

Estudo da evolução de grãos pelo método dos Autômatos Celulares

Salazar T C¹; Assis W L S¹; Rios P R¹

UFF – Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda, Volta Redonda, Rio de Janeiro.

Transformações que ocorrem por nucleação e crescimento no estado sólido são frequentemente estudadas com suporte das teorias de cinética formal. Estes estudos também têm sido realizados com grande frequência para descrever a recristalização, e são geralmente embasados em modelos matematicamente exatos. Os modelos analíticos tem sido há anos uma das melhores maneiras de se representar às características geométricas e evolutivas de uma microestrutura. Contudo, apresentam limitações e os seus resultados são válidos quando: os núcleos estão distribuídos aleatoriamente na microestrutura, todos os núcleos têm formatos aproximadamente esféricos e a velocidade de crescimento de todos os núcleos são iguais. As simulações computacionais são ferramentas para descrever fenômenos que são de difícil descrição analítica. Este trabalho investiga por simulação computacional, através do método dos Autômatos Celulares, o comportamento evolutivo dos grãos durante os processos de recristalização/transformação de fase. As curvas de distribuição de tamanho final total e de evolução individual dos grãos foram traçadas utilizando-se os volumes em função do tempo de reação. Duas variações do método foram analisadas: a primeira utilizando A.C. determinístico com variação de energia na matriz e a segunda utilizando A.C. probabilístico. A saída de dados ao fim da transformação simulada, fornece informações sobre os aspectos geométricos e da evolução de grãos individuais. Baseado na análise das curvas de crescimento, distribuições de tamanho final de grão e taxa de crescimento, é feita uma comparação qualitativa com resultados experimentais obtidos da literatura.

Palavras-chave: Recristalização, autômato celular, transformação de fase, distribuição de tamanho de grão.

E-mail de contato: tatiana@metal.eeimvr.uff.br