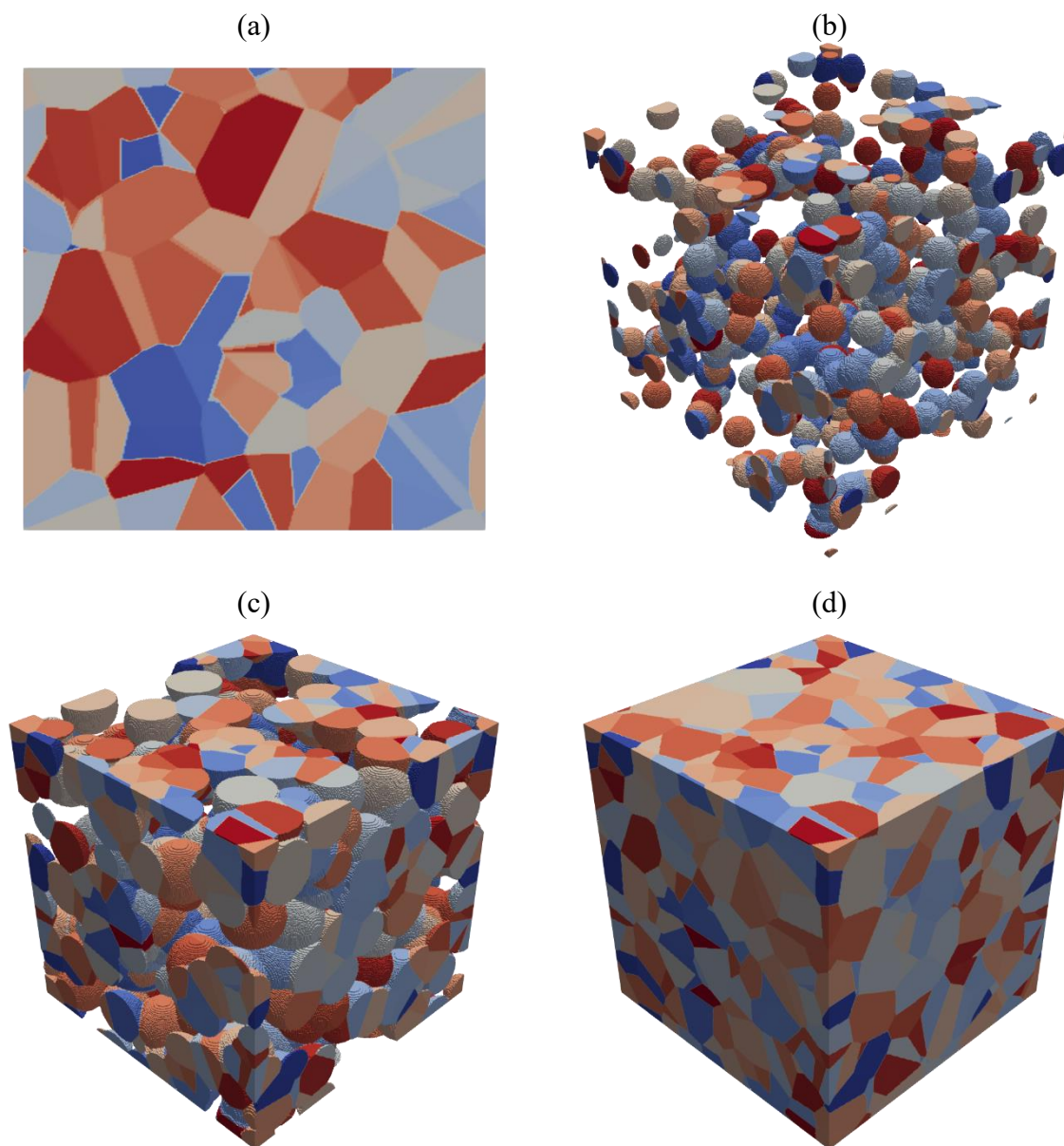


Figura 63 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $N_X = 175$ e $N_F = 350$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.

Fonte: O autor.

A média dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 64 e são discutidas na seção 5.5.5. As linhas contínuas, tracejadas e pontilhadas representam, respectivamente, as expressões da reação total, da reação nucleada nas faces e da reação nucleada em sítios aleatórios obtidas pelo princípio da superposição. Os pontos em estrela, quadrado e triângulo representam, respectivamente, os dados de simulação provenientes da reação total, da reação nucleada nas faces e da reação nucleada nos vértices da matriz inicial. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson, a linha tracejada, os dados da contiguidade da reação nucleada nas faces, a linha pontilhada, os dados da contiguidade da reação nucleada nos vértices e a linha traço-ponto, os dados da contiguidade da reação total.

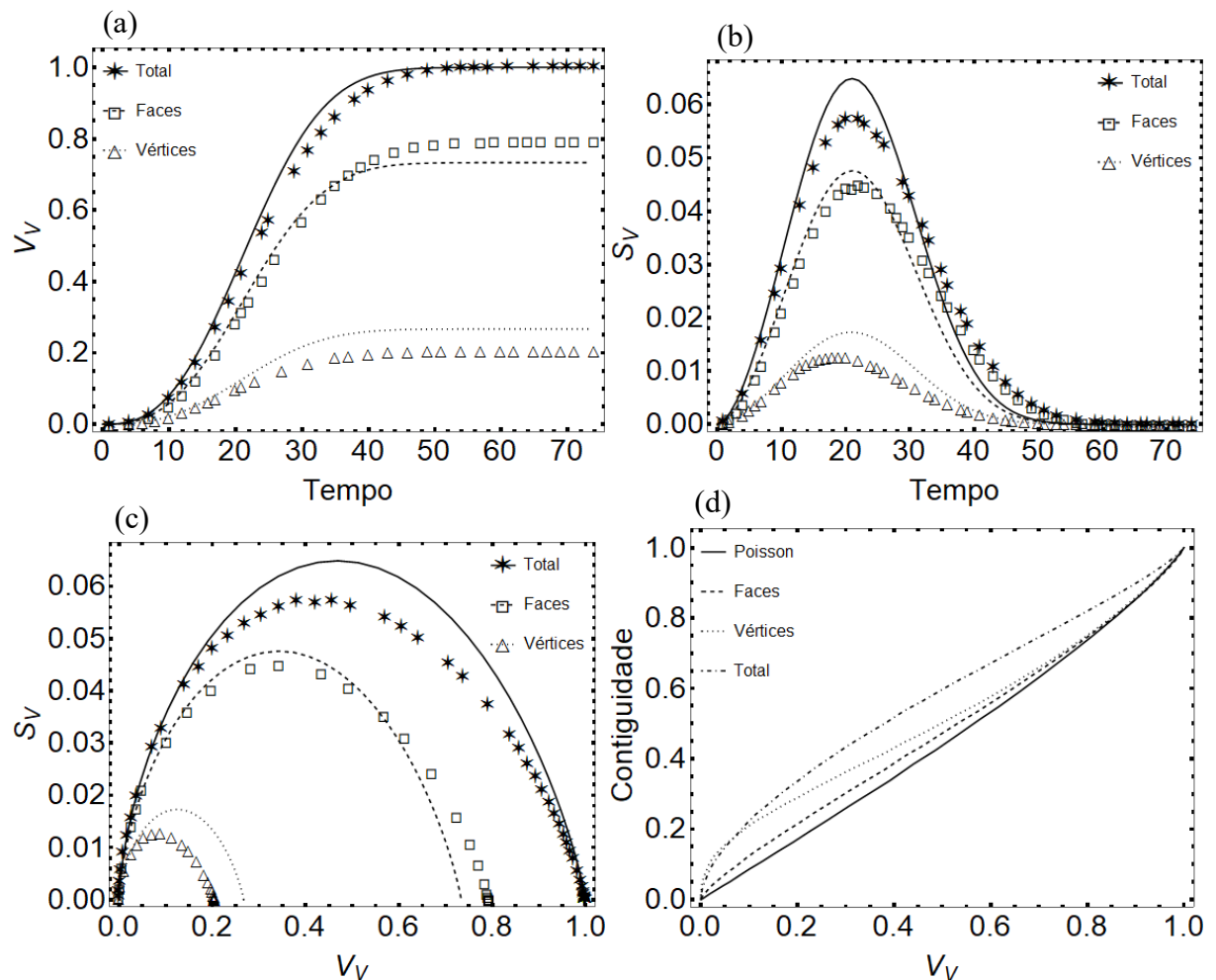


Figura 64 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $N_X = 183,34$ e $N_F = 366,68$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.5.3 Reações com Coeficiente de Nucleação $\chi = 3$ nas Faces

Para um coeficiente $\chi = 3$, foram encontradas médias do número de núcleos para as reações nucleadas em sítios aleatórios da matriz e nas faces de, respectivamente, $N_X = 193,26$ e $N_F = 578,78$. Na Figura 65, é apresentada a evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados obtidos de uma das simulações realizadas, discutidas na seção 5.5.5.

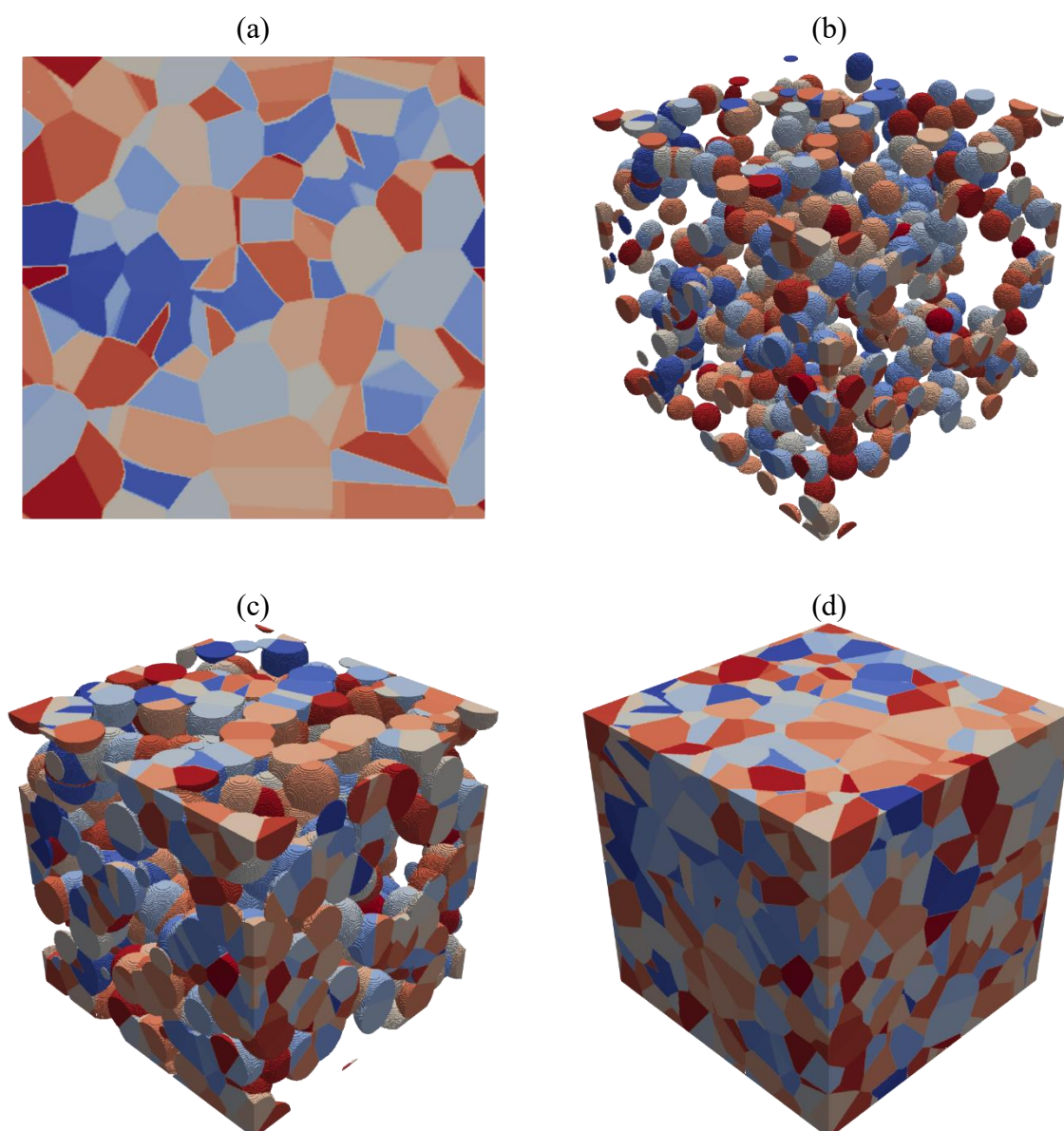


Figura 65 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $N_X = 175$ e $N_F = 525$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.

Fonte: O autor.

A média dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 66 e são discutidas na seção 5.5.5. As linhas contínuas, tracejadas e pontilhadas representam, respectivamente, as expressões da reação total, da reação nucleada nas faces e da reação nucleada em sítios aleatórios obtidas pelo princípio da superposição. Os pontos em estrela, quadrado e triângulo representam, respectivamente, os dados de simulação provenientes da reação total, da reação nucleada nas faces e da reação nucleada nos vértices da matriz inicial. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson, a linha tracejada, os dados da contiguidade da reação nucleada nas faces, a linha pontilhada, os dados da contiguidade da reação nucleada nos vértices e a linha traço-ponto, os dados da contiguidade da reação total.

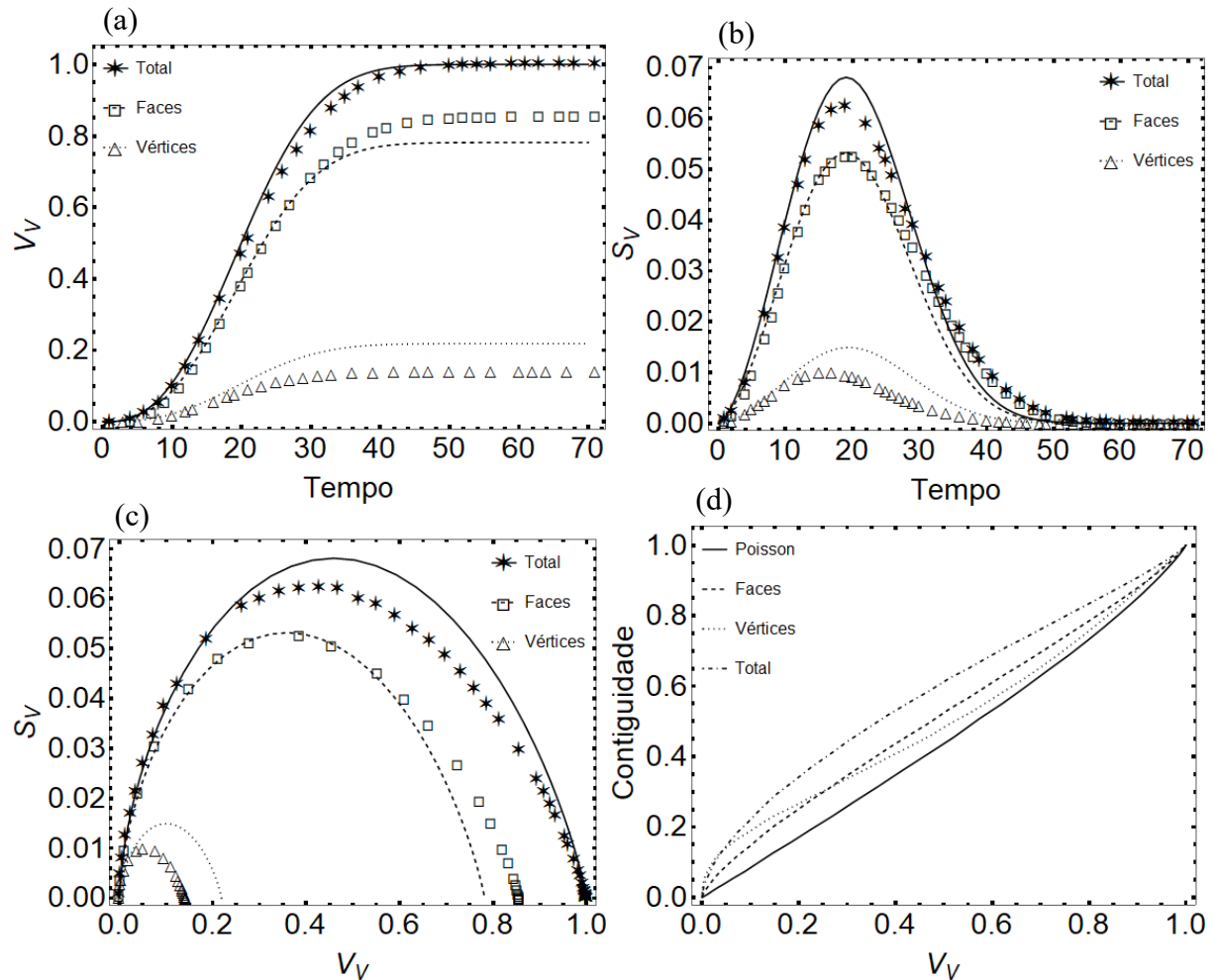


Figura 66 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $N_X = 193,26$ e $N_F = 578,78$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.5.4 Reações com Coeficiente de Nucleação $\chi = 5$ nas Faces

Para um coeficiente $\chi = 5$, encontraram-se médias do número de núcleos para as fases nucleadas em sítios aleatórios da matriz e nas faces de, respectivamente, $N_X = 192,36$ e $N_F = 961,80$. Na Figura 67, é apresentada a evolução microestrutural do presente caso avaliado, com dados obtidos de uma das simulações realizadas, discutidas na seção 5.5.5.

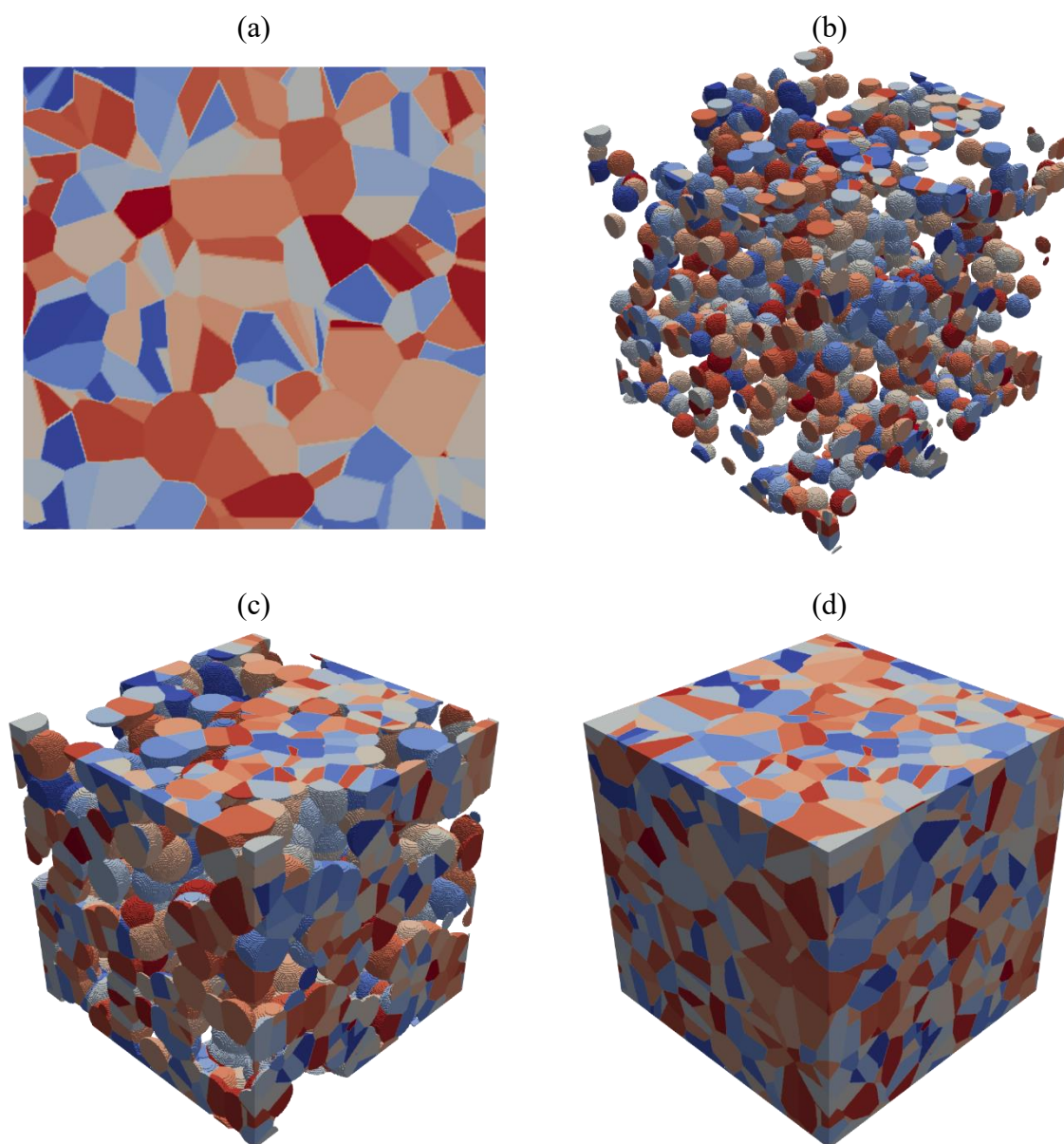


Figura 67 – Representação gráfica da microestrutura simulada das transformações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $N_X = 164$ e $N_F = 825$. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 20% de transformação. (c) 60% de transformação. (d) 100% de transformação.

Fonte: O autor.

A média dos resultados obtidos nas 50 simulações estão representadas na Figura 68 e são discutidas na seção 5.5.5. As linhas contínuas, tracejadas e pontilhadas representam, respectivamente, as expressões da reação total, da reação nucleada nas faces e da reação nucleada em sítios aleatórios obtidas pelo princípio da superposição. Os pontos em estrela, quadrado e triângulo representam, respectivamente, os dados de simulação provenientes da reação total, da reação nucleada nas faces e da reação nucleada nos vértices da matriz inicial. Para a contiguidade, a linha contínua representa a contiguidade de um processo de ponto de Poisson, a linha tracejada, os dados da contiguidade da reação nucleada nas faces, a linha pontilhada, os dados da contiguidade da reação nucleada nos vértices e a linha traço-ponto, os dados da contiguidade da reação total.

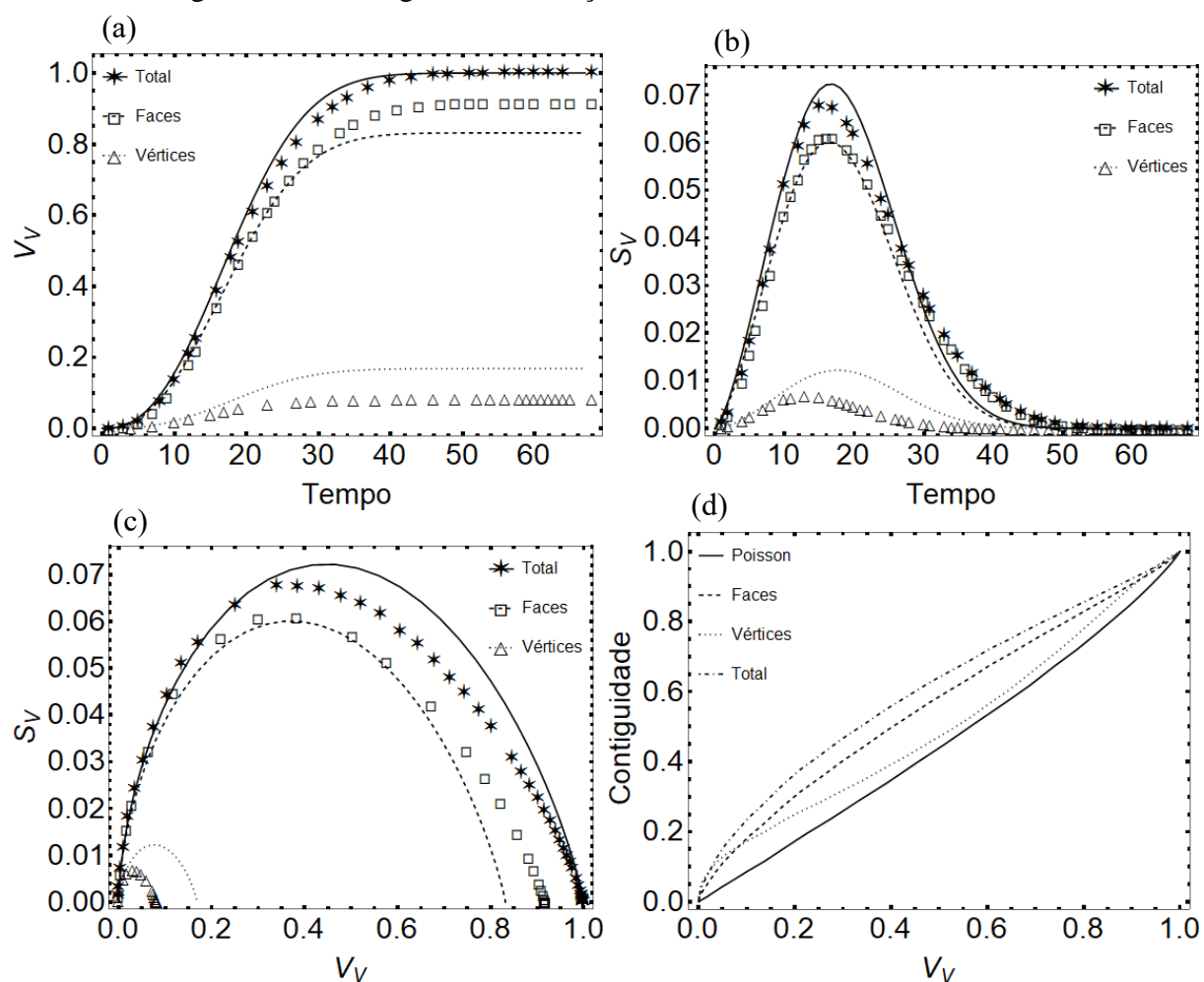


Figura 68 – Resultados médios das 50 simulações realizadas para reações simultâneas nucleadas nos vértices e nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, em que $N_X = 192,36$ e $N_F = 961,80$. (a) V_V versus Tempo. (b) S_V versus Tempo. (c) Caminho Microestrutural. (d) Contiguidade versus V_V .

Fonte: O autor.

5.5.5 Estudo das Simulações Simultâneas Nucleadas nos Vértices e nas Faces de um Policristal

A inspeção visual das micrografias apresentadas nas Figuras 61, 63, 65 e 67 permite a constatação de resultados análogos aos das reações simultâneas nucleadas em sítios aleatórios da matriz e nas faces de um policristal, isto é, as micrografias das reações simultâneas apresentam grãos característicos das reações individuais, contando com uma presença cada vez mais frequente de grãos alongados, característicos da nucleação nas faces com uma elevada quantidade de núcleos. Entretanto, neste caso, a nucleação nos vértices também apresenta grãos alongados, como foi observado no item 5.2.

Este efeito pode ser mais bem visualizado na Figura 69, gerada com dados do caso em que $x = 5$ (apresentados no item 5.5.4) em que os grãos em amarelo representam a fase nucleada nos vértices da matriz inicial, os grãos em verde representam a fase nucleada nas faces da matriz inicial e os contornos de grão estão representados em azul. Nota-se que ambas as fases apresentam grãos alongados, ocasionados por *impingement* entre a mesma fase ou entre as diferentes fases.

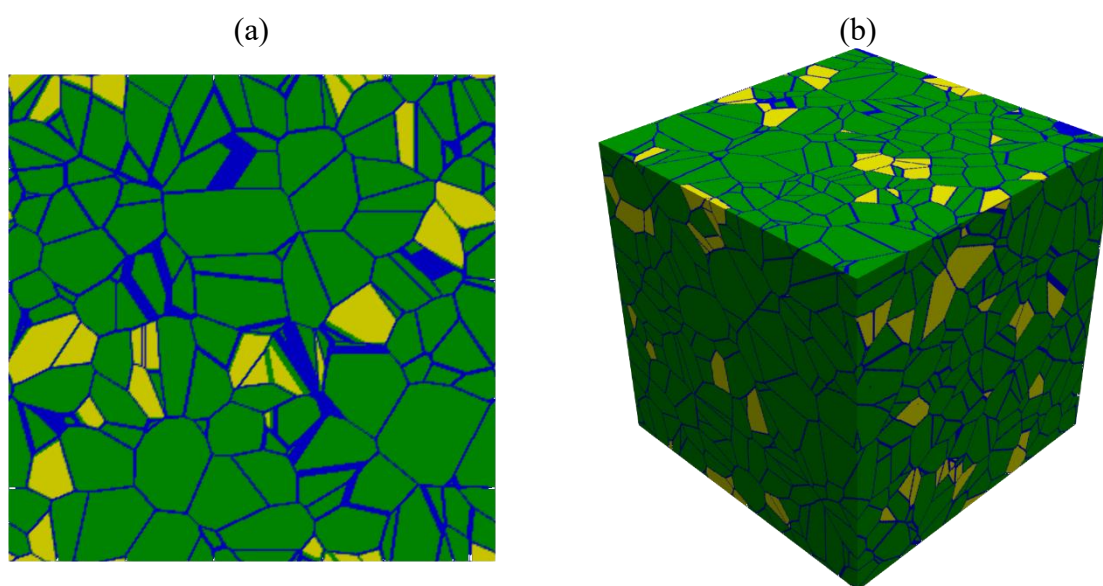


Figura 69 – Representação gráfica da microestrutura demonstrando os contornos e as morfologias características de cada fase. (a) Seção 2D do plano médio. (b) 100% de transformação em 3D.

Fonte: O autor.

Para melhor compreensão do fenômeno, é necessária a análise quantitativa dos resultados de simulação. Primeiramente, é importante ressaltar que, apesar de a equação de

Cahn ter apresentado boa concordância com as reações individuais nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi, este comportamento não foi observado quando esta equação foi utilizada com o princípio da superposição para descrever a reação nucleada simultaneamente nas faces e nos vértices. As curvas de fração transformada de cada fase são calculadas através da Equação (10).

No item 5.2.7, foi apresentada a necessidade da realização do ajuste da equação de Avrami (2) para a descrição da reação nucleada nos vértices. Assim, para todos os casos do presente tópico, esta reação é representada analiticamente pelo ajuste feito para os dados de simulação provenientes da reação individual nucleada nos vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi gerada a partir de um processo de ponto de Poisson homogêneo com intensidade 30, apresentado no item 5.2.1.

Uma comparação entre as representações analíticas pode ser vista na Figura 70 para o caso em que $x = 1$, ou seja, uma baixa quantidade de núcleos em ambas as fases nucleadas. A Figura 70(a) contém a representação da fração volumétrica transformada em função do tempo, calculada utilizando o princípio da superposição considerando o ajuste para a reação nucleada nos vértices e a equação de Cahn para a reação nucleada nas faces, através das expressões apresentadas nas Equações (9) e (10). A discrepância entre as curvas das reações parciais e os resultados da simulação é perceptível. Este distanciamento pode ser amenizado utilizando-se também um ajuste de curva feito para os dados de simulação das reações individuais nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi para representar a reação simultânea nucleada nas faces. Na Figura 70(b) é possível observar que a discrepância entre as expressões analíticas e os resultados de simulação é consideravelmente menor, pois nela a expressão utilizada para representar uma reação individual nucleada nas faces foi obtida a partir do ajuste dos resultados da simulação apresentados no item 5.3.2.

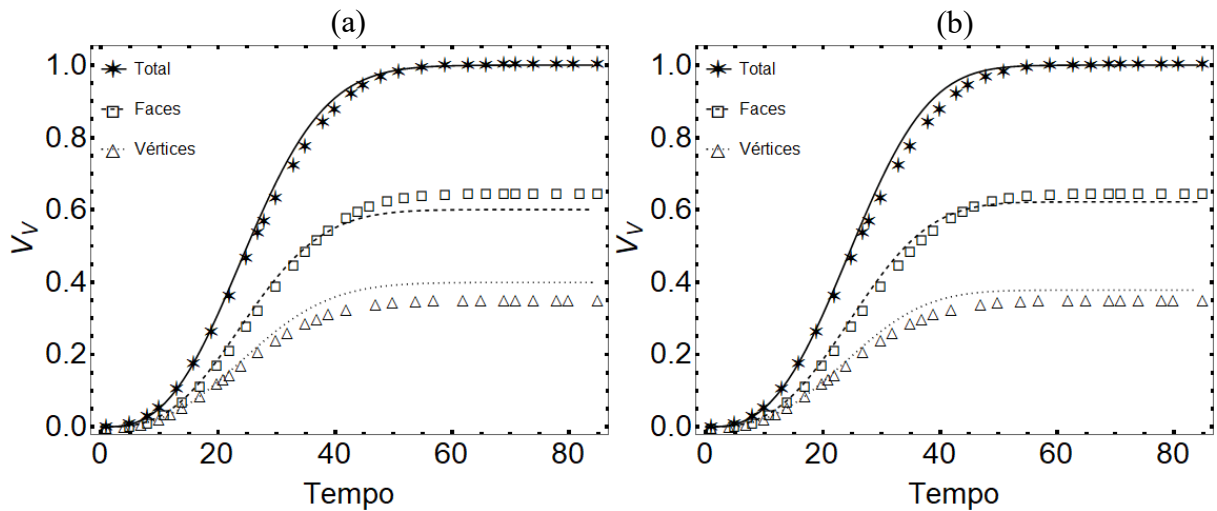


Figura 70 – Fração volumétrica transformada da reação total (linha contínua), da reação da fase nucleada nas faces (linha tracejada) e da reação nucleada nos vértices (linha pontilhada) para o caso em que $x = 1$, utilizando (a) a equação de Cahn para a reação nucleada nas faces e ajuste para a equação nucleada nos vértices. (b) ajuste para ambas as reações.

Fonte: O autor.

Uma análise análoga à apresentada na Figura 70 foi realizada para o caso em que o coeficiente de nucleação x é igual a 5 e pode ser vista na Figura 71. Neste caso, a discrepância é ainda maior que a observada para coeficientes de nucleação menores, como pode ser visto na Figura 71(a), e a utilização de ajuste para ambas as reações apresenta, novamente, maior concordância aos resultados de simulação, como pode ser observado na Figura 71(b).

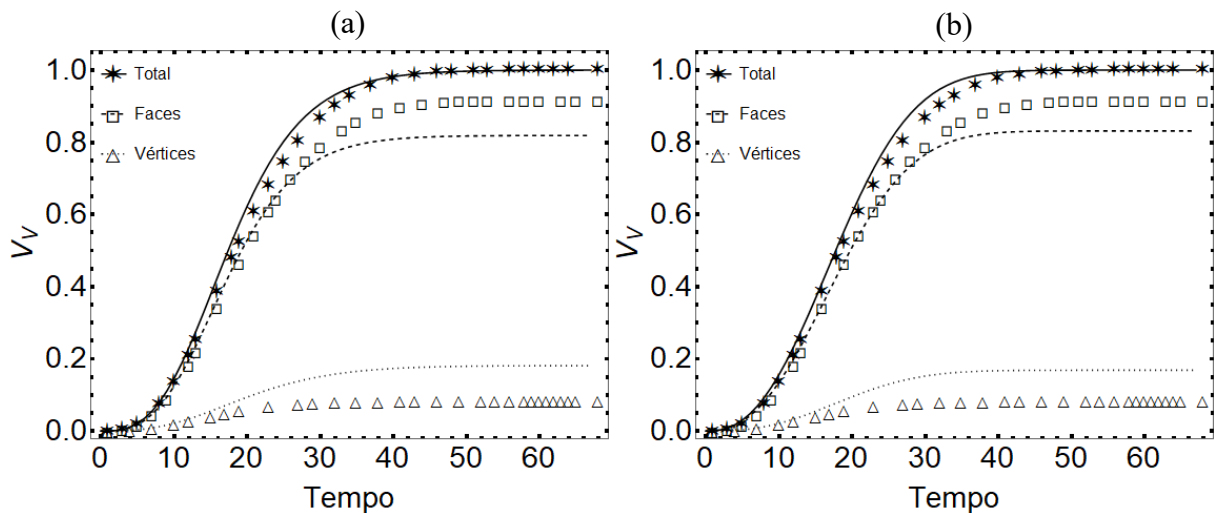


Figura 71 – Fração volumétrica transformada da reação total (linha contínua), da reação da fase nucleada nas faces (linha tracejada) e da reação nucleada nos vértices (linha pontilhada) para o caso em que $x = 5$, utilizando (a) a equação de Cahn para a reação nucleada nas faces e ajuste para a equação nucleada nos vértices. (b) ajuste para ambas as reações.

Fonte: O autor.

Diante disso, foram realizados ajustes para representar as linhas tracejadas encontradas nas partes (a), (b) e (c) das Figuras 62, 64, 66 e 68. Os ajustes foram realizados utilizando os dados das reações individuais, apresentadas na seção 5.3, e seus resultados foram sumarizados na Tabela 4.

Tabela 4 – Parâmetros cinéticos dos ajustes realizados para as simulações nucleadas nas faces de uma tesselação de Poisson-Voronoi.

Coefficiente de Nucleação, x	k	n	R^2
$x = 1$	$4,2685 \times 10^{-5}$	2,8599	0,9999
$x = 2$	$1,2027 \times 10^{-4}$	2,7116	0,9999
$x = 3$	$2,4470 \times 10^{-4}$	2,5769	0,9999
$x = 5$	$5,8448 \times 10^{-4}$	2,4031	0,9999

Fonte: O autor.

O princípio da superposição se mostrou robusto para o cálculo do V_V total, como pode ser visto na parte (a) das Figuras 62, 64, 66 e 68. Apresentando boa concordância com os resultados de simulação para a reação total.

Observa-se que o resultado das frações transformadas de cada fase apresenta pior concordância em decorrência do aumento da quantidade de núcleos nas faces da tesselação de Poisson-Voronoi, sugerindo a existência de uma interdependência entre as reações, que aumenta proporcionalmente à quantidade de núcleos. Este resultado é esperado e condizente com as condições de nucleação propostas na simulação, pois deve ser levada em consideração a existência planos com áreas pequenas nas interfaces da tesselação, onde um ou mais núcleos sorteados estão necessariamente próximos aos vértices das arestas que compõem estes planos.

Um outro aspecto relevante a ser considerado na análise dos resultados da cinética das reações é a propagação de erros, provenientes da forma pela qual os ajustes foram realizados e da necessidade de derivação das curvas ajustadas para obtenção das curvas parciais, como descrito no procedimento apresentado na Equação (10), que foi utilizada para a geração das linhas tracejada e pontilhada das Figuras 62, 64, 66 e 68 em suas partes (a), (b) e (c).

A contiguidade das reações pode ser encontrada na parte (d) das Figuras 62, 64, 66 e 68. A presença de uma concentração dos núcleos da reação é notável em todos os casos simulados, como pode ser mais bem constatado na Figura 72(c).

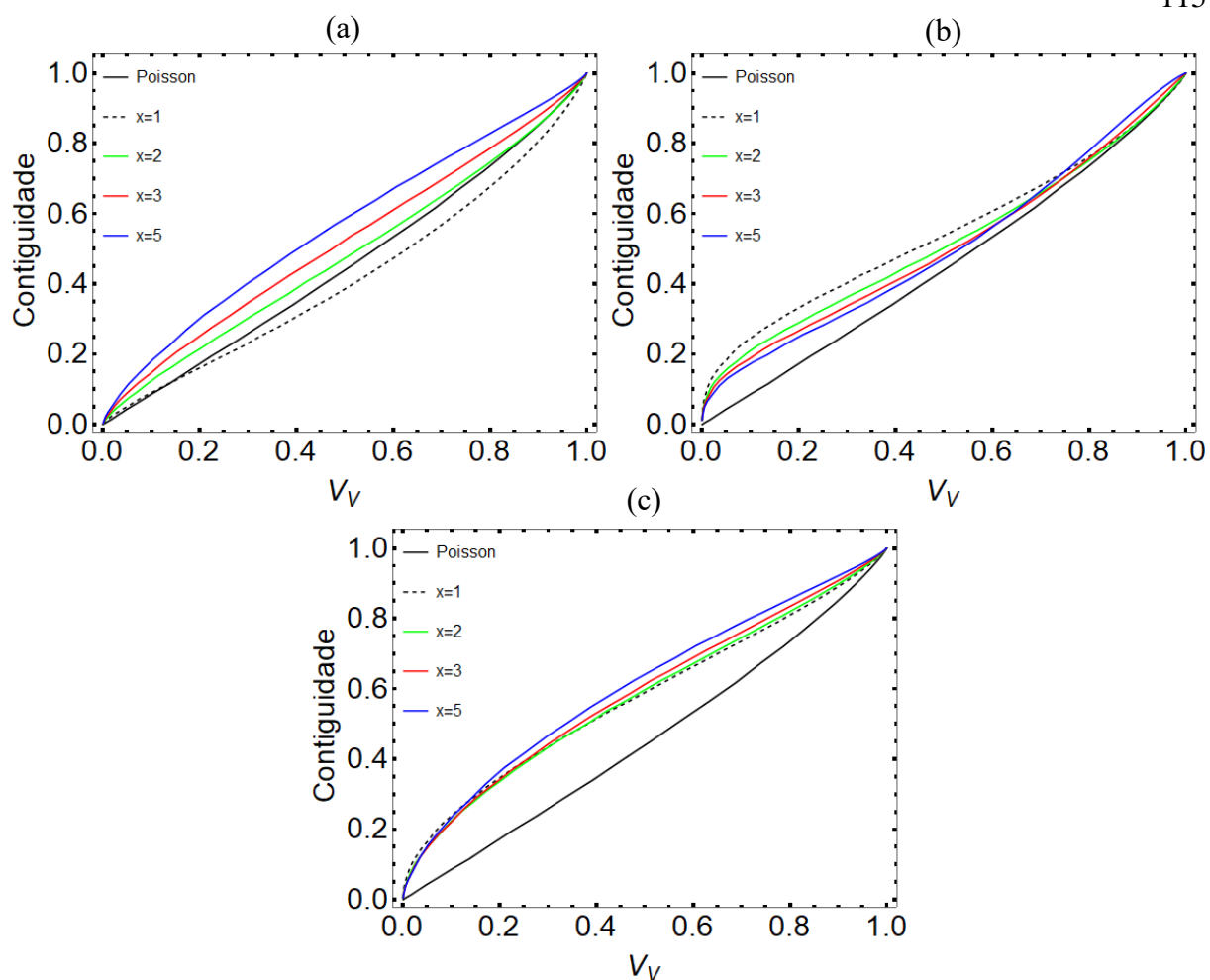


Figura 72 – Gráfico de Contiguidade versus V_V para os diferentes coeficientes de nucleação da reação: (a) nucleada nas faces. (b) nucleada nos vértices. (c) total.

Fonte: O autor.

Observa-se que o perfil da contiguidade da reação total apresenta maior semelhança ao perfil da reação nucleada nos vértices. Nas linhas contínuas coloridas, que representam maiores quantidades de núcleos nas faces, nota-se um perfil da reação total mais semelhante ao das reações nucleadas nas faces, corroborando a predominância desta fase na reação total.

6. CONCLUSÕES

Neste trabalho, foram realizadas simulações computacionais e comparações com modelos analíticos visando a análise de transformações de fase simultâneas nucleadas em sítios de nucleação preferenciais de uma tesselação de Poisson-Voronoi. Em todos os casos, foi adotada a nucleação por saturação de sítios. Para os casos que trataram de reações simultâneas, o modelo analítico de Rios e Villa [1] foi adotado. De modo geral, as principais conclusões são:

- A simulação comprova que os vértices de uma tesselação de Poisson-Voronoi não são processo de ponto de Poisson. No caso, essa comprovação se dá através da contiguidade, que mostra claramente um desvio em relação à contiguidade do processo de ponto de Poisson homogêneo. O que está de acordo com resultados analíticos obtidos anteriormente [32], [41].
- A nucleação nas faces pode ser muito bem descrita usando a equação de Cahn. A causa desta concordância ainda não tem explicação matemática.
- O modelo de JMAK foi utilizado para a nucleação nos pontos aleatórios e a equação de Cahn, para a reação nucleada nas faces. Houve boa concordância entre os resultados analíticos, obtidos pela utilização do princípio da superposição, e os resultados de simulação no caso das reações simultâneas.
- No caso da nucleação simultânea em faces e vértices, um melhor resultado foi obtido quando realizado um ajuste usando a equação de Avrami para a cinética de transformação de ambas as reações. Neste caso, os resultados analíticos, obtidos utilizando o princípio da superposição, apresentaram boa concordância com os resultados de simulação para a reação total.

7. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

- A análise visual das microestruturas sugeriu uma influência da disposição dos núcleos na reação, o que foi avaliado quantitativamente pela contiguidade. Para um maior aprofundamento deste fator, sugere-se a utilização da Função de Correlação de Pares (*Pair Correlation Function*) para investigar a disposição dos núcleos.
- Dentre os sítios preferenciais para nucleação considerados na literatura, foram utilizados apenas os vértices e as faces. Sugere-se que seja acrescentada a reação nas arestas de uma rede policristalina.
- No presente trabalho, as simulações de transformações foram nucleadas por saturação de sítios. Sugere-se que sejam realizadas simulações com taxa de nucleação constante, buscando comparar-se qual modelo apresenta maior concordância com os modelos analíticos.
- Todas as simulações com o surgimento de duas fases produto realizadas consideraram que as reações ocorrem simultaneamente. Assim, sugere-se estender o estudo para reações sequenciais.

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] P. R. Rios e E. Villa, “Simultaneous and sequential transformations”, *Acta Mater*, vol. 59, nº 4, p. 1632–1643, 2011, doi: 10.1016/j.actamat.2010.11.030.
- [2] W. A. Johnson e R. F. Mehl, “Reaction Kinetics in processes of nucleation and growth, Transactions of American Institute of Mining and Metallurgical Engineers”, *Trans. Am. Inst. Min. Metall. Eng.*, vol. 135, p. 414–458, 1939.
- [3] A. N. Kolmogorov, “On the statistical theory of the crystallization of metals”, *Bull. Acad. Sci. USSR, Math. Ser.*, 1937.
- [4] M. Avrami, “Kinetics of phase change. I: General theory”, *J Chem Phys*, vol. 7, nº 12, p. 1103–1112, 1939, doi: 10.1063/1.1750380.
- [5] M. Avrami, “Kinetics of phase change. II Transformation-time relations for random distribution of nuclei”, *J Chem Phys*, vol. 8, nº 2, p. 212–224, 1940, doi: 10.1063/1.1750631.
- [6] M. Avrami, “Granulation, phase change, and microstructure kinetics of phase change. III”, *J Chem Phys*, vol. 9, nº 2, p. 177–184, 1941, doi: 10.1063/1.1750872.
- [7] S. C. de Oliveira, “Simulação Computacional 3-D e Modelamento Analítico das Reações Simultâneas com Aplicações à Recristalização de um Aço IF”, Volta Redonda, 2013.
- [8] A. L. M. Alves, W. L. S. Assis, e P. R. Rios, “Computer simulation of sequential transformations”, *Acta Mater*, vol. 126, p. 451–468, 2017, doi: 10.1016/j.actamat.2016.12.068.
- [9] P. R. Rios e R. W. K. Honeycombe, “Effect of niobium on decomposition of austenite in 0.2C–10Cr steel”, *Materials Science and Technology*, vol. 8, nº 12, p. 1057–1062, fev. 2012, doi: 10.1179/026708392790170306.

- [10] J. W. Cahn, “The Kinetics of Grain Boundary Nucleated Reactions”, *Acta Metallurgica*, vol. 4, p. 449–459, 1956.
- [11] P. R. Rios e E. Villa, “Transformation kinetics for inhomogeneous nucleation”, *Acta Mater*, vol. 57, n° 4, p. 1199–1208, fev. 2009, doi: 10.1016/j.actamat.2008.11.003.
- [12] P. R. Rios, E. Villa, W. L. S. Assis, e T. C. S. Ribeiro, “Kinetics of transformations nucleated on random parallel planes: analytical modelling and computer simulation”, *Model Simul Mat Sci Eng*, vol. 20, n° 3, p. 035017, abr. 2012, doi: 10.1088/0965-0393/20/3/035017.
- [13] J. W. Cahn, “Time cone method for nucleation and growth kinetics on a finite domain”, *Materials Research Society Symposium - Proceedings*, vol. 398, p. 425–437, 1996, doi: 10.1557/proc-398-425.
- [14] J. W. Christian, *The Theory of Transformations in Metals and Alloys Part I*, Third. Pergamon, 2002.
- [15] P. R. Rios e A. F. Padilha, *Transformações de Fase*. São Paulo: Artliber, 2007.
- [16] P. R. Rios, D. Jardim, W. L. da S. Assis, T. C. Salazar, e E. Villa, “Inhomogeneous Poisson Point Process Nucleation: Comparison of Analytical Solution with Cellular Automata Simulation”, *Materials Research*, vol. 12, n° 2, p. 219–224, 2009. doi: <https://doi.org/10.1590/S1516-14392009000200017>.
- [17] P. R. Rios e A. F. Padilha, “Microstructural Path of Recrystallization in a Commercial Al-Mn-Fe-Si (AA3003) Alloy”, vol. 6, n° 4, p. 605–613, 2003.
- [18] R. A. Vandermeer e D. J. Jensen, “Microstructural Path and Temperatura Dependence of Recrystallization in Commercial Aluminum”, vol. 49, p. 2083–2094, 2001.
- [19] A. L. M. Alves, “Simulação Computacional de Reações com Nucleação e Crescimento de Fases Simultâneas e Sequenciais pelo Método do Cone Causal”, Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2015.

- [20] P. R. Rios, T. Yamamoto, T. Kondo, e T. Sakuma, “ABNORMAL GRAIN GROWTH KINETICS OF BaTiO₃ WITH AN EXCESS TiO₂”, vol. 46, nº 5, p. 1617–1623, 1998.
- [21] P. R. Rios e J. R. C. Guimarães, “Microstructural path analysis of athermal martensite”, vol. 57, p. 1105–1108, 2007, doi: 10.1016/j.scriptamat.2007.08.019.
- [22] P. R. RIOS e J. R. C. GUIMARÃES, “Formal Analysis of Isothermal Martensite Spread”, vol. 11, nº 1, p. 103–108, 2008.
- [23] M. Burger, V. Capasso, e C. Salani, “Modelling multi-dimensional crystallization of polymers in interaction with heat transfer”, vol. 3, p. 139–160, 2002.
- [24] G. D. da Fonseca, “Comparação do Modelo Analítico com a Simulação Computacional da Nucleação nos Contornos de Grão”, Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2016.
- [25] P. R. Rios, V. T. De Oliveira, L. D. O. Pereira, M. R. Pereira, e J. A. De Castro, “Cellular Automata Simulation of Site-saturated and Constant Nucleation Rate Transformations in Three Dimensions”, vol. 9, nº 2, p. 223–230, 2006.
- [26] P. R. Rios, V. T. de Oliveira, L. D. O. Pereira, M. R. Pereira, e J. A. de Castro, “Cellular Automata Simulation of Site-saturated and Constant Nucleation Rate Transformations in Three Dimensions”, vol. 9, nº 2, p. 223–230, 2006.
- [27] R. T. DeHoff, “Annealing processes - Recovery, Recrystallization and Grain Growth”, em *Risø National Laboratory*, 1986, p. 35–52.
- [28] G. D. da Fonseca, F. da S. Siqueira, A. Luiz Moraes Alves, W. L. da S. Assis, e P. R. Rios, “Computer simulation of site saturation and constant nucleation rate transformations on a network of Kelvin polyhedra”, *Journal of Materials Research and Technology*, vol. 8, nº 5, p. 4534–4539, 2019, doi: 10.1016/j.jmrt.2019.07.066.
- [29] H. da S. Ventura, “Efeito de uma Zona de Exclusão ao Redor dos Núcleos na Transformação de Fase”, 2020.

- [30] M. S. Lyrio, “Simulação Computacional de Transformações com Nucleação e Velocidade Não Homogêneas”, Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2020.
- [31] A. L. M. Alves, “Transformações de Fase Sequenciais”, Volta redonda, 2019.
- [32] S. N. Chiu, D. Stoyan, W. S. Kendall, e J. Mecke, “Stochastic Geometry and its Applications”, 2013. doi: 10.1002/9781118658222.
- [33] E. Villa e P. R. Rios, “On Modelling Recrystallization Processes with Random Growth Velocities of the Grains in Materials Science”, nº 1937, p. 149–162, 2012, doi: 10.5566/ias.v31.p149-162.
- [34] N. F. Ignácio, “Estudo de Transformações de Fase com Nucleação em Clusters Esféricos via Método do Cone Causal”, Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2020.
- [35] R. A. Vandermeer, “Microstructural descriptors and the effects of nuclei clustering on recrystallization path kinetics”, *Acta Mater*, vol. 53, nº 5, p. 1449–1457, mar. 2005, doi: 10.1016/j.actamat.2004.10.054.
- [36] P. R. Rios, L. O. Pereira, F. F. Oliveira, W. L. S. Assis, e J. A. Castro, “Impingement function for nucleation on non-random sites”, *Acta Mater*, vol. 55, nº 13, p. 4339–4348, ago. 2007, doi: 10.1016/j.actamat.2007.04.003.
- [37] E. Villa e P. R. Rios, “Transformation kinetics for nucleus clusters”, *Acta Mater*, vol. 57, nº 13, p. 3714–3724, ago. 2009, doi: 10.1016/j.actamat.2009.04.014.
- [38] E. A. Jäggle e E. J. Mittemeijer, “The kinetics of grain-boundary nucleated phase transformations: Simulations and modelling”, *Acta Mater*, vol. 59, nº 14, p. 5775–5786, 2011, doi: 10.1016/j.actamat.2011.05.054.
- [39] J. Ohser e F. Mücklich, *Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science*. 2000.

- [40] A. Okabe, B. Boots, K. Sugihara, S. N. Chiu, e D. G. Kendall, *Spatial Tessellations: Concepts and Applications of Voronoi Diagrams*, Second Edition. 2000. doi: 10.1002/9780470317013.
- [41] L. Heinrich, R. Körner, N. Mehlhorn, e L. Muche, “Numerical and analytical computation of some second-order characteristics of spatial Poisson-Voronoi tessellations”, *Statistics (Ber)*, vol. 31, n° 3, p. 235–259, 1998, doi: 10.1080/02331889808802638.
- [42] A. M. Gokhale e R. T. Dehoff, “Estimation of Nucleation Rate and Growth Rate from Time Dependence of Global Microstructural Properties during Phase Transformations”, 1985. Acessado: ago. 03, 2022. [Online]. Available: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF02814229>
- [43] M. S. Lyrio, A. L. M. Alves, G. M. S. de Sá, H. D. S. Ventura, W. L. D. S. Assis, e P. R. Rios, “Comparison of transformations with inhomogeneous nucleation and transformations with inhomogeneous growth velocity”, *Journal of Materials Research and Technology*, vol. 8, n° 5, p. 4682–4686, 2019, doi: 10.1016/j.jmrt.2019.08.012.
- [44] H. S. Ventura, A. L. M. Alves, W. L. S. Assis, E. Villa, e P. R. Rios, “Influence of an exclusion radius around each nucleus on the microstructure and transformation kinetics”, *Materialia (Oxf)*, vol. 2, n° July, p. 167–175, 2018, doi: 10.1016/j.mtla.2018.07.009.
- [45] T. C. S. Ribeiro, “Simulação computacional da microestrutura das transformações por nucleação e crescimento”, Universidade Federal Fluminense - UFF, 2011.
- [46] J. L. G. Ferreira, “Simulação Orientada a Objetos de Transformações de Fase em Metais”, Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2018. doi: 10.22409/PPG-MCCT.2018.m.13980271706.
- [47] A. L. M. Alves, E. Villa, e P. R. Rios, “Transformation kinetics for nucleation on second-phase particles: analytical solution and computer simulation”, *Acta Mater*, vol. 131, p. 523–533, 2017, doi: 10.1016/j.actamat.2017.03.078.

- [48] P. R. Rios, R. B. Godiksen, S. Schmidt, D. Juul Jensen, e R. A. Vandermeer, “Analytical expression for the evolution of interfacial area density between transformed grains during nucleation and growth transformations”, *Scr Mater*, vol. 54, n° 8, p. 1509–1513, abr. 2006, doi: 10.1016/j.scriptamat.2005.12.037.