

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Modelamento Computacional de Transformações de Fase em Metais com uso de Orientação a Objetos

Jonathas Luis Groetares Ferreira¹

Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF, Volta Redonda, RJ

Wesley Luiz da Silva Assis²

Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF, Volta Redonda, RJ

Tiago Araújo Neves³

Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF, Volta Redonda, RJ

1 Introdução

O modelamento computacional de transformações de fase em metais vem sendo crucial para a compreensão de fenômenos metalúrgicos e para o desenvolvimento e aperfeiçoamento de materiais. Dentre os modelos existentes, o método do Autômato Celular tem sido amplamente utilizado para a simulação do crescimento de uma nova fase na fase matriz [1, 2].

Neste trabalho, utiliza-se a Programação Orientada a Objetos para o modelamento de fenômenos de nucleação e crescimento de novas fases com o método do Autômato Celular. No presente estágio de desenvolvimento já é possível gerar resultados compatíveis com as teorias e trabalhos presentes na literatura [1–3].

2 Resultados

Foram implementados algoritmos para a realização de cálculos a partir da microestrutura gerada pela simulação. Uma das medições efetuadas é a de tamanho de grão, isto é, o diâmetro médio dos grãos. A distribuição de tamanhos de grão em uma microestrutura policristalina é bem ajustada à distribuição de Weibull [3]. Neste modelo, é determinado que toda nucleação ocorra no instante inicial. Um exemplo de simulação ocorre em uma malha cúbica com $200 \times 200 \times 200$ células e com o número de núcleos iniciais igual a 800 ppm. A distribuição gerada tem tamanho de grão médio (média dos interceptos axiais) de $\langle X \rangle = 6,7$ células e forte correlação com a função de Weibull, como visto na Figura 1(a).

Além disso, pode-se observar pela Figura 1(b) que o ajuste entre a distribuição de tamanhos de grão e a função de Weibull é dependente do número de núcleos na matriz.

¹jonathasferreira@id.uff.br

²wesleyassis@id.uff.br

³tneves@id.uff.br

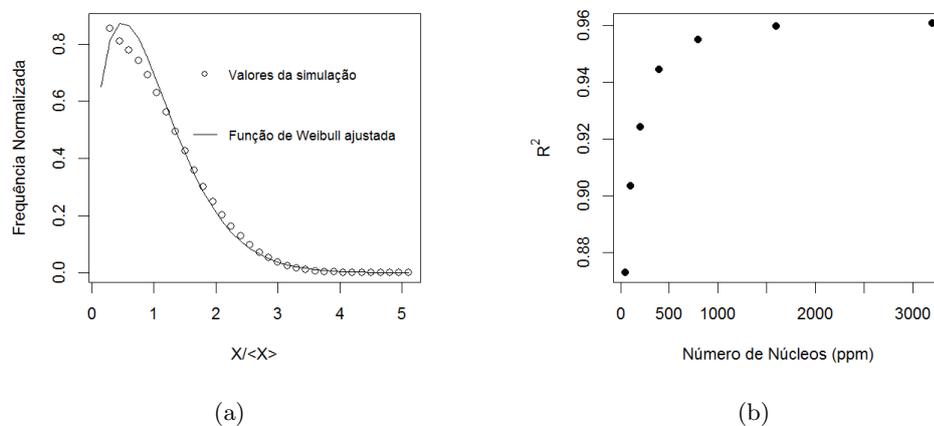


Figura 1: (a) Distribuição dos tamanhos de grão comparada com a função de Weibull. (b) Variação do coeficiente de determinação em função do número de núcleos da matriz.

3 Conclusões

O desenvolvimento deste programa tem alcançado resultados em conformidade com outros autores [3]. A simulação incluindo outros tipos de nucleação, métodos de crescimento e cálculos para análise da microestrutura gerada é pretendida para trabalhos futuros.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio da Pró-Reitoria de Assuntos Estudantis (PROAES) da Universidade Federal Fluminense, do Mestrado em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia e do Núcleo de Modelamento Microestrutural.

Referências

- [1] H. W. Hesselbarth e I. R. Göbel, Simulation of Recrystallization by Cellular Automata, *Acta Metallurgica et Materialia*, volume 39, n. 9, p. 2135-2143, 1991. DOI: 10.1016/0956-7151(91)90183-2.
- [2] P. R. Rios, V. T. Oliveira, L. O. Pereira, M. R. Pereira e J. A. Castro, Cellular Automata Simulation of Site-saturated and Constant Nucleation Rate Transformations in Three Dimensions, *Materials Research*, volume 9, n. 2, p. 223-230, 2006. DOI: 10.1590/S1516-14392006000200020.
- [3] C. Wang, G. Liu, On the stability of grain structure with initial Weibull grain size distribution, *Materials Letters*, volume 57, n. 28, p. 4424-4428, 2003. DOI: 10.1016/S0167-577X(03)00335-5.