



CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS



Dissertação de Mestrado

HENRIQUE COSTA BRAGA

**ESTUDO DA RECRISTALIZAÇÃO EM METAIS VIA SIMULAÇÃO
COMPUTACIONAL POR AUTÔMATOS HÍBRIDOS TRIDIMENSIONAIS**

Belo Horizonte – MG

Março de 2025

HENRIQUE COSTA BRAGA

**ESTUDO DA RECRISTALIZAÇÃO EM METAIS VIA SIMULAÇÃO
COMPUTACIONAL POR AUTÔMATOS HÍBRIDOS TRIDIMENSIONAIS**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Materiais do CEFET-MG, na área de concentração de Ciência e Desenvolvimento de Materiais, na Linha de Pesquisa em Seleção, Processamento e Caracterização, como parte integrante dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia de Materiais.

Orientador: Prof. Dr. Sidney Nicodemos da Silva

Braga, Henrique Costa.
B813e Estudo da recristalização em metais via simulação computacional
por autômatos híbridos tridimensionais / Henrique Costa Braga. –
2025.
258 f. : il.
Orientador: Sidney Nicodemos da Silva.

Dissertação (mestrado) – Centro Federal de Educação
Tecnológica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em
Engenharia de Materiais, Belo Horizonte, 2025.
Bibliografia.

1. Recristalização (Metalurgia). 2. Microestrutura. 3. Estereologia.
4. Engenharia de materiais computacional integrada. 5. Autômato
celular. I. Silva, Sidney Nicodemos da. II. Título.

CDD: 620.00113

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca - *campus* Nova Suíça - CEFET-MG
Bibliotecária: Rosiane Maria Oliveira Gonçalves - CRB6-2660



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS
GERAIS
COORDENAÇÃO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA DE MATERIAIS - NS



ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO Nº 3 / 2025 - POSMAT (11.52.07)

Nº do Protocolo: 23062.010048/2025-63

Belo Horizonte-MG, 20 de fevereiro de 2025.

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

ESTUDO DA RECRISTALIZAÇÃO EM METAIS VIA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL POR AUTÔMATOS HÍBRIDOS TRIDIMENSIONAIS

Autor: Henrique Costa Braga

Orientador: Prof. Dr. Sidney Nicodemos da Silva

A Banca Examinadora composta pelos membros abaixo aprovou em 21 de fevereiro de 2025 esta Dissertação:

Prof. Dr. Sidney Nicodemos da Silva (ORIENTADOR)
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais - CEFET-MG

Prof.^a Dr.^a Elaine Carballo Siqueira Corrêa (EXAMINADORA INTERNA)
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais - CEFET-MG

Prof.^a Dr.^a Cleide Barbosa Soares (EXAMINADORA EXTERNA)
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais - CEFET-MG

(Assinado digitalmente em 21/02/2025 11:01)
ELAINE CARBALLO SIQUEIRA CORREIA
PROFESSOR ENS BASICO TECN TECNOLOGICO
DEMAT (11.55.06)
Matrícula: 2506564

(Assinado digitalmente em 21/02/2025 10:58)
SIDNEY NICODEMOS DA SILVA
PROFESSOR ENS BASICO TECN TECNOLOGICO
DF (11.56.10)
Matrícula: 2519987

(Assinado digitalmente em 21/02/2025 12:49)
CLEIDE BARBOSA SOARES
ASSINANTE EXTERNO
CPF: ###.###.166-##

Visualize o documento original em <https://sig.cefetmg.br/public/documentos/index.jsp>
informando seu número: 3, ano: 2025, tipo: ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO, data de
emissão: 20/02/2025 e o código de verificação: 2a9c5794ea

Dedico este trabalho aos meus pais,
Ozório (*in memoriam*) e Imaculada
cujos valores e sacrifícios nunca poderei retribuir à altura,
e aos meus filhos, Caio e Gustavo,
minha maior inspiração e esperança de um futuro melhor.

AGRADECIMENTOS

Antes de tudo quero agradecer a DEUS que me permitiu enfrentar mais este desafio.

Agradeço muitíssimo ao professor Dr. Sidney Nicodemos da Silva pela orientação, amizade, humanidade, paciência e dedicação apresentada.

Agradeço muitíssimo as professoras Dra. Elaine Carballo Siqueira Corrêa e Dra. Cleide Barbosa Soares, pelo aceite de participação nas bancas de qualificação e de defesa dessa dissertação e realização de seus muito valiosos comentários.

Agradeço a professora Dra. Mayra Aparecida Nascimento pelas discussões realizadas no início do desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço a Carolina Fernandes pela sua condução das atividades na secretaria do POSMAT, sempre muito prestativa e dedicada em todos os momentos.

Agradeço aos demais colegas, professores e funcionários do CEFET-MG com os quais tive contato pelo privilégio da amizade, coleguismo e profissionalismo apresentado.

Por fim, agradeço de coração a todos os professores do meu passado que em algum momento da minha formação como pesquisador colaboraram com ela, onde com gratidão destaco o prof. Dr. Ronaldo Antônio Neves Marques Barbosa, prof. Dr. Rubens Correa da Silveira, prof. Dr. Fausto de Camargo Júnior, prof. Dr. Paulo Eduardo Maciel de Almeida e prof. Dr. Gray Farias Moita.

EPÍGRAFE

"Observei tudo isso,
ao concentrar-me em tudo o que é realizado debaixo do sol,
onde há pessoas que dominam outras para sua própria infelicidade."
Rei Salomão
Eclesiastes 8:9 (King James Atualizada)

RESUMO

A modelagem computacional aplicada ao estudo da recristalização em metais tem se desenvolvido por meio de diversas técnicas. Em essência o material a ser simulado é tratado como uma matriz, no qual suas células representam unidades da microestrutura que estão relacionadas aos arranjos de seus componentes internos. Atualmente a simulação com algoritmos computacionais canônicos podem ser aplicados a esta matriz metálica, possibilitando entender razoavelmente o fenômeno de crescimento dos novos grãos ou a cinética de formação por sobre uma determinada vizinhança de busca e determinados critérios (e.q. a evolução das células quando inicialmente se destoam do restante da rede matricial serão chamadas de sementes). Uma das técnicas empregadas neste contexto é a de autômatos celulares (AC) tridimensionais. À priori, os AC são modelos computacionais onde o tempo e o espaço são ambos discretizados e a evolução do sistema obedece a regras específicas pré-determinadas e também discretas. A modelagem com AC já se encontra bem evoluída neste contexto, no entanto, faltam na literatura diversas informações básicas sobre o impacto que a escolha da vizinhança selecionada de pesquisa e replicação tem sobre a modelagem cristalográfica dos metais. Neste trabalho se verificou que por meio de AC, em determinadas condições de contorno podem ser gerados grãos em formato de octaédros, cuboctaedros e cúbicos, mas não apenas no desejado formato esférico. Para aprimorar a simulação neste ponto e sanar as limitações da modelagem com AC foi utilizado a modelagem com autômatos híbridos (AH), onde foi possível se obter grãos perfeitamente esféricos, e, quando desejado, também em formatos matricialmente esferoides. Em função do escopo deste trabalho com AH conseguiu-se incorporar diversas das vantagens da modelagem com AC, mas agora associado a uma melhor qualidade dos parâmetros estruturais nos resultados obtidos. Foi desenvolvida, e é apresentada em detalhes, toda a etapa da parametrização metalúrgica, com a obtenção de valores discretos como a evolução do volume e das áreas superficiais dos grãos durante a recristalização. Como conclusão a aplicação computacional por meio de AH tridimensionais, pode-se obter as curvas do caminho microestrutural do processo de recristalização, de modo totalmente discreto, sem o uso de equações fenomenológicas de suporte como, por exemplo, a JMAK.

PALAVRAS-CHAVE: Recristalização, Caminho Microestrutural, Estereologia, Engenharia de Materiais Computacional, Autômato Celular, Autômato Híbrido.

STUDY OF RECRYSTALLIZATION IN METALS VIA COMPUTATIONAL SIMULATION USING THREE-DIMENSIONAL HYBRID AUTOMATA

ABSTRACT

Computational modeling applied to the study of recrystallization in metals has been developed through various techniques. Essentially, the material to be simulated is treated as a matrix, where its cells represent microstructural units related to the arrangement of its internal components. Currently, simulations with canonical computational algorithms can be applied to this metallic matrix, enabling a reasonable understanding of the phenomenon of new grain growth or the kinetics of formation over a defined neighborhood and specific criteria (e.g., the evolution of cells that initially differ from the rest of the matrix network, referred to as seeds). One of the techniques employed in this context is three-dimensional cellular automata (CA). At its core, CA are computational models where both time and space are discretized, and the system's evolution follows specific predetermined and discrete rules. Although CA modeling is well-developed in this context, there is a lack of fundamental information in the literature regarding the impact of the selected search and replication neighborhood on the crystallographic modeling of metals. In this work, it was found that through CA, under certain boundary conditions, grains in octahedral, cuboctahedral, and cubic shapes can be generated, but not exclusively in the desired spherical shape. To improve the simulation in this aspect and address the limitations of CA modeling, hybrid automata (HA) modeling was used. This approach enabled the generation of perfectly spherical grains and, when desired, matrix-defined spheroidal shapes. The scope of this work with HA incorporated many advantages of CA modeling, but with improved structural parameter quality in the obtained results. The metallurgical parameterization process is detailed, including the discrete evaluation of parameters such as volume evolution and grain surface areas during recrystallization. In conclusion, the application of three-dimensional HA computational modeling enabled the derivation of microstructural evolution curves for the recrystallization process in a fully discrete manner, without the use of phenomenological support equations such as JMAK.

KEYWORDS: Recrystallization, Microstructural Pathway, Stereology, Computational Materials Engineering, Cellular Automaton, Hybrid Automaton.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	33
1.1	Apresentação do tema.....	33
1.2	Justificativa e relevância	35
1.3	Organização do trabalho.....	36
2	OBJETIVOS	38
2.1	Objetivo geral.....	38
2.2	Objetivos específicos	38
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	40
3.1	Simulação computacional em Engenharia de Materiais.....	41
3.2	Técnicas computacionais de modelagem.....	44
3.3	Autômatos celulares	48
3.4	Vizinhanças de busca clássicas no plano	53
3.5	Fundamentos históricos da metalografia.....	61
3.6	A recristalização.....	65
3.7	Crescimento dos grãos na recristalização – modelo JMAK.....	66
3.8	Caminho microestrutural	69
3.9	Aspectos cinéticos da recristalização por modelagem 3D com AC.....	71
3.10	Fundamentos de estereologia quantitativa	74
3.11	Tesselação microestrutural do espaço 3D.....	77
4	METODOLOGIA.....	83
5	SIMULAÇÃO POR AUTÔMATOS CELULARES TRIDIMENSIONAIS	91
5.1	Vizinhanças canônicas tridimensionais	91
5.2	Algoritmo gerador	95
5.3	Simulações de evolução das vizinhanças fundamentais.....	97
5.4	Combinações de vizinhanças.....	99

5.5	Influência de barreiras internas	105
5.6	Influência da vizinhança de busca sobre o desempenho do algoritmo gerador	108
5.7	Efeito do número de sementes sobre a performance do algoritmo	117
5.8	Sementes geminadas.....	119
5.9	O formato dos grãos formados.....	121
6	SIMULAÇÃO POR AUTÔMATOS HÍBRIDOS	131
6.1	Algoritmo gerador	132
6.2	Geração dos grãos com formato esférico.....	135
6.3	Geração de padrões regulares de microestrutura	144
6.4	Verificação do desempenho do algoritmo gerador e do <i>passo</i>	147
7	PARAMETRIZAÇÃO DIMENSIONAL – MORFOLOGIA.....	156
7.1	Fundamentos	156
7.2	Parametrização	158
7.3	Efeitos das fronteiras.....	160
7.4	Resultados e discussão	163
8	MODELAGEM DE GRÃOS ESFEROIDES COM AH	175
8.1	O esferoide	175
8.2	O AH adaptado ao esferoide.....	178
8.3	A microestrutura formada por grãos esferoides	184
8.4	Rotacionando os esferoides	190
8.5	Heterogeneidade anisotrópica	194
9	PARAMETRIZAÇÃO DA ÁREA SUPERFICIAL DISCRETA	201
9.1	Conceitualização.....	201
9.2	A área superficial pelas faces restrita.....	205
9.3	Parametrização da esfera e do esferoide	206
9.4	Resultados e discussões.....	215
10	MODELAGEM DO CAMINHO MICROESTRUTURAL DISCRETO.....	218
10.1	A fração volumétrica transformada	219
10.2	O caminho microestrutural	223
10.3	Aplicação prática	231

11	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	237
11.1	Cumprimento dos Objetivos Específicos.....	237
11.2	Contribuições e destaques	238
11.3	Sugestões para trabalhos futuros.....	243
	REFERÊNCIAS.....	245
	APÊNDICE – Artigos.....	256
	ANEXO I – Modelo planificado para a construção do cuboctaedro.	257
	ANEXO II – Modelo planificado para a construção do ortotetracaidecaédro.....	258

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 3.1. Talos, o autômato gigante protetor da ilha de Creta.	48
Figura 3.2. Evolução do AC elementar de Wolfram (regra 30).	51
Figura 3.3. Representação das primeiras vizinhanças de Von Neumann e de Moore a partir de uma célula de origem em uma matriz bidimensional.	55
Figura 3.4. Representação no plano das células das primeiras e segundas vizinhanças de Von Neumann e de Moore.	57
Figura 3.5. Visualizações da diferença entre a distância Euclidiana de uma célula da diagonal com uma célula alinhada aos eixos para as primeiras vizinhanças.	59
Figura 3.6. Representações da evolução das pesquisas por VVN e VM (matriz 2D em ambiente quadrado com a busca iniciando no centro do lado inferior).	60
Figura 3.7. Peça filatélica com selo postal, carimbo comemorativo e <i>cachet</i> emitida em 1971 em homenagem ao então 100 anos do início das pesquisas metalográficas na Alemanha.	63
Figura 3.8. Imagens metalográficas diversas.	63
Figura 3.9. Imagem da superfície a nível atômico de material que apresenta supercondutividade a baixa temperatura, obtida por microscopia de tunelamento.	64
Figura 3.10. Gráfico ilustrativo da evolução do caminho microestrutural, ou SV_{RN} (quantidade de área superficial nas interfaces entre regiões recristalizadas e não recristalizadas por unidade de volume) versus X_r (fração volumétrica transformada real).	71
Figura 3.11. Gráfico ilustrativo tipo Avrami da proposta de evolução sigmoide de X_r ao longo do tempo discreto (τ), entre o início da simulação ($\tau = 0$) e seu fim.	74
Figura 3.12. Representação esquemática de estruturas tipo OTC e ATC.	78
Figura 3.13. Representação esquemática de redes de repetição, em (a) com o OTC (rede de Kelvin), e em (b) com a estrutura WP.	81
Figura 3.14. Representação esquematizada de uma microestrutura monofásica policristalina equiaxial típica.	82

Figura 4.1. Ilustração do processo de busca, exploração e replicagem adotado.	86
Figura 4.2. Estrutura básica do programa SimCres.	87
Figura 4.3. Padrões das orientações cartesianas visuais utilizados neste trabalho para a matriz das microestruturas 3D.	89
Figura 4.4. Padrões das orientações cartesianas visuais utilizados neste trabalho para os planos formadores XY, YZ e XZ.	90
Figura 5.1. Representação da matriz 3x3x3 de primeiras vizinhanças da célula central (a semente considerada) com a identificação das coordenadas.	93
Figura 5.2. Representações da matriz 3x3x3 com destaque das células visíveis de VF, VA e VV respectivamente.	94
Figura 5.3. Imagens do ambiente de 21x21x21 células em seu momento inicial com uma semente (em azul) no seu centro.	97
Figura 5.4. Imagens de diversos momentos de simulações do ambiente da Figura 5.3.	98
Figura 5.5. Imagens de diversos momentos de simulações do ambiente da Figura 5.3 (21x21x21 células com uma semente central).	101
Figura 5.6. Imagens de diferentes seções do plano xy em simulações em ambiente de 21x21x21 células a partir de uma única semente no seu centro.	103
Figura 5.7. Representações esquemáticas do anti-prisma (a) e (b), e do respectivo cuboctaedro (c) e (d).	104
Figura 5.8. Imagem final de simulações pela VF (a esquerda), VA (no centro) e VV (a direita), em ambiente com 21x21x21 células a partir de uma célula central, possuindo uma barreira fixa interna.	106
Figura 5.9. Imagem final de simulações pela VF (a esquerda), VA (no centro) e VV (a direita) em ambiente similar ao da Figura 5.7, mas possuindo uma barreira fixa interna diferenciada em (a) e outra distinta em (b).	107
Figura 5.10. Simulações do ambiente com 201x201x201 células sobre a VF (Nº células pesquisadas por laço, derivada numérica de primeira ordem do nº células pesquisadas pelo nº laço, e o nº acumulado de células pesquisadas e transformadas).	111
Figura 5.11. Simulações do ambiente com 201x201x201 células sobre a VF/VA (nº células pesquisadas por laço, derivada numérica de primeira ordem do nº células pesquisadas pelo nº laço, e o nº acumulado de células pesquisadas e transformadas).	112
Figura 5.12. Simulações do ambiente com 201x201x201 células sobre a VP (nº células pesquisadas por laço, derivada numérica de primeira ordem do nº células pesquisadas pelo nº laço, e o nº acumulado de células pesquisadas e transformadas).	113

Figura 5.13. Para a pesquisa sobre VF, em (a) se tem qualquer um dos 3 planos centrais no laço nº 100, ou de qualquer uma das faces no laço nº 200, e em (b) qualquer um dos 3 planos centrais no laço nº 200.	116
Figura 5.14. Em pesquisa pela VF em ambiente de 100x100x100 células, graficos do número de células cuja vizinhança é pesquisada (a esquerda) e o número acumulado de células pesquisadas e transformadas (a direita) em função do número do laço.	118
Figura 5.15. Representações em 3D do resultado final das simulações (ambientes de 21x21x21 células). Em (a) a partir de uma semente geminada dupla e busca pela VA, e em (b) a partir de uma semente geminada quadrupla e busca pela VV.	120
Figura 5.16. Representações 3D de momentos de simulação pela busca sobre VF em ambiente com 120x120x120 células e 27 sementes. Em (a), o posicionamento inicial das sementes, em (b) após o 5º laço, em (c) após ter atingido 10% de transformação, e em (d) no momento final.	123
Figura 5.17. Representações 3D de momentos de simulação no ambiente da Figura 5.15. Pela VF/VA em (a) após o 5º laço, e em (b) após ter atingido 10% de transformação. Pela VP em (c) após o 5º laço, e em (d) após ter atingido 10% de transformação.	124
Figura 5.18. Representações 3D do momento final da simulação em ambiente 120x120x120 células com 27 sementes aleatórias e distintas entre as simulações no seu interior. Em (a) foi realizada a busca pela VF, em (b) pela VF/VA, e em (c) pela VP.	126
Figura 5.19. Representações do momento final da simulação em ambiente 120x120x120 células com 27 sementes seu interior. Em (a) foi realizada a busca pela VF, em (b) pela VF/VA, e em (c) pela VP, com a distribuição das sementes aleatória mas idêntica entre as simulações.	128
Figura 5.20. Representações do momento final da simulação em ambiente de 120x120x120 células com 1000 sementes iniciais distribuídas de modo aleatório e diferenciado entre as simulações. Em (a) foi realizada a busca pela VF, em (b) pela VF/VA, e em (c) pela VP.	129
Figura 6.1. Imagens de momentos de simulações com inicialmente uma única semente em seu centro. Semente e células transformadas na cor azul.	136
Figura 6.2. Simulação em ambiente com 200x200x200 células e 10 sementes distribuídas aleatoriamente, em distintos momentos da simulação. Cada grão representado com uma cor distinta.	137
Figura 6.3. Imagens do plano XZ com y=100 para diferentes momentos da simulação da Figura 6.2 (10 sementes). Em (a), (b), (c) e (d) imagens para respectivamente 10%, 30%, 50% e 70% de células transformadas em todo o ambiente.	138

Figura 6.4. Simulação em ambiente com 200x200x200 células e 100 sementes distribuídas aleatoriamente, em distintos momentos da simulação. Cada grão representado com uma cor distinta.	139
Figura 6.5. Imagens do plano XZ com y=100 para diferentes momentos da simulação da Figura 6.4 (100 sementes). Em (a), (b), (c) e (d) imagens para respectivamente 10%, 30%, 50% e 70% de células transformadas em todo o ambiente.	140
Figura 6.6. Simulação em ambiente com 200x200x200 células e 1000 sementes distribuídas aleatoriamente, em distintos momentos da simulação. Cada grão representado com uma cor distinta.	141
Figura 6.7. Imagens do plano XZ com y=100 para diferentes momentos da simulação da Figura 6.6 (1000 sementes). Em (a), (b), (c) e (d) imagens para respectivamente 10%, 30%, 50% e 70% de células transformadas em todo o ambiente.	142
Figura 6.8. Imagens dos planos centrais do ambiente 200x200x200 ao final das simulações das Figuras 6.2, 6.4 e 6.6 (respectivamente 10, 100 e 1000 sementes).	143
Figura 6.9. Simulações em ambientes com 160x160x160 células com sementes distribuídas conforme perfis específicos. Em (a) com 64 sementes formando cubos, e em (b) com 16 sementes formando paralelepípedos compridos.	145
Figura 6.10. Simulação em ambiente com 152x152x102 células com 59 sementes distribuídas conforme perfil específico tipo CFC, resultado em uma microestrutura de OTC's.	146
Figura 6.11. Imagem da esfera matricial, ou esferoidal, gerado para a simulação do ambiente com 201x201x201 células, uma única semente central, para vários valores de <i>passo</i> , nos instantes com 33% de transformação do ambiente.	148
Figura 6.12. Gráfico com a quantidade de células pesquisadas por laço obtido para a simulação do ambiente com 201x201x201 células, uma única semente central, para vários valores de <i>passo</i> .	149
Figura 6.13. Gráfico com a diferença entre o nº células pesquisada a cada laço por laço obtido para a simulação do ambiente com 201x201x201 células, 1 única semente central, instante com 33% de formação, para vários valores de <i>passo</i> (derivada 1ª dos gráficos da Figura 6.12).	150
Figura 6.14. Gráfico com o nº acumulado de células pesquisadas e transformadas, por laço, obtido para a simulação do ambiente com 201x201x201 células, uma única semente central, instante com 33% de formação, para vários valores de <i>passo</i> .	151
Figura 6.15. Evolução do Nº Células Pesquisadas pelo Nº Células Transformadas em função do <i>passo</i> (ambiente 201x201x201 células, dados retirados da Tabela 6.1, AH evoluindo pela VF).	154

Figura 6.16. Diagrama de Euler da relação proposta entre os AH e AC do tipo e nas condições verificadas neste trabalho.	155
Figura 7.1: Simulação em ambiente com 200x200x200 células e 1000 grãos iniciais aleatoriamente distribuídos (1ª simulação).	165
Figura 7.2. Simulação em ambiente com 200x200x200 células e 1000 grãos iniciais aleatoriamente distribuídos (2ª simulação).	166
Figura 7.3. Simulação em ambiente com 200x200x200 células e 1000 grãos iniciais aleatoriamente distribuídos (3ª simulação).	167
Figura 7.4. Histogramas obtidos das simulações das Figuras 7.1, 7.2 e 7.3 (1ª, 2ª e 3ª simulação respectivamente), para a distribuição dos valores do diâmetro dos grãos (DG).	169
Figura 7.5. Histogramas obtidos da simulação das Figuras 7.1, 7.2 e 7.3 (1ª, 2ª e 3ª simulação respectivamente), para o volume dos grãos (VG).	170
Figura 7.6. Histogramas obtidos da simulação das Figuras 7.1, 7.2 e 7.3 (1ª, 2ª e 3ª simulação respectivamente), para o volume normalizado (VN).	171
Figura 7.7. Histogramas obtidos da simulação das Figuras 7.1, 7.2 e 7.3 (1ª, 2ª e 3ª simulação respectivamente), para a área superficial equivalente (SG).	172
Figura 8.1. Imagens ilustrativas do esferoide prolato (a esquerda) e do esferoide oblato (a direita).	175
Figura 8.2. Representação dos valores sobre as coordenadas x , y e z dos ângulos azimutal (Φ) e polar (θ).	177
Figura 8.3. Imagens a 3% de transformação de simulações de esferoides prolatos a partir de uma única semente no centro de um ambiente de 21x21x21 células. Semente e células transformadas na cor azul.	180
Figura 8.4. Imagens a 3% de transformação de simulações de esferoides oblatos a partir de uma única semente no centro de um ambiente de 21x21x21 células. Semente e células transformadas na cor azul.	181
Figura 8.5. Imagens a 3% de transformação de simulações de esferoides prolatos a partir de uma única semente no centro de um ambiente de 201x201x201 células. Semente e células transformadas na cor azul.	182
Figura 8.6. Imagens a 3% de transformação de simulações de esferoides oblatos a partir de uma única semente no centro de um ambiente de 201x201x201 células. Semente e células transformadas na cor azul.	183
Figura 8.7. Imagem 3D das microestruturas geradas por grãos esferoides, com 100 sementes iniciais aleatórias em ambiente com 200x200x200 células.	185
Figura 8.8. Imagem dos planos centrais das microestruturas geradas por grãos esferoides dos experimentos da Figura 8.6 (100 sementes iniciais aleatórias em ambiente com 200x200x200 células).	186

Figura 8.9. Imagens 3D e dos planos centrais das microestruturas geradas por grãos esferoides prolatos ($K_a = 4$), com 1000 sementes iniciais aleatórias em ambiente com 200x200x200 células.	187
Figura 8.10. Imagens 3D e dos planos centrais das microestruturas geradas pelo experimento da Figura 8.8 (grãos esferoides prolatos ($K_a = 4$), com 1000 sementes iniciais aleatórias em ambiente com 200x200x200 células), com a eliminação dos grãos que tocam a superfície (482 grãos restantes e 518 grãos eliminados).	188
Figura 8.11. Histogramas de distribuição para o volume dos grãos e volume normalizado dos grãos para a simulação da Figura 8.9 (482 grãos restantes).	189
Figura 8.12. Imagens 3D e dos planos centrais de grãos esferoides gerados em simulações em ambiente com 201x201x201 células com 1 única semente central com 2% de transformação.	192
Figura 8.13. Ambiente com 100 sementes aleatoriamente distribuídas, todas com grãos esferoides prolatos ($K_a = 4$), ângulo azimutal (Φ) de $7\pi/12$ rad, e ângulo polar (θ) de $\pi/4$ rad.	193
Figura 8.14. Simulação em ambiente com 200x200x200 células e 1000 sementes iniciais aleatoriamente distribuídas, com grãos com formato esferoide ($K_a = 4$), sendo que na metade superior da matriz possuindo a orientação base ($\Phi = 0$ e $\theta = 0$), e na metade inferior com uma orientação direcionada ($\Phi = 7\pi/12$ rad e $\theta = \pi/4$ rad).	196
Figura 8.15. Imagens dos planos centrais da simulação da Figura 8.14.	197
Figura 8.16. Imagens 3D e dos planos centrais das microestruturas geradas pelo experimento da Figura 8.14, com a eliminação dos grãos que tocam a superfície (414 grãos restantes e 586 grãos eliminados).	198
Figura 8.17. Histogramas de distribuição para o volume dos grãos e volume normalizado dos grãos (VG e VN) para a simulação da Figura 8.16 (414 grãos restantes).	199
Figura 9.1. Em (a) um objeto base retangular em uma matriz bidimensional, contendo 12 células de área e tendo um perímetro real de 16 faces, e em (b) e (c) duas de suas representações em orientações diferentes da orientação base.	203
Figura 9.2. Evolução do nº células matriciais em cada uma das direções dos eixos cartesianos de cada grão (NC_e) versus o tempo discreto (τ).	207
Figura 9.3. Evolução do PC_h (r , c ou a) em função do tempo discreto (τ) em um período considerado que seja anterior ao <i>impingement</i> .	209
Figura 9.4. Evolução na esfera do volume discreto e analítico (acima) e da área superficial pelas faces discreta e analítica (abaixo) em função do diâmetro discreto.	210

Figura 9.5. Evolução para o esferoide prolato ($K_a = 2$) na orientação base ($\Phi = 0$ e $\theta = 0$), do volume discreto e analítico (acima) e da área superficial pelas faces e analítica (abaixo), em função do parâmetro c discreto.	211
Figura 9.6. Evolução para o esferoide oblato ($K_a = 1/4$) na orientação base ($\Phi = 0$ e $\theta = 0$), do volume discreto e analítico (acima) e da área superficial pelas faces e analítica (abaixo), em função do parâmetro a discreto.	212
Figura 9.7. Evolução para o esferoide prolato ($K_a = 2$) na orientação $\Phi = \pi/4$ rad e $\theta = \pi/4$ rad, do volume discreto e analítico (acima) e da área superficial pelas faces e analítica (abaixo), em função do parâmetro c discreto.	213
Figura 9.8. Histogramas obtidos da simulação das Figuras 7.1, 7.2 e 7.3 (respectivamente 1ª, 2ª e 3ª simulações da Tabela 9.1), para a distribuição dos valores da área superficial pelas faces dos grãos (SF_n).	216
Figura 9.9. Histograma obtidos da simulação da Figura 8.9 (4ª simulação da Tabela 9.1), para a distribuição dos valores da área superficial pelas faces dos grãos (SF_n).	217
Figura 10.1. Evolução de N_{CT} em função do tempo discreto (τ), destacando o período anterior ao <i>impingement</i> com os próprios limites da matriz (acima), e para toda a simulação (abaixo), em ambiente com 201x201x201 células e uma única semente central em seu centro.	220
Figura 10.2. Evolução de X_r em função do tempo discreto (τ) em um ambiente de 200x200x200 células e 1000 sementes iniciais aleatoriamente distribuída. Acima para uma modelagem com AC com pesquisa de vizinhança pelas faces (grãos octaédricos), e abaixo com AH com grãos esféricos.	221
Figura 10.3. Evolução de X_r em função do tempo discreto (τ) em um ambiente de 200x200x200 células, 1000 sementes iniciais aleatoriamente distribuídas, e grãos em formato de esferoides prolatos ($K_a = 4$). Acima na orientação base ($\Phi = 0$ e $\theta = 0$), e abaixo para $Z \geq 100$ na orientação base e $Z < 100$ com $\Phi = 7\pi/12$ rad e $\theta = \pi/4$ rad.	222
Figura 10.4. Evolução da área superficial entre as regiões recristalizadas e não recristalizadas (SV_{RN}) em função do tempo discreto (τ).	226
Figura 10.5. Curva do caminho microestrutural para grãos de crescimento octaédrico (AC, 1000 sementes aleatórias, ambiente 200x200x200 células).	227
Figura 10.6. Curva do caminho microestrutural para grãos de crescimento esférico (1000 sementes aleatórias, ambiente 200x200x200 células).	228
Figura 10.7. Curva do caminho microestrutural para grãos de crescimento esferoide ($K_a = 4$, $\Phi = 0$ e $\theta = 0$), 1000 sementes aleatórias, ambiente 200x200x200 células.	229

Figura 10.8. Curva do caminho microestrutural para grãos de crescimento esferoide ($K_a = 4$, com $\Phi = 0$ e $\theta = 0$ para $Z \geq 100$ e $\Phi = 7\pi/12$ rad e $\theta = \pi/4$ rad para $Z < 100$, 1000 sementes aleatórias, ambiente 200x200x200 células).	230
Figura 10.9. Imagens das simulações obtidas por SAR e neste trabalho em ambiente de 300x300x300 células com 220 grãos aleatoriamente distribuídos.	233
Figura 10.10. Imagem real e das simulações com AH de crescimento esférico, todas com $\approx 5\%$ de transformação volumétrica e densidade média de 2400 grãos/mm ³ .	234
Figura 10.11. Curvas do caminho microestrutural obtidas por V&R, SAR e neste trabalho, onde no interior se apresenta o gráfico original do estudo de SAR.	235

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 3.1. Valores do quociente isoperimétrico (QI) para a esfera e alguns objetos clássicos de tesselação do espaço 3D.	80
Tabela 5.1. Distâncias Euclidiana e Manhattan entre as células da primeira vizinhança e a célula de origem em função da resolução de uma célula matricial (δ).	93
Tabela 5.2. Simulações completas em ambiente com $21 \times 21 \times 21$ células regulares, sem obstruções internas, iniciando com uma única célula de origem no seu centro.	109
Tabela 5.3. Simulações completas em ambiente com $201 \times 201 \times 201$ células regulares, sem obstruções internas, iniciando com uma única célula de origem no seu centro.	110
Tabela 5.4. Simulações completas em ambientes com $21 \times 21 \times 21$ células e com $201 \times 201 \times 201$ células, sem obstruções internas, iniciando com uma célula geminada dupla (VA) ou quadrupla (VV), localizada no seu centro.	120
Tabela 6.1. Simulações completas em ambientes com $21 \times 21 \times 21$ células e com $201 \times 201 \times 201$ células, iniciando com uma única célula localizada no seu centro, para diversos valores de passo.	147
Tabela 7.1. Dados gerais do ambiente e material obtidos previamente a simulação.	164
Tabela 7.2. Valores médios e selecionados das três simulações (Figuras 7.1 a 7.3), para o diâmetro equivalente dos grãos (DG), para o volume dos grãos (VG), para o volume dos grãos normalizado (VN), e para a área superficial equivalente dos grãos (SG).	168
Tabela 8.1. Simulações completas em ambientes com $21 \times 21 \times 21$ células e com $201 \times 201 \times 201$ células, iniciando com uma única célula localizada no seu centro, para diversos valores de K_a .	184
Tabela 8.2. Valores médios e selecionados encontrados para o volume dos grãos (VG) e para o volume dos grãos normalizado (VN).	190
Tabela 8.3. Valores médios e selecionados encontrados para o volume dos grãos (VG) e para o volume dos grãos normalizado (VN).	200
Tabela 9.1. Valores médios e selecionados para a área superficial pelas faces dos grãos (SF_n) de três simulações de crescimento esférico e um esferoide.	215

ÍNDICE DE QUADROS

Quadro 5.1. Listagem do pseudocódigo do núcleo da rotina inicial de busca, exploração e replicação do algoritmo gerador implementado na modelagem por AC.	96
Quadro 6.1. Listagem do pseudocódigo do núcleo da rotina de busca, exploração e replicação do algoritmo gerador implementado pelo método AH.	133
Quadro 7.1. Nomeclatura e notação empregada na parametrização dos aspectos metalográficos morfológicos matriciais 3D relacionados ao volume dos grãos.	
Quadro 7.2. Nomeclatura e notação para aspectos complementares empregados.	157
Quadro 7.3. Nomeclatura e notação para os aspectos empregados na computação matricial dos cálculos.	158
Quadro 7.4. Nomeclatura e notação para os conjuntos complementares empregados na eliminação dos grãos gerados na 1ª vizinhança do ambiente.	158
Quadro 9.1. Nomenclatura parâmetros adicionais empregados.	204

ÍNDICE DE EQUAÇÕES

Equação (3.1)	$V_e = \left(\frac{4\pi R_{ex}^3}{3} \right)$	67
Equação (3.2)	$V_{et} = V_e \times N_s$	67
Equação (3.3)	$G_0 = \frac{dR_e}{dt}$	67
Equação (3.4)	$V_{et} = \frac{4\pi N_s G_0^3 t^3}{3}$	68
Equação (3.5)	$X_r = 1 - \exp(-k_i V_{et}^{k_j})$	68
Equação (3.6)	$X_r = 1 - \exp \left[-k_i \left(\frac{4\pi N_s G_0^3 t^3}{3} \right)^{k_j} \right]$	68
Equação (3.7)	$X_r = 1 - \exp(-kt^m)$ (equação JMAK)	68
Equação (3.8)	$SV_{RR} = \frac{SV_{RN}}{1 - X_r}$	69
Equação (3.9)	$S_e = 4 \pi R_e^2$	69
Equação (3.10)	$SV_{RR} = 4 \pi R_e^2 N_s$	70
Equação (3.11)	$SV_{RN} = (1 - X_r)(4 \pi R_e^2 N_s)$	70
Equação (3.12)	$SV_{RN} = 3 \left(\frac{4 \pi N_s}{3} \right)^{\frac{1}{3}} (1 - X_r) \left[\ln \left(\frac{1}{1 - X_r} \right) \right]^{\frac{2}{3}}$	70
Equação (3.13)	$v_e(\tau) = \begin{cases} 0, & \text{para } \tau = 0 \\ \frac{4}{3}\tau^3 - 2\tau^2 + \frac{8}{3}\tau - 1, & \text{para } \tau > 0 \end{cases}$	72
Equação (3.14)	$v_e(\tau) \cong \frac{4}{3}\tau^3$	72
Equação (3.15)	$v_{et}(\tau) = N_s \frac{4}{3}\tau^3$	72
Equação (3.16)	$N_v = N_s/v_m$	72

Equação (3.17)	$\frac{v_{et}(\tau)}{v_m} = N_v \frac{4}{3} \tau^3 \Rightarrow X_{vex} = N_v \frac{4}{3} \tau^3$	73
Equação (3.18)	$X_r = 1 - \exp(X_{vex})$	73
Equação (3.19)	$X_r = 1 - \exp\left(-N_v \frac{4}{3} \tau^3\right)$	73
Equação (3.20)	$Pl = Nl$	75
Equação (3.21)	$d = \frac{1}{Pl}$	75
Equação (3.22)	$Sv = 2 Pl$	75
Equação (3.23)	$Sv = \frac{2}{d}$	76
Equação (3.24)	$Sv' = \frac{\text{Área Superficial}}{\text{Volume Esfera}} = \frac{\pi D^2}{(\pi D^3)/6} = \frac{6}{D}$	76
Equação (3.25)	$Sv' = 3 Sv$	76
Equação (3.26)	$G = 10 - 6,6439 \log_{10}(d)$	77
Equação (3.27)	$QI = 36 \pi \frac{\text{Volume}^2}{\text{Área Superficial}^3}$	80
Equação (5.1)	$V_{FA}^{18} = V_F^6 + V_A^{12}$	99
Equação (5.2)	$V_{FV}^{14} = V_F^6 + V_V^8$	100
Equação (5.3)	$V_{AV}^{20} = V_A^{12} + V_V^8$	100
Equação (5.4)	$V_P^{26} = V_F^6 + V_A^{12} + V_V^8$	100
Equação (5.5)	$f + v = a + 2$ (teorema de Euler)	102
Equação (7.1)	$C_t = C_x \times C_y \times C_z$	159
Equação (7.2)	$V_M = C_t \times \mathbf{r}^3$	159
Equação (7.3)	$VG = \frac{V_M}{N_s}$	159
Equação (7.4)	$DV = \frac{N_s}{V_M}$	159
Equação (7.5)	$DG = 2 \times \left(\frac{3 \times V_G}{4 \times \pi}\right)^{\frac{1}{3}}$	159
Equação (7.6)	$SG = \pi \times DG^2$	159

Equação (7.7)	$N_{ASTMe} = -10.0 - 6,64 \log(DG/10^4)$	159
Equação (7.8)	$C_n = \sum_{i=1}^{C_x} \sum_{j=1}^{C_y} \sum_{k=1}^{C_z} (\delta_{n, MA_{i,j,k}})$	159
Equação (7.9)	$VG_n = C_n \times \mathbf{r}^3$	159
Equação (7.10)	$DG_n = 2 \times \left(\frac{3 \times VG_n}{4 \times \pi} \right)^{\frac{1}{3}}$	159
Equação (7.11)	$VN_n = \frac{VG_n}{VG}$	160
Equação (7.12)	$SG_n = \pi \times DG_n^2$	160
Equação (7.13)	$M_v = \{M_{i,j,k} i \in [1, C_x]\} + \{M_{i,j,k} j \in [1, C_y]\} + \{M_{i,j,k} k \in [1, C_z]\}$	161
Equação (7.14)	$CS_v = \{x x \in M_v\}$	161
Equação (7.15)	$CS_i = \{1, 2, \dots, N_s\}$	161
Equação (7.16)	$CS_f = CS_i - CS_v$	140
Equação (7.17)	$M' = \begin{cases} 0, se M_{i,j,k} \notin CS_f \\ M_{i,j,k}, caso contrario \end{cases}$	162
Equação (7.18)	$N'_s = CS_f $	162
Equação (8.1)	$x = a \sin \theta \cos \phi$	176
Equação (8.2)	$y = a \sin \theta \sin \phi$	176
Equação (8.3)	$z = c \cos \theta$	176
Equação (8.4)	$K_a = c/a$	177
Equação (8.5)	$\frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1$	177
Equação (8.6)	$V_{Esferoide} = \frac{4}{3} \pi a^2 c$	178
Equação (8.7)	$S_{Ep} = 2\pi a^2 \left[1 + \frac{c}{a e_p} \arcsin(e_p) \right]$	178
Equação (8.8)	$e_p = \sqrt{1 - \frac{a^2}{c^2}}$	178

$$\text{Equação (8.9)} \quad S_{Eo} = 2\pi a^2 \left(1 + \frac{1 - e_o^2}{2 e_o} \tanh^{-1}(e_o) \right) \quad 178$$

$$\text{Equação (8.10)} \quad e_o = \sqrt{1 - \frac{c^2}{a^2}} \quad 178$$

$$\text{Equação (8.11)} \quad c = \sqrt{k_a^2 (x^2 + y^2) + z^2} \quad 179$$

$$\text{Equação (8.12)} \quad a = \sqrt{x^2 + y^2 + k_a^2 z^2} \quad 179$$

$$\text{Equação (8.13)} \quad x' = x \sin \theta \cos \phi + y \sin \theta \sin \phi + z \cos \theta \quad 190$$

$$\text{Equação (8.14)} \quad y' = x \cos \theta \cos \phi + y \cos \theta \sin \phi - z \sin \theta \quad 190$$

$$\text{Equação (8.15)} \quad z' = x \sin \phi - y \cos \phi \quad 190$$

$$\text{Equação (8.16)} \quad c = \sqrt{A^2 + k_a^2 (B^2 + C^2)} \quad 191$$

$$\text{Equação (8.17)} \quad a = \sqrt{A^2 + B^2 + k_a^2 C^2} \quad 191$$

$$\text{Equação (8.18)} \quad A = x \cos \phi \sin \theta + y \sin \phi \sin \theta + z \cos \theta \quad 191$$

$$\text{Equação (8.19)} \quad B = x \cos \phi \cos \theta + y \sin \phi \cos \theta - z \sin \theta \quad 191$$

$$\text{Equação (8.20)} \quad C = x \sin \phi - y \cos \phi \quad 191$$

$$\text{Equação (9.1)} \quad N_F^6 = \{(i+1, j, k), (i-1, j, k), (i, j+1, k), (i, j-1, k), (i, j, k+1), (i, j, k-1)\} \quad 205$$

$$\begin{aligned} \text{Equação (9.2)} \quad C_{ni} = & \sum_{i=1}^{C_x} \sum_{j=1}^{C_y} \sum_{k=1}^{C_z} \left[\left(\delta_{n, MA_{i,j,k}} \right) \times \left(\delta_{n, MA_{i+1,j,k}} \right) \times \left(\delta_{n, MA_{i,j+1,k}} \right) \right. \\ & \times \left(\delta_{n, MA_{i,j,k+1}} \right) \times \left(\delta_{n, MA_{i+1,j+1,k}} \right) \\ & \left. \times \left(\delta_{n, MA_{i+1,j,k+1}} \right) \times \left(\delta_{n, MA_{i,j+1,k+1}} \right) \right] \quad 205 \end{aligned}$$

$$\text{Equação (9.3)} \quad C_{ns} = C_n - C_{ni} \quad 206$$

$$\text{Equação (9.4)} \quad SFR_n = C_{ns} \times \mathbf{r}^2 \quad 206$$

$$\text{Equação (9.5)} \quad C_s = \frac{\sum_1^{N_s} C_{ns}}{N_s} \quad 206$$

$$\text{Equação (9.6)} \quad SFR = C_s \times \mathbf{r}^2 \quad 206$$

$$\text{Equação (9.7)} \quad SVR = \frac{\sum_1^{N_s} C_{ns}}{2 V_m} \quad 206$$

Equação (9.8)	$PC_h = \text{passo acumulado em } r, c \text{ ou } a$ $= \begin{cases} 0, & \text{para } \tau = 0 \\ (\tau - 1)/20, & \text{para } \tau > 0 \end{cases}$	208
Equação (9.9)	$SF_n = ks \times SFR_n$	214
Equação (9.10)	$SF = ks \times SFR$	214
Equação (9.11)	$SV = ks \times SVR$	214
Equação (10.1)	$X_r = \frac{N_{CT}}{C_n}$	218
Equação (10.2)	$SV_{RN} = 3 \left(\frac{4 \pi N_s}{3} \right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - \left(\frac{N_{CT}}{C_n} \mathbf{r}^3 \right) \right] \left[\ln \left(\frac{C_n}{C_n - (N_{CT} \mathbf{r}^3)} \right) \right]^{\frac{2}{3}}$	218
Equação (10.3)	$C_{RN} _{(\tau)} = \sum_{i=1}^{c_x} \sum_{j=1}^{c_y} \sum_{k=1}^{c_z} \left\{ \delta_{CS}(MA_{i,j,k}) \right.$ $\wedge \left[\left(\delta_{MA_{NN}, MA_{i+1,j,k}} \right) \vee \left(\delta_{MA_{NN}, MA_{i,j+1,k}} \right) \right.$ $\vee \left(\delta_{MA_{NN}, MA_{i,j,k+1}} \right) \vee \left(\delta_{MA_{NN}, MA_{i+1,j+1,k}} \right)$ $\left. \left. \vee \left(\delta_{MA_{NN}, MA_{i+1,j,k+1}} \right) \vee \left(\delta_{MA_{NN}, MA_{i,j+1,k+1}} \right) \right] \right\} _{(\tau)}$	223
Equação (10.4)	$SF_{RN} _{(\tau)} = ks \times \mathbf{r}^2 \times C_{RN} _{(\tau)}$	223
Equação (10.5)	$SV_{RN} _{(\tau)} = \frac{SF_{RN} _{(\tau)}}{V_m}$	223

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

AC	- Autômato Celular
AH	- Autômato Híbrido
ASTM	- <i>American Society for Testing and Materials</i>
ATC	- Tetracaidecaédro alongado
CBC	- Cuboctaedro
CCC	- Cúbica de corpo centrado
CS	- Cúbica simples
DM	- Dinâmica Molecular
EBSD	- <i>Electron Back Scatter Diffraction</i>
EDO	- Equações Diferenciais Ordinárias
EDP	- Equações Diferenciais Parciais
IA	- Inteligência Artificial
JMAK	- Modelo fenomenológico para o crescimento de grãos (iniciais de Johnson, Mehl, Kolmogorov e Avrami)
jpg	- <i>Joint Photographic Experts Group</i> (padrão amplamente utilizado para compressão e armazenamento de imagens digitais)
MC	- Método de Monte Carlo
MEF	- Método dos Elementos Finitos
OTC	- Ortotetracaidecaédro
SAR	- Salazar, Assis e Rios
SCd	- Extensão do arquivo de dados originais de uma simulação do programa SimCres
SCm	- Extensão do arquivo de dados modificados de uma simulação do programa SimCres
SCp	- Extensão do arquivo de parâmetros de uma simulação do programa SimCres
SI	- Sistema Internacional de Unidades
SimCres	- Nome do programa de simulação de recristalização implementado
TTT	- Tempo, temperatura, transformação

VA	- Vizinhança pela aresta
VF	- Vizinhança pela face
VM	- Vizinhança de Moore
VP	- Vizinhança plena
V&R	- Vandermeer e Rath
VV	- Vizinhança pelo vértice
VVN	- Vizinhança de Von Neumann
2D	- Bidimensional
3D	- Tridimensional

LISTA DE SÍMBOLOS

a	- Número de arestas de um poliedro (teorema de Euler)
a	- Semieixo de um esferoide relativo ao raio da seção equatorial, x e y
c	- Semieixo de um esferoide relativo ao alongamento no eixo z
CG_n	- Número de células que o grão originado da semente n contém
CG	- Número médio de células por grão
CIG_n	- Número de células que o grão n contém em seu interior que não estão na sua superfície
CSG_n	- Número de células que o grão n contém em sua superfície
C_n	- Número total de células de um grão n específico
C_{ni}	- Número total de células de um grão n específico que estão em seu interior sem tocar a sua superfície
C_{ns}	- Número total de células de um grão n específico que estão na sua superfície
$C_{RN} _{(\tau)}$	- Número total de células na superfície entre a região recristalizada e não recristalizada em um determinado tempo discreto (τ)
C_s	- Número médio de células da superfície dos grãos
CS	- Conjunto de todos os grãos do metal
CS_f	- Conjunto de todas as sementes cujo grãos não tocam a superfície
CS_i	- Conjunto de todas as sementes incluídas inicialmente na simulação
CS_v	- Conjunto de todas as sementes cujo grãos tocam a superfície
C_t	- Número total de células de M empregadas na simulação
C_x	- Número total de células do metal ao longo do comprimento do eixo x
C_y	- Número total de células do metal ao longo do comprimento do eixo y
C_z	- Número total de células do metal ao longo do comprimento do eixo z

d	- Diâmetro médio dos grãos [m] ¹ (método do intercepto)
DG	- Diâmetro equivalente médio dos grãos [m]
DG_n	- Diâmetro equivalente do grão originado da semente n [m]
$dist_orig$	- Distância linear entre o centro da célula verificada e o centro da célula da semente originária (grandeza não discreta)
$dist_contr$	- Número total de células evoluídas a partir da célula de origem no eixo de controle (grandeza não discreta)
e_o	- Ecentricidade do esferoide oblato
e_p	- Ecentricidade do esferoide prolato
f	- Número de faces de um poliedro (teorema de Euler)
G	- Tamanho de grão ASTM (método do intercepto)
G_0	- Taxa de crescimento do raio dos grãos
(i, j, k)	- Coordenadas genéricas de uma célula
k	- Constante empírica de proporcionalidade ao tempo da equação JMAK
K_a	- Razão de anisotropia geométrica (ou razão axial)
K_i	- Constante genérica equação JMAK
K_j	- Constante genérica equação JMAK
ks	- Constante de proporcionalidade da superfície discreta para contínua
M	- Matriz tridimensional que representa o metal na simulação
$M_{i,j,k}$	- Valor do conteúdo da célula de M nas coordenadas (i, j, k)
M'	- Nova matriz de ambiente sem os grãos vizinhos a superfície
M_v	- Conjunto de todas as células de $M_{i,j,k}$ que se encontram junto a superfície
MA	- Matriz tridimensional inicial que representa o metal antes da simulação
MA_{NN}	- Estado da matriz metal para a região originária ainda não recristalizada (no caso padrão adotado neste trabalho no valor 0)
MAM	- Matriz tridimensional que representa o metal durante a recristalização
MBP	- Matriz bidimensional de busca primária
MBS	- Matriz bidimensional de busca secundária

¹ Os colchetes são utilizados para se referir a uma correspondente unidade de grandeza específica do SI, mas de modo genérico, sem a associar a nenhum prefixo específico, seja múltiplo ou submúltiplo.

m	- Constante empírica do expoente do tempo da equação JMAK
n	- Número de identificação de determinada semente
N_{ASTMe}	- Número de grão ASTM equivalente calculado pela simulação
NC_e	- Número de células matriciais de cada grão em cada uma das direções dos eixos cartesianos sem o <i>impingement</i>
N_{CT}	- Número de células transformadas
N_F^6	- conjunto de coordenadas das 6 células vizinhas pela face a célula central considerada
Nl	- Número de objetos interceptados por unidade de comprimento da linha-teste [m^{-1}] (método do intercepto)
N_S	- Número total de sementes
N'_S	- Número total de grãos após a eliminação dos grãos vizinhos a superfície
N_v	- Número total de sementes por unidade de volume [grãos/ m^3]
<i>passo</i>	- Número máximo de células (ou fração de células) que se pode evoluir a cada laço na modelagem por AH (neste estudo <i>passo</i> = 1)
PC_h	- Valor do <i>passo</i> acumulado em r , ou em c , ou em a
Pl	- Número de interseções por unidade de linha-teste [m^{-1}]
QI	- Quociente isoperimétrico
r	- Largura da aresta δ de uma célula, [m]
r	- Raio do grão esférico
R_e	- Raio do núcleo estendido
S_e	- Área superficial de uma esfera
S_{Eo}	- Área superficial do esferoide oblato
S_{Ep}	- Área superficial do esferoide prolato
SFR	- Área superficial pela face média dos grãos simulados [m^2]
SF	- Área superficial pela face média dos grãos simulados corrigida [m^2]
SFR_n	- Área superficial pela face de um grão n específico [m^2]
SF_n	- Área superficial pela face de um grão n específico corrigida [m^2]
SG	- Área superficial equivalente média do material simulado [m^2]
SG_n	- Área superficial equivalente do grão n [m^2]

SV	- Razão entre o somatório da área superficial pela face corrigida pelo volume (todo o metal simulado [m^2/m^3]
Sv	- Área superficial por unidade de volume-teste [m^2/m^3]
Sv'	- Área superficial por unidade de volume de uma esfera ideal [m^2/m^3]
SF_{RN}	- Área superficial discreta pelas faces restrita entre a região recristalizada e não recristalizada [m^2]
$SF_{RN} _{(\tau)}$	- Área superficial discreta pelas faces restrita entre a região recristalizada e não recristalizada, em um determinado tempo discreto (τ) [m^2]
SVR	- Razão entre o somatório da área superficial pela face pelo volume de todo o metal simulado (é a medida da área superficial disponível no metal) [m^2/m^3]
SV_{RN}	- Razão da área superficial nas interfaces entre regiões recristalizadas e não recristalizadas por unidade de volume [m^2/m^3]
$SV_{RN} _{(\tau)}$	- Razão da área superficial discreta pelas faces restrita entre a região recristalizada e não recristalizada por unidade de volume, em um determinado tempo discreto (τ) [m^2/m^3]
SV_{RR}	- Razão da área superficial nas interfaces entre as regiões recristalizadas por unidade de volume [m^2/m^3]
t	- Tempo transcorrido [s]
v	- Número de vértices de um poliedro (teorema de Euler)
V_A^{12}	- Conjunto de células de VA
V_{AV}^{20}	- Conjunto de células de VA/VV
V_e	- Volume recristalizado estendido de um grão
$V_{Esferoide}$	- Volume do esferoide [m^3]
V_{et}	- Volume recristalizado estendido total dos grãos da matriz
V_F^6	- Conjunto de células de VF
V_{FA}^{18}	- Conjunto de células de VF/VA
V_{FV}^{14}	- Conjunto de células de VF/VV
VG	- Volume médio dos grãos simulados [m^3]
VG_n	- Volume do grão originado da semente n [m^3]
VN	- Volume normalizado dos grãoscífico
VN_n	- Volume normalizado de um grão n específico
V_M	- Volume total da matriz de simulação [m^3]

V_P^{26}	- Conjunto de células de VP
V_V^8	- Conjunto de células de VV
X_r	- Fração volumétrica transformada real
X_{vex}	- Razão entre o volume recristalizado e o volume total em um determinado tempo discreto
(x, y, z)	- Coordenadas genéricas de uma célula
(x_i, y_i, z_i)	- Coordenadas da célula de origem
(x_f, y_f, z_f)	- Coordenadas da célula vizinha à célula de origem que está sendo pesquisada
δ	- Resolução genérica das arestas das células cúbicas da matriz MA
$\delta_{CS}(MA_{i,j,k})$	- Função indicativa de conjunto, que é igual a 1 se $(MA_{i,j,k} \in CS)$ e é igual a 0 caso contrário
$\delta_{n,MA_{i,j,k}}$	- Função delta de Kronecker, que é igual a 1 se $MA_{i,j,k} = n$ e 0 caso contrário
ϕ	- Ângulo azimutal
θ	- Ângulo polar
τ	- Tempo discreto (laço computacional)
$\wedge$	- Operador lógico AND (“E”)
$\vee$	- Operador lógico OR (“OU”)

1 INTRODUÇÃO

1.1 Apresentação do tema

O estudo de fenômenos relacionados a transformações de fase em geral, como a recristalização em metais, tem uma vasta gama de aplicações industriais devido tanto a sua influência nos processos produtivos como em suas implicações diretas com as propriedades do metal (RIOS; PADILHA, 2007). A modelagem computacional deste fenômeno possibilita uma série de abordagens que são potencialmente muito interessantes no desenvolvimento de materiais já conhecidos visando novas aplicações ou visando melhorias no desempenho de novos materiais para aplicações estabelecidas ou novas.

A microestrutura dos materiais metálicos é normalmente constituída por fases e seus defeitos, em uma intrincada rede de distintos grãos. Um material metálico hipotético, ou uma pequena parte representativa do mesmo, pode ser representado por uma rede matricial tridimensional constituída de células cúbicas (RAABE, 2002), que seriam na escala considerada a menor porção representativa do material na modelagem. Em uma primeira abordagem, este material seria considerado como totalmente homogêneo e com apenas uma única fase. Assim, esta matriz ambiente terá todas as suas células possuindo um mesmo estado inicial, representando esta homogeneidade.

Entretanto, no interior deste material, devido a motivos termodinâmicos diversos fora do escopo da discussão no momento, ocorrerá o fenômeno de nucleação em sítios, tendo estas alteradas de estado, passando a ficarem destoante do resto das células da matriz. Este material modificado pode ser então representado fazendo com que as células matriciais nas quais surgiu o novo estado (chamadas de núcleos), distinto do estado do restante das demais células da matriz.

Este núcleo será portanto um embrião, cuja evolução ao longo do tempo na matriz será chamado simplifadamente de recristalização (RIOS et al., 2005a), o

fenômeno a ser reproduzido. Computacionalmente uma possível estratégia para se modelar o crescimento deste embrião na estrutura do metal seria por meio da aplicação de algum algoritmo de busca, exploração e replicação no seu entorno.

Esta classe de algoritmo pode ser considerada como sendo uma ferramenta de inteligência artificial aplicada à resolução de um problema específico envolvendo a pesquisa e exploração em um ambiente (RUSSELL; NORVIG, 2021). Apesar do anteriormente descrito, não existe um algoritmo geral ou roteiro único capaz de resolver todas as situações aplicáveis. Pelo contrário, cada situação tem as suas especificidades e portanto requer um algoritmo próprio ou pelo menos mais direcionado às suas particularidades.

Pela relevância, na literatura existem diversos estudos já avançados que abordam a modelagem computacional tridimensional do crescimento de grãos em metais (MAREK, 2013; MELVILLE et al., 2024; MOELANS, 2022) e diversos de seus aspectos métricos (ALVES; ASSIS; RIOS, 2023; OLIVEIRA et al., 2006; VANDERMEER, 2005).

Das técnicas de simulação que abordam este tipo de paradigma se tem os autômatos celulares (AC). Conceitualmente, um AC é um modelo discreto, consistindo em uma matriz finita e regular de células, cada uma podendo estar em um número também finito de estados possíveis, que variam de acordo com regras determinísticas. Todas as células evoluem segundo a mesma regra de atualização, baseada nos valores de uma vizinhança de células, e em alguns casos dela própria (BOCCARA, 2010; WOLFRAM, 1983, 2002).

A utilização dos AC e seus congêneres apresenta muitas características positivas, como a facilidade de implementação computacional e a possibilidade da obtenção de bons resultados, o que faz com que seja uma técnica muito empregada. Ainda, existem técnicas de modelagens do crescimento de grão que não se realizam estritamente por AC, mas onde alguns princípios dos AC podem ser empregados, como, por exemplo, os autômatos híbridos (AH).

Portanto o AC, além de ser uma ferramenta de modelagem independente e completa, possui diversos aspectos que impactam em outras formas de modelagem, como a forma da pesquisa de vizinhança.

Assim, pela aplicação de estratégias de pensamento computacional, pode-se elaborar e implementar modelos para simular a fenomenologia da recristalização em metais, de modo a contribuir para o conhecimento da Engenharia de Materiais estabelecido nesta área.

Nesta linha, o pensamento computacional é definido como a habilidade de compreender, definir, modelar, comparar, solucionar, automatizar e analisar problemas (e soluções) de forma metódica e sistemática, através da construção de algoritmos, onde algoritmo é a descrição de um processo para solução de determinado problema (SBC, 2019).

O pensamento computacional se aplica a todos os campos do conhecimento, e a todos os níveis educacionais (COSTA; SILVA; SILVA, 2024), podendo ser considerado como sendo “um dos pilares fundamentais do intelecto humano, pois junto com a leitura, a escrita e a aritmética, serve para descrever, explicar e modelar o universo e seus processos complexos” (SBC, 2019).

Neste sentido, o pilar fundamental da solução de problemas é a abstração da realidade por meio de um modelo, onde apenas aspectos estritamente relevantes em determinada situação são considerados, de modo a se entender o problema e suas condições de contorno, permitindo que tenhamos a clareza necessária e condições para solucioná-lo (SBC, 2019).

1.2 Justificativa e relevância

Apesar do estado de evolução do empregos das técnicas computacionais, percebe-se que diversas facetas mais fundamentais simplesmente ainda não foram suficientemente exploradas e discutidas. Inclusive erros advindos na aplicação da modelagem por AC podem impactar nos resultados, necessitando de correções. O

mesmo se pode dizer sobre a parametrização metalúrgica de aspectos como volume, diâmetro, e área superficial dos grãos recristalizados, e consequentemente das demais propriedades derivadas, como o caminho microestrutural.

Deste modo este trabalho tem como justificativa contribuir na compreensão de alguns destes aspectos fundamentais relacionados à modelagem por AC e AH, que não estão plenamente tratados na literatura até então, e que podem ter profundo impacto na qualidade dos seus resultados obtidos.

Ainda, espera-se verificar os erros gerados e propor melhorias, sem a necessidade de se utilizar de algoritmos e procedimentos para correções, nem de se conviver com os erros gerados, possibilitando que simulações com maior elevado nível de realismo possam ser diretamente mais facilmente realizadas.

Como técnica de melhoria em relação aos AC, neste trabalho vai-se empregar a modelagem por AH. Os AH possibilitam trabalhar concomitantemente tanto com o universo discreto, como os AC, com os quais possui muitas similaridades, mas também com o universo contínuo. Espera-se com a abordagem pelos AH poder obter perfis de resultados de alta qualidade (grãos com alta esfericidade na fase anterior ao seu mútuo contato), mas com as vantagens da implementação computacional realizada pelos AC.

1.3 Organização do trabalho

Para atingir seus objetivos este trabalho é composto por 10 capítulos textuais, grosso modo conforme se segue:

Capítulo 1- Introdução: realizada a apresentação do tema, a caracterização do problema, a sua justificativa e sua organização.

Capítulo 2 – Objetivos: realizada a apresentação do objetivo geral e objetivos específicos.

Capítulo 3 – Fundamentação teórica: apresentação conceitual e introdutória de diversos tópicos que serviram de base para o desenvolvimento do trabalho.

Capítulo 4 – Metodologia: realizada a apresentação de aspectos metodológicos gerais aplicados neste trabalho e do funcionamento do programa desenvolvido.

Capítulo 5 – Simulação por Autômatos Celulares Tridimensionais: detalhado o desenvolvimento da modelagem por AC e feita a verificação da performance do algoritmo empregado em função da forma de vizinhança de busca aplicada e da microestrutura resultante.

Capítulo 6 – Simulação por Autômatos Híbridos: similar ao capítulo anterior, mas com o uso de AH, conseguindo que os grãos cresçam de modo esférico e obtendo uma microestrutura tipo equiaxial típica.

Capítulo 7 – Parametrização dimensional - morfologia: será apresentado em detalhes o cálculo do volume dos grãos, e de seus parâmetros derivados, como o volume normal, diâmetro equivalente e área superficial equivalente, tanto da média do metal, quanto de cada grão.

Capítulo 8 – Modelagem de grãos esferoides com AH: similar ao Capítulo 6, mas agora conseguindo com que os grãos cresçam de forma esferoidal, tanto como prolatos como oblatos, ainda incorporando a possibilidade de rotação dos mesmos no metal e da obtenção de heterogeneidade na distribuição do formato geométrico dos grãos.

Capítulo 9 – Parametrização da área superficial discreta: será apresentado em detalhes o procedimento para o cálculo da área superficial real dos grãos, e de suas grandezas derivadas.

Capítulo 10 – Modelagem do caminho microestrutural discreto: por fim, será realizada a obtenção das curvas do caminho microestrutural, inclusive com uma comparação experimental.

2 OBJETIVOS

Pelo exposto anteriormente, tem-se então para este trabalho a proposta dos seguintes objetivos a serem alcançados:

2.1 Objetivo geral

Elaborar conceitualmente e implementar uma simulação computacional por autômatos híbridos tridimensionais para estudo da recristalização a partir da formação de núcleos e crescimento de grãos equiaxiais em um material metálico, cuja nucleação ocorra por saturação de sítios (todos os núcleos formados no início da simulação), e que seja usualmente homogênea (distribuição totalmente aleatória das sementes).

2.2 Objetivos específicos

O objetivo geral será alcançado pela obtenção dos seguintes objetivos específicos:

- (a) Elaborar conceitualmente os algoritmos para a simulação da recristalização pela técnica de autômatos celulares tridimensionais;
- (b) Elaborar conceitualmente os algoritmos para a simulação da recristalização pela técnica de autômatos híbridos tridimensionais, tanto gerando grãos no formato esférico como de esferoides;
- (c) Efetivamente implementar estes algoritmos na forma de um programa computacional em linguagem Python, que permita além da realização da simulação em si, também a realização da parametrização metalúrgica dos aspectos dimensionais dos novos grãos formados, como diâmetro, volume e área superficial,

com consequente elaboração da curva do caminho microestrutural, e com a respectiva visualização gráfica tridimensional (3D) e em planos seleccionados (2D) dos grãos em formação e formados; e

- (d) Realizar ensaios *in sílico* para a verificação e validação dos resultados.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste trabalho, foram aprimoradas as aplicações da modelagem computacional no estudo da recristalização, por meio do crescimento de grãos equiaxiais em um material metálico. O mecanismo de nucleação homogênea ocorre por saturação dos núcleos já formados, sendo as sementes distribuídas de maneira totalmente aleatória.

A simulação destaca-se como uma ferramenta essencial e amplamente aplicável nas Engenharias, constituindo um dos pilares fundamentais para o avanço de projetos e pesquisas (SILVA et al., 2022). Por meio de modelos matemáticos e computacionais que representam fenômenos microestruturais, torna-se possível prever e analisar sua evolução com alta precisão e confiabilidade. Além disso, a reprodução repetitiva de certos experimentos pode ser inviável devido aos elevados custos envolvidos ou à complexidade e escala dos elementos em estudo.

Com o uso de ferramentas computacionais adequadas, é possível simular esses processos de maneira eficiente, desde que associados a modelos matemáticos robustos, ao conhecimento das leis físicas que regem o experimento e à consideração do custo computacional necessário para replicar a situação.

O processo de modelagem computacional envolve usualmente as seguintes etapas (CARVALHO et al., 2015):

1. **Fenômeno físico** – simplificação e determinação das propriedades físicas relevantes;
2. **Modelo matemático** – formulação das equações governantes, como por exemplo as equações diferenciais (ZILL; CULLEN, 2001), tanto ordinárias (EDO) como parciais (EDP)²;

²Eventualmente modelos matemáticos podem ser complementados, ou mesmo substituídos, por modelos geométricos.

3. **Discretização do domínio** – utilização de técnicas baseadas em malhas, grades, nós, partículas ou células, como autômatos celulares e híbridos, entre vários outros como o Método dos Elementos Finitos (ASSAN, 2003);
4. **Algoritmo numérico** – aplicação de condições iniciais e de contorno, discretização numérica e aproximação das EDO para obter soluções algébricas (POOLE, 2004);
5. **Implementação computacional** – avaliação da acurácia, desempenho, armazenamento, robustez e usabilidade do código (DE BERG et al., 2008);
6. **Simulação numérica** – realização, validação, renderização e visualização dos resultados obtidos (AMMERAAL; ZHANG, 2008).

Portanto, a modelagem computacional pode ser aplicada nas mais diversas áreas da engenharia (BATISTA; GOMES, 2020; SILVA et al., 2022; STRUIJS, 2004; VAZ JR; SOUZA NETO; MUÑOZ-ROJAS, 2010) e mesmo em outros setores (CDRH, 2023; WILSON; COLLINS, 2019).

Com o uso de softwares adequados, inúmeros problemas podem ser reproduzidos sucessivas vezes, sendo possível alterar e observar diversos parâmetros de processo ou microestrutura, permitindo uma mais fácil visualização e predição dos resultados para cada situação requerida.

3.1 Simulação computacional em Engenharia de Materiais

A aplicação dos recursos computacionais na Engenharia e Ciência dos Materiais é um campo interdisciplinar que combina princípios da física dos materiais com as ferramentas de simulação computacional para modelar e pesquisar materiais em diversos níveis discretos, como microscópico, nanométrico ou até atômico. Modelos fenomenológicos para a simulação avançada do comportamento termo-

mecânico de materiais frágeis e dúcteis (VAZ JR; SOUZA NETO; MUÑOZ-ROJAS, 2010) podem ser acessados por estas ferramentas, tais como³:

- Modelos linear-elástico e elasto-plástico aplicados a ensaios de tração uniaxial, incluindo a abordagem de modelos de plasticidade nesse contexto;
- Análise do efeito da temperatura em modelos de plasticidade aplicados a componentes estruturais, com foco em materiais anisotrópicos (como aqueles submetidos a conformação plástica severa e texturas em materiais compósitos), incluindo a determinação do fator de intensidade de tensão e da integral J^4 ; e
- Desenvolvimento de modelos com não-linearidade geométrica, onde as deformações no material ou estrutura excedem os limites das aproximações lineares, e com não-linearidade de contato, que considera as interações entre superfícies, aplicados ao estudo da conformação plástica de metais.

Com isso, pretende-se favorecer a obtenção de maior conhecimento dos mecanismos relacionados aos fenômenos que ocorrem nos materiais, favorecendo inclusive seu projeto e otimização. Para isto são utilizados métodos computacionais avançados, como ferramentas de simulação, inteligência artificial, técnicas de otimização, método dos elementos finitos, entre outros.

Entretanto, é esperado que, apesar do foco e objetivo primordial serem na contribuição que a utilização das ferramentas matemático computacionais possa trazer ao conhecimento relativo à Engenharia de Materiais, o grau de interconexões entre ambas as áreas é de tal forma profundo, que a própria técnica matemática computacional em si também acaba sendo refinada e aprimorada.

³Para exemplos de diversos conteúdos aplicados a Engenharia de Materiais Computacional ver <https://www.ppgcem.ufscar.br/pt-br/programa/disciplinas-1/introducao-a-simulacao-computacional-em-engenharia-de-materiais>. Acessado em 20 dez. 2024.

⁴A integral J é um parâmetro empregado para quantificar a quantidade de energia disponível para a propagação de uma trinca (RICE, 1968).

Essa área emergente tem diversas aplicações em praticamente todos os setores industriais e científicos relacionados a diversos campos, como exemplo, na metalurgia, eletrônica, energia, biomateriais e nanotecnologia.

Entre algumas das principais potenciais vantagens da Engenharia de Materiais Computacional estão:

- Redução de custos: a simulação computacional permite explorar uma ampla gama de materiais e condições de forma mais rápida e eficiente, minimizando a necessidade de experimentação física intensiva.
- Compreensão dos mecanismos fundamentais: pela simulação computacional, pode-se em muitos casos se encontrar mais facilmente percepções sobre fenômenos fundamentais que influenciam, ou mesmo regem, o comportamento dos materiais.
- Inovação: por simulações computacionais pode-se encontrar novas ou inusitadas propriedades e comportamentos em materiais novos ou mesmo tradicionais (CHEN et al., 2015).

No entanto, é importante destacar que a Engenharia de Materiais Computacional ainda enfrenta desafios, como a necessidade de modelos computacionais mais precisos e eficientes, a integração de dados experimentais e teóricos e a validação experimental dos resultados computacionais. No entanto, com o avanço da tecnologia computacional e o desenvolvimento de novos métodos e técnicas, espera-se que a Engenharia de Materiais Computacional desempenhe um papel cada vez mais importante no desenvolvimento de materiais avançados e na resolução de desafios tecnológicos.

Por todos estes pontos, a Engenharia de Materiais Computacional tem ganhado destaque crescente nos programas das escolas de engenharia de materiais, tanto no mundo quanto no Brasil. Como área emergente acadêmica muitos desafios existem, como na formação de docentes, atualização curricular, criação de laboratórios, integração com indústrias e com outros campos do conhecimento.

Entretanto, diversas universidades renomadas, como o *Massachusetts Institute of Technology*, *Stanford University*, e *University of California*, já incorporam cursos específicos de modelagem e simulação computacional em seus programas de

graduação em Engenharia de Materiais. Mesmo no Brasil, instituições como a Universidade de São Paulo, Universidade Estadual de Campinas, Universidade Federal do Rio de Janeiro, e Universidade Federal Fluminense já oferecem cursos e programas de pós-graduação que incluem disciplinas de modelagem e simulação de materiais.

Nas revistas científicas indexadas a situação não é diferente. Atualmente diversos periódicos tradicionais na área de Engenharia de Materiais aceitam explicitamente estudos neste campo interdisciplinar, existindo até mesmo publicações específicas⁵.

3.2 Técnicas computacionais de modelagem

São inúmeras as ferramentas e técnicas computacionais que já vem sendo aplicadas exitosamente a Engenharia de Materiais Computacional, ou que possuem potencialidades para isto (HALLBERG, 2011; LI et al., 2024; LIU et al., 2024; ZHI et al., 2024). Não existe um modelo ou método único de simulação, cada qual tem suas características e aplicações, além de estarem passando por um momento de franco desenvolvimento.

Apenas como exemplo, explicita-se a seguir algumas, cuja aplicação pode se dar isoladamente ou mesmo em conjunto:

- Inteligência Artificial:

Inteligência é a capacidade de adquirir e aplicar conhecimentos e habilidades, adaptar-se ao ambiente e resolver problemas. Existem diferentes concepções de inteligência, e não há uma definição consensual que seja válida para todas as áreas. Já inteligência artificial (IA) é o campo da ciência que busca criar sistemas, como

⁵ - Computational Materials Science, Elsevier, Print ISSN 0927-0256, Online ISSN 1879-0801.
- npj Computational Materials, Springer Nature, Online ISSN 2057-3960.

computadores, máquinas e programas, que possam realizar tarefas que normalmente requerem inteligência humana (RUSSELL; NORVIG, 2021).

Essas tarefas incluem raciocinar, aprender e atuar, especialmente em contextos com grandes volumes de dados que são difíceis para os humanos analisarem manualmente. Existem diversas técnicas em IA incluindo redes neurais artificiais, lógica nebulosa, enxame de partículas, algoritmos de busca e otimização, processamento de linguagem natural, visão computacional, entre outras (BRAGA; CARVALHO; LUDERMIR, 2007; OLIVEIRA et al., 2006; SIMÕES; SHAW, 2007). Diversas destas ferramentas já são utilizadas no contexto da modelagem e estudo da recristalização em metais e/ou da caracterização microestrutural (CHAN et al., 2020; SHU et al., 2022; YANG et al., 2020).

- Método dos Elementos Finitos:

O Método dos Elementos Finitos (MEF) é muito valoroso na Engenharia de Materiais Computacional, pois possibilita a análise e a simulação detalhada de materiais sob diversas condições físicas, como cargas mecânicas, variações térmicas e interações eletromagnéticas (SHARMA et al., 2014; VAZ JR; SOUZA NETO; MUÑOZ-ROJAS, 2010; ZHU et al., 2019). Ao se dividir o material em uma malha de elementos finitos e aplicar funções de forma para cada elemento, o MEF resolve problemas complexos de maneira aproximada, mas precisa. Isso é crucial para prever comportamentos como tensões, deformações, transferência de calor e até processos de falha em materiais avançados, como compósitos e materiais multifuncionais.

Além de sua precisão e flexibilidade, o MEF é capaz de modelar fenômenos em várias escalas, desde a estrutura macroscópica até o nível micro e atômico, integrando-se com outras técnicas de simulação para fornecer uma abordagem multiescalar. No entanto, essa capacidade avançada vem com desafios, como a necessidade de recursos computacionais significativos e a dependência da qualidade da malha.

- Dinâmica Molecular:

A Dinâmica Molecular (DM) é uma técnica computacional essencial para diversos estudos na Engenharia de Materiais Computacional, usada para simular e analisar o comportamento de materiais em nível atômico e molecular (SOHRABIAN et al., 2024; ZHAO et al., 2024). Ao calcular as trajetórias dos átomos com base nas equações de movimento de Newton e nas forças interatômicas, a DM permite investigar propriedades mecânicas, como tensões e fraturas, além de fenômenos de transporte, reações químicas e mudanças estruturais em materiais. Por exemplo, a DM pode explorar a resistência de nanomateriais como o grafeno ou a difusão de átomos em ligas metálicas, oferecendo uma visão profunda das interações atômicas que governam as propriedades dos materiais.

Apesar de sua capacidade de fornecer percepções detalhadas, a DM enfrenta desafios significativos, como altos custos computacionais e dependência de modelos precisos de interação atômica. As simulações podem ser limitadas pela escala temporal e espacial, exigindo recursos computacionais robustos para modelar sistemas grandes ou por períodos prolongados. Além disso, a precisão dos resultados depende da qualidade dos potenciais empíricos usados para descrever as interações entre átomos. Mesmo com essas limitações, a DM pode ser muito valiosa para entender e desenvolver novos materiais, permitindo a investigação de fenômenos sofisticados que são difíceis de abordar experimentalmente.

- Método de Monte Carlo:

O Método de Monte Carlo (MC) é uma técnica estatística utilizada para modelar e simular processos sofisticados e estocásticos (PAYTON et al., 2024; PENG et al., 2023; RANA; MONDER; CHATTERJEE, 2024). Ao gerar uma série de experimentos simulados com base em números aleatórios, o MC permite analisar a evolução de microestruturas, como o crescimento de grãos em metais, e estimar propriedades macroscópicas que dependem de distribuições estatísticas, como a condutividade térmica de materiais compósitos. Essa abordagem é particularmente eficaz para lidar com sistemas onde há muitas variáveis e incertezas, que são difíceis de modelar com métodos determinísticos tradicionais.

Embora o MC seja extremamente flexível e capaz de integrar-se com outras técnicas computacionais, como o MEF ou a DM, ele pode ser computacionalmente intensivo, exigindo muitas amostras para resultados estatisticamente significativos. A eficácia das simulações de MC depende da qualidade dos modelos e da precisão na geração de números aleatórios, e sua interpretação requer um sólido entendimento de estatística e análise de incertezas.

- Modelagem por Autômatos Celulares:

A modelagem por Autômatos Celulares (AC) tem se destacado na Engenharia de Materiais Computacional pela sua capacidade de simular o comportamento e a evolução de estruturas materiais em escalas microscópicas e mesoscópicas (MUKHOPADHYAY; LOECK; GOTTSTEIN, 2007; OLIVEIRA et al., 2006; SVYETLICHNYY, 2023). Utilizando conceitos inspirados em sistemas dinâmicos complexos, essa técnica permite a representação de materiais de forma discreta, dividindo-os em células ou elementos individuais que interagem de acordo com regras definidas (JANSSENS, 2010; RAABE, 2002; SEYED-SALEHI, 2025).

Essas interações podem simular processos como a recristalização em materiais policristalinos, a difusão de átomos ou até mesmo a propagação de falhas em materiais frágeis, fornecendo percepções valiosas para o projeto e a otimização de materiais com propriedades específicas ou especiais. Através da Modelagem por AC, pode-se explorar virtualmente uma ampla gama de cenários e condições, estudando o impacto de diferentes parâmetros e variáveis no comportamento final do material.

Essa abordagem oferece uma visão detalhada e dinâmica da evolução de estruturas e propriedades, permitindo a identificação de padrões emergentes (complexidade) e o desenvolvimento de estratégias para otimização de materiais em diversas aplicações industriais, desde a metalurgia até a nanotecnologia.

Esta técnica será extensivamente empregada neste trabalho e portanto mais profundamente abordada a seguir.

3.3 Autômatos celulares

O termo autômato é originário da antiguidade. Inicialmente no grego era “*automaton*”, sendo depois incorporado pelo latim como “*automatus*”. Este termo pode possuir diversos sentidos dependendo do contexto, mas em essência significa aquele que age por vontade própria. Na mitologia grega se destaca a figura de Talos, o autômato gigante de bronze protetor da ilha de Creta (Figura 3.1), que sobrevoava a ilha a protegendo de eventuais naus invasoras.

Figura 3.1. Talos, o autômato gigante protetor da ilha de Creta.



Fonte: imagem de selo postal de Creta, ano 1900.

Especificamente na ciência da informação, um autômato é um modelo matemático e/ou computacional que descreve um sistema que muda de estado em resposta aos valores recebidos em suas entradas. Trata-se de uma definição ampla, que engloba diversas classes de autômatos. Neste trabalho, serão considerados especificamente os autômatos celulares (AC) e seus congêneres, os autômatos

celulares híbridos, que, a partir de agora, serão denominados apenas como autômatos híbridos (AH).

Existe a hipótese conceitual generalista de que as leis físicas sejam discretas e que o universo é o resultado de um gigantesco AC. Assim sendo, qualquer sistema com muitos elementos idênticos que interagem local e deterministicamente pode por esta tese ser modelado (WOLFRAM, 2002).

É verdade que estes conceitos e aplicações fundamentais dos AC são objeto de controvérsias, relacionadas tanto a uma possível demasiada simplificação da natureza quanto a uma extrapolação dos resultados. Entretanto, é fato que a aplicação dos AC possui grande relevância prática, pois propicia um método para se realizar o estudo aprofundado e a modelagem de sistemas complexos e dinâmicos, sejam naturais ou artificiais.

Nos AC, cada vez que as regras são aplicadas à matriz completa, uma nova matriz será gerada das condições de contorno do sistema. Uma tabela verdade define a regra de transição para o autômato porque indica o que vai acontecer para cada um dos padrões possíveis para uma vizinhança.

Os AC são potencialmente muito interessantes para o estudo e modelagem de sistemas complexos. Sistemas complexos, ou que exibem complexidade, são a grosso modo aqueles sistemas onde propriedades emergem independentemente de ações ou decisões de um agente controlador central, como acontece em muitas situações no mundo natural (BOCCARA, 2004).

Na década de 1940, Stanislaw Ulam modelou matematicamente o crescimento de cristais em uma rede simples, embora de forma mais descritiva devido às limitações computacionais da época. Entretanto, Ulam, percebendo o potencial para uma nova forma de modelagem, incentivou o matemático John Von Neumann a desenvolver estudos nesta linha. Von Neumann iniciou então os estudos formais dos AC, cuja meta principal seria poder representar matematicamente a evolução natural com um dispositivo capaz de se autorreplicar. No início da década de 1950 Von Neumann desenvolveu os primeiros AC bidimensionais, provando que era possível em determinada configuração um AC fazer infinitas cópias de si mesmo.

Posteriormente, John Conway desenvolveu no final de década de 1960 o AC “Jogo da Vida” (“*Game of Life*”), que foi bastante difundido na então latente área da informática (CASTRO; CASTRO, 2008; GARDNER, 1970), contribuindo em muito na divulgação desta ferramenta de modelagem. O “Jogo da Vida” é um modelo simplificado que consiste em uma grade bidimensional de células, onde cada célula pode estar viva ou morta. A evolução do jogo é determinada por regras simples baseadas no estado das células vizinhas. Células vivas podem permanecer vivas, morrer por solidão se tiverem poucos vizinhos vivos, ou morrer por superpopulação se tiverem muitos vizinhos vivos. Células mortas podem se tornar vivas se tiverem exatamente três vizinhos vivos.

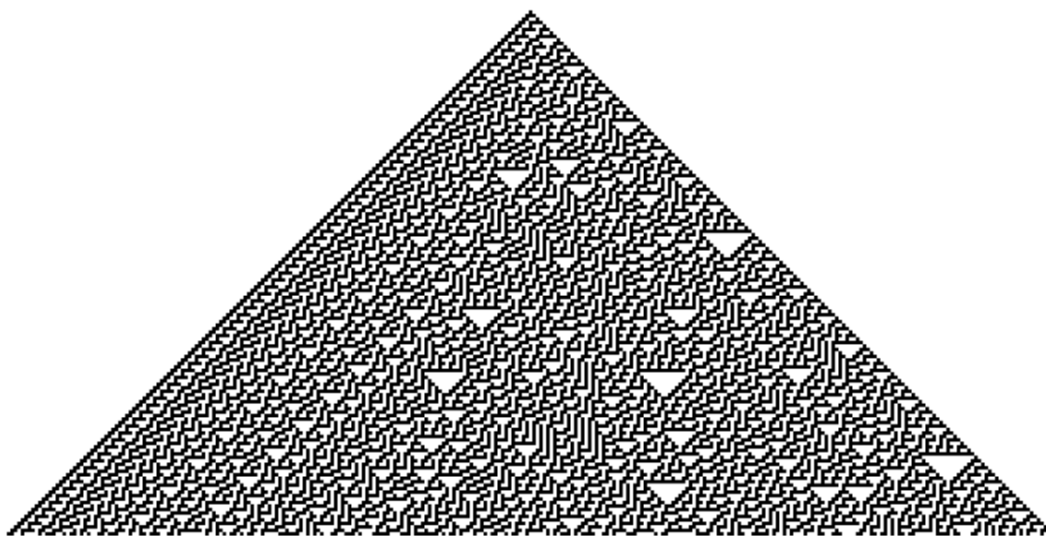
Essas regras simples dão origem a padrões complexos e interessantes, incluindo osciladores, espaçonaves e estruturas estáveis, tornando o “Jogo da Vida” uma ferramenta fascinante para estudar a dinâmica de sistemas complexos e padrões emergentes (BAYS, 2010; TRIANTAFYLLOU, 2023).

Posteriormente, no início da década de 1980, Stephen Wolfram apresentou seus AC elementares, consolidando ainda mais a área. Estes AC elementares são modelos relativamente simples, onde cada célula em uma linha unidimensional pode assumir um de dois estados (geralmente representados como 0 e 1) e evolui de acordo com regras determinísticas baseadas no estado das células vizinhas (CASTRO; CASTRO, 2008; WOLFRAM, 1983, 1984).

As regras são especificadas através de uma tabela verdade que define o novo estado de uma célula com base nos estados de sua célula atual e de seus vizinhos imediatos. Existem 256 regras possíveis para os AC elementares unidimensionais, cada uma das quais pode produzir uma variedade de padrões dinâmicos, incluindo estruturas estáticas, osciladores e comportamentos caóticos.

Alguns desses AC elementares têm sido amplamente estudados (RAMOS et al., 2023), por sua simplicidade e capacidade de gerar complexidade a partir de regras locais simples, tornando-se uma área de pesquisa fundamental em teoria dos AC e ciência da complexidade. A Figura 3.2 ilustra o AC elementar de regra 30 após 250 passos de evolução.

Figura 3.2. Evolução do AC elementar de Wolfram (regra 30).



Fonte: (WOLFRAM, 2002).

O mesmo Stephen Wolfram publicou em 2002 o livro "*New Kind of Science*". Neste livro, Wolfram explora uma variedade de ideias e conceitos que emergiram de suas pesquisas sobre AC e sistemas complexos. Ele argumenta que muitos fenômenos naturais podem ser modelados e compreendidos através de simples regras computacionais, desafiando assim a visão tradicional da ciência baseada em equações matemáticas.

Ao longo do livro, Wolfram introduz o leitor a uma ampla gama de tópicos, desde a teoria dos AC até a natureza da computação e sua aplicação na compreensão de fenômenos naturais. Ele argumenta que, através da exploração desses sistemas computacionais simples, podemos obter percepções profundas sobre a complexidade do universo. "*A New Kind of Science*" gerou um intenso debate na comunidade científica e continua a influenciar várias áreas, incluindo engenharia, física, biologia, matemática e ciência da computação.

Essencialmente, um AC pode ser definido como um sistema dinâmico discreto que possui as seguintes características fundamentais (BOCCARA, 2010):

- São constituídos por um conjunto discreto de sítios;

- Evoluem em passos discretos de tempo;
- Cada sítio assume valores dentro de um conjunto finito de possibilidades;
- Os atributos de cada célula evoluem conforme as mesmas regras; e
- As regras de transição dos atributos de uma célula são função dos atributos de uma vizinhança de células.

Esta técnica tem permitido com sucesso a realização de modelagens não triviais de uma grande gama de sistemas complexos de forma relativamente simples em termos de implementação computacional e com possibilidade de se verificar o surgimento de comportamentos emergentes.

São diversas as possíveis configurações de modelagens por AC. Geralmente os AC são aplicados em modelos de células regulares e cúbicas, mas também existem estudos em outras configurações, como por exemplo em padrão hexagonal (LEON et al., 2011; TARIQ; KUMARAVEL, 2016), e mesmo em outras configurações de espaços não euclidianos como curvos (CHELGHOUM et al., 2004).

Normalmente os modelos por AC são determinísticos, mas existem muitos trabalhos com AC estocásticos (ATMAN; DICKMAN; MOREIRA, 2003; CAMPOS; DA ROCHA FILHO, 2013; ROY; PAUL; DAS, 2022). Ainda, a rede matricial pode tanto possuir limites fixos (rede não periódica), quanto ser periódica (BOCCARA, 2010). Ainda, existem variantes dos autômatos, como os Autômatos Híbridos (AH).

Classicamente, o termo AH é utilizado para sistemas que combinam elementos dinâmicos contínuos (ou analógicos) com autômatos finitos discretos (ALUR et al., 1995; LYNCH; SEGALA; VAANDRAGER, 2003; MOISEENKO et al., 2020; TRAN et al., 2022).

No entanto, há casos de hibridização em AC, como a que será realizada neste trabalho, em que a evolução do estado e do tempo ainda ocorre em passos discretos, mas a transição é controlada por uma função contínua (DENG et al., 2022; TOVAR et al., 2006). Isso abre uma ampla gama de possibilidades para modelagens computacionais mais precisas. Esse tipo de abordagem pode, em tese, facilitar a

obtenção de perfis de resultados mais próximos da realidade ‘macro’, embora seu uso se afaste da essência teórica da fundamentação dos autômatos celulares puros.

Assim, apesar de conceitualmente o valor dos AC ser muito expressivo, na prática a maioria das modelagens são realizadas em escalas não fundamentais e nem necessariamente plenamente discretas e regulares, nas quais muitas simplificações acabam naturalmente ocorrendo. Dessa forma, em algumas implementações os AC podem gerar resultados distantes dos considerados ideais ou mesmo aceitáveis.

Nesses casos, o uso de autômatos celulares híbridos, denominados neste trabalho por apenas autômatos híbridos (AH), onde as regras de transição são controladas por funções contínuas, pode contribuir para a obtenção de melhores resultados nas modelagens. As propriedades dos AC e AH aplicadas ao foco deste trabalho serão discutidas em detalhes mais adiante.

3.4 Vizinhos de busca clássicas no plano

Considerando uma rede matricial genérica, a mesma é formada por células, denominadas simplesmente de células matriciais, ou somente células. Aquelas células cujo valor (ou estado) inicialmente se destoa do restante da rede matricial são chamadas de sementes. Inicialmente o algoritmo elaborado especificamente para o tratamento desta rede deverá promover uma busca nas células da rede que são diretamente vizinhas às células das sementes.

As células desta vizinhança pesquisada que atendem certos critérios pré-estabelecidos, como possuir um estado diferente do estado da semente, irão alterar este seu estado inicial passando a possuir o estado da semente. Assim, é como se a célula da semente original tivesse se replicado, englobando agora também diversas células da sua primeira vizinhança.

Feito isto, sobre esta nova rede expandida de células alteradas (não mais sobre a semente), o algoritmo inicial de busca seria aplicado, gerando uma nova rede

expandida de células alteradas (transformadas) ainda maior. Este processo se repete sucessivamente até atingir os limites do ambiente.

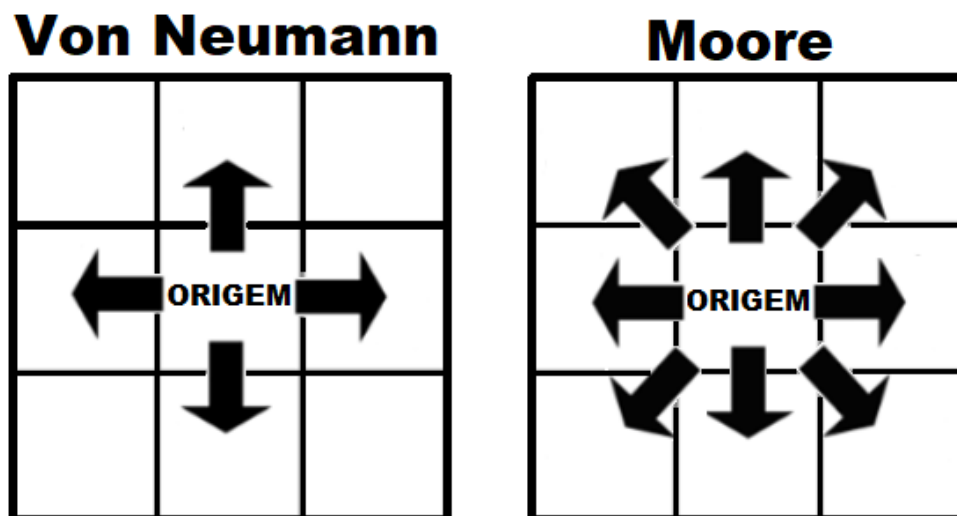
Nesse caso, as células matriciais atuam como autômatos, de modo que aquelas que mudam de estado em determinado momento induzem a mudança de estado de alguns de seus autômatos vizinhos no instante imediatamente seguinte. Dessa forma, essas células transformadas (autômatos) parecem ter a capacidade de se autorreplicar continuamente, seguindo um padrão e regras preestabelecidas.

Como visto, para se realizar uma aplicação por AC, torna-se necessário perfazer uma sucessão de pesquisas na rede matricial diretamente vizinha a semente e posteriormente às células transformadas. Esta pesquisa pode ser realizada por diferentes arranjos. Em um ambiente bidimensional as vizinhanças canônicas não orientadas tipicamente empregadas são a de Von Neumann e a de Moore (WOLFRAM, 1983; ZAITSEV, 2017).

No ambiente bidimensional, na vizinhança de Von Neumann (VFN) a busca inicial se dá pelas células vizinhas à semente de origem que possuem uma aresta em comum com a célula desta semente (total de quatro vizinhanças diretas). Ainda no ambiente bidimensional, na vizinhança de Moore (VM), além destas células já consideradas pela VFN, as células que possuem um vértice em comum a algum dos vértices da célula da semente também são consideradas (total de oito vizinhanças diretas).

A Figura 3.3 ilustra estes ambos arranjos de primeiras vizinhanças em uma matriz bidimensional.

Figura 3.3. Representação das primeiras vizinhanças de Von Neumann e de Moore a partir de uma célula de origem em uma matriz bidimensional.



Fonte: (BRAGA; MOITA; ALMEIDA, 2016).

Este tipo de verificação realizado pela VVN ou VM pode ser muito interessante para a realização de estudos e simulações dos mais diversos tipos, como estudos com autômatos celulares bidimensionais (CROOKS, 2017), modelagens da movimentação humana (BRAGA; MOITA; ALMEIDA, 2016) ou de veículos terrestres (BEHZADI; ALESHEIKH, 2014), entre outros (BRASIEL; LIMA, 2024).

Mesmo para a simulação do crescimento de grãos em metais, importantes e fundamentais estudos já foram e ainda são realizados em ambientes puramente bidimensionais (HALLBERG; WALLIN; RISTINMAA, 2010; JANSSENS, 2010; SROLOVITZ et al., 1988; SROLOVITZ; GREEST; ANDERSON, 1986; ZHOU et al., 2023).

Estas chamadas primeiras vizinhanças são constituídas pelo conjunto de células que atendem a estes critérios e que estão na vizinhança imediata da célula de origem considerada.

Como visto, a primeira vizinhança de Von Neumann é formada pelas quatro células próximas adjacentes pelas arestas diretas da célula de origem (ou as células acima, abaixo, direita, esquerda, considerando uma vista de topo). Já a primeira vizinhança de Moore, além das células já consideradas pela primeira vizinhança de Von Neumann, considera também as quatro células imediatamente próximas

adjacentes pelos vértices da célula de origem como sendo também parte da primeira vizinhança.

Já a segunda vizinhança da célula de origem considerada é formada por todas as células diretamente vizinhas das células que compõe a primeira vizinhança, que atendem aos critérios anteriores, e que naturalmente não façam parte da primeira vizinhança.

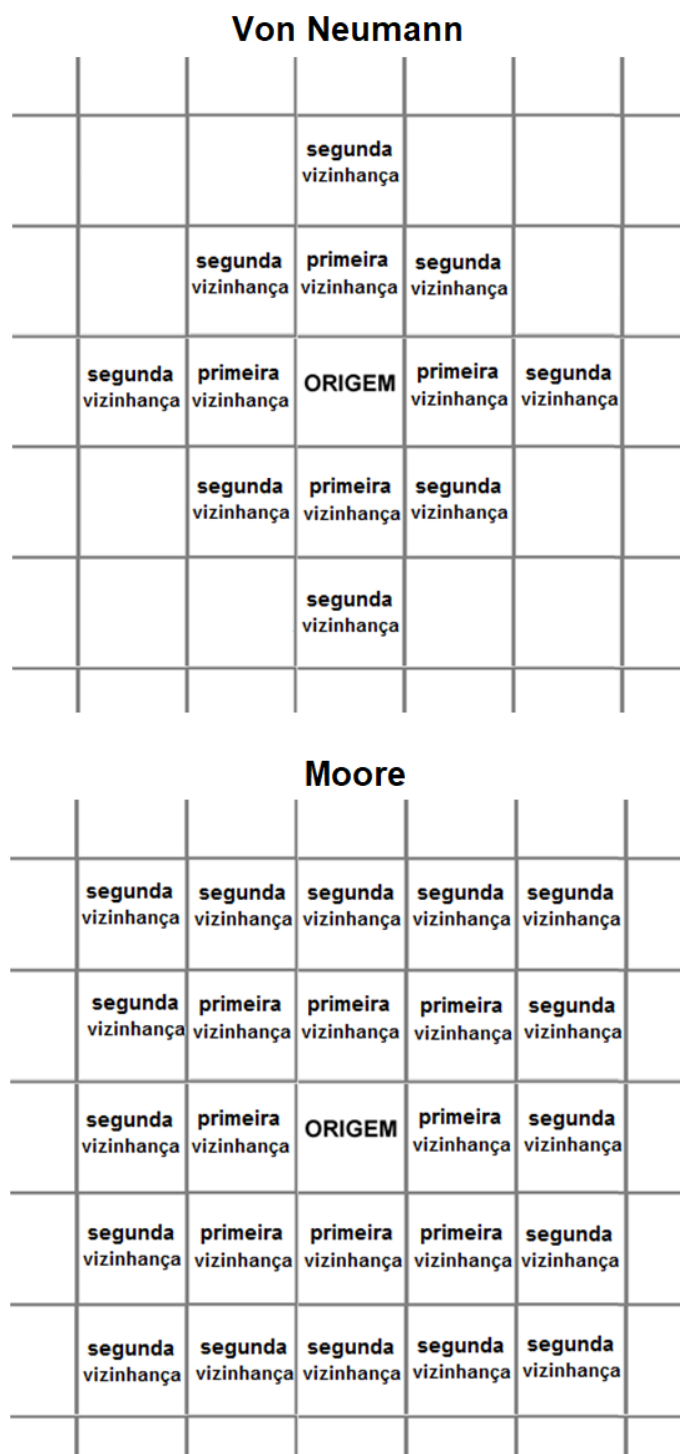
Continuando com este raciocínio, pode-se facilmente determinar, para ambas as formas de busca, quais são as células da matriz que correspondem à terceira vizinhança da célula de origem, e assim sucessivamente.

As células de cada vizinhança para uma dada forma de busca possuem algumas características comuns entre si, cujo conhecimento pode ser útil no entendimento do perfil de evolução da rede e conseqüentemente de suas aplicações teóricas e práticas.

Por exemplo, para a VVN, todas as células que pertencem a uma mesma vizinhança possuem o mesmo valor de distância Manhattan (soma das distâncias horizontais e verticais entre dois pontos no plano cartesiano). Já para a VM, todas as células que pertencem a uma mesma vizinhança possuem o mesmo valor de distância Chebyshev (maior distância vertical ou horizontal entre dois pontos no plano cartesiano) de cada célula que a compõe.

Para melhor ilustrar estas vizinhanças, a Figura 3.4 apresenta estas primeiras e segundas vizinhanças de uma célula de origem para ambos os critérios de busca (Von Neumann e Moore) em um ambiente bidimensional.

Figura 3.4. Representação no plano das células das primeiras e segundas vizinhanças de Von Neumann e de Moore.



Fonte: adaptado de (BRAGA; MOITA; ALMEIDA, 2016).

Considerando o critério de busca de Von Neumann, todas as células da primeira vizinhança possuem o valor da distância de Manhattan unitário em relação a origem, todas as células da segunda vizinhança possuem o valor da distância Manhattan de 2 em relação a célula de origem, e assim sucessivamente.

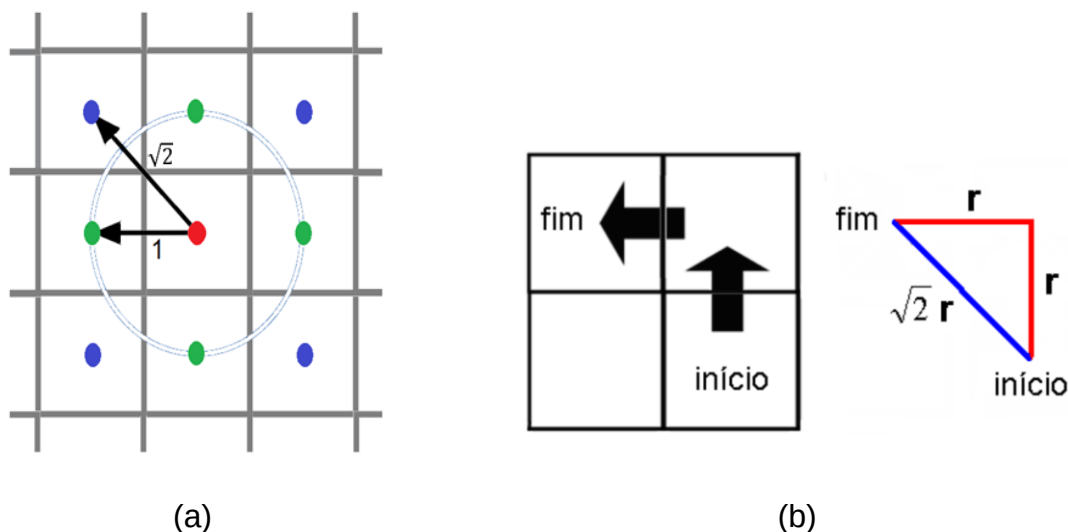
Já se considerando o critério de busca de Moore, todas as células da primeira vizinhança possuem o valor da distância de Chebyshev unitário em relação a célula de origem, todas as células da segunda vizinhança possuem o valor da distância de Chebyshev de 2 em relação a célula de origem, e assim sucessivamente.

Como consequência se tem que a distância Euclidiana (distância direta e linear entre dois pontos), que é um parâmetro fundamental em muitas aplicações da modelagem no mundo real, obtida entre a média das células de uma dada vizinhança pela busca pelo critério de Von Neumann terá valores menores que a respectiva média das células da mesma vizinhança pelo critério de Moore.

Na verdade, considerando que a célula de origem está no centro de um eixo cartesiano imaginário, exatamente ao longo dos eixos cartesianos ambos os critérios de busca se equiparam em termos de distância Euclidiana. Entretanto, ao se distanciar deste eixo, as diferenças aparecem e aumentam até um valor máximo de $\sqrt{2}$ aos 45° dos eixos cartesianos. A Figura 3.5 ilustra estas diferenciações.

Diferenças geométricas dinâmicas das mais diversas (PAROLIN; IRALA; DARÓS, 2024), mesmo que exclusivamente dentro do espaço Euclidiano, são pontos importantes a serem considerados. Entretanto, neste caso específico a situação ainda é mais crítica, pois pela modelagem por AC é feita a utilização de um espaço discreto para a representação de um ambiente real contínuo (BANDI; THALMANN, 2000; BRAGA; MOITA; ALMEIDA, 2016; ROGSCH, 2016; SEITZ; KÖSTER, 2012), o que por si somente resulta em diferenças como ilustrado pela Figura 3.5.

Figura 3.5. Visualizações da diferença entre a distância Euclidiana de uma célula da diagonal com uma célula alinhada aos eixos para as primeiras vizinhanças.



Legenda (a):

- Círculos verdes indicam o centro das células da primeira vizinhança de Von Neumann, e adicionalmente também o centro das células da primeira vizinhança de Moore que estão sobre os eixos;
- Círculos azuis indicam o centro das células da primeira vizinhança de Moore que estão sobre as diagonais;
- Círculo vermelho indica o centro da célula de origem;
- Representação do círculo grande passando pelos círculos verdes indica toda a região a distância Euclidiana “1” do centro.

Legenda (b):

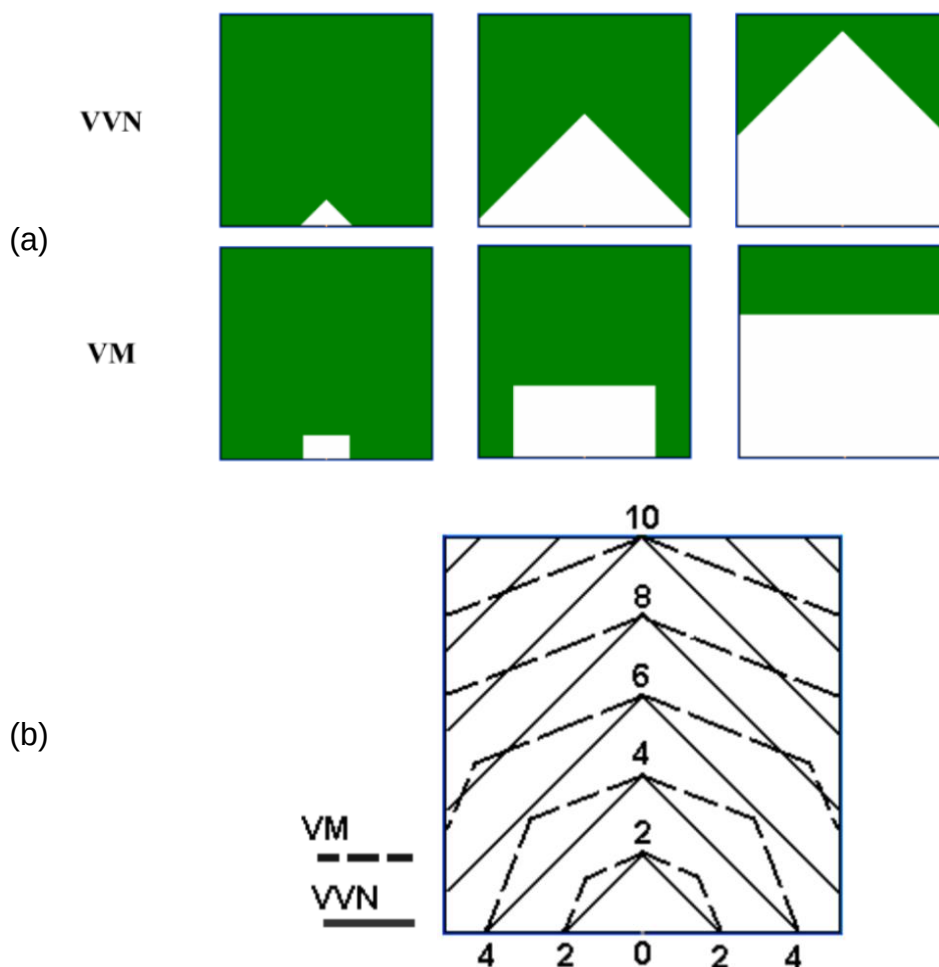
- r é a largura da célula da matriz simulada.

Fonte: (a) do autor, (b) (BRAGA; MOITA; ALMEIDA, 2016)

Estas diferenças geométricas dinâmicas advindas da discretização e do modo de evolução por sobre as vizinhanças devem ser mais bem compreendidas, pois podem impactar nos resultados, portanto, na adequação da modelagem na solução do problema.

Estudos em ambientes bidimensionais em campos diversos já relataram mais detalhadamente algumas destas diferenças (BRAGA; MOITA; ALMEIDA, 2016; PORZYCKI; WĄS, 2023; ROGSCH, 2016). A Figura 3.6 apresenta representações de uma matriz bidimensional quadrada, na qual o algoritmo de busca e exploração foi empregado, por ambos os critérios de pesquisa, começando pelo centro do lado inferior da matriz.

Figura 3.6. Representações da evolução das pesquisas por VVN e VM (matriz 2D em ambiente quadrado com a busca iniciando no centro do lado inferior).



Legenda:

Em (a) a evolução das pesquisas em três momentos distintos, onde a região verde apresenta a área não pesquisada, e região branca a área pesquisada.

Em (b) linhas (segmentos de retas) de mesma distância do centro do lado inferior para ambas as pesquisas (VVN e VM).

Fonte: (BRAGA; MOITA; ALMEIDA, 2016).

Na Figura 3.6a se apresenta a evolução da pesquisa em três momentos distintos (região verde identifica a área não pesquisada, e região branca a área pesquisada). Na Figura 3.6b se apresenta o impacto que estas diferentes formas de pesquisa (VVN e VM) tem sobre o perfil de distâncias obtido. É nítida as diferenças tanto do perfil de evolução (Figura 3.6a) quanto dos valores encontrados (Figura 3.6b), e nenhum dos dois se equivale a uma circunferência (formato ideal que seria obtido, se não houvesse a discretização do ambiente).

Entretanto, apesar de modelagens em ambientes tridimensionais também já terem trazido à tona determinados destes pontos (ALEKSANDROV; ZLATANOVA; HESLOP, 2021; OLIVEIRA et al., 2006), este é um assunto ainda aberto para maior compreensão e detalhamento no contexto da modelagem do crescimento de grãos recristalizados.

3.5 Fundamentos históricos da metalografia

Toda a modelagem computacional proposta neste trabalho só é possível devido ao conhecimento acumulado em décadas de observações metalográficas. Assim, a metalografia, ou a grosso modo o estudo microscópico da estrutura e das propriedades dos metais e suas ligas, é a principal fonte do conhecimento necessário que possibilita se realizar as etapas de verificação e validação das modelagens. Portanto a história e evolução da metalografia são importantes.

Lentes simples para ampliação derivadas de cristais naturais já são empregadas desde o século VIII a.C., mas os óculos somente foram inventados em Veneza na Itália em torno do ano de 1280. Da invenção dos óculos, mais de 4 séculos se passaram para o surgimento dos primeiros microscópios ópticos simples, em torno de 1590 (ARAKI, 2017). Não é conhecido o inventor, sendo vários os nomes possíveis. Sabe-se que Galileo Galilei fez experimentos com microscopia óptica em 1608.

Em relação aos primeiros trabalhos registrados da observação da superfície de metais por microscopia destaca-se o estudo pioneiro de Robert Hooke, que em 1665 publicou "*Micrographia*", onde descreveu e reproduziu em baixa ampliação detalhes da ponta de uma agulha e da borda de uma navalha (D., 1920). Em 1722 Reaumur publicou um estudo contendo imagens obtidas por microscopia de fraturas em barras de aço e ferro (D., 1920).

Em 1808, Widmanstätten estudou a estrutura de meteoritos, polindo uma seção plana e aquecendo-a até que os constituintes se diferenciassem em cor devido à oxidação, introduzindo assim o método *heat-tinting* (tintura térmica). A estrutura desses ferros é tão grosseira que a ampliação é desnecessária, mas o método deu

pistas para trabalhos posteriores (D., 1920). Entretanto, a metalografia como conhecida atualmente surgiu apenas em 1863.

Foi o inglês Henry Clifton Sorby quem introduziu a técnica de seccionamento dos metais com o consequente polimento e ataque químico de sua superfície, para posterior observação ao microscópio óptico, e ainda associado a técnica da microfotografia para registro das imagens (GARCIA-GUINEA et al., 2016; SORBY, 1864). Por isso Sorby é considerado o pai da metalografia.

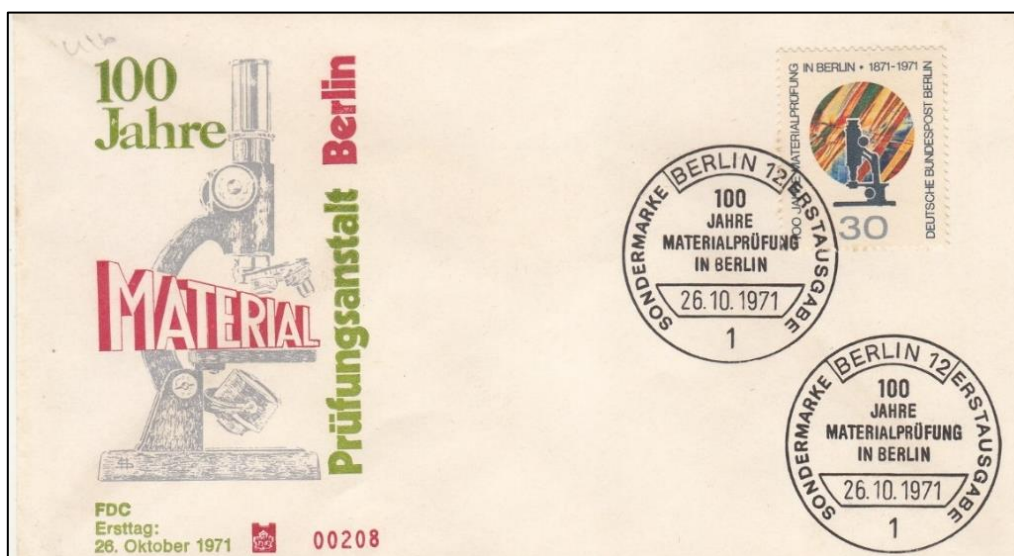
Apesar do estabelecimento dos fundamentos da técnica, foi apenas no início da década de 1880 que alguns desafios relacionados à iluminação, visualização e microfotografia em maiores ampliações foram superados (EDYVEAN; HAMMOND, 1997). Isso permitiu que o próprio Sorby, em suas obras clássicas publicadas em 1884 e em 1886 (EDYVEAN; HAMMOND, 1997), apresentasse a técnica de observação metalográfica aprimorada e identificasse detalhes importantes de várias das estruturas fundamentais dos aços, incluindo a perlita (SORBY, 1886).

Sua técnica chamou a atenção e rapidamente se espalhou para outros centros de pesquisas, notadamente nos Estados Unidos e Alemanha (Figura 3.7). Mesmo na época da introdução da nova técnica, as imagens obtidas das micrografias já ajudaram a melhor compreender algumas características conhecidas, como porque uma pequena quantidade de certos elementos químicos influenciava tanto no comportamento de alguns aços (EDYVEAN; HAMMOND, 1997).

No Brasil sabe-se a metalografia foi lecionada na Escola Politécnica de São Paulo a partir de 1910, e que no Instituto de Pesquisas Tecnológicas de São Paulo existe um laboratório próprio para pesquisas metalográficas desde 1926 (COLPAERT, 1965).

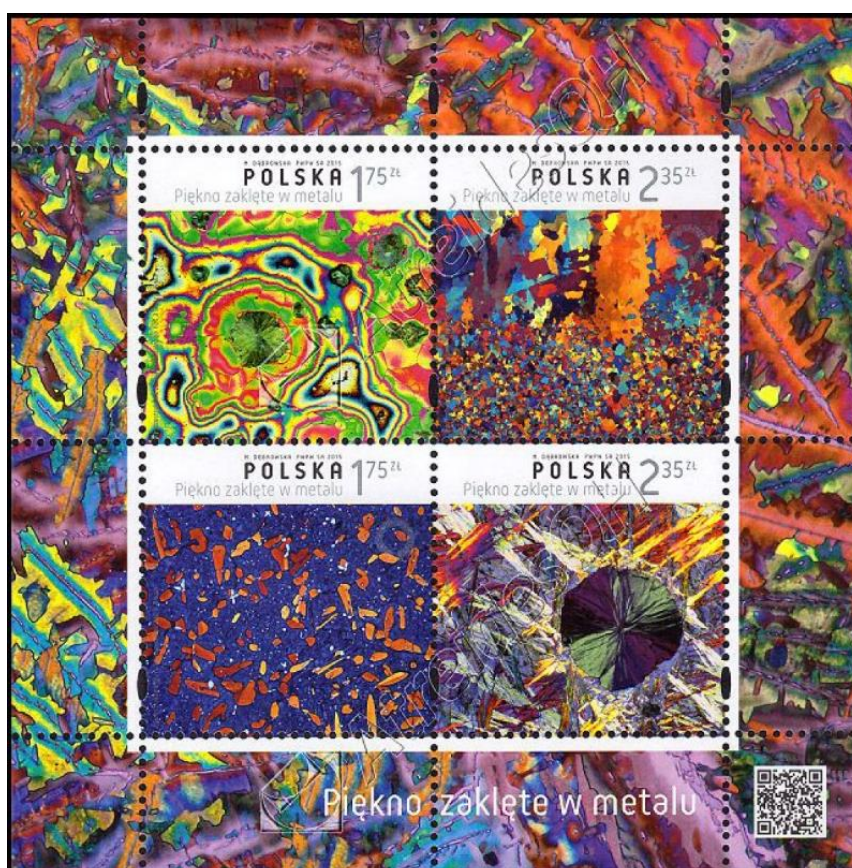
Assim, passados mais 160 anos de observações metalográficas, grande aprimoramento da técnica original em si e dos equipamentos ocorreu, permitindo que imagens incríveis e reveladoras deste universo microscópico sejam obtidas (Figura 3.8).

Figura 3.7. Peça filatélica com selo postal, carimbo comemorativo e *cachet* emitida em 1971 em homenagem ao então 100 anos da metalografia na Alemanha.



Fonte: imagem de envelope filatélico emitido pela então Alemanha Ocidental, 1971.

Figura 3.8. Imagens metalográficas diversas.

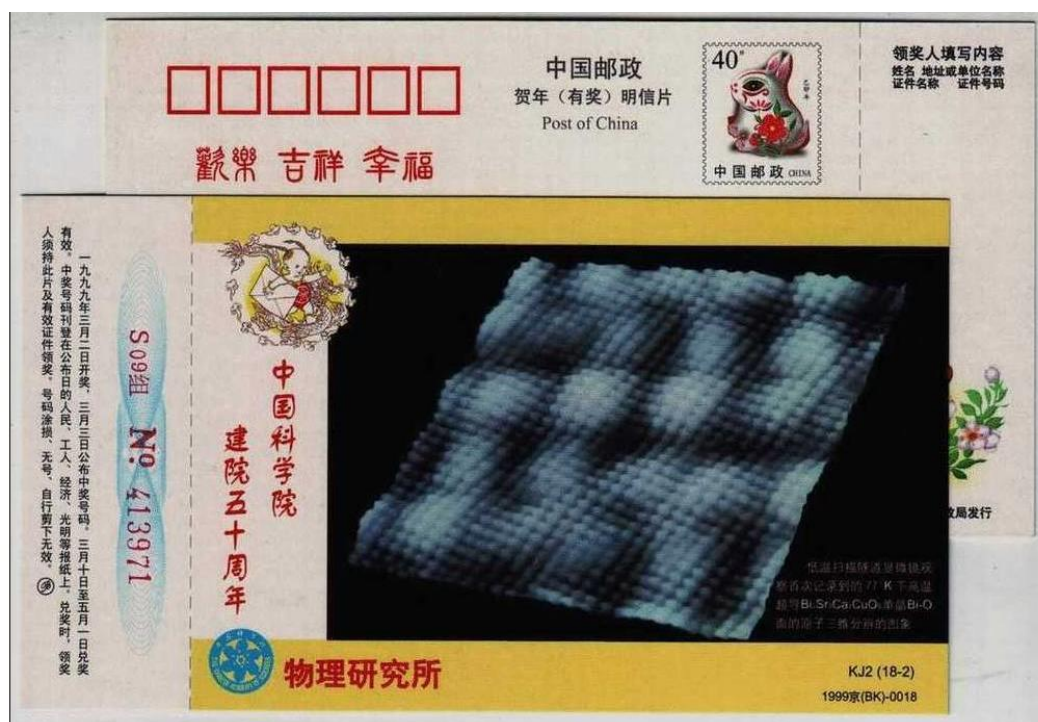


Fonte: Imagem de bloco de selos postais emitido pela Polônia, 2015.

Ao longo do tempo diversas novas ferramentas e tecnologias de observação foram descobertas e aprimoradas, como o microscópio eletrônico em 1937 por Ernest Ruska e Max Knoll, que existem comercialmente nas modalidades de varredura (aumento de até 20.000 X) e de transmissão (aumento de até 300.000 X) (RIOS; PADILHA, 2007).

Chegou-se ao ponto de se conseguir observar em certas condições até mesmo a própria superfície atômica (MURR, 2009), pela microscopia de campo iônico, introduzida em 1951 por Erwin Wilhelm Müller, ou até a nível de sub-angstroms pela microscopia de tunelamento de varredura, cujos descobridores Gerd Binnig e Heinrich Rohrer receberam o Prêmio Nobel da Física de 1981. Na Figura 3.9 se ilustra uma imagem obtida desta técnica.

Figura 3.9. Imagem da superfície a nível atômico de material que apresenta supercondutividade a baixa temperatura, obtida por microscopia de tunelamento.



Fonte: imagem feita pelo Instituto de Física da China, em homenagem aos 50 anos da Academia Chinesa de Ciências, em inteiro postal da República Popular da China emitido em 1991.

Da possibilidade de se visualizar a superfície dos metais em alta ampliação, surgiram vários estudos e teorias, com o respectivo conhecimento associado adquirido contribuindo sobremaneira para o progresso atual da humanidade, e permitindo a realização de sua modelagem computacional. Vai-se detalhar a seguir os alguns fundamentos clássicos sobre a recristalização, a evolução microestrutural associada, e da parametrização dimensional convencional.

3.6 A recristalização

Essencialmente recristalização é a formação de uma nova estrutura de grãos em um material deformado, por meio da formação e migração de contornos de grão de alto ângulo (aqueles com desorientação maior que 10 a 15°), impulsionada pela energia armazenada da deformação (DOHERTY et al., 1998).

A recristalização pode ocorrer inteiramente dentro de uma única fase cristalográfica estável, como por exemplo em alumínio puro, cobre puro, titânio α , ou pode também ocorrer associada a uma mudança de fase, como por exemplo no aço carbono em processo de recozimento (PADILHA; SICILIANO JR., 2005; PEDRAZA; COUTINHO; PAULA E SILVA, 1983).

A recristalização é influenciada por diversos fatores, como a temperatura de recozimento (influencia na taxa de nucleação e de crescimento dos grãos recristalizados), o grau de deformação plástica, o tamanho dos grãos iniciais (grãos menores tendem a recristalizar mais rapidamente), a taxa de aquecimento, e a ocorrência de precipitados e elementos em solução sólida (PEDRAZA; COUTINHO; PAULA E SILVA, 1983; REED-HILL, 1982).

Simplificadamente, a recristalização ocorre em etapas (DOHERTY et al., 1998), como a recuperação (discordâncias se rearranjam reduzindo a energia interna sem alterações significativas na estrutura cristalina), nucleação (núcleos surgem ao longo do material, preferencialmente em regiões de mais alta energia), e o crescimento de

grãos (os núcleos termodinamicamente estáveis, chamados embriões, se expandem substituindo os antigos grãos deformados).

A visualização da recristalização e de sua evolução, assim como de seus efeitos, pode ser realizada por diversos meios, como microscopia ótica ou eletrônica, ensaios mecânicos, ensaios de dureza, difração de elétrons retroespalhados - EBSD⁶ (*Electron Back Scatter Diffraction*), entre outros (FERREIRA et al., 2014; GONÇALVES, 2015).

Assim a recristalização desempenha um papel importante nos materiais metálicos, sendo aplicada em situações como no tratamento de chapas laminadas para aumentar a ductilidade e reduzir as tensões residuais internas, na prevenção da fragilização ao mitigar os efeitos da deformação plástica e melhorar a resistência à fratura, e na otimização de propriedades mecânicas (PADILHA; SICILIANO JR., 2005).

3.7 Crescimento dos grãos na recristalização – modelo JMAK

Apesar da natureza deste trabalho ser sobre o uso de métodos computacionais aplicados, a apresentação do conhecimento analítico já existente é importante para sua fundamentação, até porque os estudos clássicos de simulação de recristalização têm se utilizados destes (HESSELBARTH; GÖBEL, 1991).

Dos trabalhos pioneiros de Johnson, Mehl, Kolmogorov e Avrami foi estabelecido a denominada teoria JMAK para a descrição fenomenológica da cinética de evolução do crescimento de grãos recristalizados (OLIVEIRA et al., 2006; RIOS et al., 2005b). Esta teoria supõe que os núcleos na fase de crescimento, antes do encontro com outros grãos (*impingement*), sejam esféricos, que a velocidade de crescimento seja constante e uniforme, que todos os núcleos sejam formados logo no

⁶ Padilha, Â.F., Sandim, H.R. EBSD (*Electron Backscatter Diffraction*) para Iniciantes. USP, 2021. Disponível em <https://www.researchgate.net/publication/353040628_EBSD_Electron_Backscatter_Diffraction_para_Iniciantes>. Acessado em 09 jan. 2025.

início, e, que os núcleos estejam distribuídos aleatoriamente no interior da matriz. Salvo indicação contrária, estes também serão os critérios empregados nas modelagens computacionais com AC e AH a serem realizadas neste trabalho.

O primeiro passo da teoria JMAK é simular o crescimento dos novos grãos individuais como se eles evoluíssem independentemente uns dos outros. O volume total recristalizado obtido desta maneira tende a ser naturalmente maior do que o volume recristalizado real, pois na realidade os grãos formados limitam o crescimento dos demais. Assim se tem as seguintes equações:

$$V_e = \left(\frac{4\pi R_e^3}{3} \right) \quad (3.1)$$

$$V_{et} = V_e \times N_s \quad (3.2)$$

$$G_0 = \frac{dR_e}{dt} \quad (3.3)$$

Onde

V_e é o volume recristalizado estendido de um grão (equação da esfera);

V_{et} é o volume recristalizado estendido total dos grãos;

N_s é o número de sementes ou embriões;

R_e é o raio do núcleo estendido;

t é o tempo transcorrido;

G_0 é a taxa de crescimento do raio dos grãos.

O modelo JMAK pressupõe que G_0 é constante, independente do tempo e da fração recristalizada. Reescrevendo as equações 3.1, 3.2 e 3.3, obtêm-se:

$$V_{et} = \frac{4\pi N_S G_0^3 t^3}{3} \quad (3.4)$$

Do modelo JMAK, pode-se obter a relação entre a fração volumétrica transformada real (X_r) em função de V_{et} , a saber:

$$X_r = 1 - \exp(-k_i V_{et}^{k_j}) \quad (3.5)$$

Onde k_i e k_j são constantes genéricas. Reescrevendo as equações 3.4 e 3.5, obtêm-se as seguintes equações fenomenológicas fundamentais do modelo JMAK:

$$X_r = 1 - \exp \left[-k_i \left(\frac{4\pi N_S G_0^3 t^3}{3} \right)^{k_j} \right] \quad (3.6)$$

ou

$$X_r = 1 - \exp(-kt^m) \quad (3.7)$$

A equação 3.7, ou equação JMAK (OLIVEIRA et al., 2006), é uma reescrita mais geral da equação 3.6, onde k e m são constantes empíricas, sendo k a constante

de proporcionalidade do tempo (constante cinética) e m o expoente do tempo (expoente de Avrami).

3.8 Caminho microestrutural

Sobre os novos grãos formados por recristalização, dois tipos de interfaces externas se destacam. O primeiro tipo de interface ocorre entre o grão recristalizado em formação e a microestrutura originária. No início da formação dos novos grãos este é o tipo de interface dominante. Entretanto, quando os grãos recristalizados se tocam, surge um novo tipo de interface, formado na superfície de encontro dos novos grãos. No decorrer da recristalização este tipo de interface cresce em quantidade, até que somente esta interface exista, indicando o fim da recristalização.

Para melhor distinção, a quantidade de área superficial nas interfaces entre regiões recristalizadas e não recristalizadas por unidade de volume será indicada por SV_{RN} , e a quantidade de área superficial nas interfaces entre duas regiões recristalizadas por unidade de volume será indicada por SV_{RR} . Estas grandezas contribuem na caracterização da evolução da microestrutura na recristalização. Sendo S_{VEX} a área interfacial estendida total, têm-se pela expressão de DeHoff (RIOS; PADILHA, 2003) que:

$$SV_{RR} = \frac{SV_{RN}}{1-X_r} \quad (3.8)$$

Aplicando-se a equação da área superficial de uma esfera (S_e) se obtêm:

$$S_e = 4 \pi R_e^2 \quad (3.9)$$

$$SV_{RR} = 4 \pi R_e^2 N_s \quad (3.10)$$

Trabalhando as Equações 3.8 e 3.10, obtêm-se:

$$SV_{RN} = (1 - X_r)(4 \pi R_e^2 N_s) \quad (3.11)$$

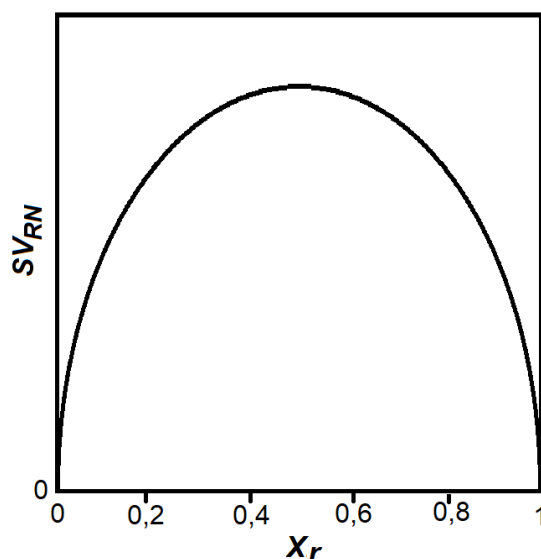
Que desenvolvida (OLIVEIRA et al., 2006; RIOS; PADILHA, 2003b) resulta:

$$SV_{RN} = 3 \left(\frac{4 \pi N_s}{3} \right)^{\frac{1}{3}} (1 - X_r) \left[\ln \left(\frac{1}{1 - X_r} \right) \right]^{\frac{2}{3}} \quad (3.12)$$

Essa equação foi estabelecida para representar o caminho microestrutural nas condições de distribuição aleatória dos grãos e nucleação por saturação de sítios (OLIVEIRA et al., 2006). O caminho microestrutural é uma curva relevante, amplamente empregada no estudo da evolução de processos de recristalização (GODIKSEN, 2007; VANDERMEER; JENSEN, 1996).

Somente para ilustração, apresenta-se na Figura 3.10 um gráfico ilustrativo da evolução do caminho microestrutural, onde se apresenta a evolução esquemática de SV_{RN} em função de X_r .

Figura 3.10. Gráfico ilustrativo da evolução do caminho microestrutural, ou SV_{RN} (quantidade de área superficial nas interfaces entre regiões recristalizadas e não recristalizadas por unidade de volume) versus X_r (fração volumétrica transformada real).



Fonte: do autor.

Na Figura 3.10 se observa que o valor de SV_{RN} se inicia nulo, cresce até um ponto de máximo, e volta a reduzir até ficar nulo novamente. Isto acontece pois no início toda a área interfacial é entre o(s) núcleo(s) e a fase originária (considerada como aproximadamente nula). Com o avançar da recristalização a área dos grãos formados começa a crescer, até atingir um ponto de máximo, devido às restrições no crescimento causado pela evolução dos outros novos grãos. A partir deste ponto seu valor começa a diminuir, pois a maior parte da área superficial passa a se dar entre os próprios novos grãos recristalizados. Esta diminuição somente termina quando o processo de recristalização se encerra, não havendo, portanto, mais nenhuma interface com a área originária pois toda esta já foi recristalizada.

3.9 Aspectos cinéticos da recristalização por modelagem 3D com AC

Na literatura (OLIVEIRA et al., 2006), por meio de uma modelagem computacional com AC 3D realizada através da pesquisa de vizinhanças pelas faces, determinou-se numericamente, utilizando um ajuste polinomial de curvas, que o volume de um único grão evolui em função do laço computacional (*loop* do algoritmo), também denominado tempo discreto (τ), conforme a seguinte relação:

$$v_e(\tau) = \begin{cases} 0, & \text{para } \tau = 0 \\ \frac{4}{3}\tau^3 - 2\tau^2 + \frac{8}{3}\tau - 1, & \text{para } \tau > 0 \end{cases} \quad (3.13)$$

Desprezando os termos de menor ordem, tem-se:

$$v_e(\tau) \cong \frac{4}{3}\tau^3 \quad (3.14)$$

Trabalhando a Equação 3.14 com a Equação 3.2, encontra-se:

$$v_{et}(\tau) = N_s \frac{4}{3}\tau^3 \quad (3.15)$$

Ainda, considerando N_v como o número de sementes ou embriões por unidade de volume e v_m o volume do metal simulado, tem-se que:

$$N_v = N_s/v_m \quad (3.16)$$

Substituindo a Equação 3.16 na Equação 3.15, obtêm-se:

$$\frac{v_{et}(\tau)}{v_m} = N_v \frac{4}{3} \tau^3 \Rightarrow X_{vex} = N_v \frac{4}{3} \tau^3 \quad (3.17)$$

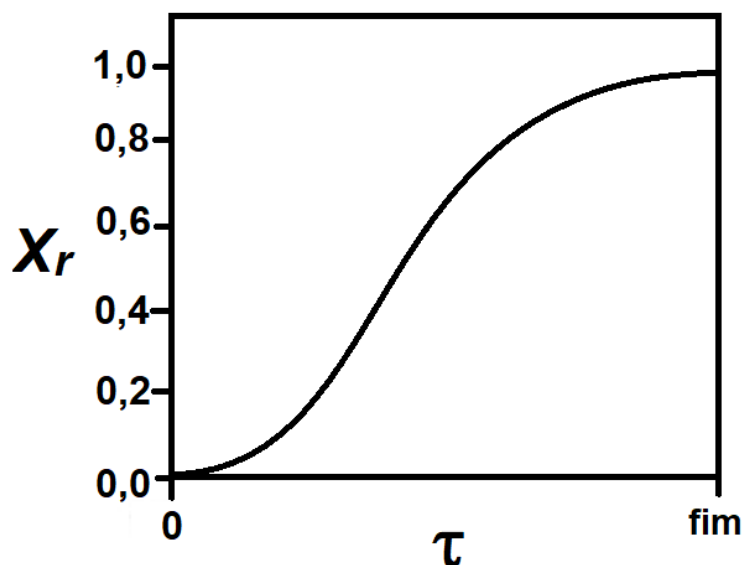
Onde X_{vex} é a razão entre o volume recristalizado e o volume total em um determinado tempo discreto, ou a fração transformada global. Assim o X_{vex} é uma razão geométrica idealizada no sentido que não considera o impedimento causado pelos grãos já recristalizados, diferentemente do X_r que é a razão volumétrica real. Ambos se relacionam pelo modelo de Avrami (VANDERMEER; RATH, 1989), a saber:

$$X_r = 1 - \exp(-X_{vex}) \quad (3.18)$$

Substituindo a Equação (3.17) na Equação (3.18), obtêm-se a Equação (3.19) que relaciona a fração recristalizada volumétrica real com o tempo discreto, cujo formato ilustrativo, típico de uma função de Avrami (SHIRZAD; VINEY, 2023), é apresentado na Figura 3.11.

$$X_r = 1 - \exp\left(-N_v \frac{4}{3} \tau^3\right) \quad (3.19)$$

Figura 3.11. Gráfico ilustrativo tipo Avrami da proposta de evolução sigmoide de X_r ao longo do tempo discreto (τ), entre o início da simulação ($\tau = 0$) e seu fim.



Fonte: do autor.

Por fim, um exemplo da aplicação prática de curvas cinéticas da fração transformada em função do tempo, como por exemplo as do tipo JMAK apresentadas, está na possibilidade de geração de curvas tipo TTT (tempo, temperatura e transformação), já que estas são em essência “uma representação gráfica da cinética isotérmica da reação para diversas temperaturas” (RIOS; PADILHA, 2007, p. 122).

3.10 Fundamentos de estereologia quantitativa

Uma das principais análises realizadas na caracterização de materiais é a determinação do tamanho médio dos grãos, sendo essa uma métrica amplamente utilizada tanto no meio acadêmico quanto na indústria.

O tamanho dos grãos está diretamente relacionado a diversas propriedades mecânicas e térmicas dos materiais. Por exemplo, usualmente a redução de tamanho de grão pode ser uma estratégia visando melhorar a resistência mecânica conforme a relação de Hall-Petch (CALLISTER JR.; RETHWISCH, 2017). Assim, a

determinação e controle do tamanho de grão desempenha um papel fundamental no desenvolvimento de novos materiais e no controle de qualidade industrial.

A técnica mais difundida para essa medição utiliza imagens bidimensionais obtidas por microscopia óptica ou eletrônica. A análise pode ser feita de diversas formas, incluindo a observação direta em um corpo de prova metalográfico, a utilização de programas de processamento de imagens ou a interpretação de micrografias previamente obtidas. Atualmente, esses métodos possibilitam uma avaliação precisa e reprodutível da microestrutura do material.

O cálculo do diâmetro médio dos grãos frequentemente se baseia no número de intersecções entre os contornos dos grãos e uma linha-teste sobreposta à imagem, que pode assumir diferentes formatos, como linhas retas ou circulares (ASTM, 2024). A partir desses dados, aplicam-se fórmulas específicas. Em casos mais avançados, algoritmos computacionais também podem ser empregados para determinar automaticamente os contornos e áreas dos grãos, aumentando a precisão e a eficiência do processo.

Para materiais policristalinos monofásicos e isotrópicos, têm-se as seguintes equações (RIOS; PADILHA, 2007):

$$Pl = Nl \quad (3.20)$$

$$d = \frac{1}{Pl} \quad (3.21)$$

$$Sv = 2 Pl \quad (3.22)$$

Ou ainda:

$$Sv = \frac{2}{d} \quad (3.23)$$

Onde:

Nl é o número de objetos interceptados por unidade de comprimento da linha-teste [m^{-1}];

Pl é o número de interseções por unidade de linha-teste [m^{-1}];

d é o diâmetro médio dos grãos [m]; e

Sv é a área superficial por unidade de volume-teste [m^2/m^3], uma medida da quantidade de interface entre os grãos em uma determinada quantidade de material.

Pela importância, a Equação (3.23) merece uma maior discussão. Ao se dividir a área superficial pelo volume de uma esfera ideal, obtêm-se Sv' :

$$Sv' = \frac{\text{Área Superficial}}{\text{Volume Esfera}} = \frac{\pi D^2}{(\pi D^3)/6} = \frac{6}{D} \quad (3.24)$$

Assim:

$$Sv' = 3 Sv \quad (3.25)$$

Dessa forma, a Equação (3.23) é uma aproximação estatística que leva em conta a contagem de interseções entre as superfícies dos grãos e linhas-teste em cortes bidimensionais, considerando que os grãos não são esferas perfeitas, mas uma coleção de formas poligonais tridimensionais sofisticadas.

Essa fórmula funciona bem em metalografia porque fornece uma estimativa prática da área superficial total em função do diâmetro médio dos grãos. Isto simplifica a análise de materiais reais, onde grãos não são obviamente perfeitamente esféricos, até porque as esferas não são capazes de provocar a perfeita tesselação do espaço 3D.

Por fim, para conversão do diâmetro médio (d), obtido pelo método do intercepto, estando este em cm, para o tamanho de grão ASTM, muito empregado industrialmente, pode-se usar a seguinte equação (ASTM, 2024):

$$G = 10 - 6,6439 \log_{10}(d) \quad (3.26)$$

Onde:

G é o tamanho de grão ASTM.

3.11 Tesselação microestrutural do espaço 3D

A completa tesselação do espaço 3D, ou o seu preenchimento sem deixar vazios, é um assunto de grande relevância na Engenharia de Materiais, e há muito tem atraído a atenção.

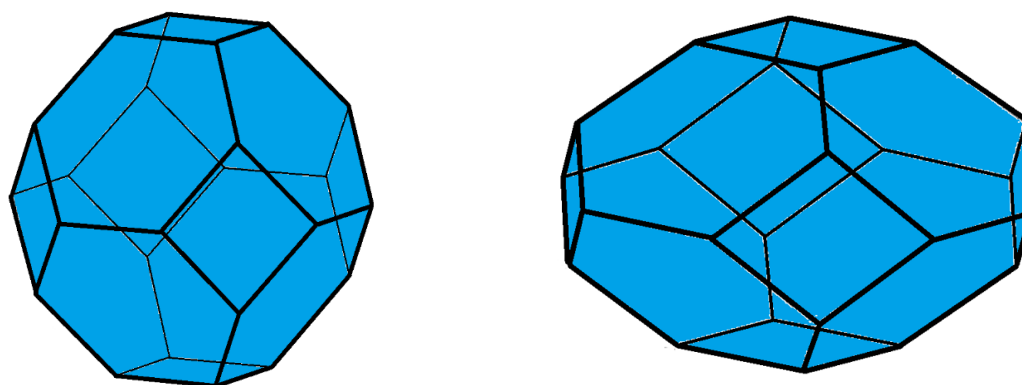
São diversos os poliedros de preenchimento ou tesselados no espaço tridimensional como, por exemplo, cubos, paralelepípedos, dodecaedros rômnicos, hexaedros rômnicos, prismas hexagonais, prismas triangulares retos, e certos tetracaidecaedros (TDC).

Destes poliedros, no estudo microestrutural uma categoria se destaca na literatura, os TDC. Os TDC são em essência uma classe composta por poliedros convexos com 14 faces. Alguns TDC tem especial relevância em ciência dos materiais, entre eles o ortotetracaidecaedro (OTC), e o tetracaidecaedro alongado

(ATC). Tanto o OTC quanto o ATC são poliedros com 8 faces hexagonais e 4 faces quadriláteras (14 faces totais), 24 vértices e 36 arestas, atendendo ao teorema de Euler, como todos os demais poliedros convexos.

Uma grande diferença entre o OTC e o ATC está na forma como suas faces se arranjam no espaço. O OTC possui uma estrutura mais uniforme e equiforme, com suas faces formadas por hexágonos regulares e quadrados, sendo inclusive um poliedro de Arquimedes, convexo e não regular (CUNDY; ROLLETT, 1961). Já o ATC é mais alongado com suas faces formada por hexágonos não regulares e losangos. Para melhor exemplificar as diferenças, na Figura 3.12 se apresenta uma representação esquemática de estruturas tipo OTC e ATC.

Figura 3.12. Representação esquemática de estruturas tipo OTC e ATC.



Fonte: adaptadas pelo autor.

Mesmo excluindo os estudos em escala atômica, onde a rede CCC (cúbica de corpo centrado) tetraédrica desempenha um papel fundamental, existem inúmeros trabalhos realizados em escalas superiores (nano, micro, meso e macro) que investigam ou consideram essas formas geométricas em uma grande diversidade de materiais como metais, polímeros, compósitos, cerâmicas e celulares.

Nesta linha, um trabalho primordial e clássico é o de Lord Kelvin (THOMSON, 1887), um dos mais profícuos cientistas do final do século XIX (LLOYD, 1980). Outro

trabalho clássico é o de Cahn, que influenciou dezenas de estudos posteriores (CAHN, 1956).

Por exemplo, existem vários estudos considerando o OTC como forma de representação granular para diversos metais em certas condições (RIOS; GLICKSMAN, 2006; TAKAYAMA et al., 1991; UMEMOTO; HAI GUO; TAMURA, 1987), e mesmo outros materiais como cerâmicas (PAYTON, 2012). Em um estudo experimental, a estrutura tipo OTC já foi encontrada em uma formação granular de uma classe de liga de alumínio (RHINES; PATTERSON, 1982).

Em relação ao ATC, este também tem grande relevância, sendo já conhecido e estudado há muito tempo, sendo amplamente encontrado, por exemplo, em espumas e bolhas (JIANG et al., 2017; SULLIVAN; GHOSH; LERCH, 2008; THIYAGASUNDARAM; SANKAR; ARAKERE, 2010), ou mesmo considerado em estudos de certos nanometais (DARNBROUGH; ROEBUCK; FLEWITT, 2015). Assim o ATC também apresenta várias aplicações na Engenharia de Materiais (MARTINKOVIČ; MINARIK, 2014; THIYAGASUNDARAM; SANKAR; ARAKERE, 2010; THOMSON, 1887).

Entretanto, entre ambos, para a simulação da recristalização equiaxial em metais, é o OTC que se destaca sendo considerado de uso preferível, pois possui uma forma que se adapta melhor a certas configurações geométricas ortorrômbricas, sendo de uso interessante onde a tesselação tridimensional de uma estrutura mais simétrica e mais próxima de um formato equiaxial é preferível. Além disso, como será visto logo a frente, é o OTC/ATC as formas geométricas regulares conhecidas que mesmo isoladamente pode preencher o espaço 3D com as menores energias.

Entretanto, além dos poliedros simples, estruturas compostas formadas por combinações de poliedros também podem fazer a completa tesselação do espaço, como octaedros em conjunto com tetraedros, ou como a estrutura Weaire-Phelan (WP), composta por um dodecaedro irregular associado a uma classe de tetraidecaedro (BRAKKE, [s.d.]; INCHBALD, 2013; WEAIRE; PHELAN, 1994).

Estruturas WP são encontradas naturalmente na estrutura do $\text{Na}_8\text{Si}_{46}$ (um tipo de clatrato de silício, que possui uma estrutura cristalina na qual os átomos de silício

formam uma rede tridimensional que aprisiona os átomos de sódio em cavidades ou "gaiolas").

Um ponto de destaque para a estrutura WP é que esta possui uma energia superficial pelo volume ainda menor que a do OTC. Um parâmetro empregado para esta verificação é o quociente isoperimétrico (QI). Para o espaço 3D, o QI é uma medida de eficiência volumétrica em relação à minimização de superfície.

O maior valor possível para o QI é 1, obtido para uma esfera, que é a forma mais eficiente em minimizar a área superficial para um dado volume. O valor de QI para um determinado objeto pode ser encontrado pela seguinte equação (WEAIRE; PHELAN, 1994):

$$QI = 36 \pi \frac{Volume^2}{Área Superficial^3} \quad (3.27)$$

Para referência, na Tabela 3.1 se apresentam alguns QI para objetos selecionados.

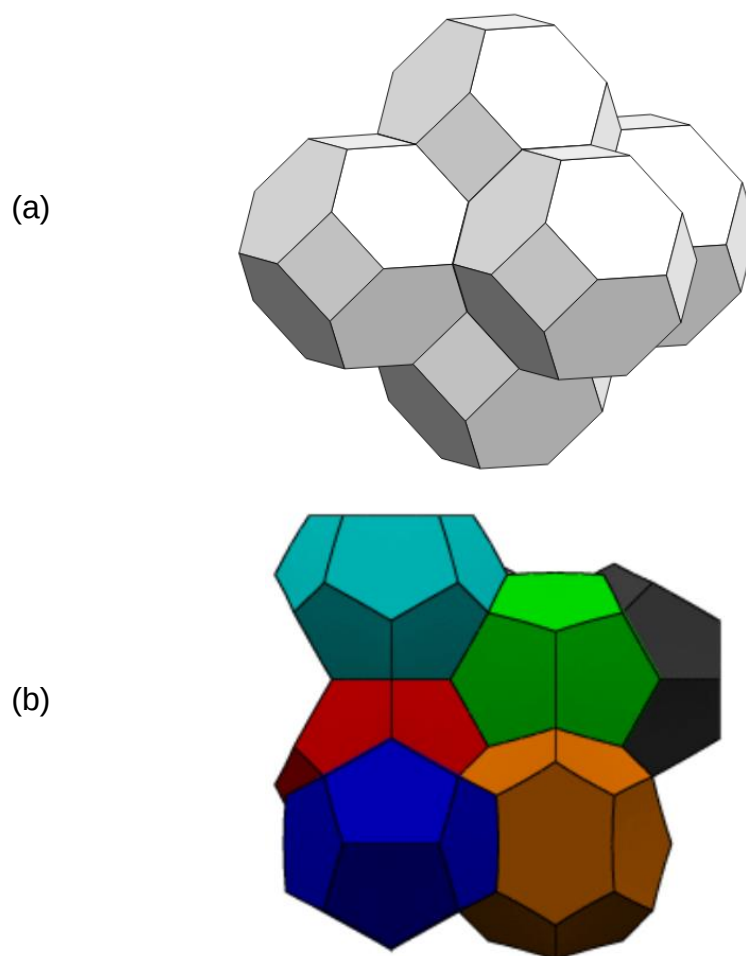
Tabela 3.1. Valores do quociente isoperimétrico (QI) para a esfera e alguns objetos clássicos de tesselação do espaço 3D.

Objeto	QI
Esfera	1
Células de WP	0,764
Tetracaidecaedro de Kelvin	0,757
OTC	0,7534
Cubo	0,5236

Fonte: adaptado (WEAIRE; PHELAN, 1994).

Na Figura 3.13 se apresentam representações da formação de redes de repetição com o OTC (também denominada de rede de Kelvin) e com a estrutura WP, capazes de tesselar o espaço 3D, depois da esfera, com mínima energia superficial por volume.

Figura 3.13. Representação esquemática de redes de repetição, em (a) com o OTC (rede de Kelvin), e em (b) com a estrutura WP.

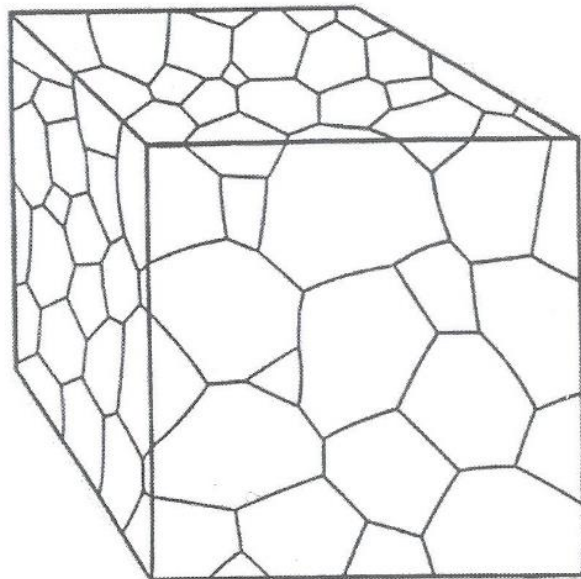


Fonte: (a) (BRAKKE, [s.d.]), e (b) (INCHBALD, 2013).

Entretanto, apesar das tratativas de validação da ocorrência regular do formato OTC em grãos metálicos, este não é ainda um ponto fechado para discussões, sendo considerado apenas como uma “forma provável dos grãos” (RIOS; PADILHA, 2007, p. 22). Neste sentido, estudos sugerem pelo menos como sendo de 14 lados a geometria potencialmente preferencial para o preenchimento do espaço natural (WEAIRE; RIVIER, 1984).

Por fim, a Figura 3.14 ilustra uma típica microestrutura monofásica policristalina equiaxial esperada.

Figura 3.14. Representação esquematizada de uma microestrutura monofásica policristalina equiaxial típica.



Fonte: (RIOS; PADILHA, 2007, p. 23).

4 METODOLOGIA

Para alcançar os objetivos propostos, o trabalho foi dividido em três partes principais: (1) simulação utilizando a técnica de autômatos celulares tridimensionais, (2) simulação através da técnica de autômatos híbridos, e (3) parametrização dimensional dos novos grãos formados e da evolução microestrutural. Embora cada parte possua sua independência e particularidades, elas se complementarão progressivamente, integrando-se em um programa coeso e abrangente.

Cada uma dessas partes segue uma metodologia estruturada em três etapas principais: exploratória, desenvolvimento e implementação, e experimental.

1. **Etapla Exploratória:** Na etapa exploratória, foi realizada uma revisão bibliográfica abrangente, focando em fontes revisadas por pares e publicações fundamentais relacionadas aos temas abordados. Esta pesquisa teve como objetivo fundamentar teoricamente o trabalho, compreender as técnicas empregadas, revisar o estado da arte e identificar eventuais lacunas no conhecimento atual.
2. **Etapla de Desenvolvimento e Implementação:** Durante a fase de desenvolvimento e implementação, novos modelos foram detalhados e suas aplicações práticas foram desenvolvidas computacionalmente. Esta fase incluiu a concepção e codificação dos modelos, garantindo que eles estivessem alinhados com as premissas teóricas estabelecidas na etapa anterior.
3. **Etapla Experimental:** Na etapa experimental foram realizados ensaios *in silico*, utilizando simulações computacionais para verificar e validar os novos modelos desenvolvidos. Após a validação, as simulações se concentraram no estudo do crescimento dos grãos, permitindo tanto avaliar a eficácia e a precisão da ferramenta desenvolvida, quanto procurar contribuir com o conhecimento na área.

A linguagem de programação empregada para toda a implementação foi a Python 3.12.1, com o extensivo suporte de suas bibliotecas nativas, como numpy e

matplotlib, e onde necessário, utilizando fundamentos clássicos de computação gráfica (AMMERAAL; ZHANG, 2008; DE BERG et al., 2008; GOMES; VELHO, 2008; VELHO; GOMES, 2007). Na representação visual das microestruturas digitais a palheta padrão de cores utilizada foi a 'jet'. O programa foi criado seguindo uma abordagem procedural.

Os algoritmos foram implementados computacionalmente em um computador pessoal usual (sistema operacional Microsoft Windows® 10, 64 bits, processador Intel® Core™ i7-2600 CPU @ 3.40 GHz, RAM 12.0 GB).

Uma parcela do metal em estudo é representada por uma matriz tridimensional regular com células cúbicas. Este metal hipotético é unário, e inicialmente considerado inteiramente homogêneo, sendo constituído por apenas a fase originária, que poderá indiferentemente ser tanto uma fase parente β (a recristalização irá ocorrer com mudança da fase cristalográfica), ou pela mesma fase α (a recristalização irá ocorrer sem mudança da fase cristalográfica).

Ainda, o metal foi usualmente considerado inteiramente livre de influências de defeitos, impurezas, imperfeições, fronteiras e efeitos cristalográficos. Assim, todas as células da matriz estarão inicialmente com o mesmo estado, representadas por um valor.

A nucleação foi usualmente homogênea, com a distribuição das sementes sendo totalmente aleatória na matriz do metal, exceto se indicado ao contrário. O processo de nucleação adotado foi o de saturação de sítios (nenhuma nova semente surge após o início da simulação). Assim, a quantidade escolhida de sementes da fase α recristalizada foi então gerada dentro do material antes da simulação do crescimento.

Cada semente ocupa apenas uma célula matricial cada, que para diferenciá-las das células da fase ou estado originário tiveram um valor diferenciado. Dessa forma será criada a matriz do ambiente de simulação, tanto com as células originárias e das sementes ("microgrãos") identificadas e diferenciadas.

Por fim, espera-se que todos os novos grãos recristalizados da fase α devam crescer de modo equiaxial, ou conforme desejado, de modo a substituírem

integralmente toda a estrutura originária, seja ela constituída por uma fase parente β ou mesmo pela própria fase α anterior deformada. Os novos grãos não reagem entre si, não havendo recuperação ou recristalização posterior. Assim o crescimento dos novos grãos é localmente paralisado no momento que suas fronteiras se encontram (ocorrência do *impingement*).

Um algoritmo gerador de busca, exploração e replicação planejado, cujo detalhamento irá ocorrer mais a frente, foi implementado computacionalmente e aplicado sobre esta matriz ambiente com as sementes. Inicialmente este algoritmo realiza uma pesquisa nas células da primeira vizinhança selecionada da(s) células da(s) semente(s).

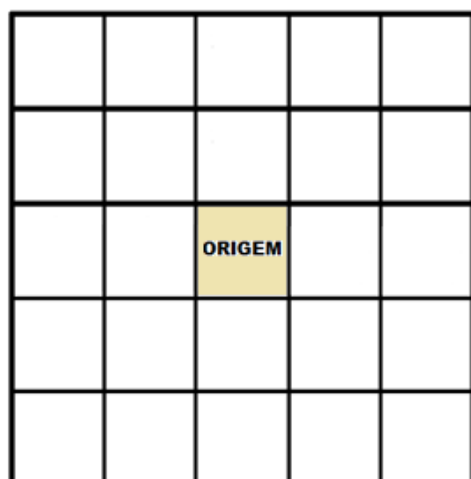
Se o estado das células da vizinhança diretamente exploradas possuir o valor do estado característico da microestrutura originária, o estado destas células pesquisadas é alterado para o estado característico da semente (embrião) de origem.

Após este primeiro laço, o algoritmo gerador implementado é novamente aplicado, mas não mais às células das sementes de origem, mas àquelas células que tiveram seu valor alterado, que formam os novos contornos dos grãos recristalizados em evolução.

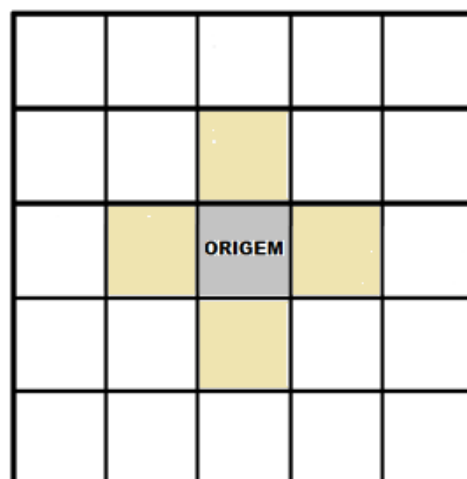
Assim o algoritmo realiza uma pesquisa nas células da primeira vizinhança selecionada destas células dos novos contornos de grãos. Do mesmo modo que fez no primeiro laço, o estado destas células pesquisadas que pertencem a microestrutura originária são alterados.

Este processo é então repetido sucessivamente até que não haja mais nenhuma célula da primeira vizinhança dos grãos formados a ser pesquisada, ou seja, neste momento todo o ambiente foi pesquisado. A Figura 4.1 ilustra este processo.

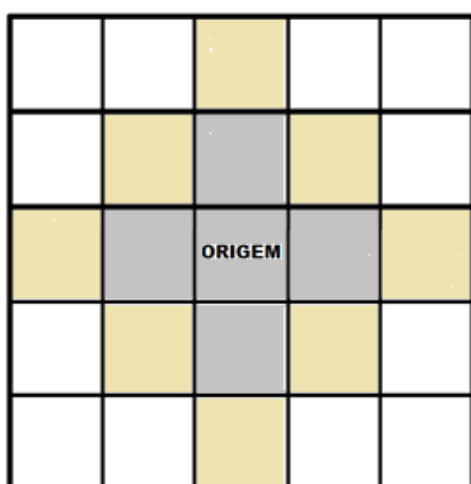
Figura 4.1. Ilustração do processo de busca, exploração e replicagem adotado.



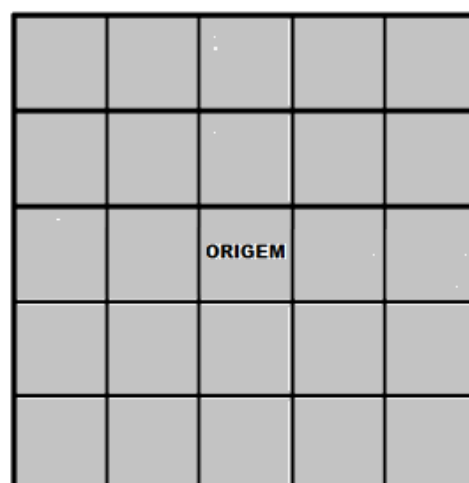
(a) "Nascimento" de uma célula ativa (a "semente" ou "microgrão").



(b) 1ª Replicação ("nascimento" de novas células matriciais ativas) e "morte" da original.



(c) 2ª Replicação e "morte".



(d) Situação final (busca e replicação completa, todo o ambiente pesquisado).

Legenda: células ativas em amarelo, células "mortas" em cinza, e células não pesquisadas em branco.

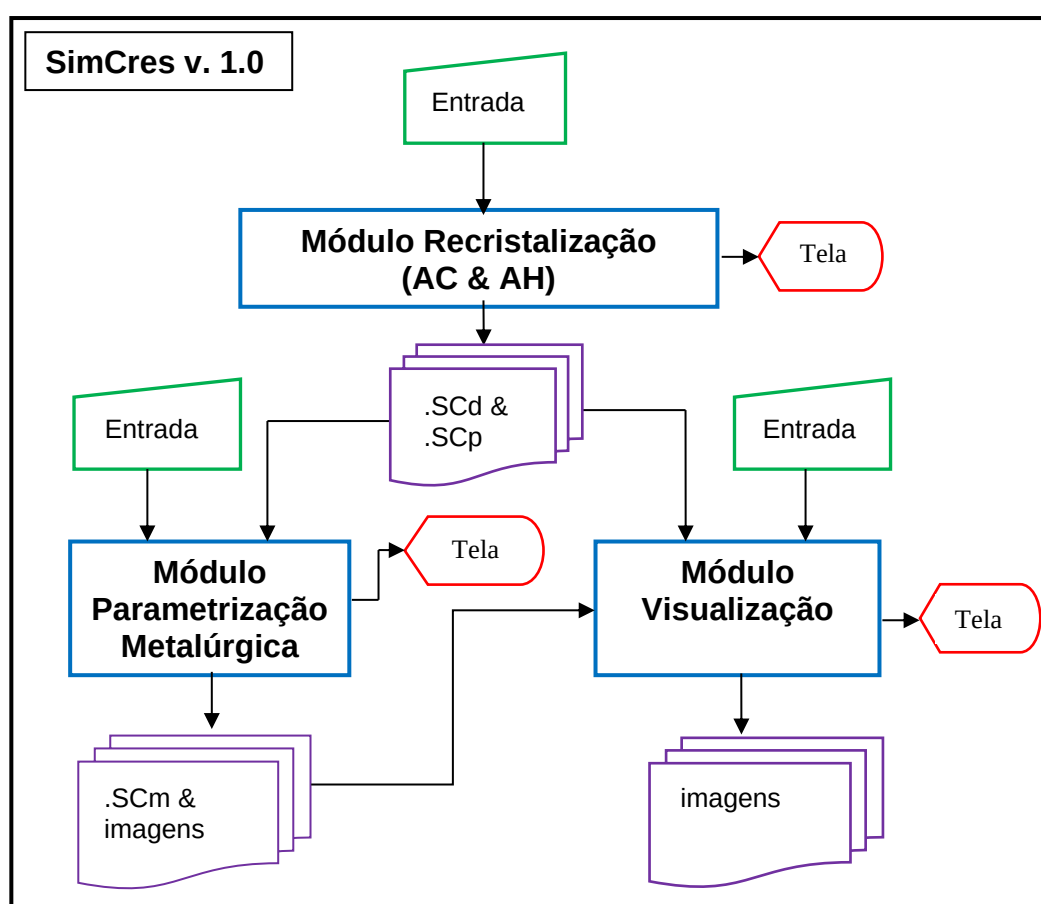
Fonte: do autor.

Durante a simulação absolutamente nenhuma forma de controle ou mesmo de acompanhamento mais incisivo é realizado sobre o desempenho do algoritmo, sobre seus resultados, ou sobre a matriz ambiente em transformação. A única medida efetuada durante a simulação é que a evolução da matriz do ambiente em diversos

laços previamente selecionados é salva em distintos arquivos, cada um respectivo a um determinado momento transcorrido da simulação.

O programa implementado é denominado **SimCres v. 1.0**, e contém três módulos distintos. Um módulo para a simulação em si, um para a parametrização metalúrgica (aspectos dimensionais), e um outro somente para a visualização. Estes módulos são totalmente independentes um do outro. A Figura 4.2 ilustra estes módulos e suas interconexões.

Figura 4.2 - Estrutura básica do programa SimCres.



Legenda:

SCd: extensão do arquivo de dados contendo a matriz do metal simulado.

SCp: extensão do arquivo de dados com parâmetros computacionais da simulação.

SCm: extensão do arquivo de dados da parametrização metalúrgica da simulação.

imagens: arquivos com a extensão jpg, contendo as imagens geradas no respectivo módulo.

Fonte: do autor.

No módulo de recristalização, primeiramente foi criada uma matriz tridimensional regular com células cúbicas, que representa a parcela do metal hipotético em estudo, conforme já apresentado, considerado inteiramente homogêneo (todas as células da matriz estarão com o mesmo estado), e o processo de nucleação foi o de saturação de sítios (quantidade de sementes pré-determinada).

A quantidade escolhida de sementes é então gerada dentro do material antes da simulação. Estas sementes ocupam apenas uma célula matricial cada, que para diferenciá-las das células da microestrutura originária terão um estado (ou valor) diferenciado. Dessa forma se criou a matriz do ambiente de simulação, com as células da microestrutura originária e das sementes (“microgrãos”) identificadas e diferenciadas.

Durante a simulação realizada pelo módulo de recristalização, a única medida efetuada é que a evolução da matriz do ambiente é salva em distintos arquivos de dados (extensão “.SCd”), cada um respectivo a um determinado momento transcorrido da simulação previamente selecionado, além da visualização em tela do andamento da simulação, mas sem a visualização gráfica dos resultados. Terminada a simulação é salvo um arquivo com os parâmetros gerais da mesma (extensão “.SCp”).

O módulo de parametrização fará a leitura destes arquivos anteriormente salvos (“.SCd” e “.SCp”) e então realiza diversos cálculos, de modo que os resultados sejam melhor entendidos, obtendo-se parâmetros diversos tanto da evolução do programa como de aspectos metalúrgicos dimensionais. Algumas imagens destes cálculos são também geradas e salvas se desejado, como histogramas de distribuições de valores. O módulo de parametrização também poderá gerar arquivos “.SCm”, que são matrizes modificadas dos arquivos “.SCd”.

Por fim, o módulo de visualização fará simplesmente a visualização em 3D, e/ou em planos ortogonais selecionados, do ambiente inteiro ou de regiões do mesmo, através da leitura de arquivos salvos, no caso dos “.SCd” e “.SCm”.

Os nomes das extensões “.SCd”, “.SCp” e “.SCm” são criados simplesmente para facilitar diferenciação destes arquivos. Nestes as letras “SC” representam as iniciais principais do nome do programa (SimCres), e a letra adicional “d”, “p” ou “m” indicam a natureza da informação contida no arquivo (respectivamente dados

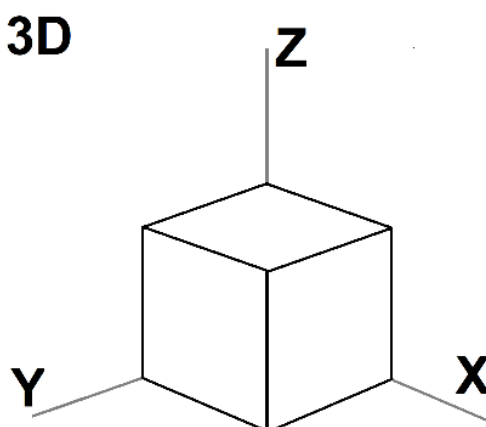
originais, parâmetros, dados modificados). Também podem ser diretamente salvos arquivos de imagens com a extensão padrão “jpg”, mas sendo possível outras formas padronizadas de imagem.

Concomitantemente aos arquivos “.SC#” salvos, são também gerados arquivos “.txt” (tipo texto) e “.csv” (tipo colunas separadas por vírgulas) para facilitar futuras eventuais análises dos resultados dos ensaios em outros programas em geral, como por exemplo o Excel.

A matriz representativa do metal hipotético em estudo a ser simulado, além de ser tridimensional, retangular, e com células cúbicas, como já informado, será também não periódica (limite extra de valor fixo). As buscas serão realizadas deterministicamente somente sobre as primeiras vizinhanças não orientadas (sem que aja qualquer célula ou direção preferencial).

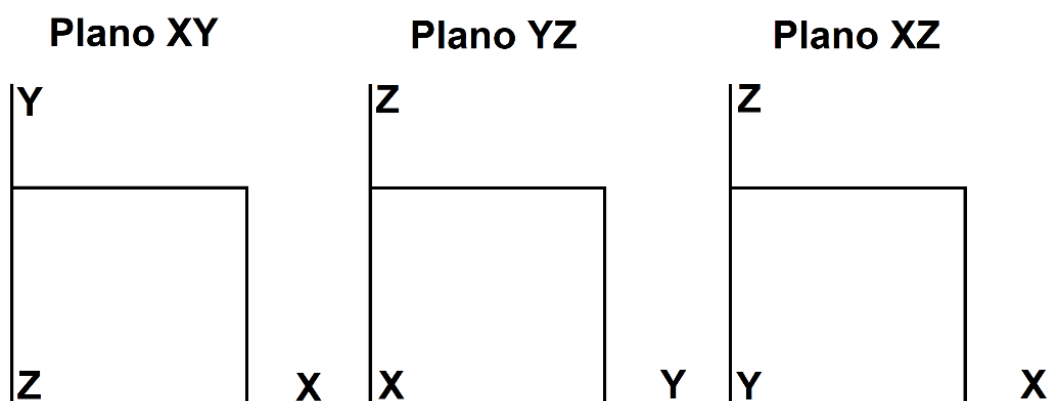
Sobre as imagens 3D geradas das microestruturas simuladas, assim como seus planos formadores (XY, YZ, e XZ) que foram empregados neste trabalho, estarão sempre, salvo orientação em contrário, com as orientações cartesianas conforme apresentado nas Figuras 4.3 e 4.4.

Figura 4.3. Padrões das orientações cartesianas visuais utilizados neste trabalho para a matriz das microestruturas 3D.



Fonte: do autor.

Figura 4.4. Padrões das orientações cartesianas visuais utilizados neste trabalho para os planos formadores XY, YZ e XZ.



Fonte: do autor.

Por fim, apesar de já terem sido preliminarmente apresentados, reforça-se alguns pontos sobre a nomenclatura utilizada neste trabalho:

- A matriz utilizada na simulação é composta por suas células matriciais, ou denominadas somente células, que não podem ser diretamente subdivididas em partes menores. Assim quando o termo “célula” é empregado, desde que não haja nenhuma outra informação associada, está se referindo especificamente a uma célula matricial da simulação;

- O termo “semente” será utilizado para representar o menor grão possível na simulação (portanto da dimensão de uma célula matricial).

5 SIMULAÇÃO POR AUTÔMATOS CELULARES TRIDIMENSIONAIS

Apesar da relevância dos estudos realizados em simulações considerando o material de modo bidimensional, a maioria dos fenômenos que ocorrem no material realmente se passam em situações tridimensionais. Assim, estudos considerando o ambiente como sendo tridimensional também têm sua importância e não devem ser excluídos.

Existem diversas possíveis formas de vizinhanças direta de uma célula tridimensional. As formas de vizinhança realmente fundamentais, denominadas canônicas, seriam aquelas que não podem ser reduzidas a formas mais rudimentares. Na literatura a forma mais empregada de vizinhança de busca canônica é a realizada pelas faces.

Desta forma, o estudo mais aprofundado da modelagem evolução do crescimento do grão pela técnica de Autômatos Celulares (AC) por estas vizinhanças canônicas é de grande importância para o conhecimento do comportamento destes, e portanto para a elaboração de algoritmos e tratativas mais eficientes.

5.1 Vizinhanças canônicas tridimensionais

Considerando um ambiente tridimensional com células cúbicas, uma célula do seu interior possui em seu contorno direto (primeira vizinhança) células vizinhas pelo compartilhamento de faces, de arestas e de vértices. Considerando sempre vizinhanças não orientadas, estas são as possibilidades canônicas fundamentais de primeiras vizinhanças, pois não podem ser reduzidas a vizinhanças mais simples.

Assim, para a célula tridimensional de origem (a semente considerada) com a resolução δ (comprimento das arestas das células cúbicas), e que se encontra nas

coordenadas genéricas (x, y, z) , têm-se as seguintes vizinhanças canônicas não orientadas:

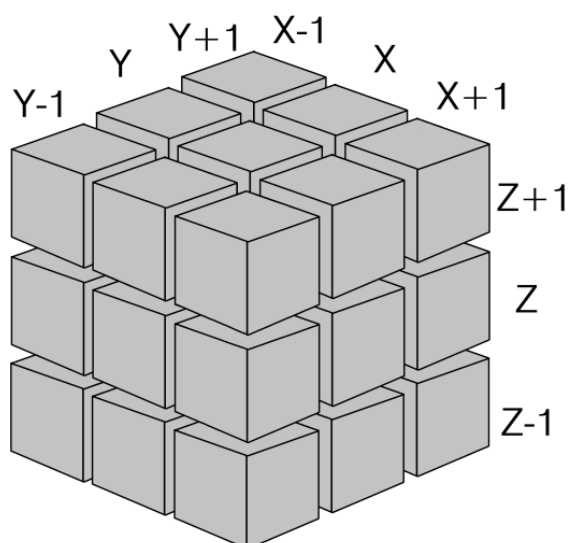
- VF (vizinhança pela face): conjunto formado considerando as 6 células da primeira vizinhança que possuem alguma face em comum com a célula de origem (V_F^6);

- VA (vizinhança pela aresta): conjunto formado considerando as 12 células da primeira vizinhança que possuem alguma aresta em comum com a célula de origem (V_A^{12}); e a

- VV (vizinhança pelo vértice): conjunto formado considerando as 8 células da primeira vizinhança que possuem algum vértice em comum com a célula de origem (V_V^8).

A Figura 5.1 ilustra a matriz $3 \times 3 \times 3$ unitária com todo o conjunto de primeiras vizinhanças e a Tabela 5.1 sintetiza algumas características das distâncias internas das células que as compõem. A Figura 5.2 apresenta as representações das três vizinhanças canônicas fundamentais existentes (VF, VA e VV) e, pelos conceitos apresentados, as V_F^6 (ou apenas VF), V_A^{12} (ou apenas VA) e V_V^8 (ou apenas VV) são formadas cada uma pelos seguintes conjuntos específicos de células.

Figura 5.1. Representação da matriz 3x3x3 de primeiras vizinhanças da célula central (a semente considerada) com a identificação das coordenadas.



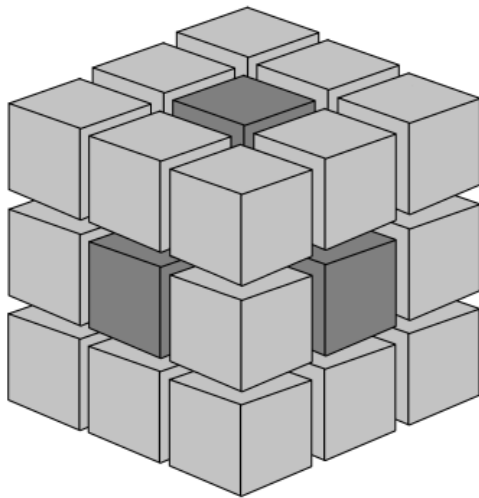
Fonte: do autor.

Tabela 5.1. Distâncias Euclidiana e Manhattan entre as células da primeira vizinhança e a célula de origem em função da resolução de uma célula matiriial (δ).

Vizinhanças canônicas fundamentais não orientadas (conjunto)	Distância Euclidiana entre o centro das células da 1ª vizinhança e o centro da célula de origem	Distância Manhattan entre as células da 1ª vizinhança e a célula de origem
VF (V_F^6)	1δ	1δ
VA (V_A^{12})	$\sqrt{2}\delta$	2δ
VV (V_V^8)	$\sqrt{3}\delta$	3δ

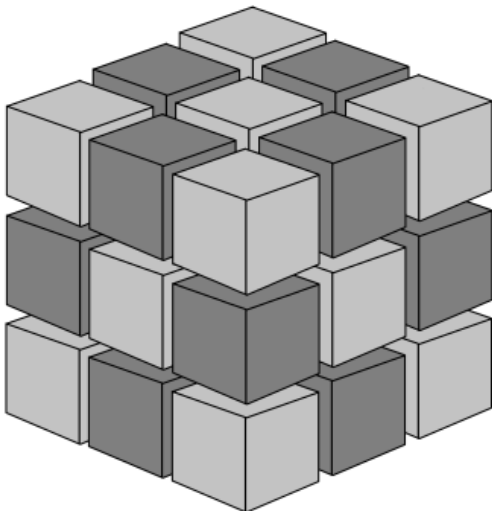
Fonte: do autor.

Figura 5.2. Representações da matriz 3x3x3 com destaque das células visíveis de VF, VA e VV respectivamente.



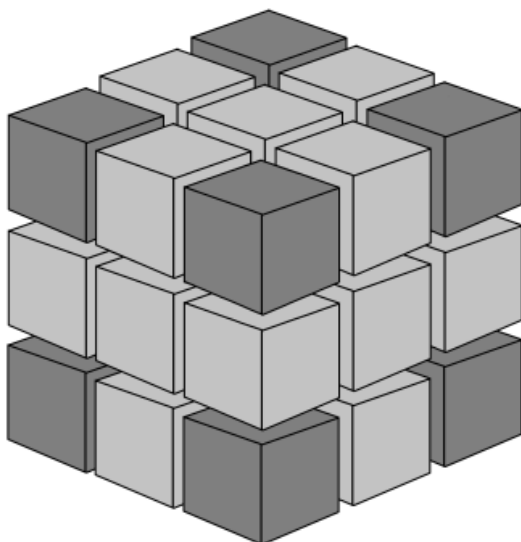
VF (V_F^6)

$$V_F^6 = \{(x+1, y, z), (x-1, y, z), (x, y+1, z), (x, y-1, z), (x, y, z+1), (x, y, z-1)\}$$



VA (V_A^{12})

$$V_A^{12} = \{(x+1, y, z+1), (x-1, y, z+1), (x, y+1, z+1), (x, y-1, z+1), (x+1, y, z-1), (x-1, y, z-1), (x, y+1, z-1), (x, y-1, z-1), (x+1, y+1, z), (x-1, y+1, z), (x+1, y-1, z), (x-1, y-1, z)\}$$



VV (V_V^8)

$$V_V^8 = \{(x+1, y+1, z+1), (x+1, y-1, z+1), (x, y+1, z+1), (x, y-1, z+1), (x+1, y+1, z-1), (x+1, y-1, z-1), (x, y+1, z-1), (x, y-1, z-1)\}$$

As células que compõem estes três conjuntos são distintas entre si (nenhuma das células de um conjunto se repete em outro conjunto), perfazendo 26 células. Considerando adicionalmente a própria célula da origem, são ao todo 27 células, formando toda a primeira vizinhança com a sua respectiva semente. Não há em cada conjunto canônico nenhuma célula, seja da face, aresta ou vértice, preferencial em relação as demais do mesmo conjunto. Esta é uma submatriz de $3 \times 3 \times 3$ elementos, cuja célula de origem está no seu centro.

Como já informado, atualmente ao redor do mundo a busca epistemológica mais empregada em diversas modelagens é a da evolução (ou mimetização) pela VF, considerando tanto o sistema canônico quanto quaisquer outros conjuntos e formas de vizinhança. A VF apresenta algumas similaridades conceituais em relação à VVN, inclusive sendo as vezes o termo VVN estendido diretamente para o ambiente tridimensional. Neste trabalho foi utilizado exclusivamente o termo VF, limitando o termo VVN para uso exclusivo no ambiente bidimensional, conforme originalmente concebido.

Importante destacar que realmente imaginar a possibilidade física de ocorrer um crescimento de um cristal isoladamente por meio do vértice ou da aresta, sem perpassar pela face, não é algo simples de se conceber no mundo real. Entretanto, estas VF, VA e VV são as vizinhanças canônicas não orientadas, e seu estudo e compreensão podem trazer informações valiosas visando a realização de modelagens mais elaboradas.

5.2 Algoritmo gerador

O núcleo principal do algoritmo gerador de busca, exploração e replicação efetivamente computacionalmente implementado neste fase está sintetizado no pseudocódigo do Quadro 5.1.

Quadro 5.1. Listagem do pseudocódigo do núcleo da rotina inicial de busca, exploração e replicação do algoritmo gerador implementado.

```

INPUT: MA, MBP
OUTPUT: MAM
01 WHILE MBP ≠ 0:
02   MBS = 0
03   FOR (j variando de 1 até o número de vizinhanças diretas consideradas):
04     FOR (k variando de 1 até o número de casas de origem indicadas em MBP):
05       FUNCTION AlteraAmbiente
06         IF [(xf, yf, zf) indica uma célula inserida nos limites de MA] THEN:
07           IF [MAM(xf, yf, zf) igual a 0] THEN:
08             MAM(xf, yf, zf) = MAM(xi, yi, zi)
09             MBS = MBS + (xf, yf, zf)
10           END IF
11         END IF
12       END FUNCTION AlteraAmbiente
13     END FOR
14   END FOR
15   MBP = MBS
16 END WHILE

```

Fonte: do autor.

Onde:

- (*x_i*, *y_i*, *z_i*) são as coordenadas da célula de origem;
- (*x_f*, *y_f*, *z_f*) são as coordenadas da célula vizinha à célula de origem que está sendo pesquisada;
- *MA* é a matriz tridimensional inicial que representa o metal antes da simulação;
- *MAM* é a matriz tridimensional que representa o metal durante a recristalização ou ao seu final;
- *MAM*(*x_i*, *y_i*, *z_i*) contém o número da semente da célula de origem sendo considerada;
- *MBP* é a matriz de busca primária, que contém as coordenadas de todas as células de origem em determinado laço;

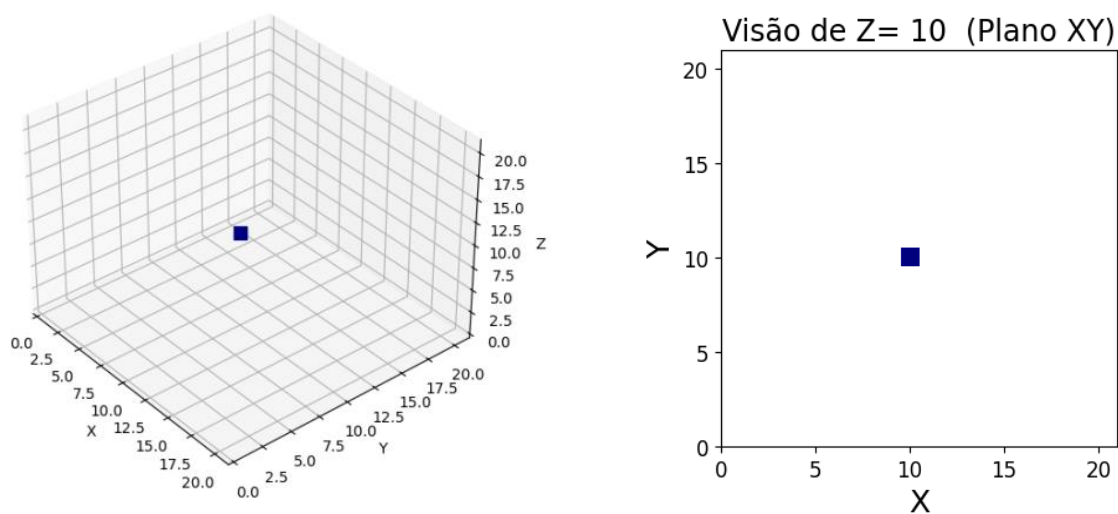
- *MBS* é a matriz de busca secundária, que contém as coordenadas de todas as células em *MAM* que tiveram seus valores alterados em determinado laço.

Com a implementação computacional deste pseudocódigo no programa SimCres modelagens computacionais com AC podem então ser realizadas.

5.3 Simulações de evolução das vizinhanças fundamentais

Para verificar preliminarmente como comportamentos podem variar em função da vizinhança de busca aplicada foram efetuadas simulações específicas. Estas foram realizadas em um ambiente com 21 células de cada lado e inicialmente com uma única semente em uma célula central do mesmo, para cada uma das três vizinhanças canônicas (VF, VA e VV). A Figura 5.3 apresenta algumas imagens ilustrativas do momento inicial, e a Figura 5.4 apresenta algumas imagens de diferentes momentos das simulações.

Figura 5.3. Imagens do ambiente de 21x21x21 células em seu momento inicial com uma semente (em azul) no seu centro.

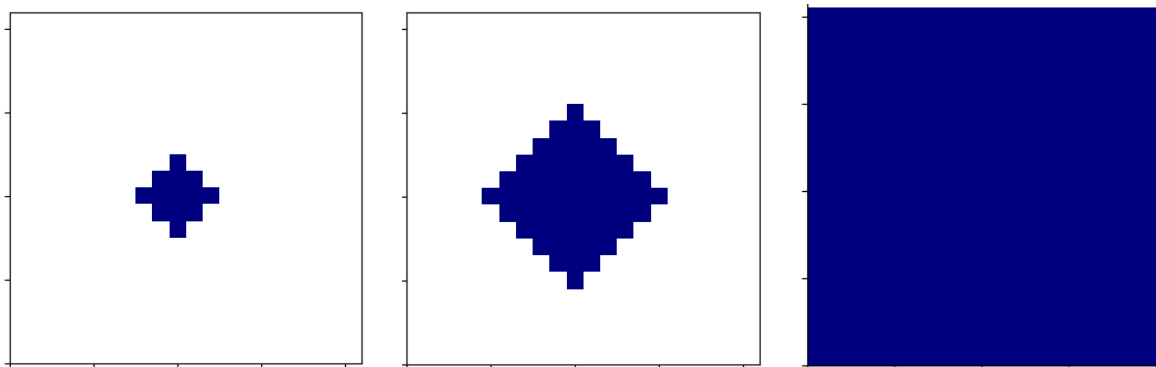


(a) representação 3D.

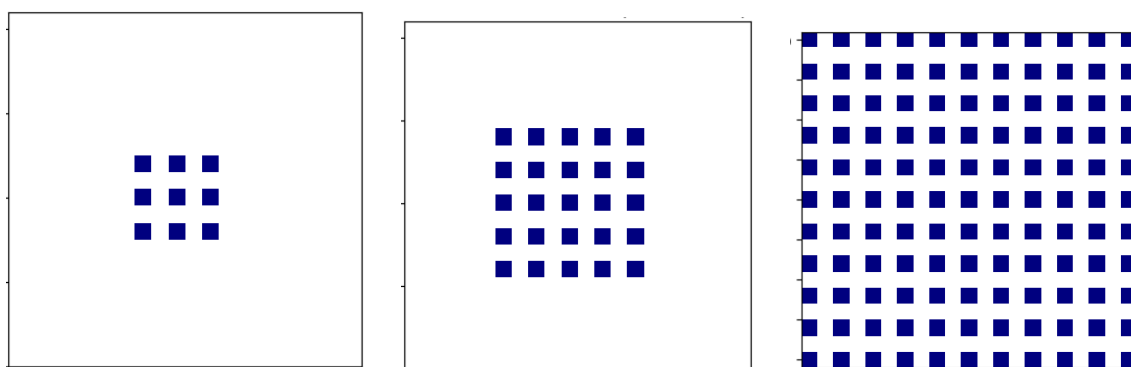
(b) visão plano XY central.

Fonte: do autor.

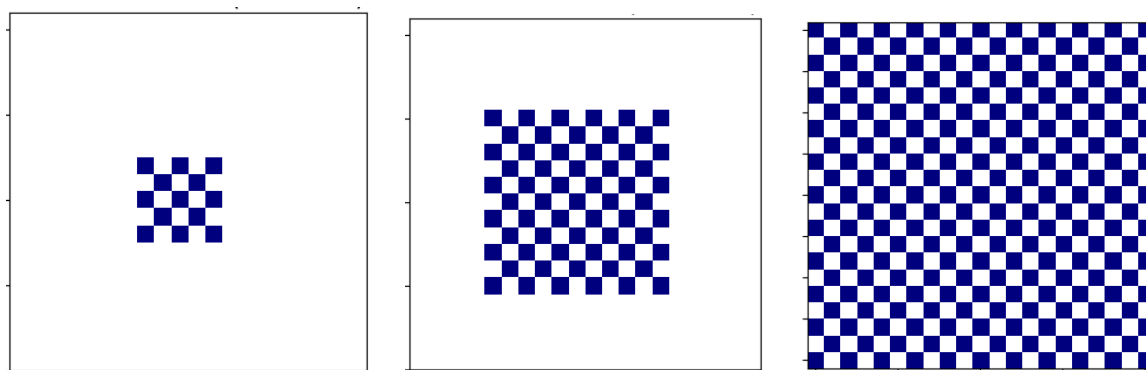
Figura 5.4. Imagens de diversos momentos de simulações do ambiente da Figura 5.3. Em (a) para VF, em (b) para VA, e em (c) para VV.



(a) VF: para o 2º, 5º, e último laço de busca.



(b) VA: para o 2º, 5º, e último laço de busca.



(c) VV: para o 2º, 5º, e último laço de busca.

Nota: Semente e rede de células transformadas na cor azul, sempre com visão do plano XY central ($z=10$)

Fonte: do autor.

Nestas figuras a célula de origem, assim com as células transformadas, está na cor azul, e a região não transformada na cor branca. Nas Figuras 5.3 e 5.4, as visões são sempre planos XY com $z=10$. Devido à simetria da evolução, as visões dos outros planos, XZ com $y=10$ e YZ com $x=10$, serão idênticas às apresentadas para o plano XY.

Observando a Figura 5.4, nota-se que a busca apenas pela VF, mesmo a partir de uma única semente, é capaz de envolver todas as células do ambiente do exemplo (atingiu 100% das células disponíveis). Já as buscas apenas pela VA, ou apenas pela VV, a partir de uma única semente, não são capazes disto. Assim, para este exemplo, a VF propiciou uma busca plena, enquanto as buscas isoladamente realizadas pelas VA ou VV não o fazem. Ainda, no caso da VF, o grão gerado, apesar de formado por células (discreto), tende ao formato de um octaedro regular.

5.4 Combinações de vizinhanças

Existem outras possibilidades de pesquisa sobre estas mesmas três vizinhanças canônicas não orientadas já tratadas, que podem ser obtidas por meio de combinações. Assim, além das três vizinhanças já apresentadas, mais quatro são obtidas:

- pela combinação de duas vizinhanças de busca entre si: VF/VA (VF combinada com VA); VF/VV (VF combinada com VV), e VA/VV (VA combinada com VV); e ainda
- pela combinação das três vizinhanças ao mesmo tempo: VF/VA/VV ou simplesmente VP (vizinhança plena).

Dessa forma se obtêm os seguintes quatro novos conjuntos complementares de vizinhanças V_{FA}^{18} , V_{FV}^{14} , V_{AV}^{20} , e V_P^{26} , a saber:

$$V_{FA}^{18} = V_F^6 + V_A^{12} \quad (5.1)$$

$$V_{FV}^{14} = V_F^6 + V_V^8 \quad (5.2)$$

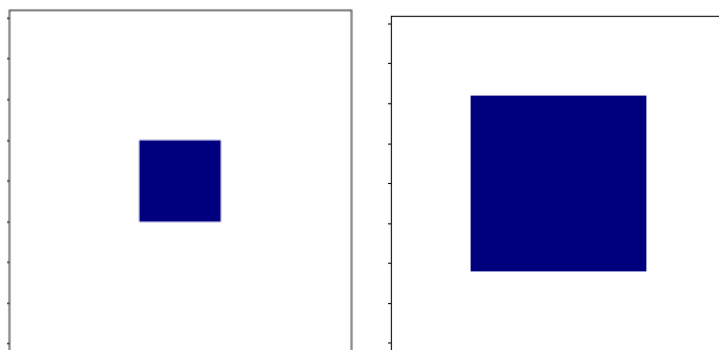
$$V_{AV}^{20} = V_A^{12} + V_V^8 \quad (5.3)$$

$$V_P^{26} = V_F^6 + V_A^{12} + V_V^8 \quad (5.4)$$

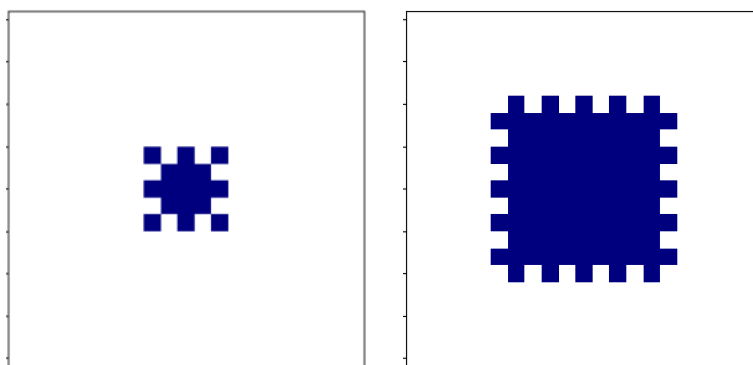
Ainda, a vizinhança combinada VP possui certa similaridade conceitual com a VM, já em ambos arranjos todas as células que formam a primeira vizinhança à célula de origem são consideradas. O conjunto VP também pode ser definido como o conjunto de células no espaço que possuem a sua distância Chebyshev unitária em relação a célula central.

Com estes novos conjuntos oriundos das combinações das primeiras vizinhanças canônicas, as vizinhanças V_F^6 , V_{FA}^{18} , e V_P^{26} , que são os três conjuntos de vizinhanças tipicamente empregadas no estudo de objetos discretizados pelos seus voxels (SÁNCHEZ-CRUZ et al., 2013; SRIHARI, 1981), passam a ser agora todas contempladas. A Figura 5.5 apresenta imagens ilustrativas de momentos de simulações destas vizinhanças combinadas.

Figura 5.5. Imagens de diversos momentos de simulações do ambiente da Figura 5.3 (21x21x21 células com uma semente central).



(a) VF/VA, ou VA/VV, ou VP: para o 2º e 5º laço de busca.



(b) VF/VV: para o 2º e 5º laço de busca.

Nota: Em (a) para VF/VA, ou VA/VV, ou VP, e em (b) para VF/VV. Semente e rede de células transformadas na cor azul, sempre com visão do plano XY central ($z=10$).

Fonte: do autor.

Como visto na Figura 5.5, a imagem do plano central é a mesma para as buscas sobre a VF/VA, VA/VV ou VP. Entretanto, nos outros planos a busca pela VF/VA apresenta um comportamento bem diferenciado em relação às outras.

A Figura 5.6 apresenta algumas imagens ilustrativas para melhor visualizar estas diferenças ao longo dos planos (seções do plano XY de $z = 10$ até $z=18$) para o laço nº 8, no mesmo ambiente da Figura 5.3. Assim, esta sucessão de imagens

possibilita se identificar melhor a forma geométrica formada pela respectiva vizinhança de busca empregada.

Como observado, dentro das restrições de um ambiente discreto, diferentes formatos aproximados de grãos podem ser obtidos. Como já esperado pelas imagens da Figura 5.3a, a VF gera um grão que evolui conforme um octaédro regular (8 faces triangulares, 6 vértices e 12 arestas). Já a VF/VA gera um cuboctaedro, conforme se apresenta esquematicamente e com mais detalhes na Figura 5.7. A VF/VV evolui como um cubo, mas com “ranhuras” em todo o seu contorno. Por fim a VP evolui simplesmente como um cubo (6 faces quadradas, 8 vértices e 12 arestas).

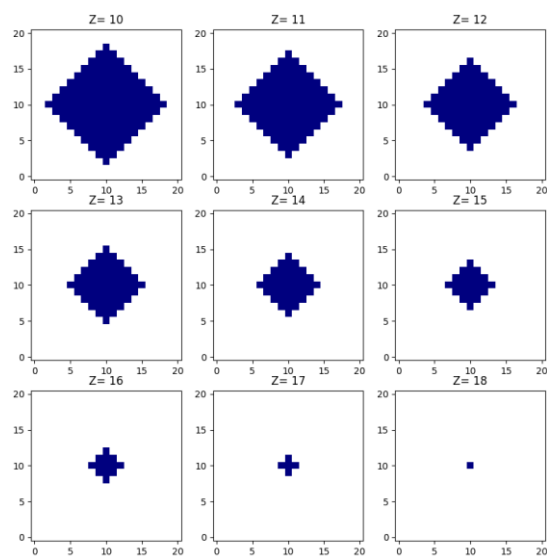
O cuboctaedro (CUNDY; ROLLETT, 1961) gerado pela VF/VA (Figura 5.7) merece um maior detalhamento. Este é um sólido arquimediato (poliedro convexo semi-regular), sendo considerado uma instância intermediária entre um octaedro e um cubo (KIPER, 2007). O cuboctaedro é formado por 14 faces, sendo 6 faces quadradas e 8 faces triangulares (ver Anexo I). Ainda, possui 12 vértices e 24 arestas, atendendo ao teorema de Euler, apresentado na Equação (5.5):

$$f + v = a + 2 \quad (5.5)$$

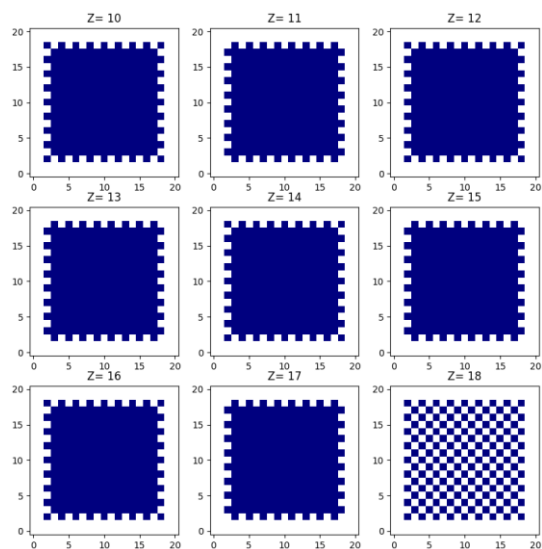
Onde f , v , e a são respectivamente o número de faces, vértices e arestas do poliedro, ou $(14 + 12 = 24 + 2)$.

Ainda, as suas faces quadradas formam 3 pares paralelos, e estes pares paralelos são ortogonais entre si. Os 8 triângulos são todos equiláteros. Todas as arestas possuem o mesmo comprimento, sendo que cada aresta separa uma face quadrada de uma face triangular.

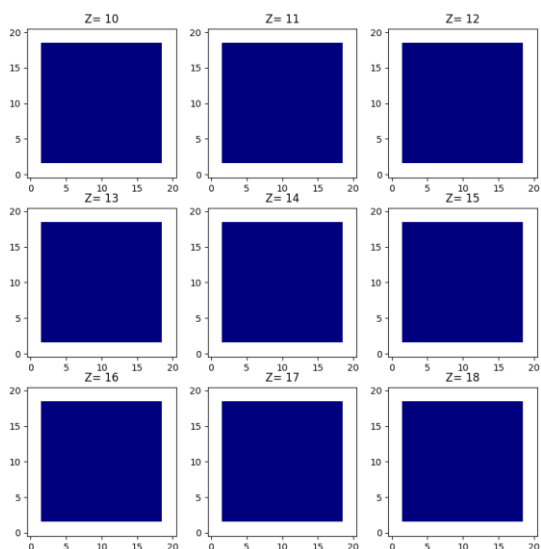
Figura 5.6. Imagens de diferentes seções do plano XY em simulações em ambiente de 21x21x21 células a partir de uma única semente no seu centro.



(a) VF



(b) VF/VV

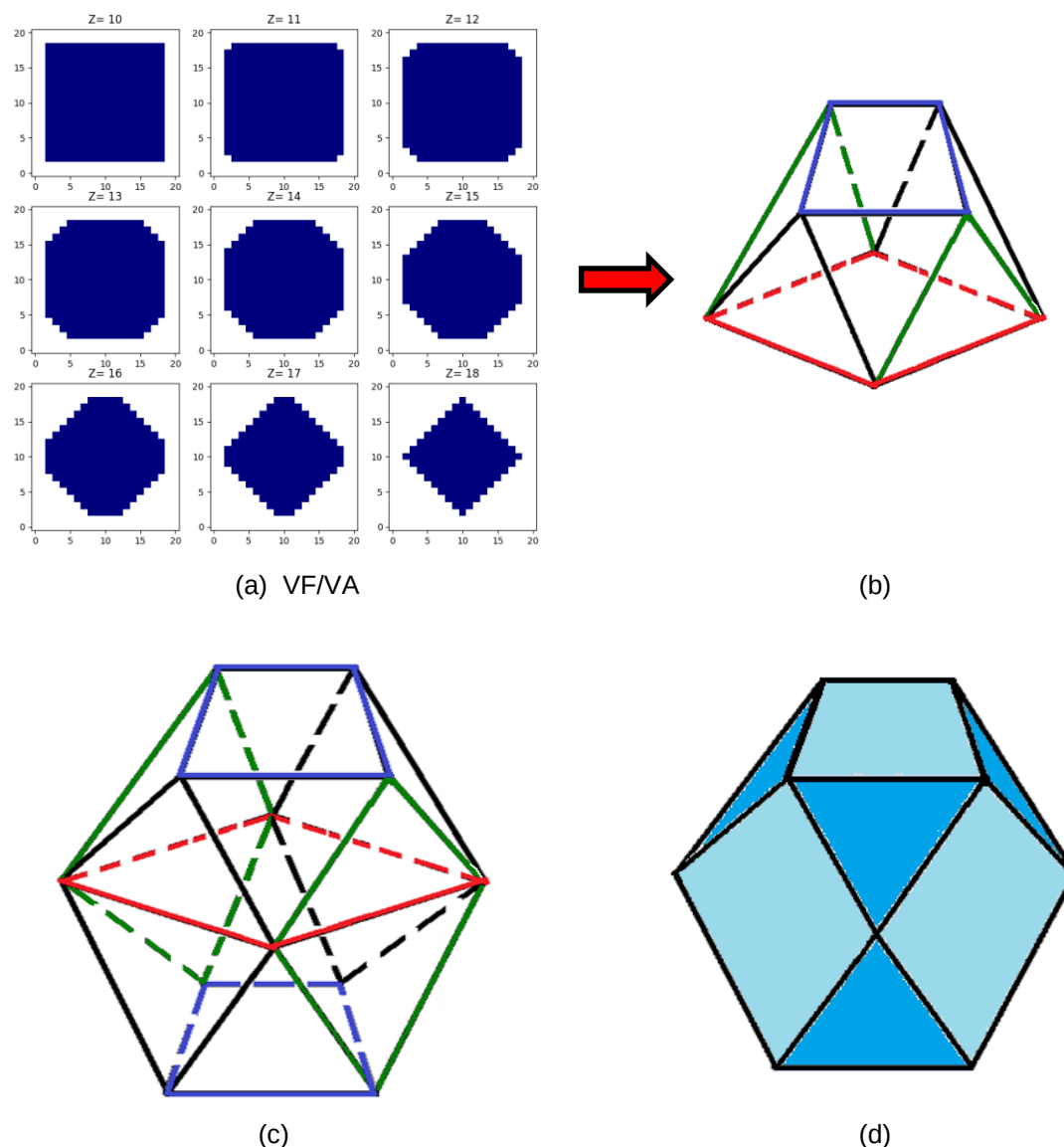


(c) VA/VV ou VP

Nota: As visões se iniciam no plano XY central ($z=10$), indo até $Z=18$. Em (a) pela VF, em (b) pela VF/VV, e em (c) pela VA/VV ou VP.

Fonte: do autor.

Figura 5.7. Representações esquemáticas do anti-prisma (a) e (b), e do respectivo cuboctaedro (c) e (d).



Legenda:

(a) visões que se iniciam no plano XY central ($z=10$), indo até $Z=18$ (ambiente $21 \times 21 \times 21$ células).

(b) e (c): as faces quadradas paralelas estão na mesma cor (azul, preto ou verde); em vermelho as arestas de um dos quadrados internos, que divide o cuboctaedro em dois antiprismas quadrados assimétricos equivalentes e é defasado em 45° das 2 faces quadradas das quais é paralelo; e, na perspectiva apresentada, as arestas visíveis estão em linhas contínuas e as arestas não visíveis em linhas tracejadas.

(d) todas as arestas visíveis em preto, as faces quadradas e triangulares visíveis apresentadas em diferentes tons de azul, e as arestas e faces não visíveis ocultas.

Fonte: do autor.

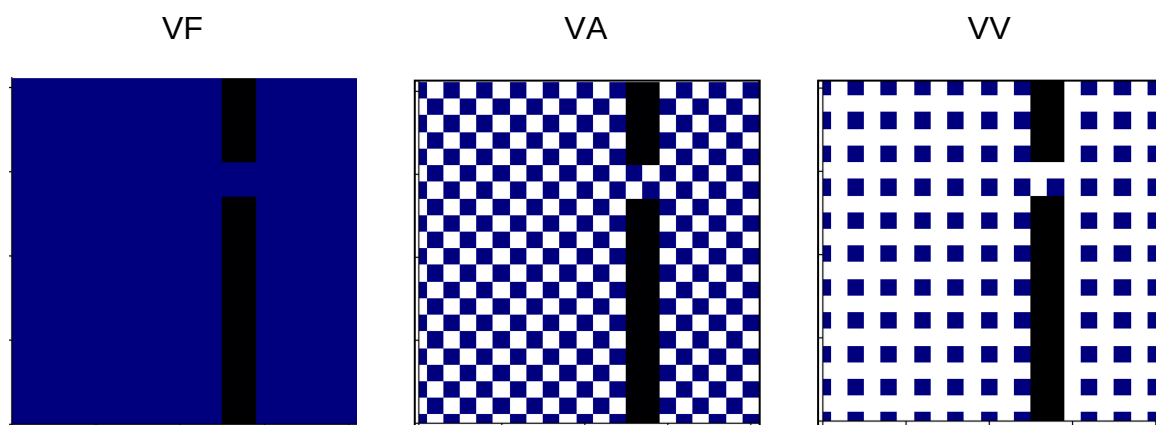
5.5 Influência de barreiras internas

Em um material metálico real, é possível que existam regiões fixas que não permitam a evolução do grão em crescimento. Estas regiões bloqueadas podem ser devido a diversos motivos como, por exemplo, a existência de precipitados, inclusões, e mesmo por fases prévias ou parentes que, por motivos termodinâmicos e/ou cinéticos, não vão se transformar durante a simulação. Na concepção inicial do material hipotético em estudo estas possibilidades foram desconsideradas, mas alguns testes fundamentais serão feitos para se verificar a futura adequação do modelo a estas hipóteses.

Assim, para se ilustrar a influência das obstruções internas por sobre as buscas, realizou-se simulações para o mesmo ambiente da Figura 5.3, mas agora com elementos fixos inclusos, por sobre os quais o crescimento do grão não será permitido. No caso deste exemplo a obstrução será uma “parede” cobrindo todo o plano YZ, exceto por uma faixa livre em y de 13 a 14. Repetiu-se sobre estes ambientes modificados as mesmas simulações anteriormente realizadas na Figura 5.3.

Na Figura 5.8 é ilustrado este ambiente modificado e também os resultados do momento final destas simulações para as buscas sobre a VF, VA e VV respectivamente. Na Figura 5.8 as imagens são do plano XY para $z=10$, onde na cor preta estão os obstáculos fixos, na cor azul as células pesquisadas formando as respectivas redes ampliadas, e na cor branca as células do metal não transformadas.

Figura 5.8. Imagem final de simulações pela VF (a esquerda), VA (no centro) e VV (a direita), em ambiente com 21x21x21 células a partir de uma célula central, possuindo uma barreira fixa interna.



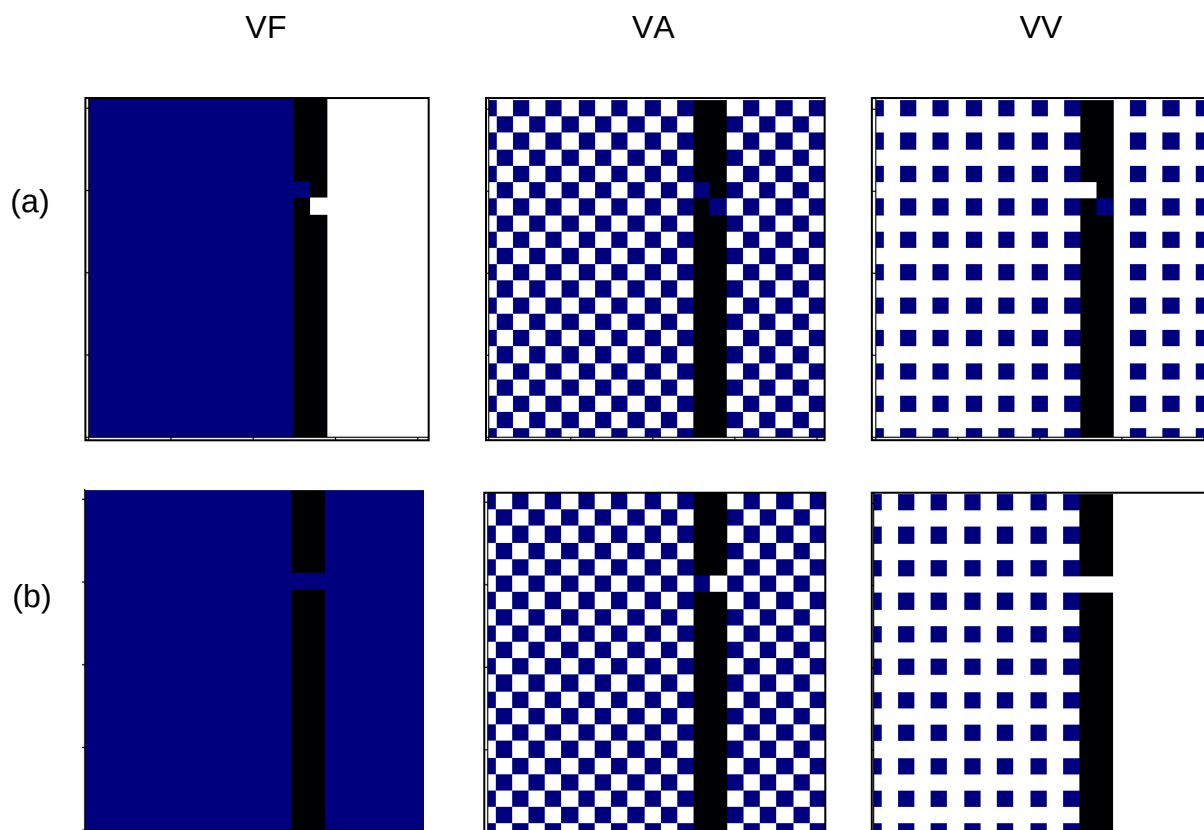
Nota: Células da semente e transformadas na cor azul, células não transformadas na cor branca, e células dos obstáculos em preto.

Fonte: do autor.

Como observado, a busca tanto pela VF, VA, ou VV é capaz de abranger todo o ambiente, não sendo os obstáculos fixos impedimento para aplicação direta do algoritmo implementado. Mas para isto é necessário que exista pelo ao menos um caminho mínimo entre as eventuais regiões separadas pelo impedimento, de modo que a matriz de células da rede ampliada possa perpassar por este caminho livre segundo o seu padrão de repetição.

Para melhor ilustrar este ponto, na Figura 5.9 (sempre com visões do plano XY para $z=10$) são ilustradas simulações conforme anteriormente realizadas no ambiente com obstruções da Figura 5.9, mas acrescentando uma barreira extra no caminho de ligação entre as duas regiões maiores separadas pela obstrução.

Figura 5.9. Imagem final de simulações pela VF (a esquerda), VA (no centro) e VV (a direita) em ambiente similar ao da Figura 5.8, mas possuindo uma barreira fixa interna diferenciada em (a) e outra distinta em (b).



Nota: Células da semente e transformadas na cor azul, células não transformadas na cor branca, e células da barreira fixa na cor preta.

Fonte: do autor.

Na Figura 5.9a foram adicionadas nesta região de passagem duas linhas de células de barreiras vizinhas entre si pelo vértice, e na Figura 5.9b duas linhas de células de barreiras unidas entre si pela face.

Como observado na Figura 5.9a, devido à específica barreira adicionada no caminho da passagem, a busca pela VF não conseguiu atingir a segunda região do ambiente matricial. Entretanto, na Figura 5.9b se observa que a busca pela VF já conseguiu atingir plenamente todo o ambiente. Isto ocorreu devido ao formato das barreiras, que no ambiente da Figura 5.9a bloqueou a rede de busca pela VF, que

requer um caminho contínuo cujas células se comunicam diretamente entre si por pelo menos uma das faces, como ocorreu no ambiente da Figura 5.9b.

Para as buscas pelas VA e VV, nenhum impedimento foi causado pelo ambiente da Figura 5.9a, mas para o ambiente da Figura 5.9b a busca pela VA foi impedida de seguir por todo o ambiente. Isto ocorreu porque as barreiras na Figura 5.8a não coincidiram com todas as células da rede imediata de pesquisas da busca por VA e VV, mas no ambiente da Figura 5.9b todas as células da rede imediata de pesquisas da busca VA foram bloqueadas, não permitindo a sua evolução.

No caso das vizinhanças combinadas, a facilidade de perpassar objetos é ainda maior, devido a emprego simultâneo de mais de um arranjo matricial de busca. Por exemplo, no caso da VP, apenas uma única célula disponível em qualquer local da primeira vizinhança possibilita a busca por um laço a mais.

5.6 Influência da vizinhança de busca sobre o desempenho do algoritmo gerador

Apesar de ser um único algoritmo gerador empregado para todas as possibilidades de buscas canônicas e suas combinações (Quadro 5.1), o desempenho do algoritmo em termos de custo computacional sofre alterações em função da vizinhança de busca.

Para esta verificação foram realizadas simulações em um ambiente matricial regular com 21x21x21 células (ou 9.261 células totais), sem obstruções internas, em todos os sete arranjos de vizinhanças de busca apresentados, a partir de uma única semente central. Os ensaios foram repetidos 3 vezes em cada vizinhança. A Tabela 5.2 apresenta resultados destas simulações.

Tabela 5.2. Simulações completas em ambiente com 21x21x21 células regulares, sem obstruções internas, iniciando com uma única célula de origem no seu centro.

Ambiente 21x21x21 células		Nº Total de Células			
Vizinhança de busca (conjunto)	Nº Laços	Transformadas		Pesquisadas	
		Nº	(%)(¹)	Nº	(%)(²)
VF (V_F^6)	31	9.261	100	55.566	600
VA (V_A^{12})	16	4.631	50	55.572	1200
VV (V_V^8)	11	2.331	25	18.648	800
VF/VA (V_{FA}^{18})	16	9.261	100	166.698	1800
VF/VV (V_{FV}^{14})	12	9.261	100	129.654	1400
VA/VV (V_{AV}^{20})	11	9.261	100	185.220	2000
VP (V_P^{26})	11	9.261	100	240.786	2600

(1): percentagem em relação ao número total de células do ambiente (9.261).

(2): percentagem em relação ao número total de células transformadas.

Fonte: do autor.

Como já observado na Figura 5.3, as buscas pelas vizinhanças VA e VV não são plenas. Pela Tabela 5.2, verifica-se que a busca pela VA alcança uma plenitude de 50%, e que a busca pela VV alcança uma plenitude de apenas 25%. Todas as demais vizinhanças de busca alcançam plenitude total (100%). Até mesmo a busca pela VA em conjunto com VV alcançou a plenitude máxima.

Neste exemplo (Tabela 5.2), a busca que apresentou a maior eficiência (menor custo computacional quanto a este quesito) foi a realizada pela VF, obtendo uma razão de 6 células pesquisadas para 1 célula transformada. A busca que apresentou a menor eficiência (maior custo computacional quanto a este quesito) foi a busca pela VP, obtendo uma razão de 26 células pesquisadas para 1 célula transformada. Assim,

nos limites deste experimento, em relação a este quesito a busca pela VF é de longe computacionalmente a mais eficiente de todas, considerando o algoritmo (Quadro 5.1) conforme apresentado (sem nenhuma otimização especial).

Para verificar o efeito do número de células sobre os resultados da Tabela 5.2, estes experimentos foram reproduzidos, mas agora em um ambiente contendo 201x201x201 células (ou 8.120.601 células totais). Os ensaios foram repetidos 3 vezes em cada vizinhança. A Tabela 5.3 apresenta resultados destas simulações e as Figuras 5.10 a 5.12 as imagens de alguns resultados.

Tabela 5.3. Simulações completas em ambiente com 201x201x201 células, sem obstruções internas, iniciando com uma única célula de origem no seu centro.

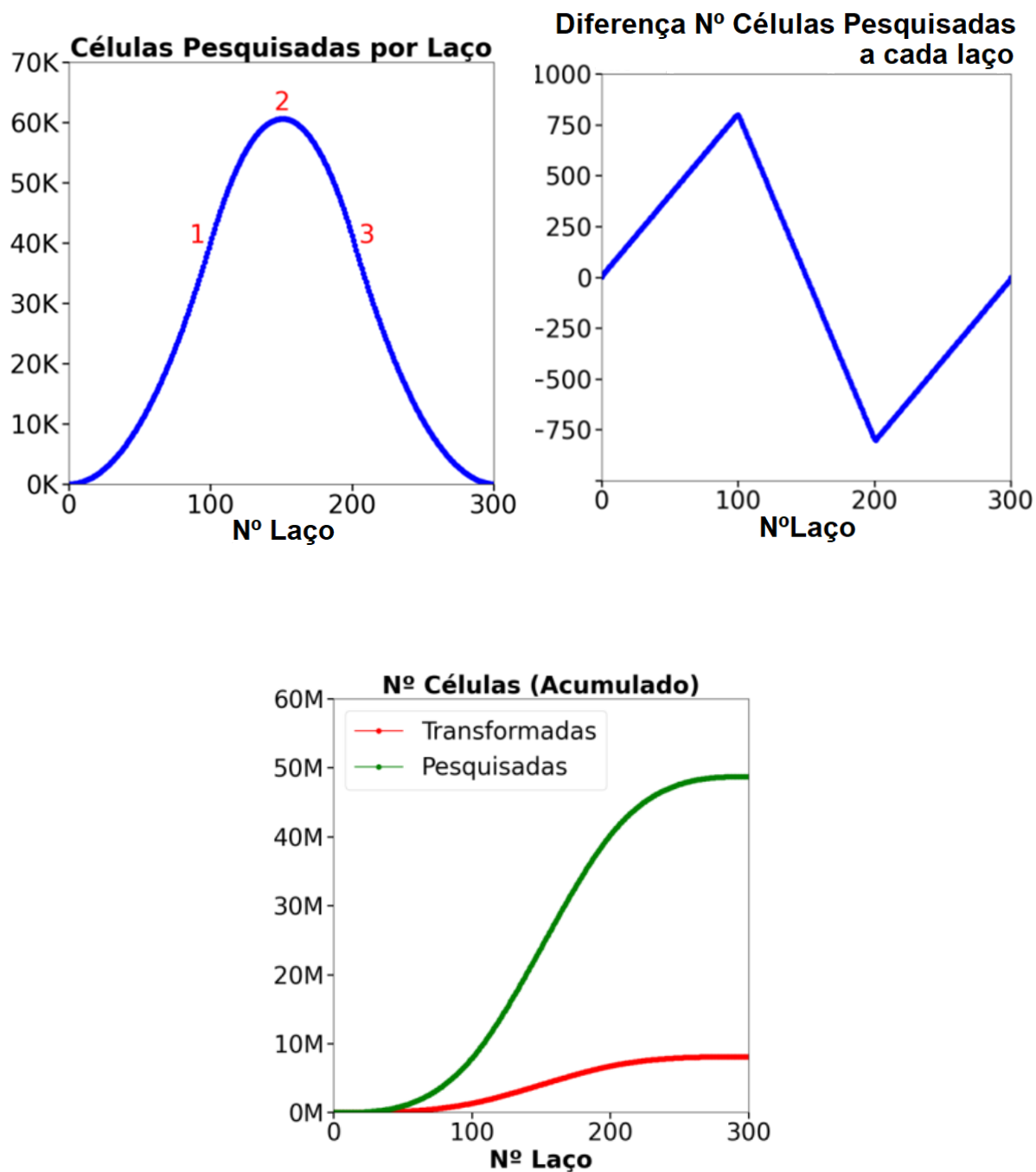
Ambiente 201x201x201 células		Nº Total de Células			
Vizinhança de busca (conjunto)	Nº Laços	Transformadas		Pesquisadas	
		Nº	(%)(¹)	Nº	(%)(²)
VF (V_F^6)	301	8.120.601	100	48.721.806	600
VA (V_A^{12})	151	4.060.301	50	48.721.812	1200
VV (V_V^8)	103	2.030.301	25	16.241.584	800
VF/VA (V_{FA}^{18})	151	8.120.601	100	146.167.560	1800
VF/VV (V_{FV}^{14})	102	8.120.601	100	113.687.000	1400
VA/VV (V_{AV}^{20})	101	8.120.601	100	162.410.020	2000
VP (V_P^{26})	101	8.120.601	100	211.133.026	2600

(1): percentagem em relação ao número total de células do ambiente (8.120.601).

(2): percentagem em relação ao número total de células transformadas.

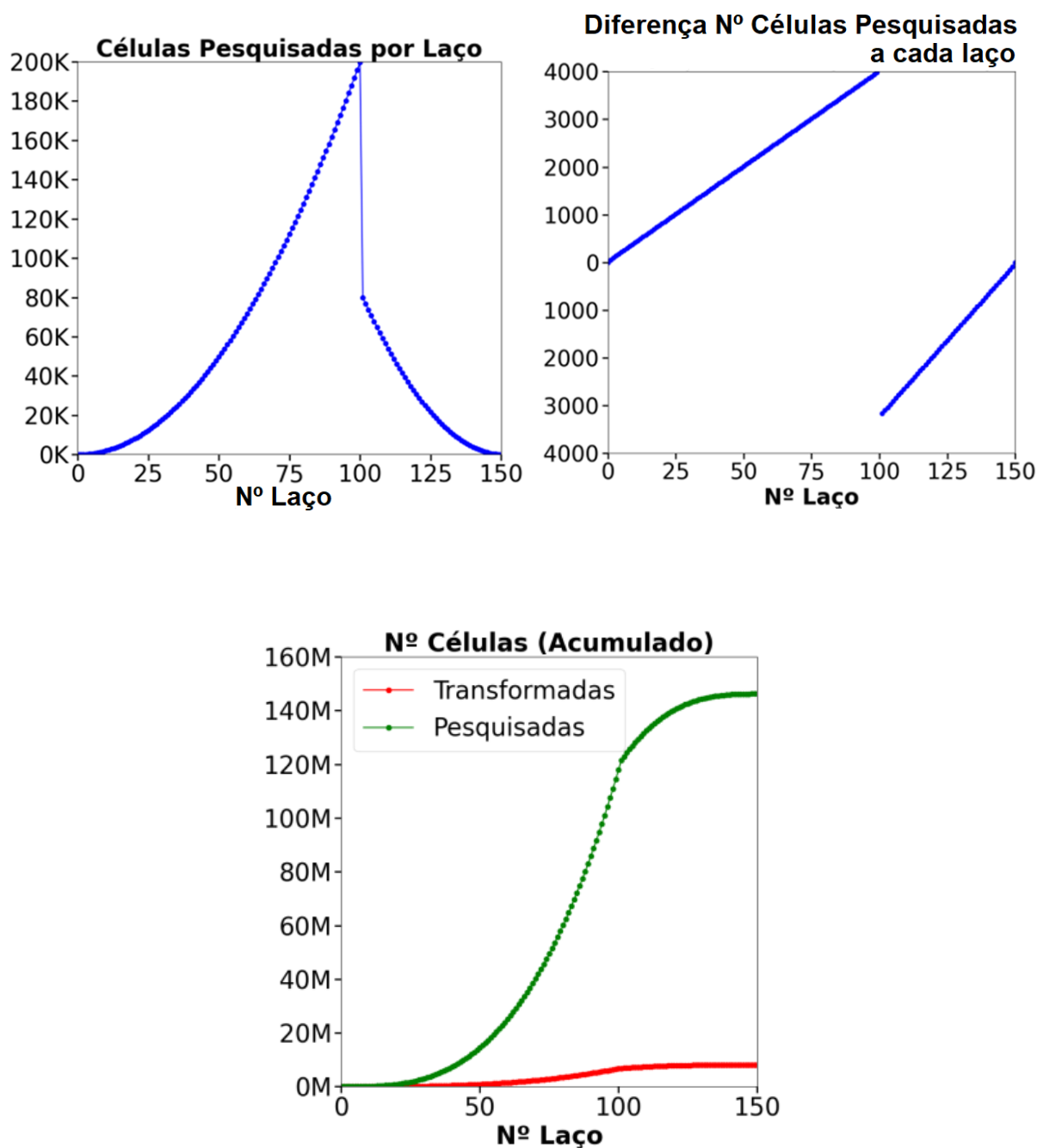
Fonte: do autor.

Figura 5.10. Simulações do ambiente com 201x201x201 células sobre a VF (Nº células pesquisadas por laço, derivada numérica de primeira ordem do nº células pesquisadas pelo nº laço, e o nº acumulado de células pesquisadas e transformadas).



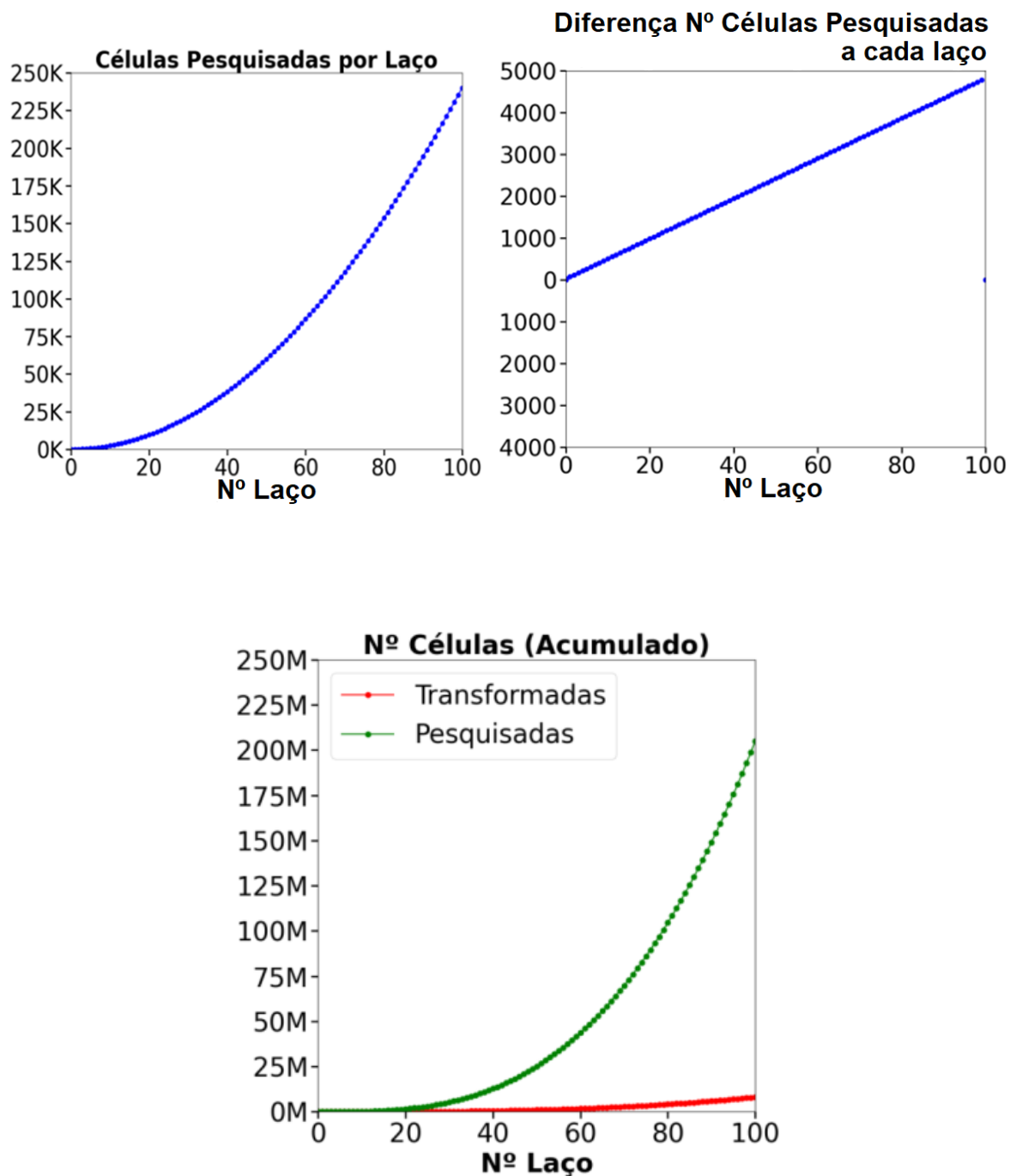
Fonte: do autor.

Figura 5.11. Simulações do ambiente com 201x201x201 células sobre a VF/VA (nº células pesquisadas por laço, derivada numérica de primeira ordem do nº células pesquisadas pelo nº laço, e o nº acumulado de células pesquisadas e transformadas).



Fonte: do autor.

Figura 5.12. Simulações do ambiente com 201x201x201 células sobre a VP (nº células pesquisadas por laço, derivada numérica de primeira ordem do nº células pesquisadas pelo nº laço, e o nº acumulado de células pesquisadas e transformadas).



Fonte: do autor.

A Figura 5.10 apresenta resultados para a busca pela VF, a Figura 5.11 para a busca pela VF/VA, e a Figura 5.12 para a busca pela VP. Os gráficos à esquerda apresentam a evolução do nº de células cuja vizinhança é pesquisada no laço. Os gráficos no centro apresentam a os resultados de uma derivação numérica de primeira ordem do nº de células cuja vizinhança é pesquisada por laço (gráficos a esquerda). Por fim, nos gráficos à direita se têm a evolução do nº total acumulado de células cuja vizinhança é pesquisada (em verde) e de células efetivamente transformadas (em vermelho) por laço.

Inicialmente, nota-se nas Tabelas 5.2 e 5.3 que pela VF foi necessário uma quantidade maior de laços para completar a busca do que a requerida para as demais formas de busca, e, conseqüentemente, a busca pela VF possui a menor quantidade de células pesquisadas por laço.

Ainda, a quantidade de células pesquisadas em cada laço se altera de modo diferenciado em relação a busca empregada. Por exemplo, na busca pela VF a quantidade de células pesquisadas em cada laço aumenta até um valor máximo em torno de 50% da simulação, depois se reduzindo a cada novo laço (Figura 5.10), em um formato que lembra uma curva tipo sino, enquanto pela VP o crescimento é contínuo (Figura 5.12).

Isto faz com que as curvas do Nº de Células Acumuladas Pesquisadas ou Transformadas em função do Nº do Laço para a VF tenha um formato que lembra uma curva tipo sigmoide, enquanto pela busca pela VP estas mesmas curvas tem crescimento contínuo com a evolução da simulação.

A existência de um ponto de máximo nas buscas pela VF ou nas buscas pela VF/VA ocorre devido ao formato do conjunto da evolução das células transformadas ser não coincidente com o formato da matriz total. Isto faz com que em algum momento durante a simulação apenas uma parte das células transformadas atinjam o limite da matriz ambiente, alterando assim o formato de evolução e limitando o encontro de novas células a serem pesquisadas.

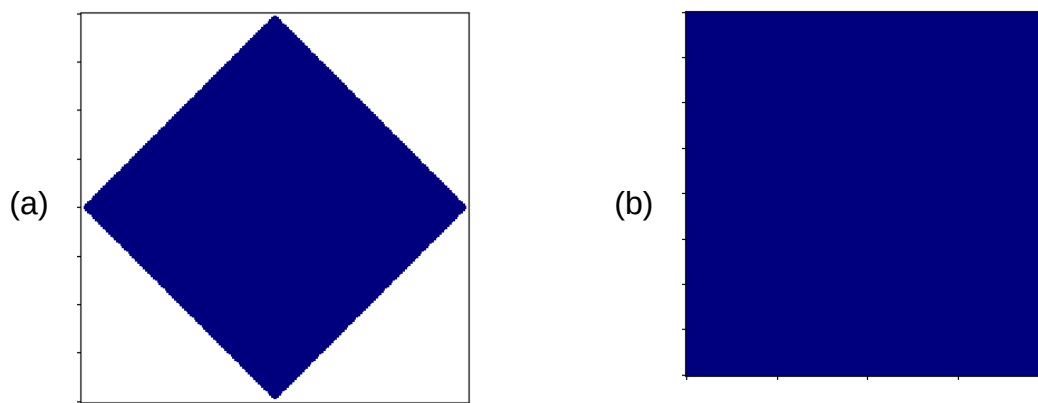
Já no caso da busca pela VP, o formato do conjunto da evolução das células transformadas nos exemplos apresentados é coincidente com o formato da matriz total. Assim o momento no qual o conjunto das células transformadas atinge o limite do material coincide com o momento final da simulação (redução abrupta a zero).

Na Figura 5.10 à esquerda, busca pela VF, foram destacados na curva de evolução do N^o de Células Pesquisadas em função do N^o do Laço três pontos críticos (1, 2 e 3). O ponto crítico 1 indica um momento da simulação onde a taxa de crescimento da curva, então positiva e crescente, continua positiva mas passa a decrescer. O ponto crítico 2 indica um momento de máximo. Por fim, o ponto crítico 3 indica um momento da simulação com similaridades ao do ponto crítico 1, mas agora em relação ao decréscimo.

A determinação do laço em que ocorre o ponto 2 (ou dos que os circundam) é óbvia devido a ser este um ponto de máximo (laço 150). Já para a determinação mais precisa dos pontos críticos 1 e 3, é necessário se verificar o gráfico da sua derivada de primeira ordem (Figura 5.10a no centro).

Pelo gráfico da derivada os pontos críticos 1 e 3 podem ser claramente identificados por serem respectivamente o máximo e o mínimo, ocorrendo no entorno dos laços 100 e 200 respectivamente. Para melhor compreender as razões que causaram estas mudanças abruptas no comportamento, várias imagens das simulações em momentos no entorno destes pontos críticos foram verificadas, algumas apresentadas na Figura 5.13.

Figura 5.13 - Para a pesquisa sobre VF, em (a) se tem qualquer um dos 3 planos centrais no laço nº 100, ou de qualquer uma das faces no laço nº 200, e em (b) qualquer um dos 3 planos centrais no laço nº 200.



Nota: Para a pesquisa sobre VF/VA no laço nº 100, em (a) se tem qualquer uma das faces, e em (b) qualquer um dos 3 planos centrais.

Fonte: do autor.

Para a busca pela VF, na Figura 5.13a é mostrada a representação do plano central (devido a simetria da evolução e do ambiente esta é a imagem de qualquer um dos planos XY, XZ ou YZ centrais) no laço nº 100. Fica agora claro o porque do ponto crítico 1. A simulação fez neste momento que o grão em crescimento atingisse a superfície do material. Até este ponto a região de contorno do grão crescia livremente, mas a partir deste ponto não mais poderá crescer livre em todo seu entorno por ter atingido em alguns pontos seus limites, por isso a mudança na inclinação da curva de evolução do nº células pesquisadas por laço.

A mesma Figura 5.13a pode ser usada para representar um momento da simulação no laço nº 200 de qualquer uma das seis faces do material, correspondendo ao ponto crítico 3. Neste momento todos os três planos centrais estão completamente transformados (Figura 5.13b).

Alguns comentários análogos podem ser realizados para descrever a evolução da busca pela VF/VA (Figura 5.12). Percebe-se uma alteração abrupta na forma de evolução da curva do nº células pesquisadas no laço nº 100. Isto aconteceu devido a neste momento a face quadrada superior atingir os planos externos (Figura 5.13a).

Concomitantemente, neste momento, todos os planos centrais ficaram completamente preenchidos (Figura 5.13b). Assim a região livre para crescimento sobre uma redução abrupta.

Em relação ao número de células pesquisadas e o número de células transformadas, a diferença entre estes valores é brutal para todas as vizinhanças de busca verificadas. São dois os motivos principais para estas diferenças.

Um deles é que quando a busca ocorre nos limites extremos do ambiente, muitas das pesquisas são realizadas sobre células que estariam em tese fora do ambiente matricial total concebido, o que obviamente não resulta em transformação (espécie de limite extra de valor fixo na busca do AC).

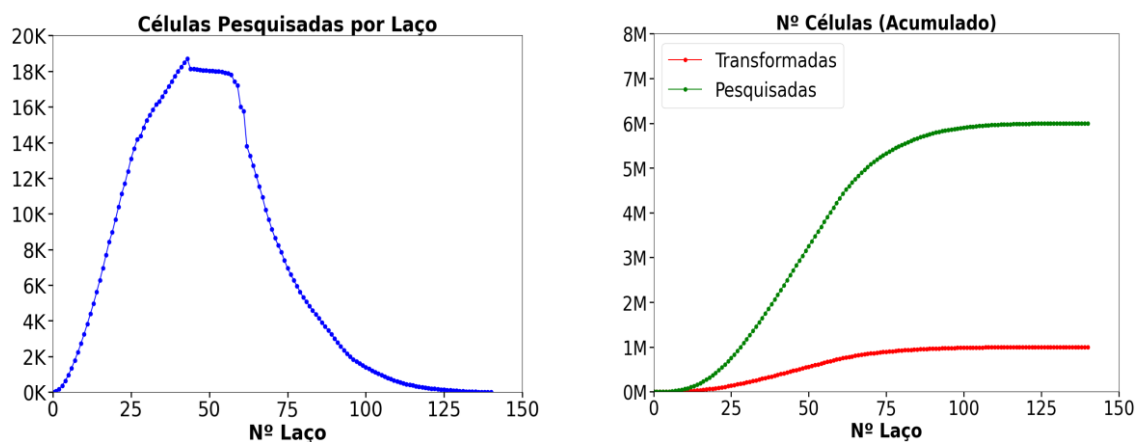
O segundo, e principal motivo que ocorre também no interior da matriz, é que após o laço inicial, várias pesquisas acontecem em células que acabaram de ser transformadas em uma pesquisa anterior, sendo portanto pesquisas que não resultam em novas transformações. Quanto maior o número de pesquisas realizadas sem resultar em transformação (pesquisas em tese desnecessárias), maior o custo computacional em relação a este quesito.

Um ponto notável é que a relação absoluta entre o número de células acumuladas pesquisadas e transformadas final das simulações realizadas possui o mesmo valor do número de células pesquisadas pela respectiva célula de origem, tanto através da busca pela VF quanto para todas as demais vizinhanças de busca consideradas. Isto é causado pelo algoritmo gerador, de modo que independentemente do número de células pesquisadas, na média da simulação, para cada célula transformada um conjunto fixo pré-determinado é pesquisado.

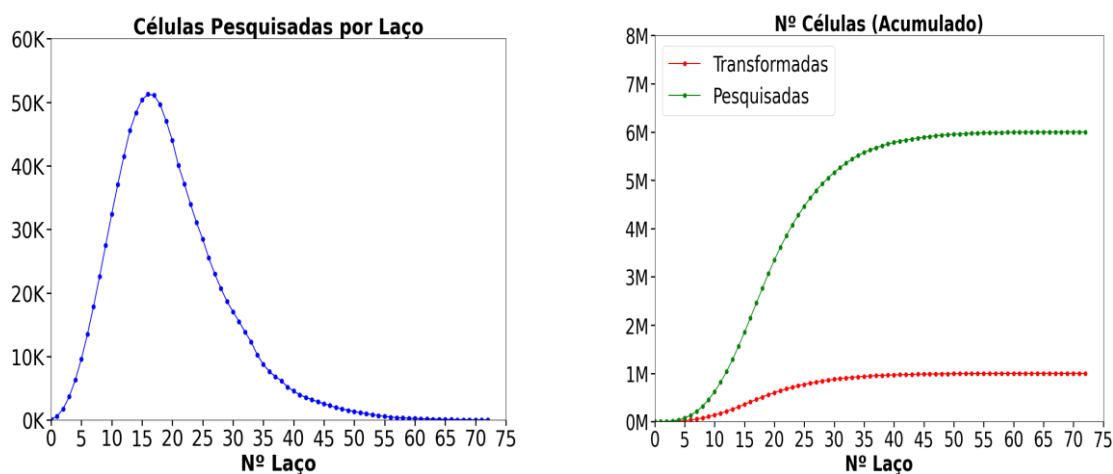
5.7 Efeito do número de sementes sobre a performance do algoritmo

Para verificar a influência do número de sementes sobre alguns aspectos do algoritmo, foram feitas simulações em um ambiente com 100x100x100 células, contendo 10, 100 e 1000 sementes, realizando a pesquisa pela VF (Figura 5.14).

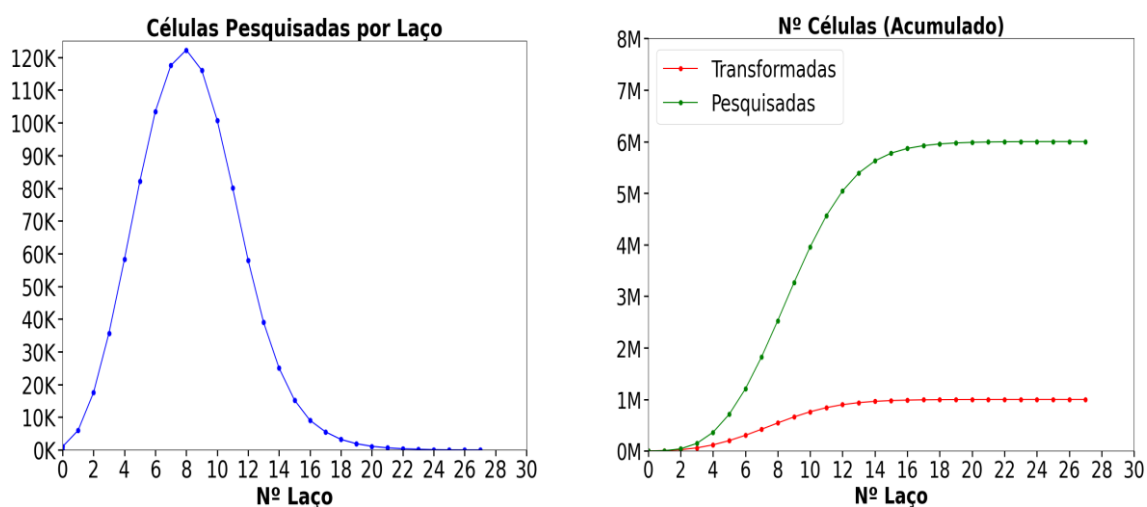
Figura 5.14. Em pesquisa pela VF em ambiente de 100x100x100 células, graficos do número de células cuja vizinhança é pesquisada (a esquerda) e o número acumulado de células pesquisadas e transformadas (a direita) em função do número do laço.



(a) 10 sementes (140 laços).



(b) 100 sementes (72 laços).



(c) 1000 sementes (27 laços)

Fonte: do autor.

Observa-se que o número de sementes influencia significativamente tanto na quantidade de laços da simulação quanto na quantidade de células cuja vizinhança é pesquisada em cada laço. Quanto menor o número de sementes, maior o número de laços para completar a simulação, mas menor será a quantidade de células cuja vizinhança é pesquisada a cada laço. Isto acontece de forma que, no comportamento global (células pesquisadas e transformadas) não haverá diferença nos valores acumulados, apenas a distribuição será em maior ou menor quantidade de laços.

5.8 Sementes geminadas

Como anteriormente visto, as buscas por VA e VV ocorrem por redes matriciais com arranjos específicos, que ao evoluir de uma única semente não conseguem preencher todo o volume do ambiente matricial disponível, mas de apenas 50% ou 25% respectivamente. Isto traz a ideia alternativa de realizar uma busca a partir de uma semente geminada, composta por mais de uma célula, visando desse modo se criar as redes matriciais distintas mínimas de evolução, de modo que todo o volume disponível seja coberto, resultando em uma transformação plena.

Assim realizou-se experimentos nos ambientes com $21 \times 21 \times 21$ células e com $201 \times 201 \times 201$ células, ambos com uma semente geminada dupla no seu centro evoluindo pela busca VA, e também com uma semente geminada quadrupla no seu centro evoluindo pela busca VV. Na Tabela 5.4 são apresentados resultados destas simulações, e na Figura 5.15 algumas imagens representativas.

Tabela 5.4. Simulações completas em ambientes com 21x21x21 células e com 201x201x201 células, sem obstruções internas, iniciando com uma célula geminada dupla (VA) ou quadrupla (VV), localizada no seu centro.

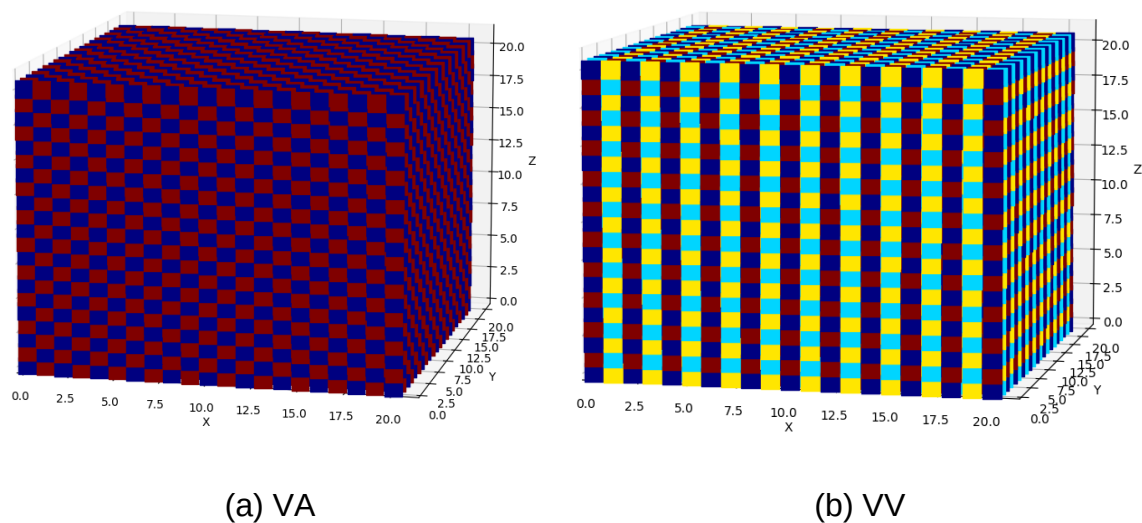
Ambiente (Nº Células)	Vizinhanças de Busca (conjunto de busca)	Nº Laços	Nº Total de Células			
			Transformadas		Pesquisadas	
			Nº	(%) ⁽¹⁾	Nº	(%) ⁽²⁾
21x21x21 (9.261)	VA (V_A^{12})²	16	9.261	100	110.952	1200
	VV (V_V^8)⁴	13	9.261	100	73.984	800
201x201x201 (8.120.601)	VA (V_A^{12})²	151	8.120.601	100	97.445.412	1200
	VV (V_V^8)⁴	103	8.120.601	100	64.963.984	800

(1): percentagem em relação ao número total de células do ambiente.

(2): percentagem em relação ao número total de células transformadas.

Fonte: do autor.

Figura 5.15. Representações em 3D do resultado final das simulações (ambientes de 21x21x21 células). Em (a) a partir de uma semente geminada dupla e busca pela VA, e em (b) a partir de uma semente geminada quadrupla e busca pela VV.



Fonte: do autor.

Na Figura 5.15 cada rede matricial diferenciada gerada está com suas células representada em uma cor diferente. Dessa forma, tem-se duas cores na Figura 5.15a e quatro cores na Figura 5.15b. Como observado, em todas estas simulações a plenitude foi de 100%.

Assim a busca pela VA a partir de uma semente única gera um arranjo específico de rede matricial que contempla 50% das células. Aplicando-se neste ambiente uma outra busca pela VA, em uma semente qualquer que não pertença a rede matricial anteriormente pesquisada, a plenitude do ambiente será alcançada na busca.

Similarmente, a busca pela VV a partir de uma semente gera um arranjo específico de rede matricial que contempla 25% das células. Aplicando-se neste ambiente outras buscas pela VV, a partir de outras três sementes quaisquer que não pertençam a rede matricial anteriormente pesquisada, e que também pertençam a redes matriciais de busca pela VV diferentes entre si, a plenitude do ambiente também será alcançada na busca.

Isto também explica a razão para qual na busca combinada pela VA/VV, a partir de uma única semente, ter sido capaz de alcançar a plenitude (Tabelas 5.2 e 5.3). Naquele experimento, estas diferentes vizinhanças de buscas aplicadas concomitantemente geraram células transformadas em redes que já são naturalmente complementares.

5.9 O formato dos grãos formados

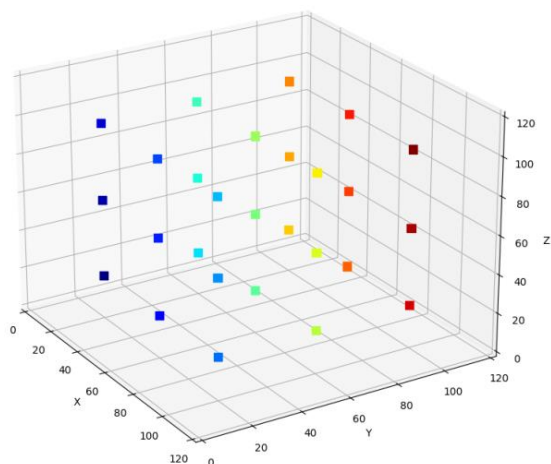
Havendo somente uma semente (um grão), a vizinhança de busca empregada obviamente não irá influenciar no formato do grão final, já que a semente irá crescer até atingir todo o ambiente. Entretanto, na existência de mais grãos (mais sementes), uma questão importante é saber como a seleção da vizinhança de busca pode influenciar no formato dos grãos formados.

Para abordar este ponto, inicialmente serão conduzidas simulações aplicando as buscas sobre a VF em um ambiente com dimensões de 120x120x120 células. Serão criadas 27 sementes, distribuídas uniformemente em um arranjo específico padronizado ao longo do material, com 9x9x9 sementes equidistantes em cada um de três planos distintos, em uma hipotética nucleação periódica. A Figura 5.16 ilustra resultados destas simulações. Nas imagens, cada grão está representado com uma cor diferente.

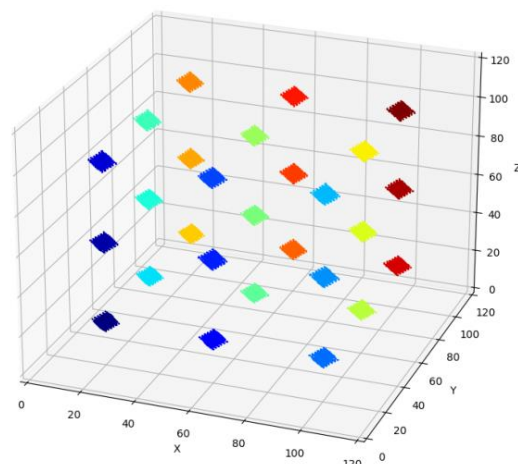
Na Figura 5.16a é apresentada uma representação do posicionamento inicial das 27 sementes. Na Figura 5.16b é apresentada uma representação dos grãos gerados pela busca pela VF após 5 laços de pesquisa. A Figura 5.16c é similar a Figura 5.15b, mas agora os grãos estão maiores (a simulação pela VF atingiu uma transformação de 10% do ambiente). Por fim, na Figura 5.16d é mostrada uma representação da simulação já completa (100% de transformação).

Observa-se que os grãos em formação nas Figuras 5.16b e 5.16c possuem o seu formato característico esperado para a busca pela VF, como já anteriormente observado na Figura 5.3b também para a busca pela VF. Entretanto, independente do seu formato característico mantido durante a evolução da simulação, ao seu final todos os grãos apresentaram um formato de cubos (na imagem a forma está mais similar a paralelepípedos, mas isto é devido apenas a escala da visualização em z ser reduzida em relação as escalas em x e em y).

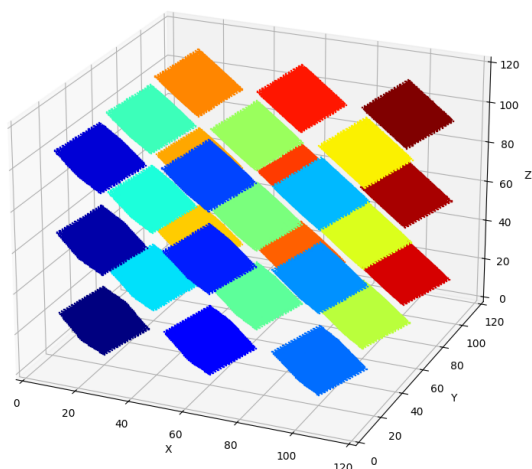
Figura 5.16. Representações 3D de momentos de simulação pela busca sobre VF em ambiente com 120x120x120 células e 27 sementes. Em (a), o posicionamento inicial das sementes, em (b) após o 5º laço, em (c) após ter atingido 10% de transformação, e em (d) no momento final.



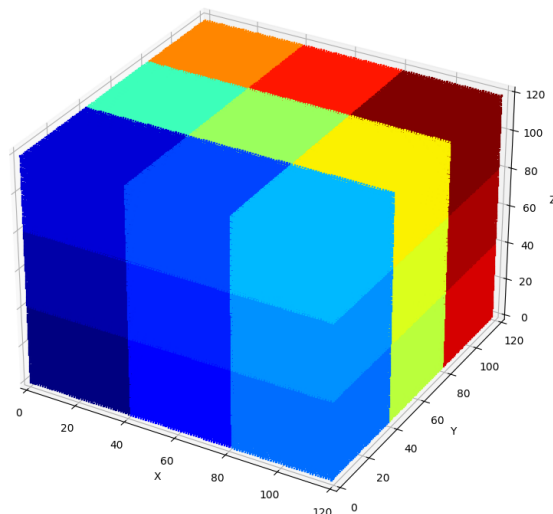
(a)



(b)



(c)

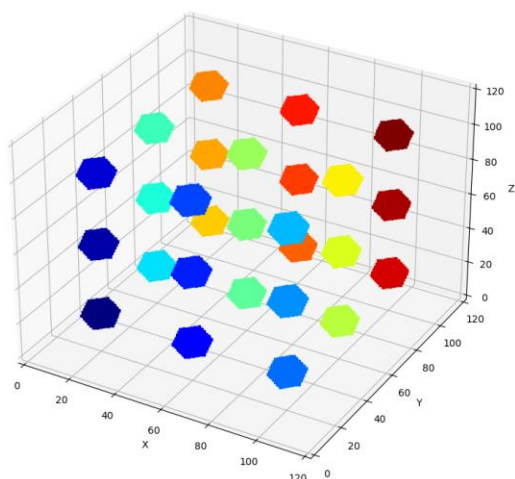


(d)

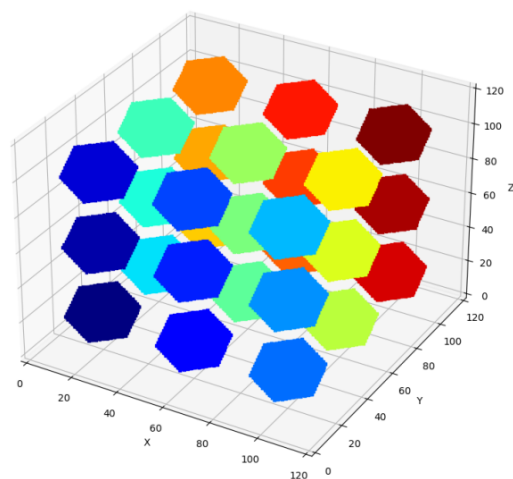
Fonte: do autor.

Para verificar estes efeitos com buscas em outras vizinhanças, os experimentos da Figura 5.16 foram repetidos para a busca pela VF/VA e para a busca pela VP. A Figura 5.17 apresenta alguns resultados específicos.

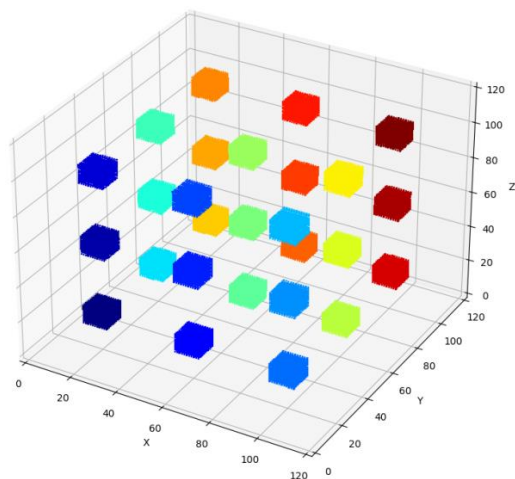
Figura 5.17. Representações 3D de momentos de simulação no ambiente da Figura 5.15. Pela VF/VA em (a) após o 5º laço, e em (b) após ter atingido 10% de transformação. Pela VP em (c) após o 5º laço, e em (d) após ter atingido 10% de transformação.



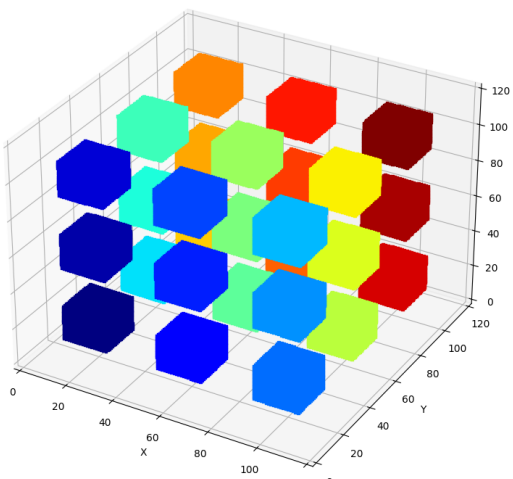
(a)



(b)



(c)



(d)

Fonte: do autor.

A Figura 5.16a também pode ser utilizada para representar o estado inicial das demais simulações (VF/VA e VP), já que todas as buscas ocorreram em um mesmo ambiente inicial e com a mesma distribuição de sementes.

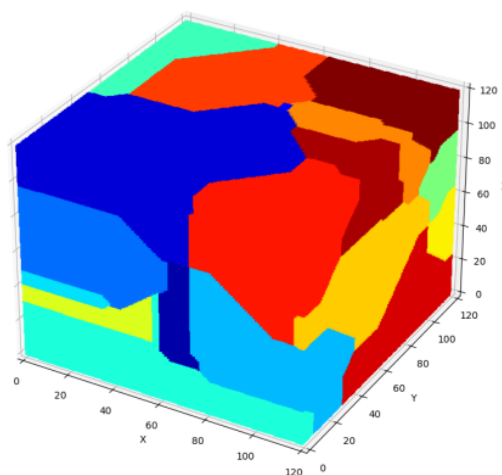
Já as Figuras 5.17a, 5.17b, 5.17c e 5.17d apresentam imagens de momentos similares aos apresentados nas Figuras 5.16b e 5.16c para a VF, mas agora com a realização da busca pela VF/VA e VP respectivamente. Nestas imagens se observa o formato característico esperado para estas formas de busca de vizinhança (Figura 5.6).

Entretanto, para a representação do final de todas as simulações, pode ser utilizada a já apresentada Figura 5.16d para ilustrar o final da simulação realizada pela VF. Isto ocorre porque, independente do formato diferenciado dos grãos gerados durante estas simulações, ao final os grãos gerados serão realmente idênticos, tanto para as pesquisas realizadas pela VF, quanto pela VF/VA, quanto pela VP.

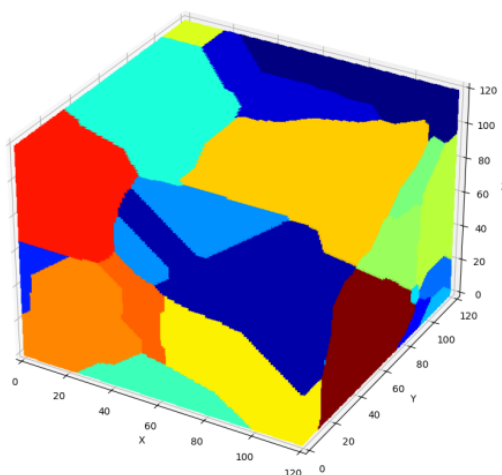
Entretanto, nestas simulações as sementes estavam igualmente e regularmente distribuídas em um arranjo muito específico. Para verificar a influência deste arranjo, duas novas simulações similares foram realizadas, mas com as sementes distribuídas aleatoriamente no interior do material e de modo diferenciado entre as simulações. A Figura 5.18 apresenta imagens destas simulações. Cada semente está representada por uma cor diferente.

Figura 5.18. Representações 3D do momento final da simulação em ambiente 120x120x120 células com 27 sementes aleatórias e distintas entre as simulações no seu interior. Em (a) foi realizada a busca pela VF, em (b) pela VF/VA, e em (c) pela VP.

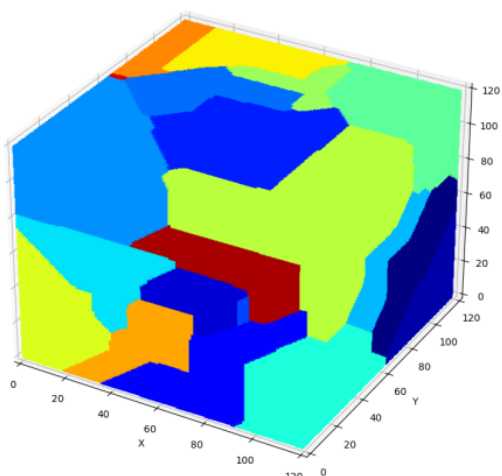
(a) VF



(b) VF/VA



(c) VP



Fonte: do autor.

Uma análise visual preliminar e qualitativa da Figura 5.18 indica grande variabilidade no formato dos grãos entre as imagens. Não é possível de modo aparente se perceber qualquer relação entre o formato dos grãos formados e a vizinhança de busca empregada, e os mesmos se diferenciam muito de estruturas esféricas (baixo grau de esfericidade).

De modo a eliminar a potencial influência da distribuição diferenciada das sementes entre as pesquisas, são por fim realizadas mais duas novas simulações similares, com a distribuição das sementes ainda aleatória, mas iguais entre si para as três formas de buscas. A Figura 5.18 ilustra estes resultados.

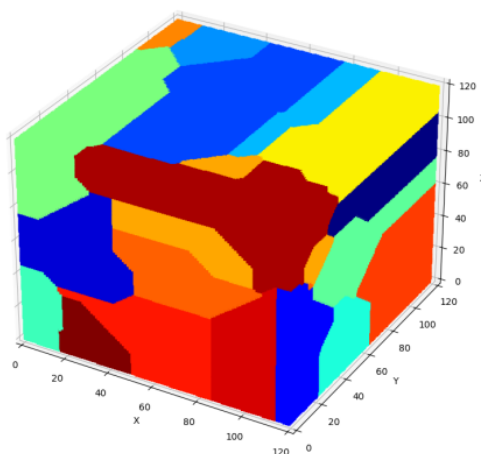
Uma simples comparação visual entre as imagens da Figura 5.19a, 5.19b e 5.19c deixa claro que as mesmas possuem vários aspectos imagéticos em comum. As imagens não são totalmente diferentes como aconteceu entre as Figuras 5.18a, 5.18b e 5.18c, existindo nítidas similaridades. Isto é esperado já que os grãos tiveram origem nos mesmos locais. Entretanto, as imagens absolutamente também não são iguais, ficando claro que mesmo com as 27 sementes na mesma localização, várias alterações no formato final em função da vizinhança de busca selecionada podem existir.

Isto pode ser explicado devido ao fato de que, em função da vizinhança de busca escolhida, o formato dos grãos em evolução são muito diferenciados. Assim, durante o seu crescimento, grãos vizinhos irão se encontrar em diferentes momentos e em diferentes regiões, dependendo da vizinhanças de busca selecionada e da localização dos mesmos. Isto irá resultar em formatos geométricos diferenciados, que com a continuação do crescimento vão se encontrar com outros grãos, gerando formatos ainda mais sofisticados, e eventualmente degenerados (GLICKSMAN; RIOS; LEWIS, 2009; HULL et al., 2018), em um processo que só vai se encerrar no final da simulação.

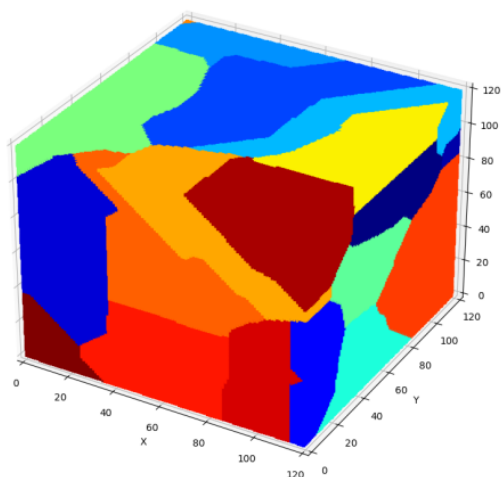
Por fim, para melhor compreender a influência do número de grãos sobre o formato dos mesmos, em situação de distribuição totalmente aleatória das sementes (condição mais realista), o experimento da Figura 5.18 foi refeito, mas agora com 1000 sementes em cada simulação em um ambiente de 120x120x120 células. A Figura 5.20 apresenta alguns resultados.

Figura 5.19. Representações do momento final da simulação em ambiente 120x120x120 células com 27 sementes seu interior. Em (a) foi realizada a busca pela VF, em (b) pela VF/VA, e em (c) pela VP, com a distribuição das sementes aleatória mas idêntica entre as simulações.

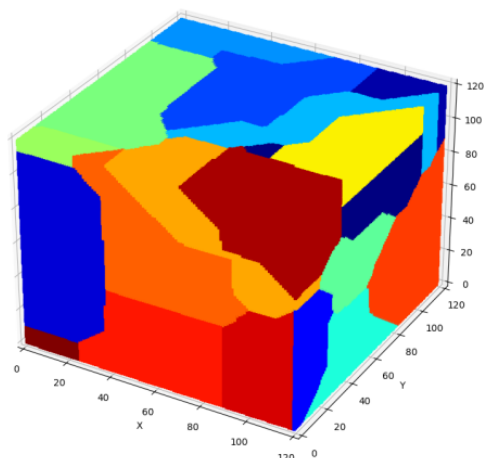
(a) VF



(b) VF/VA



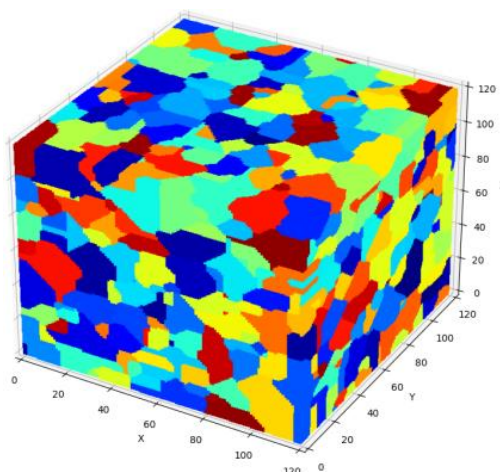
(c) VP



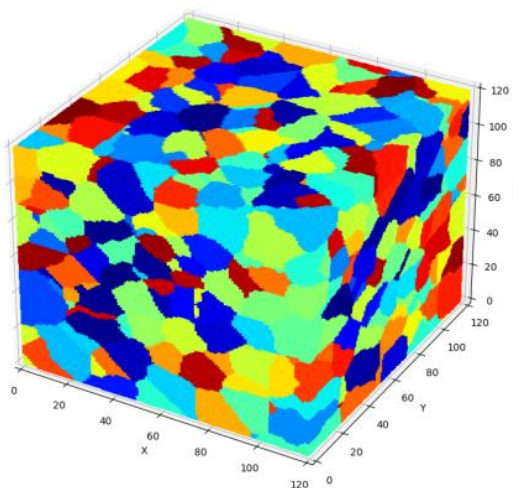
Fonte: do autor.

Figura 5.20. Representações do momento final da simulação em ambiente de 120x120x120 células com 1000 sementes iniciais distribuídas de modo aleatório e diferenciado entre as simulações. Em (a) foi realizada a busca pela VF, em (b) pela VF/VA, e em (c) pela VP.

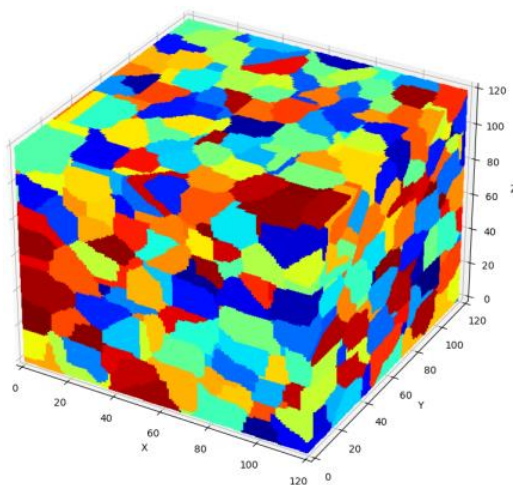
(a) VF



(b) VF/VA



(c) VP



Fonte: do autor.

Assim, a resposta ao ponto inicialmente colocado é que sim, a vizinhança de busca aplicada pode influenciar significativamente no formato dos grãos finais obtidos. Ainda, em relação aos objetos formados já considerados, o formato pela VF/VA (cuboctaedro) é o que mais se aproxima naturalmente da geometria esférica.

Assim, se em uma etapa posterior de parametrização metalúrgica esta condição de maior esfericidade for um ponto relevante, realizar a busca pela VF/VA pode ser potencialmente mais interessante.

Entretanto, para todos os casos estudados, mesmo considerando aspectos de modo qualitativo, não foi observado após o final da simulação a estrutura granular equiaxial teórica presumida que seria baseada na forma de um ortotetracaidecaédro (OTC) (Figura 3.9a e Anexo II), ou mesmo tendo alguma similaridade com uma esperada microestrutura monofásica policristalina (Figura 3.11).

Era esperada uma normal variação de geometria entre os grãos (SMITH; NICHOLS, 1993), mas não como a encontrada neste trabalho pelas simulações com os AC.

6 SIMULAÇÃO POR AUTÔMATOS HÍBRIDOS

Como visto no Capítulo 5, a aplicação do crescimento por AC diretamente pela pesquisa sobre a VF gera grãos em formatos octaédricos, enquanto a pesquisa sobre a VF/VA gera grãos em formatos de cuboctaedros, e a pesquisa sobre a VP gera grãos em formatos cúbicos.

Ressalta-se novamente que estes são os formatos gerados na recristalização a partir de uma única semente, antes de haver impedimento do seu crescimento causado por outros grãos ou quaisquer barreiras ou limites. Ainda, ao descrever estas formas como sendo octaédricas, cuboctaédricas e cúbicas, na verdade são as formas homologas às mesmas considerando as limitações de um ambiente tridimensional discreto (formas matriciais).

Dessa forma, a aplicação de um método puro de AC determinístico, utilizando uma pesquisa e replicação direta por sobre suas primeiras vizinhanças não orientadas, sem se aplicar nenhuma regra extra ou algoritmo adicional, apesar de provocar a reprodução das sementes existentes conforme determinadas geometrias, não é capaz de provocar o crescimento de grãos em um rede equiaxial.

Assim, foram realizadas alterações na técnica empregada de modelagem originalmente por AC, de modo que fossem mantidas suas excelentes qualidades intrínsecas enquanto ferramenta de simulação, mas que pudesse levar à formação de grãos completamente matricialmente esféricos.

Para isto, foi empregada como técnica de modelagem os autômatos híbridos (AH). Os AH são considerados como uma técnica baseada em AC, havendo portando muitas semelhanças entre ambas. Entretanto, é permitido aos AH operarem com um universo de possibilidades discretas e contínuas ao mesmo tempo, ou seja, processos discretos interagem com processos físicos ou analógicos (LYNCH; SEGALA; VAANDRAGER, 2003).

Esta forma de operação híbrida (contínua-discreta) fere alguns quesitos mandatórios dos AC puros, descaracterizando-os estritamente como tais, mas ao mesmo tempo abre para a modelagem uma gama de novas possibilidades e com diversos dos pontos positivos dos AC.

Assim, espera-se que simulações com mais elevado nível de realismo possam ser diretamente mais facilmente realizadas, sem que haja a necessidade da aplicação de algoritmos ou procedimentos posteriores de correção e controle, ou de se conviver com os erros gerados.

Neste capítulo se vai realizar por meio de AH a modelagem computacional do crescimento equiaxial de grãos em metais, com a realização subsequente da sua parametrização dimensional final.

6.1 Algoritmo gerador

A técnica utilizada na simulação foi a da modelagem por autômatos híbridos, tridimensionais e determinísticos, em uma matriz retangular com células cúbicas. Assim como na modelagem com AC, a matriz é não periódica (nenhuma interação acontece com ambiente exterior). As buscas (e quando acontecem também a replicagem) são realizadas somente sobre as primeiras vizinhanças pelas faces (VF) dos últimos autômatos gerados.

Como já apresentado, o programa global de simulação (SimCres v. 1.0) possui três módulos: o módulo de recristalização (crescimento do(s) novos grão(s)), o módulo de parametrização dimensional, e o módulo de visualização. Estes módulos são totalmente independentes entre si, e seu funcionamento se dá conforme descrito no Capítulo 4.

O núcleo principal do algoritmo gerador de busca, exploração e replicação computacionalmente implementado neste trabalho para a modelagem por AH está sintetizado no pseudocódigo do Quadro 6.1.

Quadro 6.1. Listagem do pseudocódigo do núcleo da rotina de busca, exploração e replicação do algoritmo gerador implementado pelo método AH.

```

INPUT: MA, MS, passo
OUTPUT: MAM
01 FUNCTION AlteraAmbiente
02   MBP = MS
03   dist_contr = 0
04   WHILE MBP ≠ 0:
05     dist_contr = dist_contr + passo
06     MBS = 0
07     FOR i variando de 1 até comprimento (MS):
08       (x0, y0, z0) = coordenadas indicadas em MS(i) # endereço semente i
09       FOR j variando de 1 até comprimento MBP(i):
10         (xi, yi, zi) = coordenadas indicadas em MS(i, j) # endereço contorno verificado
11         FOR k variando de 1 até 6: # pesquisa as vizinhanças pelas faces:
12           MBV(k) = coordenada da vizinhança pela face considerada
13           (xf, yf, zf) = coordenadas indicadas em MBV(k)
14           IF (xf, yf, zf) indica uma coordenada válida e livre THEN:
15             dist_origem = [(xf - x0)2 + (yf - y0)2 + (zf - z0)2]1/2
16             IF dist_origem ≤ dist_contr THEN: # HIBRIDIZAÇÃO
17               MAM(xf, yf, zf) = MAM(xi, yi, zi)
18               MBS (i) = MBS(i) + {(xf, yf, zf)}
19             ELSE:
20               IF (xi, yi, zi) não pertence a MBS(i) THEN:
21                 MBS = MBS(i) + {(xi, yi, zi)}
22               END IF
21             END IF
22             END IF
23           END FOR
24         END FOR
25       END FOR
26     MBP = MBS
27   END WHILE
28 END FUNCTION

```

Fonte: do autor.

Onde:

- (x_0, y_0, z_0) são as coordenadas da célula de origem da semente;
- (x_i, y_i, z_i) são as coordenadas da célula de origem do laço;
- (x_f, y_f, z_f) são as coordenadas da célula vizinha à célula de origem que está sendo pesquisada;
- j é o conjunto de vizinhanças diretas consideradas (como a pesquisa ocorre pelas faces, são 6 as primeiras vizinhanças possíveis)
- MA é a matriz tridimensional inicial que representa o metal antes da simulação;
- MAM é a matriz tridimensional que representa o metal durante a recristalização ou ao seu final;
- $MAM(x_i, y_i, z_i)$ contém o número da semente da célula de origem sendo considerada;
- MBP é a matriz de busca primária, que contém as coordenadas de todas as células de origem em determinado laço ;
- MBS é a matriz de busca secundária, que contém as coordenadas de todas as células em MAM que tiveram seus valores alterados em determinado laço;
- $passo$ é o número máximo de células que se pode evoluir a cada laço (quando não informado ao contrário, $passo = 0,5$);
- $dist_contr$ é o número total de células teoricamente evoluídas a partir da célula de origem em um eixo (grandeza não discreta); e
- $dist_origem$ é a distância linear entre o centro da célula verificada e o centro da célula da semente originária (grandeza não discreta).

O critério de vizinhança pela face foi escolhido por, além de ser a forma de pesquisa mais simples, ser a mais eficiente computacionalmente. É verdade que das primeiras vizinhanças não orientadas, a VF gera erros consideráveis devido ao formato matricial octaédrico natural da sua pesquisa, mas devido a hibridização da modelagem esta característica negativa não será relevante e não irá influir nos resultados dimensionais dos grãos formados.

Este algoritmo gerador implementado é então aplicado sobre esta matriz ambiente com as sementes. Similarmente ao realizado para a modelagem por AC,

este algoritmo inicialmente realiza uma pesquisa nas células da primeira vizinhança pelas faces. Neste primeiro laço, se o estado das células da vizinhança diretamente explorada possuir o valor do estado característico da fase parente, o estado destas células pesquisadas são alterados para o estado característico da semente originária do grão.

Após este primeiro laço, o algoritmo gerador implementado será novamente aplicado, mas não mais às células das sementes, mas àquelas células que tiveram seu valor alterado (os novos contornos dos grãos recristalizados em evolução). Assim o algoritmo realiza uma pesquisa nas células da primeira vizinhança pelas faces destas células dos novos contornos de grãos. Do mesmo modo que fez no primeiro laço, o estado de todas estas células pesquisadas que pertencem a fase parente, mas agora que também estejam a uma distância ao centro da semente igual ou inferior ao raio da circunferência esperada (*dist_origem*), serão alterados.

Dessa forma, no segundo laço em diante, a evolução é impedida de seguir livremente em todas as direções, sendo limitada pela evolução da esfera, o que assegura o formato matricialmente esférico dos grãos recristalizados.

Este processo é então repetido sucessivamente até que não haja mais nenhuma célula da primeira vizinhança dos grãos formados a ser pesquisada (todo o ambiente foi pesquisado e transformado).

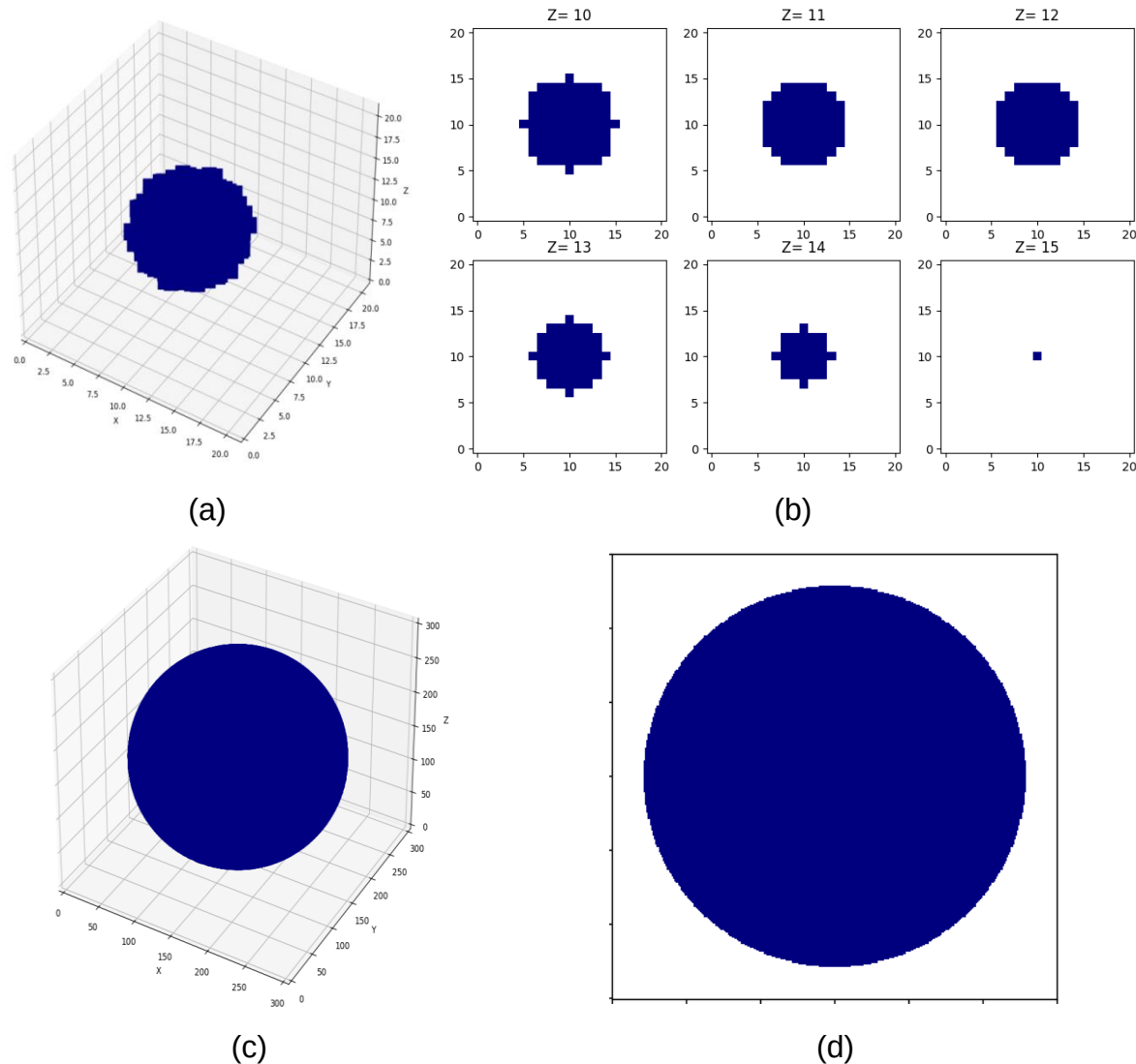
6.2 Geração dos grãos com formato esférico

Para verificar a adequação da metodologia quanto a obtenção do formato esférico matricial dos grãos em formação, realizou-se a simulação do crescimento de um único grão, em um ambiente de 21x21x21 células, e também em um ambiente de 301x301x301 células. Nestas simulações a semente estava inicialmente localizada no centro do ambiente. A Figura 6.1 apresenta alguns resultados.

Como verificado visualmente, os resultados foram excelentes. Diferentemente do que acontece com a pesquisa pela primeira vizinhança não orientada por um AC, por AH é plenamente possível obter diretamente uma forma esférica exata,

obviamente que dentro dos limites de precisão de um ambiente discreto (forma matricial).

Figura 6.1. Imagens de momentos de simulações com inicialmente uma única semente em seu centro. Semente e células transformadas na cor azul.



Legenda:

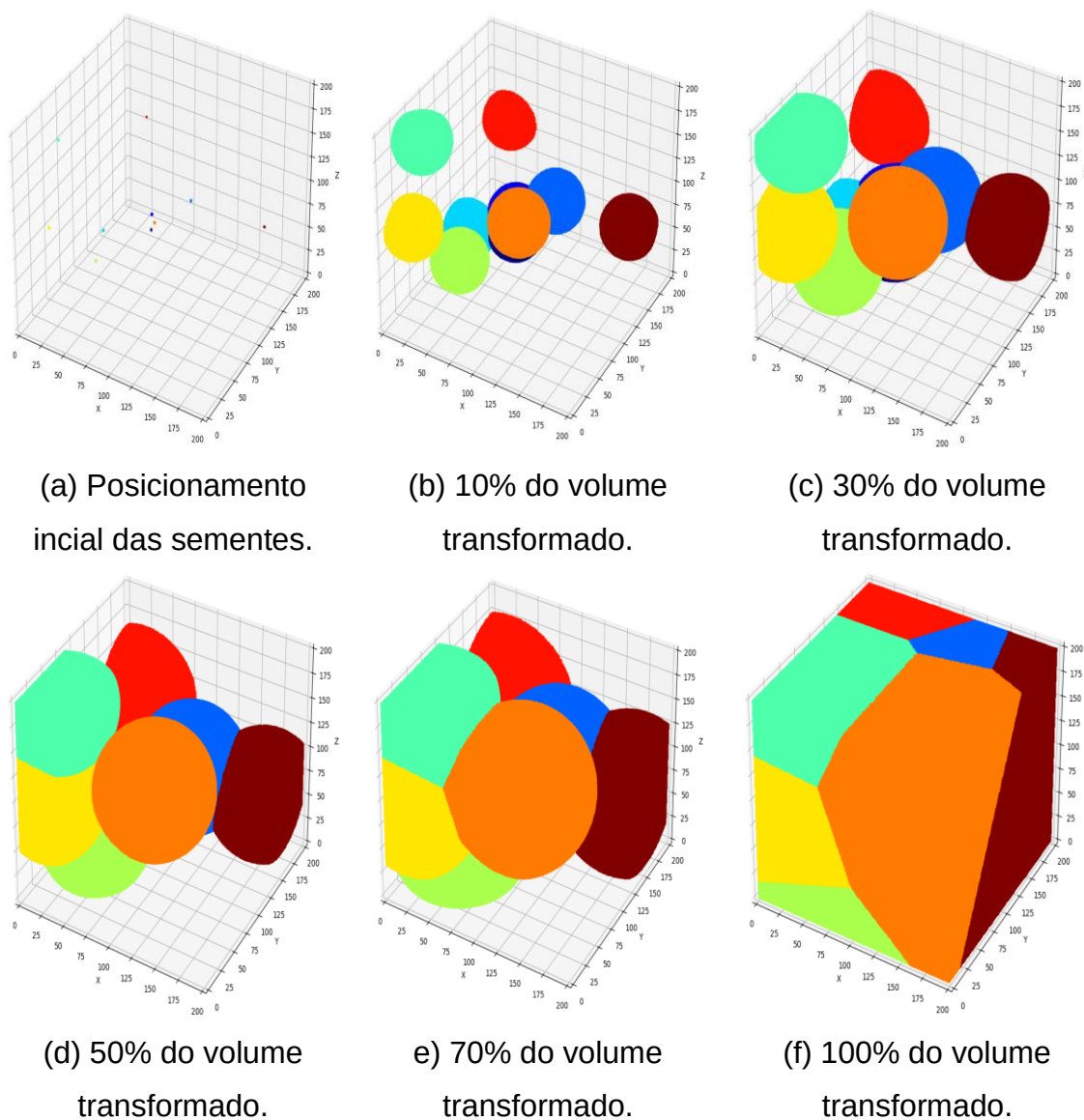
Em (a) e (b) em um ambiente com 21x21x21 células após o passo nº 17, e em (c) e (d) em um ambiente com 301x301x301 células após uma transformação de 33% das células. Em (a) imagem em 3D e em (b) imagens do plano xy com z variando entre 10 e 15. Em (c) imagem em 3D, e em (d) uma imagem do plano central.

Fonte: do autor.

Para melhor visualizar os efeitos do formato de vários grãos crescendo simultaneamente durante a recristalização, foram então realizadas simulações em um

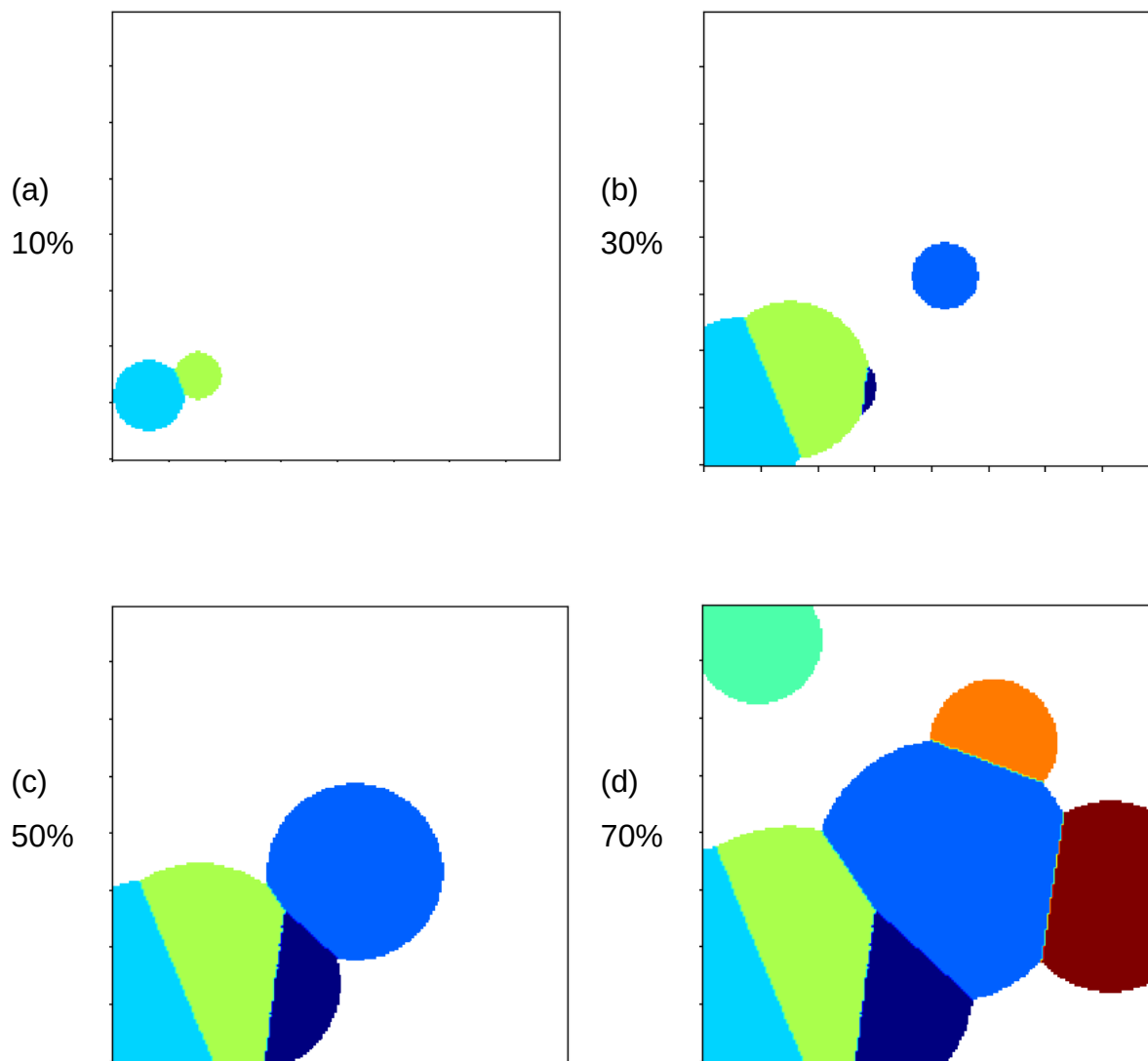
ambiente com 200x200x200 células, mas com 10, 100 e 1000 sementes aleatoriamente distribuídas. Nas Figuras 6.2 e 6.3 são apresentados os resultados para as simulações com 10 sementes, nas Figuras 6.4 e 6.5 são apresentados os resultados para as simulações com 100 sementes, e nas Figuras 6.6 e 6.7 são apresentados os resultados para as simulações com 1000 sementes.

Figura 6.2. Simulação em ambiente com 200x200x200 células e 10 sementes distribuídas aleatoriamente, em distintos momentos da simulação. Cada grão representado com uma cor distinta.



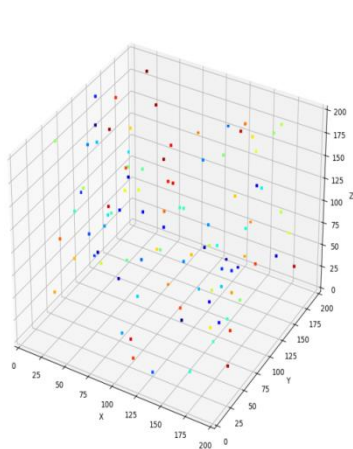
Fonte: do autor.

Figura 6.3. Imagens do plano XZ com $y=100$ para diferentes momentos da simulação da Figura 6.2 (10 sementes). Em (a), (b), (c) e (d) imagens para respectivamente 10%, 30%, 50% e 70% de células transformadas em todo o ambiente.

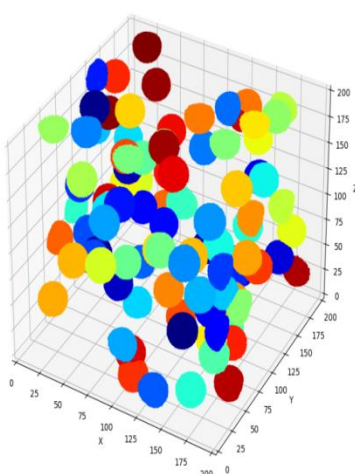


Fonte: do autor.

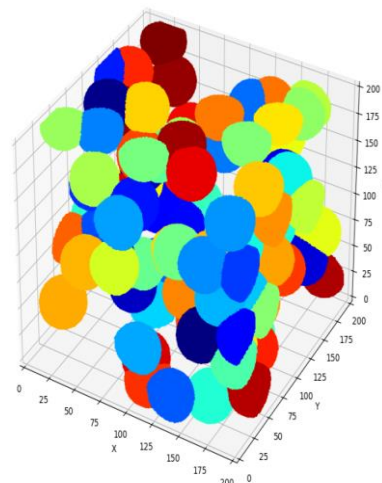
Figura 6.4. Simulação em ambiente com 200x200x200 células e 100 sementes distribuídas aleatoriamente, em distintos momentos da simulação. Cada grão representado com uma cor distinta.



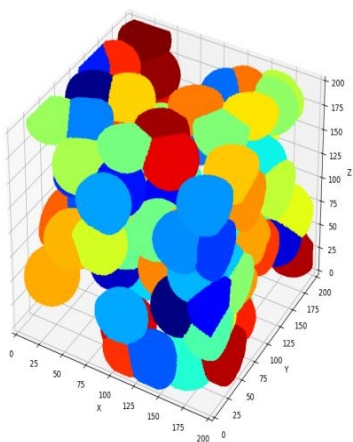
(a) Posicionamento inicial das sementes.



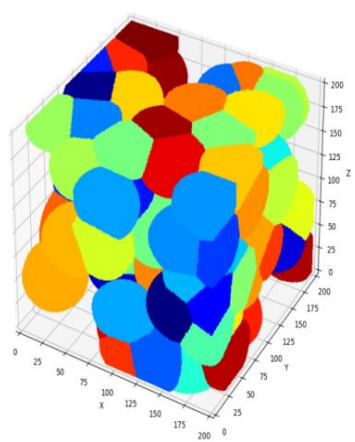
(b) 10% do volume transformado.



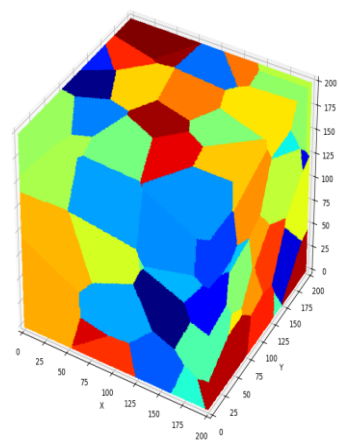
(c) 30% do volume transformado.



(d) 50% do volume transformado.



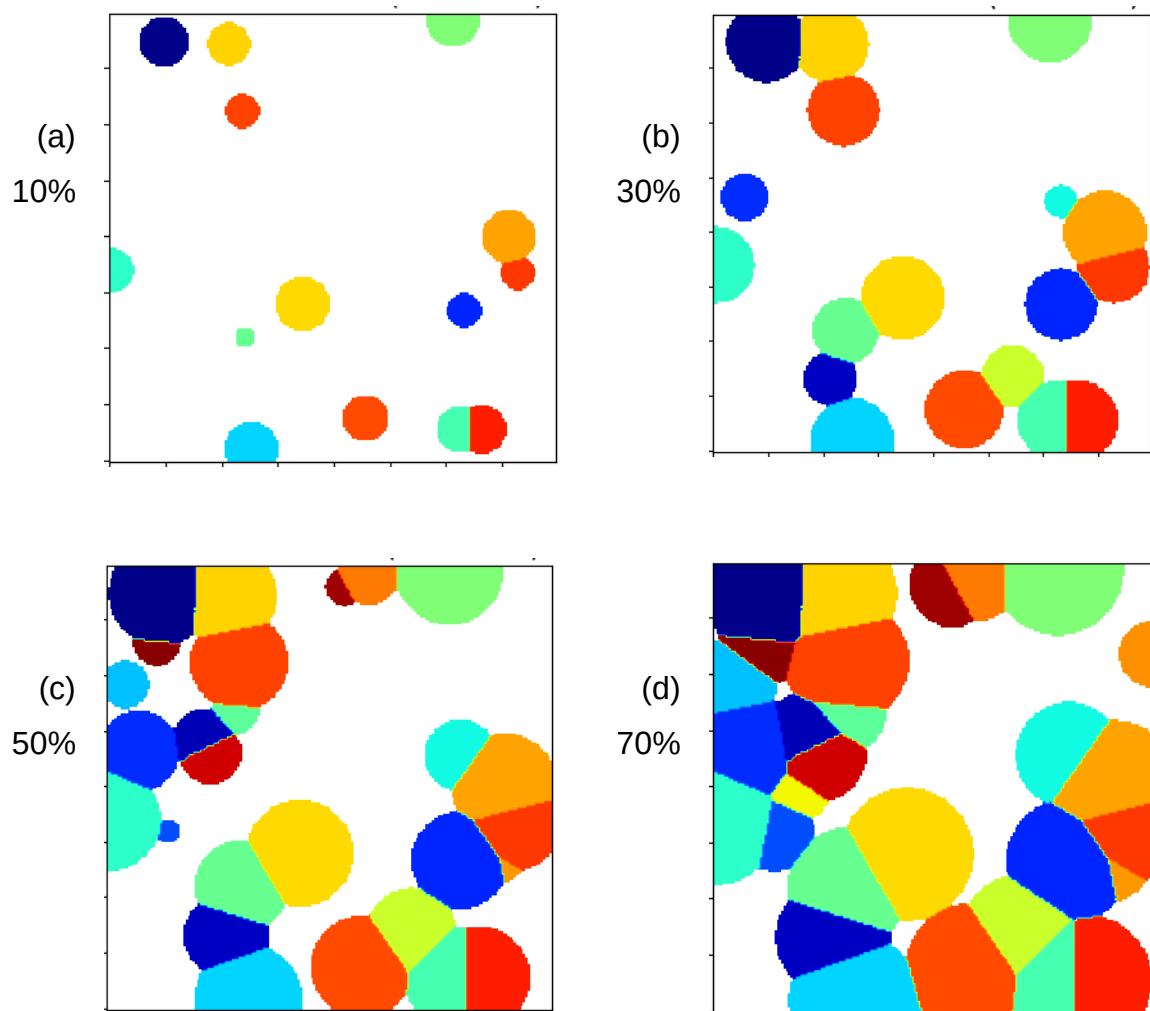
(e) 70% do volume transformado.



(f) 100% do volume transformado.

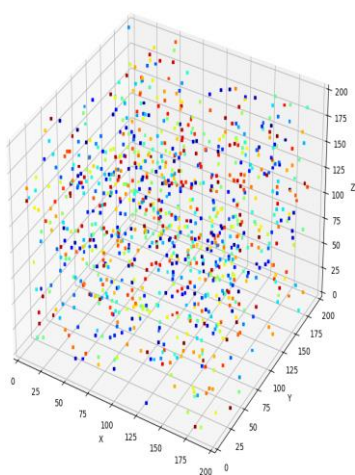
Fonte: do autor.

Figura 6.5. Imagens do plano XZ com $y=100$ para diferentes momentos da simulação da Figura 6.4 (100 sementes). Em (a), (b), (c) e (d) imagens para respectivamente 10%, 30%, 50% e 70% de células transformadas em todo o ambiente.

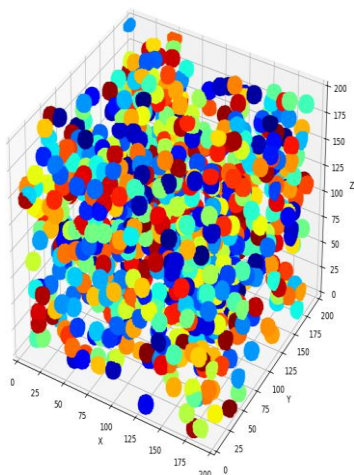


Fonte: do autor.

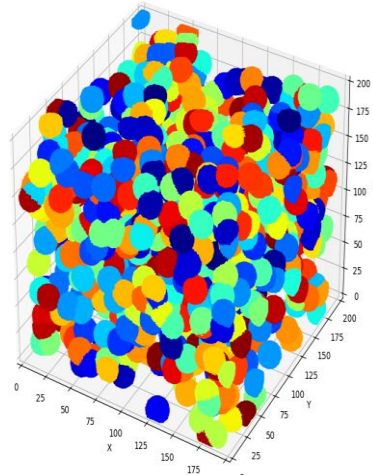
Figura 6.6. Simulação em ambiente com 200x200x200 células e 1000 sementes distribuídas aleatoriamente, em distintos momentos da simulação. Cada grão representado com uma cor distinta.



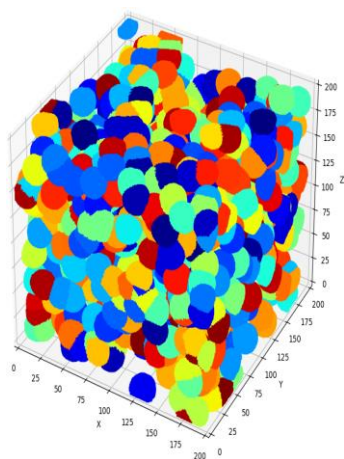
(a) Posicionamento inicial das sementes.



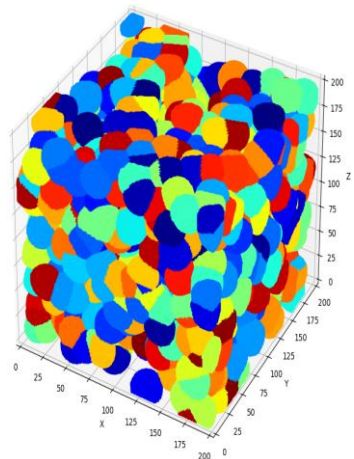
(b) 10% do volume transformado.



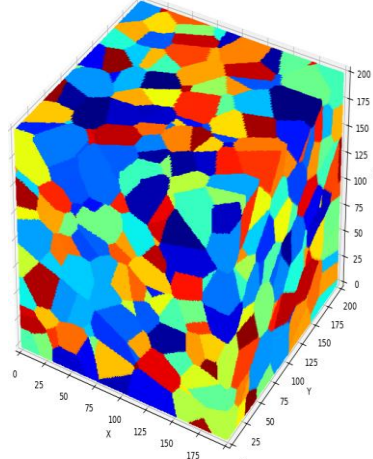
(c) 30% do volume transformado.



(d) 50% do volume transformado.



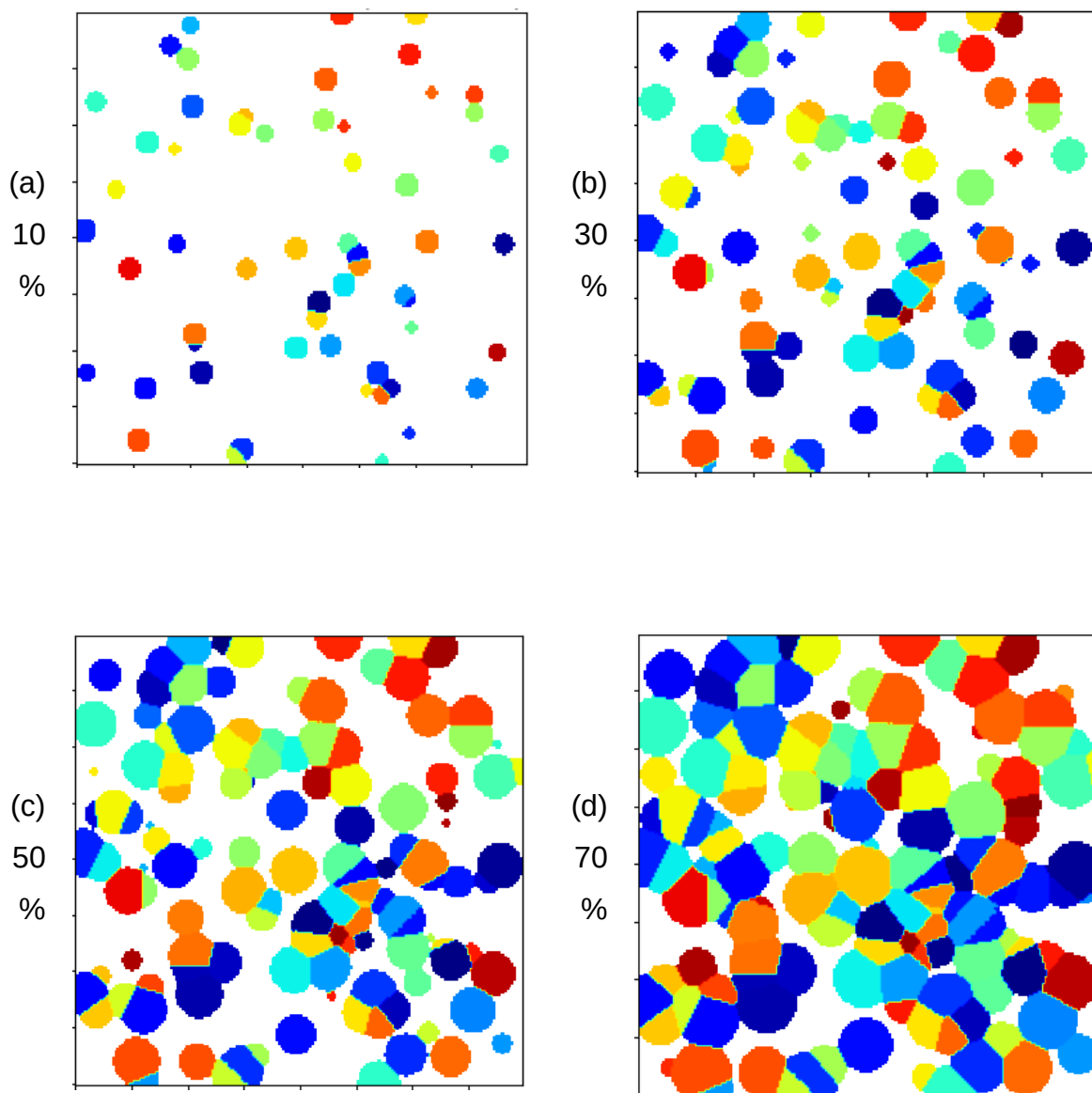
(e) 70% do volume transformado.



(f) 100% do volume transformado.

Fonte: do autor.

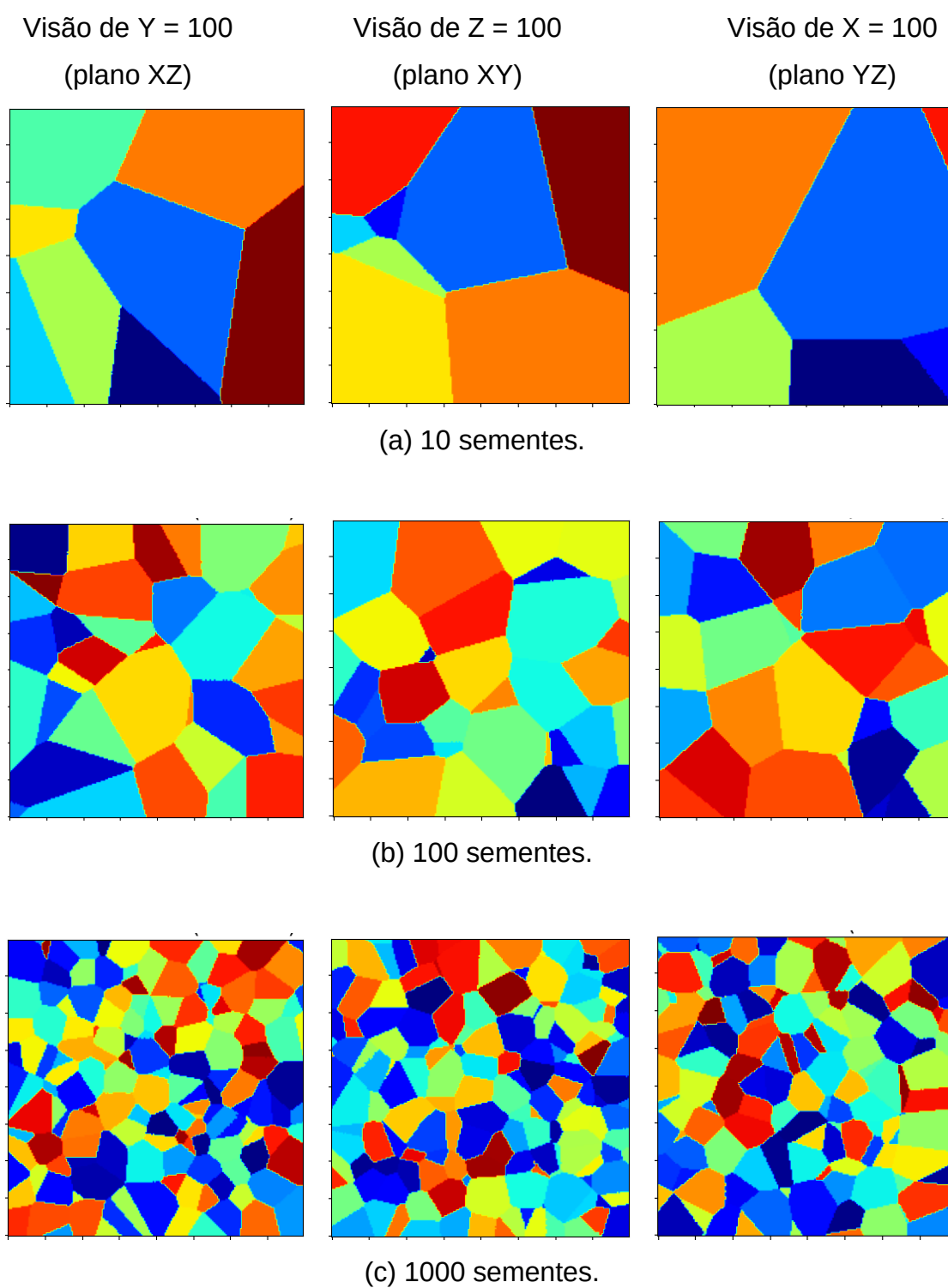
Figura 6.7. Imagens do plano XZ com $y=100$ para diferentes momentos da simulação da Figura 6.6 (1000 sementes). Em (a), (b), (c) e (d) imagens para respectivamente 10%, 30%, 50% e 70% de células transformadas em todo o ambiente.



Fonte: do autor.

Por fim, na Figura 6.8 são apresentados os resultados das imagens finais dos planos centrais das simulações com 10, 100 e 1000 sementes (Figuras 6.2, 6.4 e 6.6 respectivamente).

Figura 6.8. Imagens dos planos centrais do ambiente 200x200x200 ao final das simulações das Figuras 6.2, 6.4 e 6.6 (respectivamente 10, 100 e 1000 sementes).



Fonte: do autor.

Comparando visualmente as imagens das simulações da recristalização por crescimento equiaxial das sementes aleatoriamente distribuídas da Figura 6.8, com algumas imagens esperadas de microestruturas monofásicas policristalinas observáveis por microscopia óptica, como as da representação da Figura 5.20b, (RIOS; PADILHA, 2007, p. 23), observa-se qualitativamente razoável similaridade.

6.3 Geração de padrões regulares de microestrutura

Caso a distribuição dos grãos não seja aleatória, é possível obter alguns padrões microestruturais bem específicos e regulares de formação dos grãos. Apesar deste ser um comportamento esperado, até porque já foi observada a geração de grãos cúbicos no Capítulo 5 para os AC, para ilustrar e confirmar sua ocorrência na modelagem por AH apresentada, realizou-se algumas simulações exemplos com específicas distribuições iniciais das sementes.

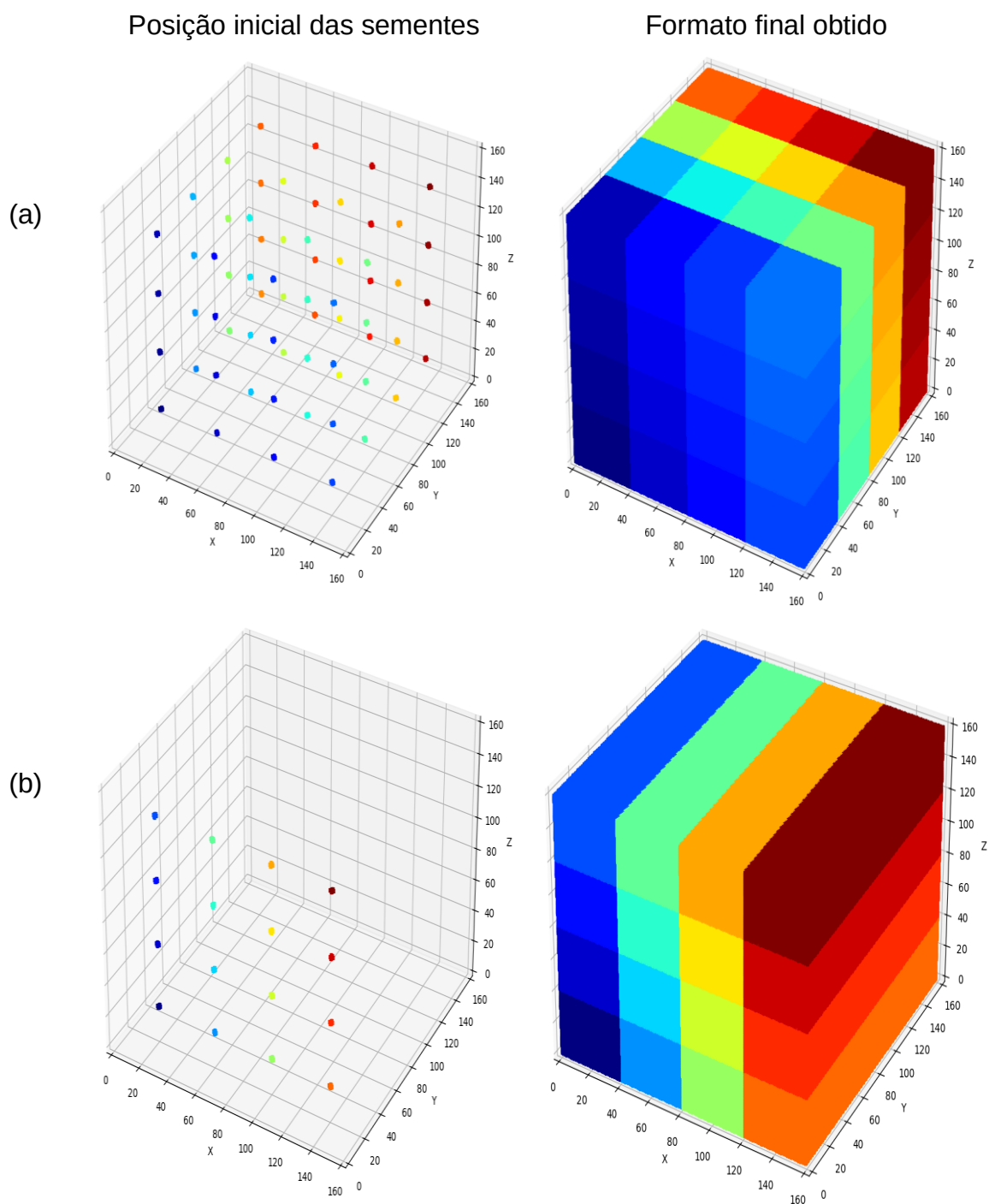
Visando a obtenção de cubos, as sementes foram posicionadas em um padrão de repetição análoga a de uma estrutura CS (cúbica simples), similar à distribuição realizada na obtenção da Figura 5.15d. A distância entre as sementes será igual a aresta dos grãos cúbicos formados. Como pela modelagem com AH as sementes crescem em formato realmente matricialmente esférico, o que não acontecia na modelagem com AC, até o momento do início dos choques entre os grãos em crescimento, a visão da microestrutura lembrará uma estrutura CS.

Para a obtenção de paralelepípedos, com uma face quadrada e seu outro comprimento igual ao comprimento da matriz, basta usar apenas uma camada qualquer de sementes da estrutura criada para a obtenção dos grãos cúbicos.

Já para a obtenção de OTC's, as sementes foram posicionadas em um padrão de repetição similar ao de uma estrutura CCC (cúbica de corpo centrado). Analogamente ao ocorrido na microestrutura de grãos cúbicos, nos momentos ao início dos choques entre os grãos em crescimento, a visão da microestrutura recristalizada nesta distribuição será correspondente ao seu arranjo básico, no caso de uma estrutura CCC.

As Figuras 6.9 e 6.10 apresentam imagens destas simulações.

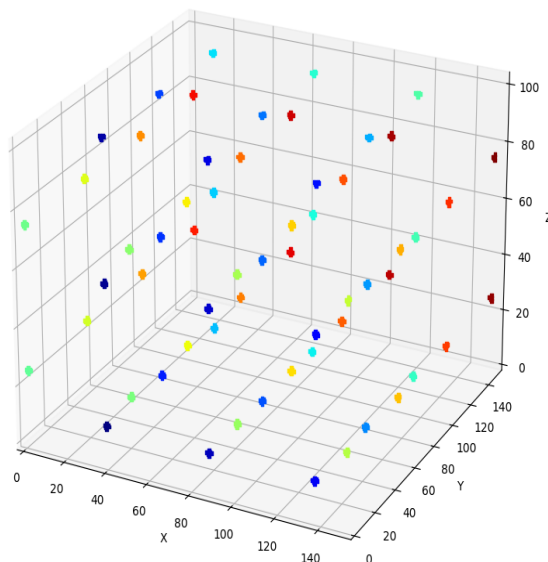
Figura 6.9. Simulações em ambientes com 160x160x160 células com sementes distribuídas conforme perfis específicos. Em (a) com 64 sementes formando cubos, e em (b) com 16 sementes formando paralelepípedos compridos.



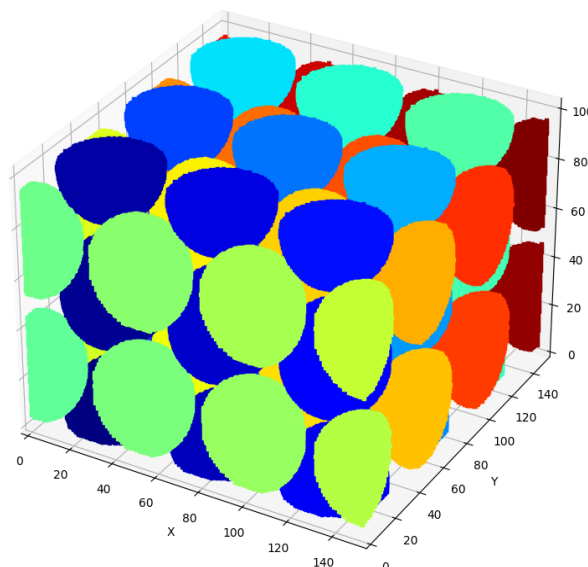
Fonte: do autor.

Figura 6.10. Simulação em ambiente com $152 \times 152 \times 102$ células com 59 sementes distribuídas conforme perfil específico análogo ao tipo CCC, resultado em uma microestrutura de OTC's.

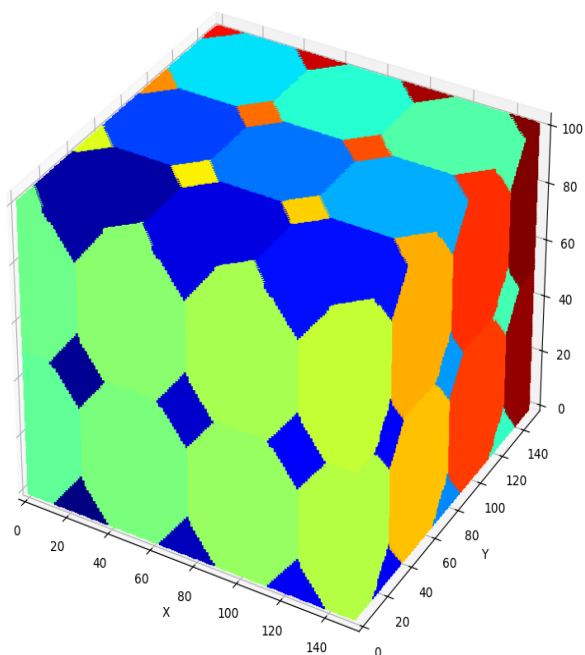
Posição inicial das sementes



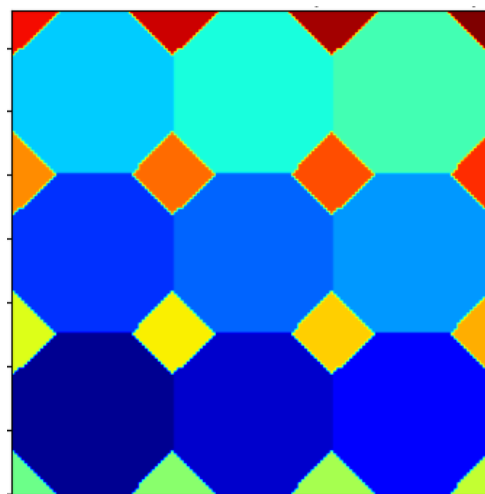
Momento intermediário ilustrativo
(pouco anterior ao *impingement*)



Formato final obtido



Formato final obtido
(Plano central XY)



Fonte: do autor.

6.4 Verificação do desempenho do algoritmo gerador e do *passo*

A qualidade do AH para simular o crescimento matricial esférico já foi comprovada, mas ainda é relevante obter informações sobre o desempenho e comportamento do algoritmo gerador. Para isto, foram consideradas as simulações em dois distintos ambientes, um com 21x21x21 células, e outro com 201x201x201 células, mas agora para diversos valores de *passo* (0,25, 0,50, 0,60, 0,75 e 1,00). Em ambas simulações apenas uma única semente no seu centro foi adicionada, sem nenhuma obstrução interna ao ambiente.

A Tabela 6.1 apresenta os resultados encontrados e as Figuras 6.11 a 6.14 ilustram alguns dados de desempenho da simulação para estes ensaios da Tabela 6.1 do ambiente com 201x201x201 células.

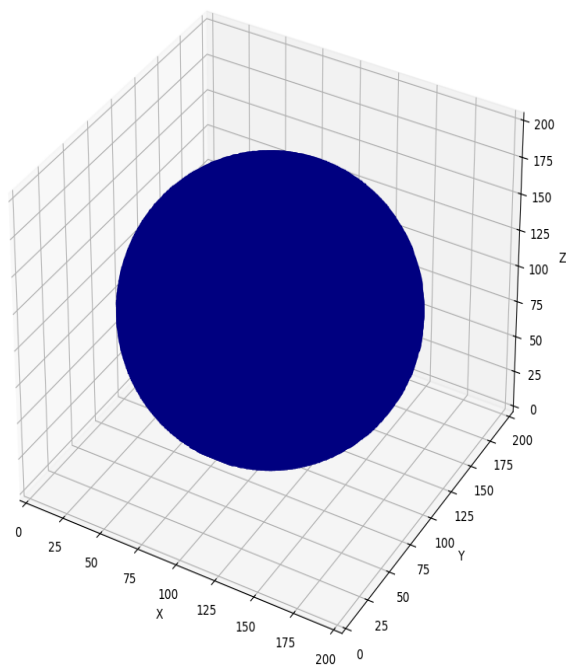
Tabela 6.1. Simulações completas em ambientes com 21x21x21 células e com 201x201x201 células, iniciando com uma única célula localizada no seu centro, para diversos valores de *passo*.

Ambiente (Nº Células)	Passo	Nº total de Laços	Nº Total de Células			
			Transformadas		Pesquisadas	
			Nº	(%) ⁽¹⁾	Nº	(%) ⁽¹⁾
21x21x21 (9.261)	0,25	67	9.261	100	161.490	1744
	0,50	34			82.140	8869
	0,60				67.374	728
	0,75	30			56.958	615
	1,00	30			55.344	598
201x201x201 (8.120.601)	0,25	691	8.120.601	100	153.353.928	1888
	0,50	347			76.809.120	946
	0,60	301			62.451.360	769
	0,75	301			49.924.848	615
	1,00	301			48.721.806	600

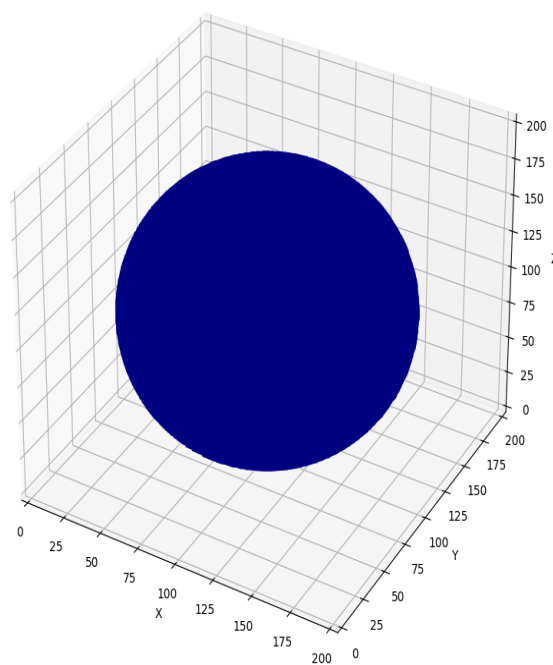
Nota: (1) percentagem em relação ao número total de células do ambiente.

Fonte: do autor.

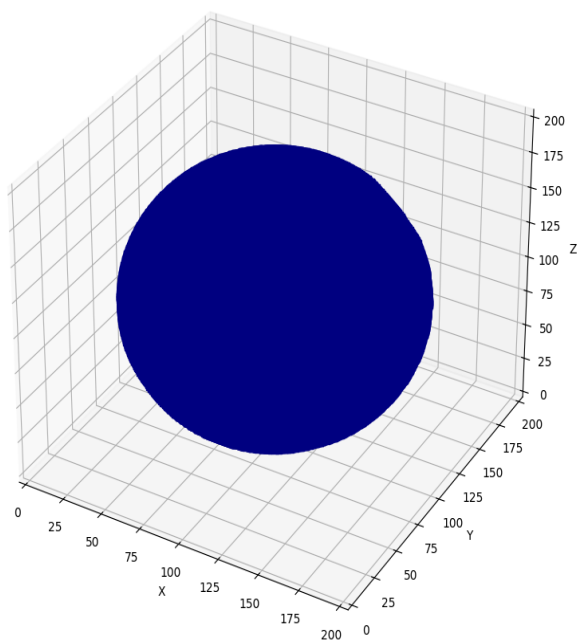
Figura 6.11. Imagem da esfera matricial, ou esferoidal, gerado para a simulação do ambiente com 201x201x201 células, uma única semente central, para vários valores de *passo*, nos instantes com 33% de transformação do ambiente.



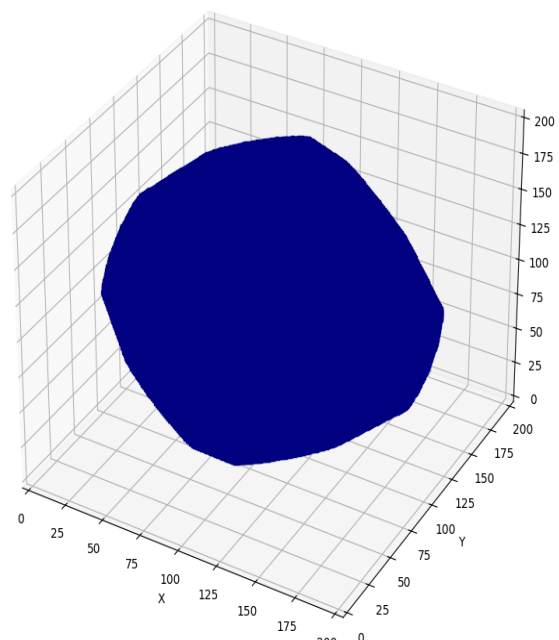
passo 0,25



passo 0,50



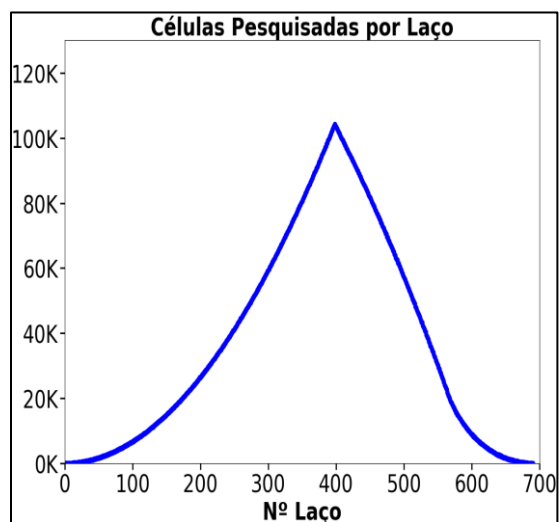
passo 0,60



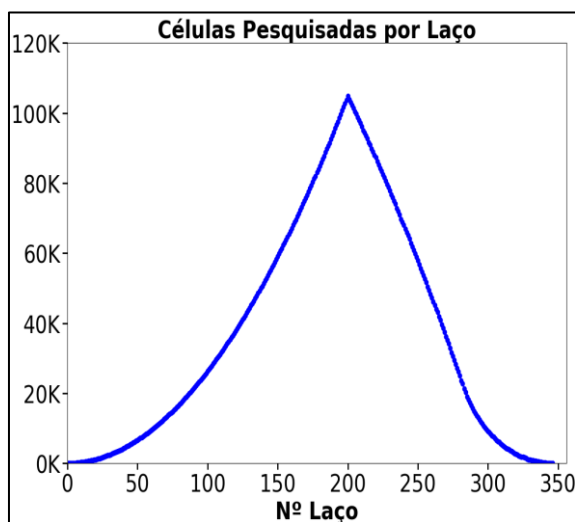
passo 0,75

Fonte: do autor.

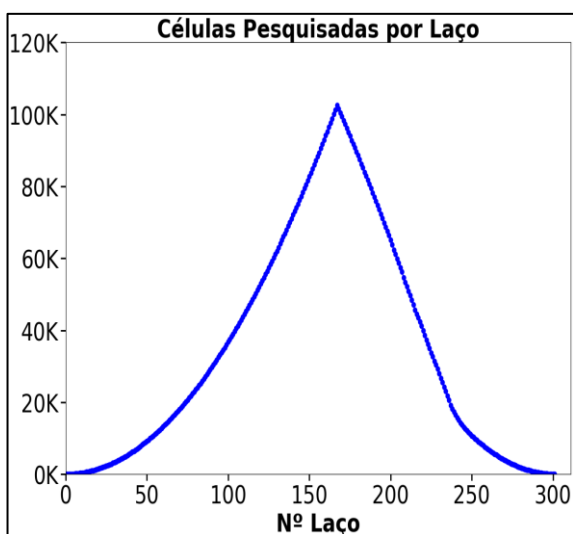
Figura 6.12. Gráfico com a quantidade de células pesquisadas por laço obtido para a simulação do ambiente com 201x201x201 células, uma única semente central, para vários valores de *passo*.



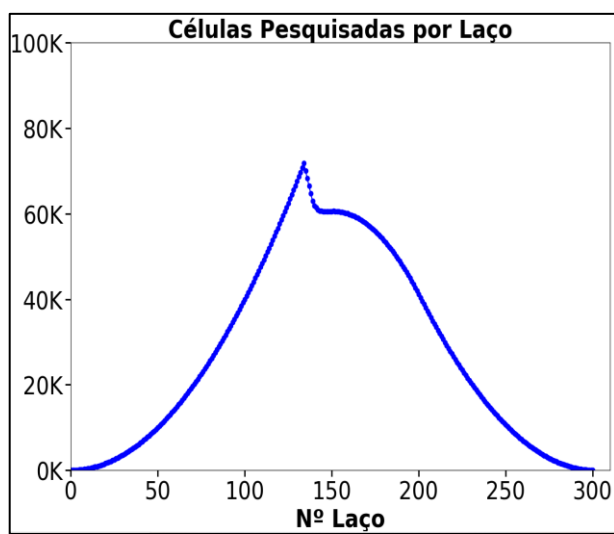
passo 0,25



passo 0,50



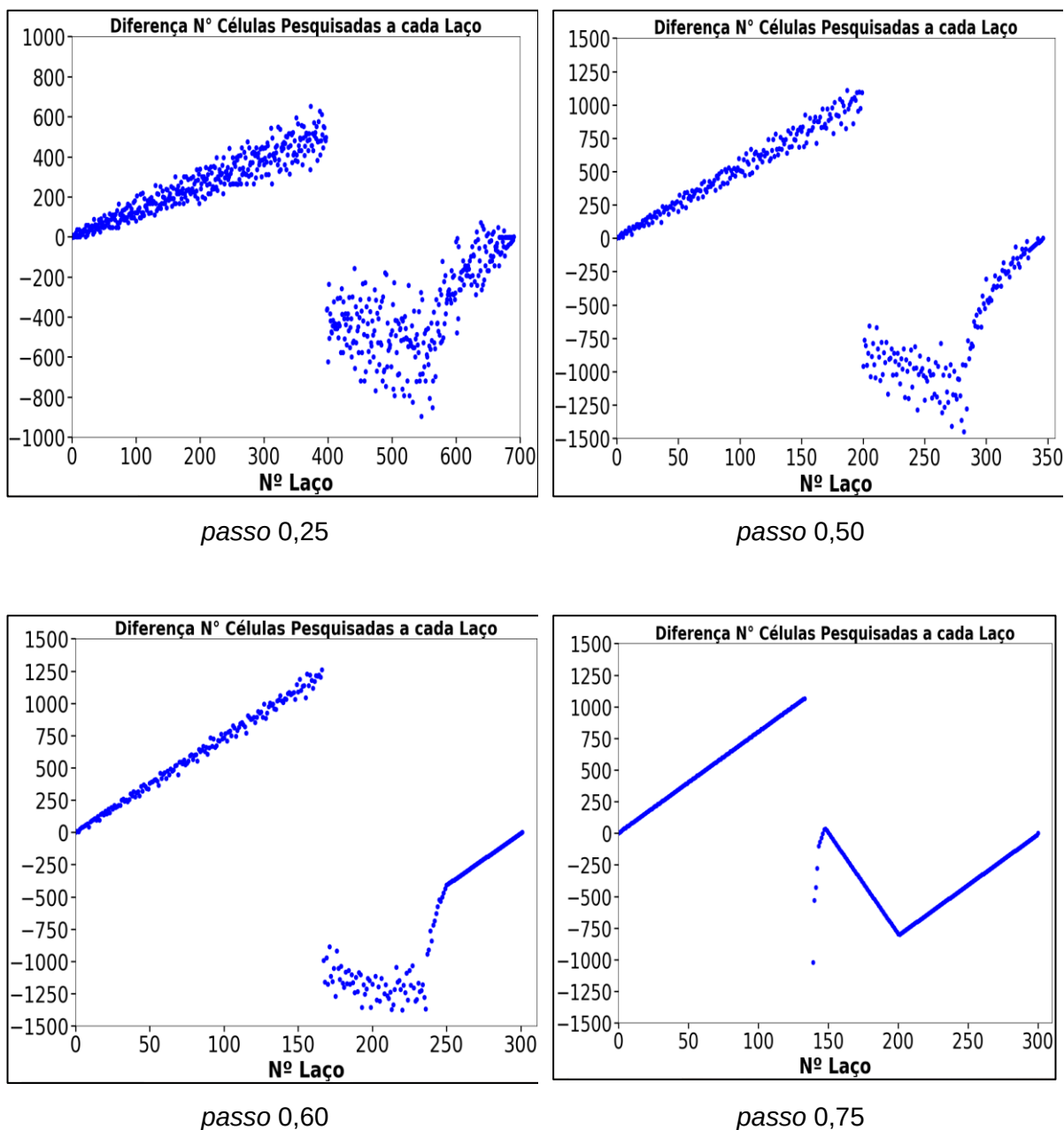
passo 0,60



passo 0,75

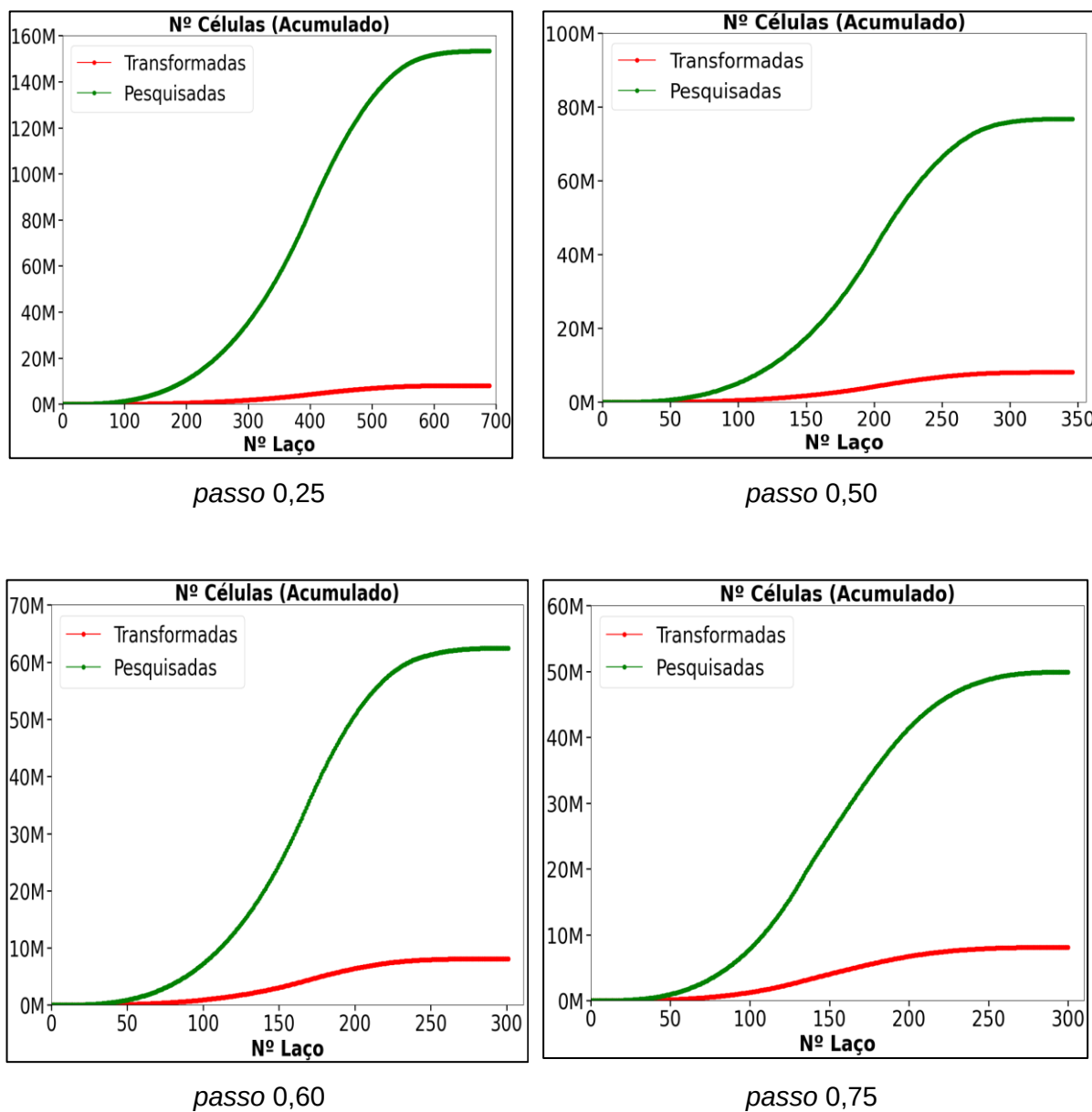
Fonte: do autor.

Figura 6.13. Gráfico com a diferença entre o nº células pesquisada a cada laço por laço obtido para a simulação do ambiente com 201x201x201 células, uma única semente central, para vários valores de *passo* (derivada 1ª dos gráficos da Figura 6.12).



Fonte: do autor.

Figura 6.14. Gráfico com o nº acumulado de células pesquisadas e transformadas, por laço, obtido para a simulação do ambiente com 201x201x201 células, uma única semente central, para vários valores de *passo*.



Fonte: do autor.

Conforme apresentado no Capítulo 4, exceto pelas simulações relacionadas pela Tabela 6.1, todas as demais simulações deste capítulo utilizaram o *passo* = 0,50. Observando os dados da Tabela 6.1 e as Figuras 6.11 a 6.14, verifica-se que esta foi uma escolha acertada, e por vários motivos.

Observando a Figura 6.11, para o *passo* de 0,75 o objeto formado foi esferoidal, apenas lembrando uma esfera (na verdade o objeto é uma mistura irregular da esfera gerada pela hibridização com o octaedro gerado pela busca pela VF). Para o *passo* de 0,60, o objeto formado foi muito próximo a uma esfera, mas ainda não perfeita. Já para o *passo* de 0,50 e o *passo* de 0,25, os objetos formados visualmente foram esferas matriciais perfeitas.

A Figura 6.12 traz informações sobre o nº de células pesquisadas a cada laço do programa. Inicialmente a curva apresenta um crescimento contínuo. Isto acontece porque as células pesquisadas estão junto a superfície externa do objeto formado, e como o objeto está crescendo de tamanho, a cada laço da simulação a sua área externa também aumenta, fazendo com que o número de células pesquisadas acompanhe este crescimento. Entretanto, em um momento o nº de células pesquisadas atinge um ponto de máximo, quando então começa a diminuir.

Este fenômeno é análogo ao visualizado nos AC para a evolução pela VF (Figura 5.10). Como o objeto formado pela evolução da replicação das células não coincide com o formato da matriz simulação, em algum momento o objeto em formação irá tocar as superfícies, fazendo com que a taxa de crescimento comece a diminuir de valor, até que um crescimento máximo seja atingido, quando a taxa de crescimento começa a cair.

Um dos pontos mais importante da Figura 6.12, talvez seja a possibilidade de geração da Figura 6.13, a derivada de primeira ordem do número de células pesquisada a cada laço pelo número do laço. Conforme verificado no Capítulo 5, quando da modelagem por AC pela VF, e mesmo pela VF/VA e VP, este gráfico é composto por nítidos segmentos de retas, cuja inclinação é a taxa de crescimento (ou decaimento) da sua curva do número de células pesquisadas por laço. Mas na Figura 6.13, tanto para o *passo* de 0,25 como pelo *passo* de 0,50, os pontos não apresentam nenhuma linearidade aparente, mas sim grande variação nos seus valores.

Isto é causado pela hibridização. Na Figura 6.13 para o passo 0,60, percebe-se uma variabilidade, mas não em toda a amplitude, o que indica que houve uma hibridização parcial, mas não total. Por fim, na Figura 6.13 para o passo 0,75, percebe-se que houve pouca hibridização. Assim até o momento se encontrou vários pontos positivos para a escolha do *passo* 0,50 ou 0,25. Entretanto a Figura 6.14 vai resolver este ponto.

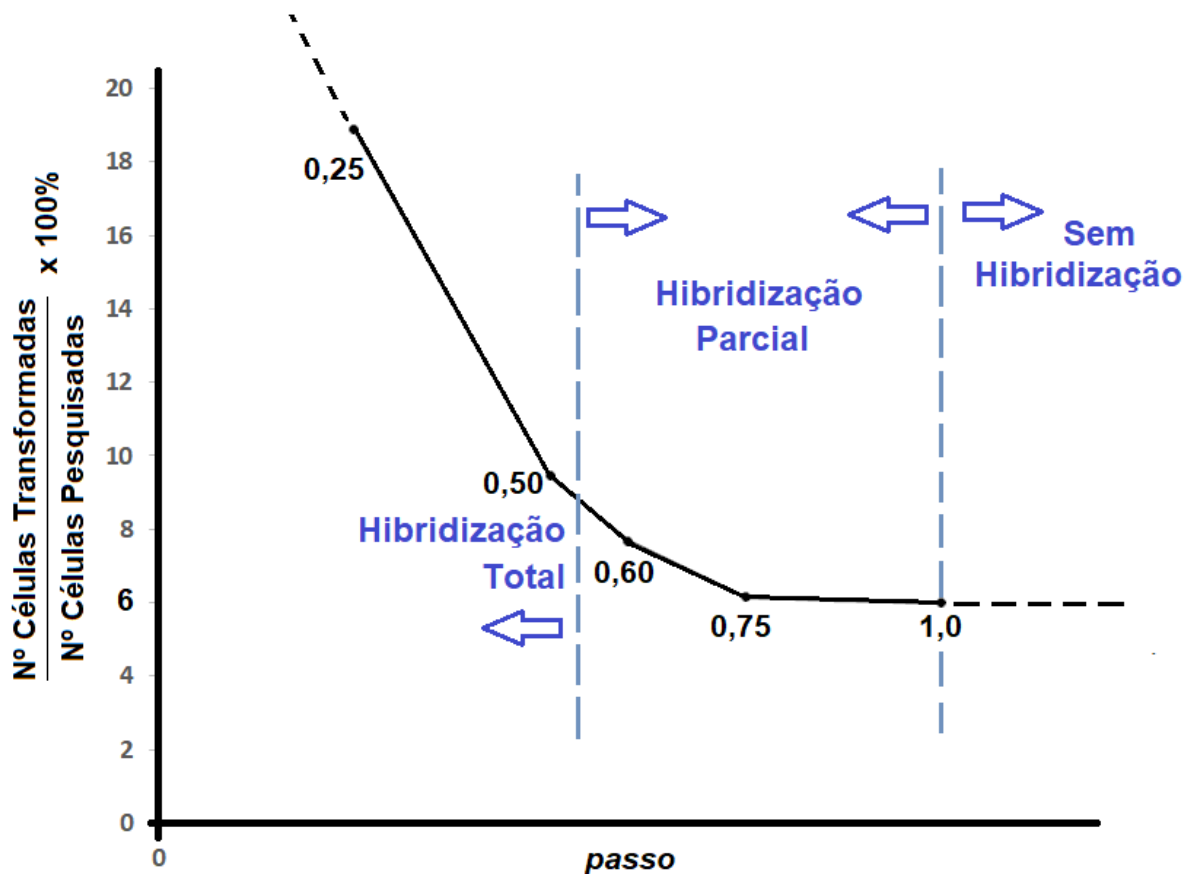
As curvas apresentadas na Figura 6.14 são relativamente parecidas em termos de aparência, mas quanto menor o valor do *passo* empregado, maior a quantidade de células pesquisadas para se fazer a total transformação do ambiente. Assim um *passo* reduzido tem um custo computacional muito maior que o uso de um *passo* grande. Dessa forma, apesar de ambos terem apresentados resultados ótimos, o *passo* de 0,50 é preferível em relação ao uso do *passo* 0,25, não pela qualidade da resposta pois ambos foram similares, mas pelo menor custo computacional.

Aumentando-se o *passo*, o número de células pesquisadas por laço diminui. Entretanto, esta queda vai reduzindo de intensidade com o aumento do *passo*, até se estabilizar quando o nº de células pesquisadas se igualar ao valor que ocorreria com o respectivo AC puro (situação limite onde não mais ocorre a hibridização). Observa-se como exemplo o valores apresentados na Tabela 6.1 para o *passo* 1,00.

Estes são os mesmos das Tabelas 5.2 e 5.3 quando da pesquisa pela VF. Assim, em relação ao *passo* 1,00, nenhuma nova figura ilustrativa do seu uso teve que ser adicionada. Isto foi devido a simplesmente todas as curvas obtidas com AH com *passo* 1,00 terem sido idênticas às da Figura 5.10 com AC, já que neste nível de *passo* toda a hibridização foi impedida de acontecer. Nesta situação o então AH gerou resultados idênticos aos do AC da pesquisa pelas VF.

Desta forma, encontrou-se empiricamente 0,50 como sendo um valor adequado para o *passo*. A Figura 6.15, obtida com dados retirados da Tabela 6.1, ilustra vários destes pontos observados.

Figura 6.15. Evolução do Nº Células Transformadas pelo Nº Células Pesquisadas em função do *passo* (ambiente 201x201x201 células, dados retirados da Tabela 6.1, AH evoluindo pela VF).



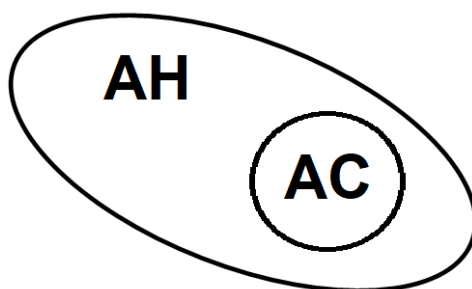
Fonte: do autor.

Assim, tem-se um ponto curioso. Como já discutido, os AH são em seus princípios baseados em AC, mas não podem, ou não deveriam, ser chamados de alguma classe de AC, pois os AH não atendem a todos os preceitos dos AC (apesar disto existem trabalhos denominando os AH de AC modificados ou similar).

Entretanto, pelo menos nas condições do experimento realizado, mostrou-se que na verdade é mais provável que os AC é que sejam uma classe dos AH. Caso simplesmente um *passo* suficientemente elevado for utilizado, a hibridização não vai ocorrer nem sequer parcialmente.

Não é que o AH vai se comportar como o AC, ele será o respectivo AC conforme sua evolução de pesquisa pelas vizinhanças. Inclusive alterando-se a forma de pesquisa do AH implementado, todos os respectivos AC estudados no Capítulo 5 poderão ser obtidos diretamente por este novo algoritmo gerador dos AH. A Figura 6.16 ilustra esta característica por meio de um diagrama de Euler.

Figura 6.16. Diagrama de Euler da relação proposta entre os AH e AC do tipo e nas condições verificadas neste trabalho.



Fonte: do autor.

Assim, verificou-se que pela modelagem com AH se consegue simular o crescimento de esferas matriciais perfeitas, sendo portanto esta uma técnica que demonstra ter grande potencial de uso na simulação da recristalização de estruturas equiaxiais em metais.

Por fim, até o momento nas simulações realizadas se focou essencialmente em células e iterações, e não em efetivos parâmetros físicos. Entretanto a parametrização dimensional dos novos grãos formados após a total recristalização é uma etapa adicional necessária, de modo que os resultados das simulações possam ser explicitamente aplicados ao material ou ao processo real, e também comparados com outros. Este é o assunto do próximo capítulo.

7 PARAMETRIZAÇÃO DIMENSIONAL – MORFOLOGIA

7.1 Fundamentos

Alguns dos parâmetros mais relevantes são aqueles relacionados aos aspectos dimensionais da nova microestrutura recristalizada, tais como por exemplo o volume, diâmetro, e área superficial dos novos grãos. Entretanto, antes de se iniciar na formulação desta parametrização morfológica e estrutural no ambiente matricial 3D, torna-se necessário apresentar alguns pontos e estabelecer certos critérios.

A metodologia proposta para a análise dimensional da microestrutura recristalizada, baseada em cálculos do ambiente discretizado, pela sua natureza distinta, diverge da metodologia estereológica tradicional empregada para a determinação de vários parâmetros metalográficos dos metais (Cap. 3.7).

Isto porque, entre outros aspectos, nas simulações computacionais realizadas, em teoria, não é necessário recorrer a subterfúgios para acessar informações sobre o volume do material, por mais consolidadas que estas sejam, uma vez que se tem literalmente acesso à constituição de todos os voxels que formam o metal simulado. Assim, é possível inferir exatamente, dentro dos limites da técnica, por meio de métodos computacionais que serão apresentados, aspectos morfológicos como o volume dos grãos e diversos parâmetros dimensionais desejados derivados dele.

Dessa forma, ressalta-se que comparações entre resultados fornecidos das simulações com os obtidos tradicionalmente via metalográfica, devido às diferentes abordagens empregadas, devem sempre ser feitos com atenção a estes pontos.

Ainda, a formalização da terminologia e notação relacionada a parametrização da metalografia estereologica se encontra bem estabelecida (RIOS; PADILHA, 2007), e é extensivamente utilizada tanto na práxis laboral como na literatura. Assim, de modo a se evitar confusões entre as duas abordagens, vai-se neste trabalho se desenvolver uma tratativa de nomenclatura que seja diferenciada para a parametrização matricial tridimensional.

Para isso, estabeleceu-se que os termos dos parâmetros metalográficos dimensionais, de origem tridimensional matricial, serão preferencialmente formados por duas letras maiúsculas. Se o termo não possuir índice, a respectiva grandeza refere-se a um parâmetro médio ou global de todo o metal modelado. Por outro lado, se o termo possuir um índice, essa grandeza refere-se a algum elemento específico, seja de uma célula matricial ou de um determinado grão.

Para contribuir na apresentação da nova terminologia empregada neste capítulo, apresentam-se os Quadros 7.1, 7.2 e 7.3, nos quais as notações utilizadas estão descritas e segmentadas.

Quadro 7.1. Nomeclatura e notação empregada na parametrização dos aspectos metalográficos morfológicos matriciais 3D relacionados ao volume dos grãos.

Símbolo	Definição	Unidade [SI]
DG	Diâmetro equivalente médio do material simulado	[m]
DG_n	Diâmetro equivalente de um grão n específico	[m]
DV	Densidade de grãos médio do material simulado	Nº Grãos/[m ³]
SG	Área supeficial equivalente média do material simulado	[m ²]
SG_n	Área supeficial equivalente de um grão n específico	[m ²]
VG	Volume do grão médio do material simulado	[m ³]
VG_n	Volume de um grão n específico	[m ³]
VN_n	Volume normalizado de um grão n específico	[adimensional]

Fonte: do autor.

Quadro 7.2. Nomeclatura e notação para aspectos complementares empregados.

Símbolo	Definição	Unidade [SI]
r	Largura da aresta das células da matriz da simulação	[m]
N_{ASTMe}	Número de grão ASTM equivalente calculado pela simulação	-
V_M	Volume total da matriz de simulação	[m ³]

Fonte: do autor.

Quadro 7.3. Nomeclatura e notação para os aspectos empregados na computação matricial dos cálculos.

Símbolo	Definição
C_n	Número total de células de um grão n específico
C_{ni}	Número total de células de um grão n específico que estão em seu interior sem tocar a sua superfície
C_{ns}	Número total de células de um grão n específico que estão na sua superfície
C_s	Número médio de células da superfície dos grãos
C_t	Número total de células de M empregadas na simulação
C_x	Número total de células no eixo x de M
C_y	Número total de células no eixo y de M
C_z	Número total de células no eixo z de M
M	Matriz Ambiente (matriz 3D que representa o material simulado)
$M_{i,j,k}$	Valor do conteúdo da célula de M nas coordenadas (i, j, k)
n	Índice de identificação de uma semente (ou grão resultante) específico
N_s	Número total de sementes

Fonte: do autor.

7.2 Parametrização

Para o início da realização da parametrização morfológica é necessário o valor do comprimento da aresta da célula cubica adotada (r), parâmetro chave que faz a interrelação dimensional entre o mundo matricial e o mundo real. Ainda, necessita-se

de dados da matriz ambiente inicial, como a quantidade de células do ambiente simulado em cada um dos eixos (C_x , C_y , C_z) e do número total de sementes (N_s).

Com estes valores, pode-se obter o diâmetro médio e o volume médio dos grãos gerados nas simulações, entre outras grandezas, pois estas dependem apenas do estado inicial da simulação, e não da simulação em si, conforme:

$$C_t = C_x \times C_y \times C_z \quad (7.1)$$

$$V_M = C_t \times \mathbf{r}^3 \quad (7.2)$$

$$VG = \frac{V_M}{N_s} \quad (7.3)$$

$$DV = \frac{N_s}{V_M} \quad (7.4)$$

$$DG = 2 \times \left(\frac{3 \times VG}{4 \times \pi} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (7.5)$$

$$SG = \pi \times DG^2 \quad (7.6)$$

$$N_{ASTMe} = -10.0 - 6,64 \log(DG/10^4) \quad (7.7)^7$$

Realizada a simulação, os demais parâmetros podem ser obtidos. Apesar da relevância destes dados das Equações (7.1) a (7.7), como o diâmetro médio (DG) e o volume médio (VG) dos grãos, já que representam o material como um todo, exceto em situações muito particulares, é esperado que cada grão tenha suas próprias características dimensionais. O volume de um determinado grão específico pode ser encontrado pelo número de células que o compõe. Assim:

$$C_n = \sum_{i=1}^{C_x} \sum_{j=1}^{C_y} \sum_{k=1}^{C_z} (\delta_{n, MA_{i,j,k}}) \quad (7.8)$$

$$VG_n = C_n \times \mathbf{r}^3 \quad (7.9)$$

$$DG_n = 2 \times \left(\frac{3 \times VG_n}{4 \times \pi} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (7.10)$$

⁷ Expressão válida para DG em μm .

$$VN_n = \frac{VG_n}{VG} \quad (7.11)$$

$$SG_n = \pi \times DG_n^2 \quad (7.12)$$

Onde $(\delta_{n, MA_{i,j,k}})$ se trata da função delta de Kronecker, que é igual a 1 se $MA_{i,j,k} = n$ e 0 caso contrário.

Como já visto, na fase de crescimento livre (sem interferência dos grãos entre si), pela técnica de modelagem por AH realizada neste estudo, os grãos terão o formato matricial esférico. Entretanto, após o início do interferências entre os grãos (*impingement*), o formato dos grãos gerados ficará irregular, mas com características advindas da sua origem equiaxial.

Assim, o diâmetro anteriormente indicado (DG_n), obtido no final da simulação (após a total recristalização) ou em qualquer momento intermediário após o início das mútuas intereferências entre os grãos, deve ser entendido como sendo um diâmetro equivalente, ou seja, o diâmetro aproximado que teria se o grão tivesse o formato esférico e possuísse o mesmo volume (mesmo número de células). O mesmo raciocínio se aplica a área superficial (SG_n), que é uma área equivalente se o grão tivesse formato esférico e possuísse o mesmo volume.

7.3 Efeitos das fronteiras

Terminada esta etapa inicial de parametrização, torna-se necessário apresentar um outro ponto ainda não suficientemente tratado neste estudo, mas que justifica um esclarecimento adicional: os efeitos sobre os resultados da simulação causado pelo metal externo a matriz de simulação, que se localiza junto às suas fronteiras (ou limites).

Conforme informado no Capítulo 4, as fronteiras externas adotadas em todas as simulações são não periódicas. Assim, quando a simulação atinge a fronteira externa nada mais acontece com aquele elemento. Ainda, não há nenhuma influência da vizinhança do metal externo sobre o interior da matriz da simulação. Entretanto,

mesmo assim, percebe-se a ocorrência de dois fenômenos distintos, e que se auto influenciam, no entorno destas fronteiras na região interna da matriz.

Na primeira situação, os grãos formados que durante seu crescimento se encontrarem com as fronteiras terão seu crescimento impedido, resultando na possibilidade de que os grãos formados na vizinhança das fronteiras externas serem **menores** do que seriam se de fato pudessem crescer livremente para fora do ambiente.

Na segunda situação, os grãos do metal que em teoria seriam formados no ambiente externo a matriz de simulação, próximos às fronteiras, deveriam em tese ao crescer poderem atingir o ambiente simulado, portanto passarem a crescer dentro da matriz de simulação. Daí a possibilidade dos grãos internos da matriz que estejam na vizinhança das fronteiras externas serem **maiores** do que de fato seriam se tivessem seu crescimento paralizado por grãos externos que cresceriam para dentro da matriz.

Assim, estes são dois fenômenos concorrentes, que atuam na medida de auto minimizarem seus efeitos médios. De qualquer forma, especificamente os grãos que tocam a superfície externa da matriz devem ter suas análises morfológicas e geométricas individuais consideradas com cautela.

Para evitar qualquer dúvida em relação ao impacto destes fenômenos junto à superfície, as equações (7.1) a (7.12) podem ser computacionalmente adaptadas para a realização de seus cálculos desconsiderando estes grãos formados diretamente vizinhos à superfície, através da substituição da matriz M por uma matriz M' que não considera os grãos da superfície. Esta nova matriz M' , e a respectiva nova quantidade de sementes (N'_s), podem ser parametrizadas pelas equações 7.13 a 7.18, cuja notação está apresentada no Quadro 7.4, conforme se segue:

$$M_v = \{M_{i,j,k} | i \in [1, C_x]\} + \{M_{i,j,k} | j \in [1, C_y]\} + \{M_{i,j,k} | k \in [1, C_z]\} \quad (7.13)$$

$$CS_v = \{x | x \in M_v\} \quad (7.14)$$

$$CS_i = \{1, 2, \dots, N_s\} \quad (7.15)$$

$$CS_f = CS_i - CS_v \quad (7.16)$$

$$M' = \begin{cases} 0, & \text{se } M_{i,j,k} \notin CS_f \\ M_{i,j,k}, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (7.17)$$

$$N'_s = |CS_f| \quad (7.18)$$

Quadro 7.4. Nomeclatura e notação para os conjuntos complementares empregados na eliminação dos grãos gerados na 1ª vizinhança do ambiente.

Símbolo	Definição
CS_f	Conjunto de todas as sementes cujo grãos não tocam a superfície
CS_i	Conjunto de todas as sementes incluídas inicialmente na simulação
CS_v	Conjunto de todas as sementes cujo grãos tocam a superfície
M'	Nova matriz de ambiente sem os grãos vizinhos a superfície
M_v	Conjunto de todas as células de $M_{i,j,k}$ que se encontram junto a superfície
N'_s	Quantidade de grãos após eliminação dos grãos vizinhos a superfície

Fonte: do autor.

Esta troca de matrizes, de M por M' , pode provocar uma perda significativa na quantidade de original de grãos (conjunto CS_i), mas por outro lado deixará os grãos restantes (conjunto CS_f), formado exclusivamente por grãos dimensionalmente confiáveis dentro dos limites da metodologia empregada. Se a quantidade de grãos restante (N'_s), o mesmo que a cardinalidade de CS_f , for suficiente para as análises, absolutamente não haverá nenhuma restrição quanto a eliminação destes grãos das vizinhanças.

Por fim, outra questão importante a se discutir seria realizar a simulação em uma matriz não periódica. Em uma matriz não periódica, quando um grão do interior ao crescer atingir a superfície, este grão, ao invés de ter seu crescimento paralizado, irá considerar continuar o crescimento do lado oposto da matriz. Se este lado oposto

da matriz estiver vazio, este grão continuará seu processo de crescimento por lá. Isto pode parecer fisicamente um tanto estranho, e de fato o é, mas toda e qualquer modelagem é uma forma de representação simplificada da realidade.

Assim, apesar de fisicamente impossível, esta é uma alternativa de modelagem a princípio plenamente aceitável e mesmo já amplamente utilizada neste e em muitos outros contextos.

Entretanto, os grãos das vizinhanças formados por este método também são grãos que igualmente devem ter suas análises dimensionais individuais consideradas com cautela. Por eles de fato virem de grãos que já existem no interior, a verdadeira aleatoriedade do posicionamento inicial das sementes destes grãos segmentados, formados pela transposição da matriz por duas faces opostas, é um quesito questionável.

Dessa forma, assim seria também recomendável que estes grãos da superfície obtidos pela simulação por uma matriz não periódica devam ser eliminados para maior confiabilidade nos resultados, principalmente em relação aos aspectos individuais destes grãos.

Seguindo o entendimento apresentado neste trabalho, considerando que os grãos das vizinhanças são grãos que individualmente devem ser vistos com atenção, tanto pela simulação com matriz periódica quanto não periódica, e devido a conceitualmente ser fisicamente menos controverso seu uso como forma de representação da realidade, neste trabalho se decidiu utilizar somente a modelagem em matriz fixa, não periódica.

Por fim, para se evitar dúvidas, quando for entendido como necessário (por exemplo quando da realização de análises individuais), estes grãos da vizinhança serão simplesmente eliminados das análises pelos métodos já apresentados.

7.4 Resultados e discussão

Para ilustrar uma aplicação prática da parametrização morfológica do diâmetro e volume, vai-se considerar o experimento em ambiente com 200x200x200 células e 1000 sementes distribuídas aleatoriamente. Neste exemplo a largura da aresta de uma célula utilizada, r , será considerada sempre como sendo de $0,1 \mu m$. Este experimento será repetido 3 vezes para melhor se verificar a reprodutibilidade dos resultados.

Previamente as simulações em si, considerando suas informações iniciais, e aplicando diretamente as equações (7.1) a (7.6), se obtêm os dados da Tabela 7.1.

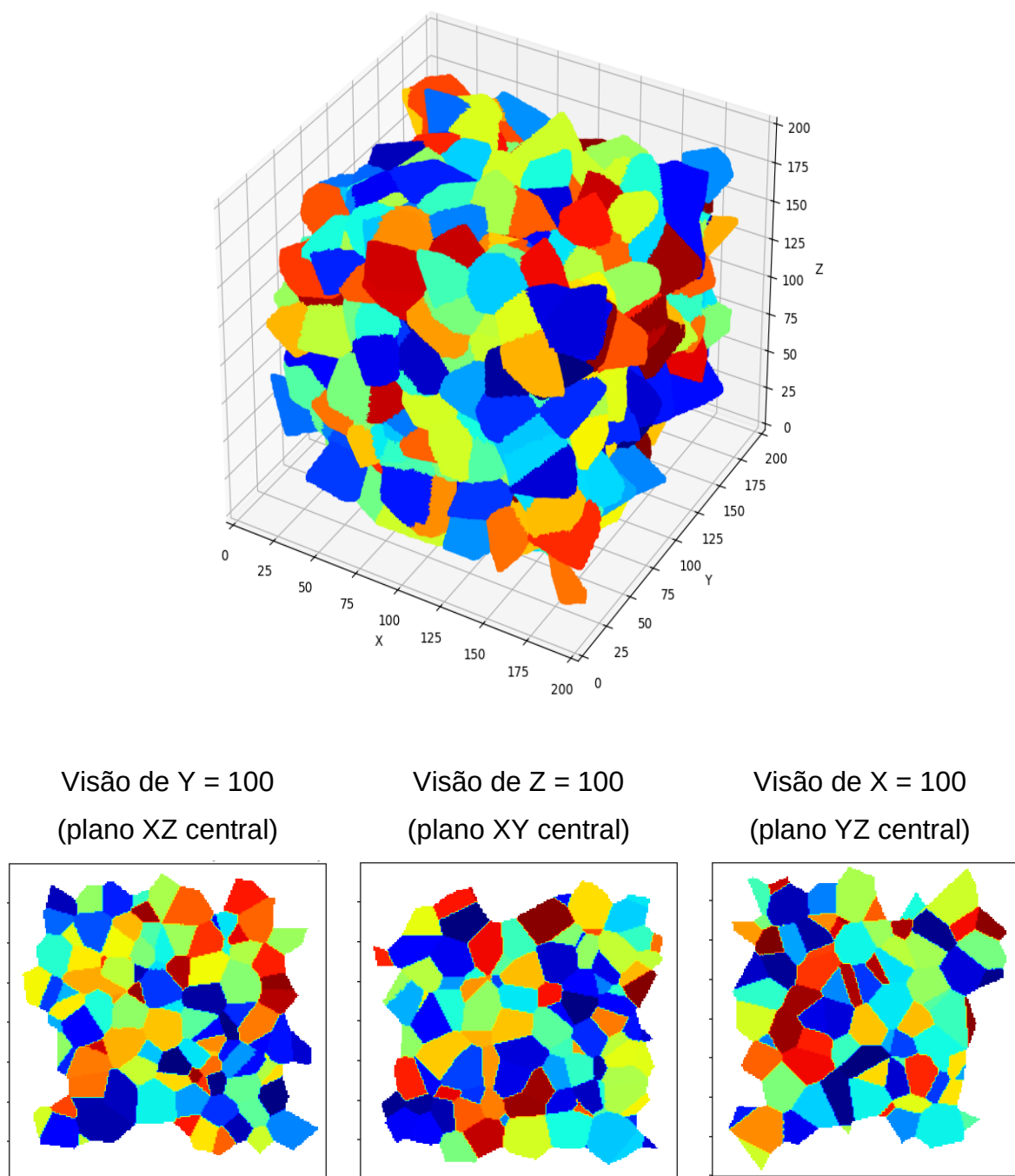
Tabela 7.1. Dados gerais do ambiente e material obtidos previamente a simulação.

Parâmetro	Valor
Matriz ambiente	200 x 200 x 200 células
C_t	8 milhões células
N_s	1000 sementes iniciais
r	$0,1 \mu m$
CG	8000 células/grão
VG	$8 \mu m^3$
VM	$8000 \mu m^3$
DV	$0,125 \text{ grão}/\mu m^3$
DG	$2,42 \mu m$
SG	$19,0 \mu m^2$
N_{ASTMe}	14,0

Fonte: do autor.

O primeiro dos experimentos considerado será o já realizado apresentado na Figura 6.6. Nesta simulação, das 1000 sementes iniciais, 435 geraram grãos que tocaram a superfície externa da matriz de simulação em algum ponto. Eliminando na totalidade estes grãos, uma nova matriz final modificada com 565 grãos é obtida. A Figura 7.1 apresenta esta nova matriz final formada desta primeira simulação. Em sequência, as Figuras 7.2 e 7.3 apresentam as imagens da segunda e terceira repetição desta simulação, onde se têm respectivamente 550 e 553 grãos restantes.

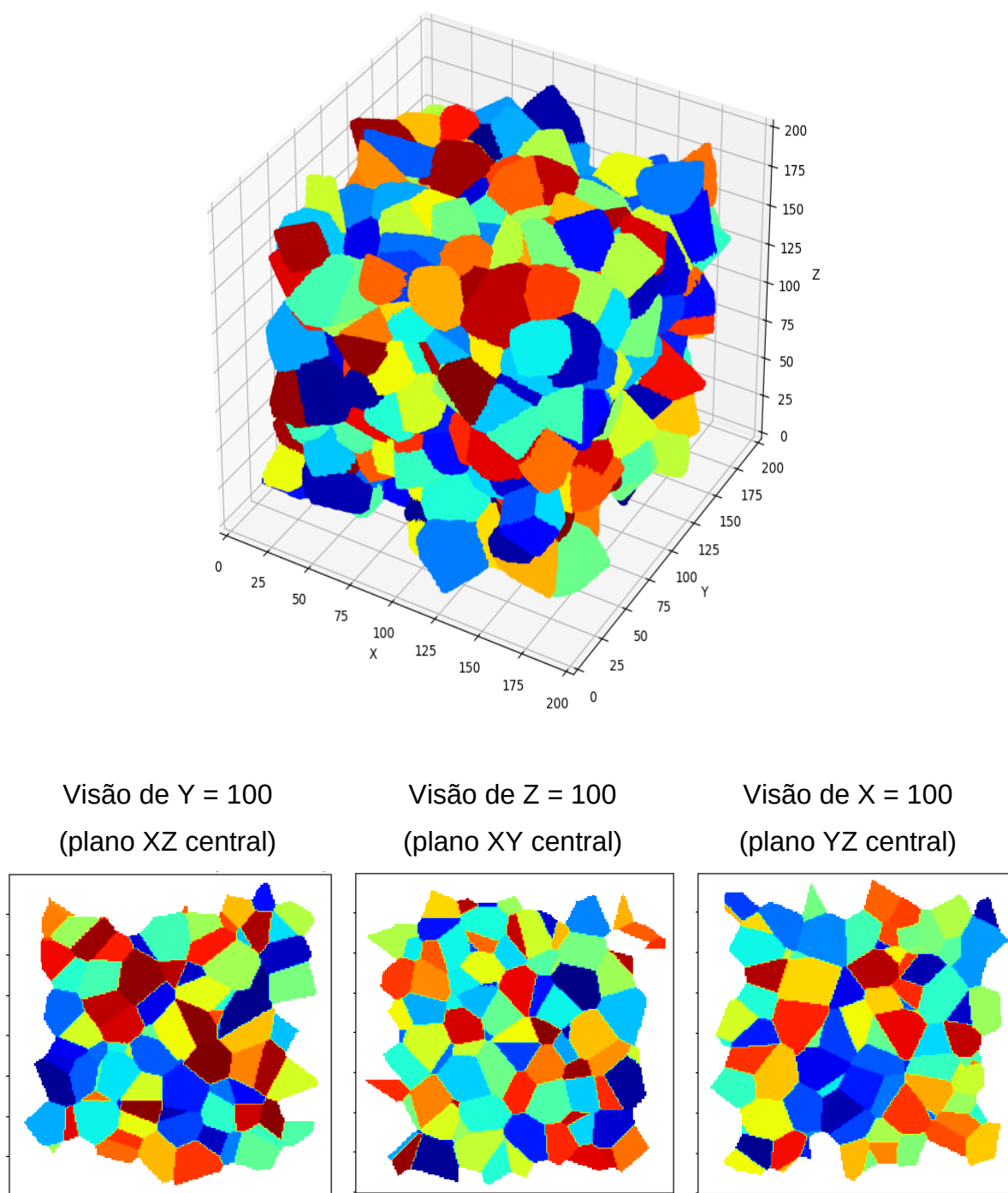
Figura 7.1. Simulação em ambiente com 200x200x200 células e 1000 grãos iniciais aleatoriamente distribuídos (1ª simulação).



Nota: simulação contempla os 565 grãos formados sem nenhum contato com a superfície, (gerado das Figuras 6.6d e 6.8c).

Fonte: do autor.

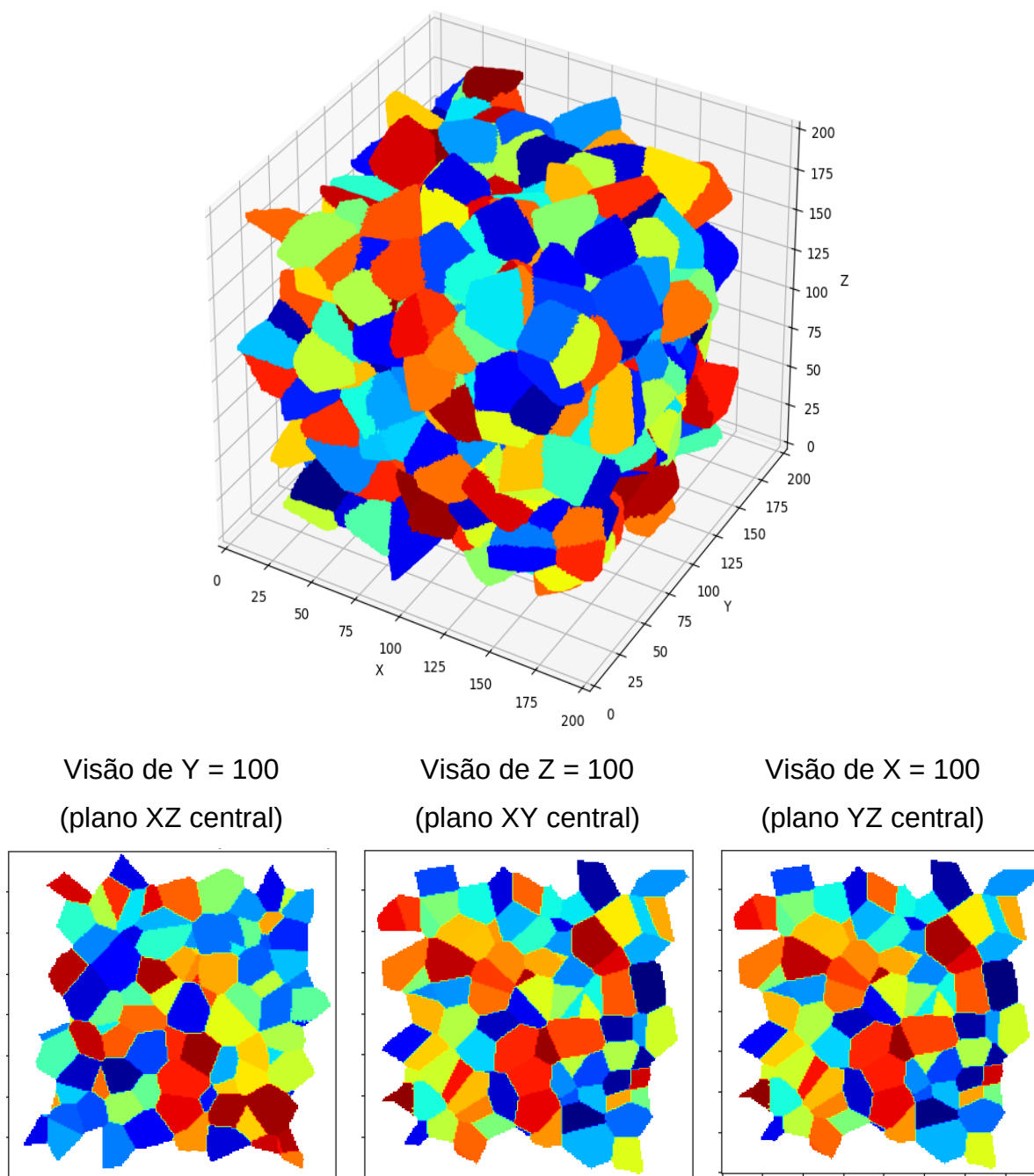
Figura 7.2. Simulação em ambiente com 200x200x200 células e 1000 grãos iniciais aleatoriamente distribuídos (2ª simulação).



Nota: simulação contempla os 550 grãos formados sem nenhum contato com a superfície.

Fonte: do autor.

Figura 7.3. Simulação em ambiente com 200x200x200 células e 1000 grãos iniciais aleatoriamente distribuídos (3ª simulação).



Nota: simulação contempla os 553 grãos formados sem nenhum contato com a superfície.

Fonte: do autor.

Feitas estas três simulações, para a análise dimensional são aplicadas independentemente para cada simulação, as equações (7.1) a (7.20), adaptando-as conforme as equações (7.21) a (7.26), para que não sejam considerados os grãos da superfície. A Tabela 7.2 apresenta alguns dos resultados dimensionais encontrados,

cujos histogramas detalhados de distribuição dos valores são apresentados nas Figuras 7.4 a 7.6.

Tabela 7.2. Valores médios e selecionados das três simulações (Figuras 7.1 a 7.3), para o diâmetro equivalente dos grãos (DG), para o volume dos grãos (VG), para o volume dos grãos normalizado (VN), e para a área superficial equivalente dos grãos (SG).

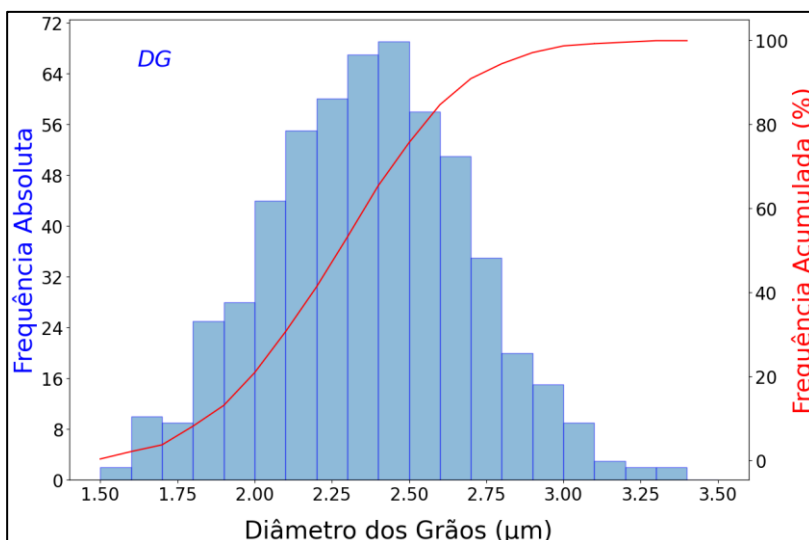
Parâmetro	Simulação (Nº) ⁽¹⁾	Valor médio	Desvio padrão	Mediana	Valor mínimo	Valor Máximo
$DG (\mu m)$	1 (Figura 7.1)	2,37	0,33	2,37	1,41	3,34
	2 (Figura 7.2)	2,40	0,35	2,42	1,23	3,40
	3 (Figura 7.3)	2,41	0,34	2,41	1,45	3,39
	Média⁽²⁾	2,39	-	-	1,36	3,38
$VG (\mu m^3)$	1 (Figura 7.1)	7,36	3,00	6,97	1,46	19,5
	2 (Figura 7.2)	7,73	3,28	7,37	0,98	20,5
	3 (Figura 7.3)	7,75	3,24	7,28	1,59	20,4
	Média⁽²⁾	7,61	-	-	1,34	20,1
VN	1 (Figura 7.1)	1	0,41	0,95	0,20	2,65
	2 (Figura 7.2)	1	0,42	0,95	0,13	2,65
	3 (Figura 7.3)	1	0,42	0,94	0,21	2,64
	Média⁽²⁾	1	-	-	0,18	2,65
SG	1 (Figura 7.1)	18,0	4,89	17,6	6,22	35,1
	2 (Figura 7.2)	18,5	5,31	18,3	4,77	36,2
	3 (Figura 7.3)	18,6	5,21	18,2	6,57	36,1
	Média⁽²⁾	18,4	-	-	5,85	35,8

Notas: (1) Simulações com 565, 550 e 553 grãos finais que não tocam os limites (simulações 1, 2 e 3 respectivamente). (2) Média dos valores das três simulações.

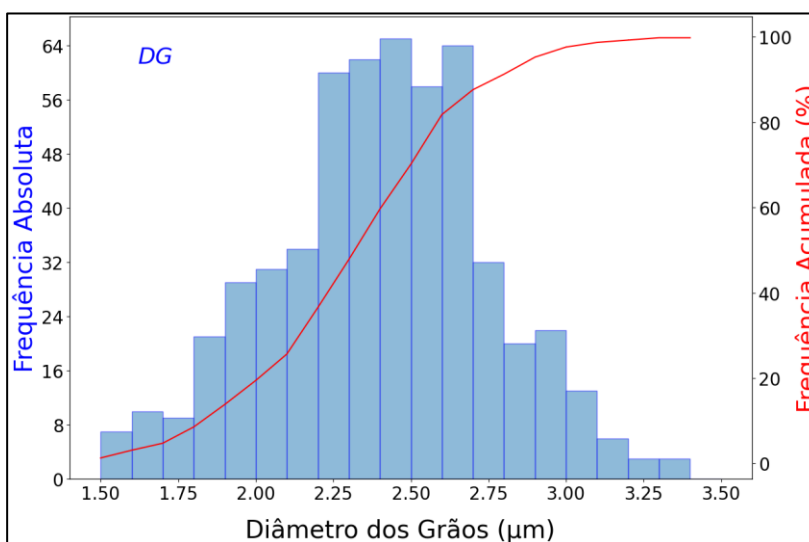
Fonte: do autor.

Figura 7.4. Histogramas obtidos das simulações das Figuras 7.1, 7.2 e 7.3 (1ª, 2ª e 3ª simulação respectivamente), para a distribuição dos valores do diâmetro equivalente dos grãos (DG).

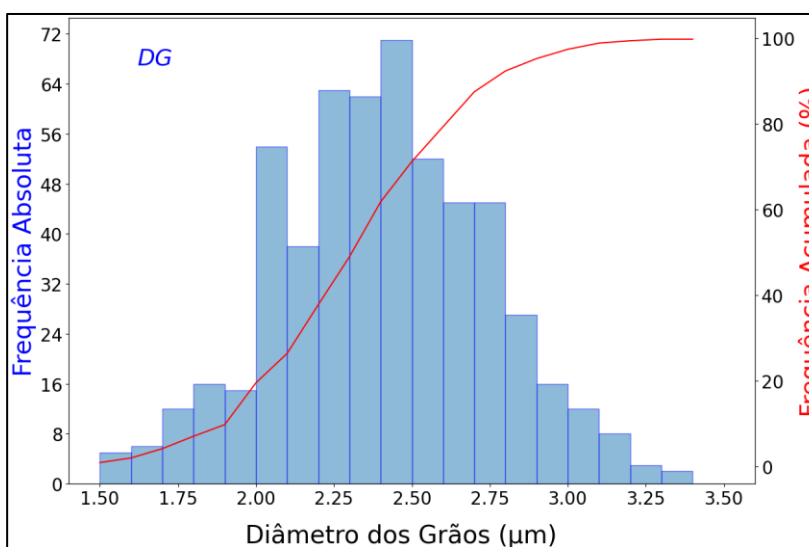
1ª Simulação
(Figura 7.1)



2ª Simulação
(Figura 7.2)



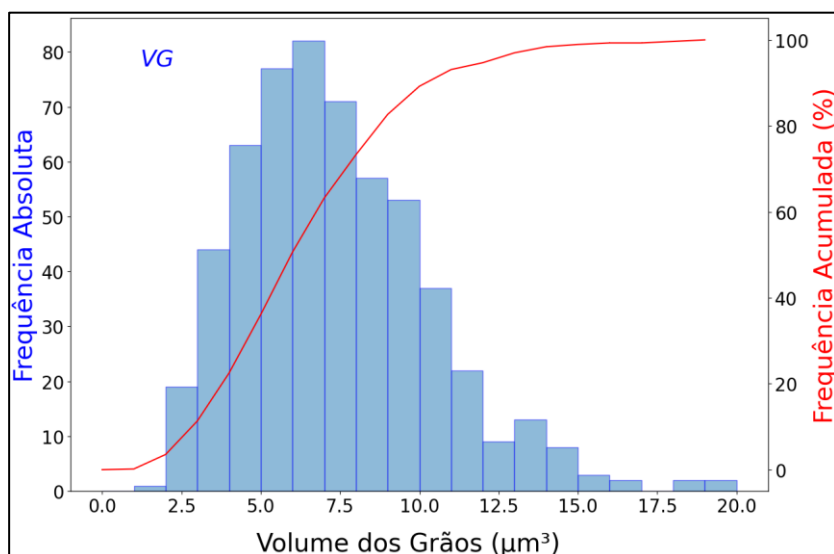
3ª Simulação
(Figura 7.3)



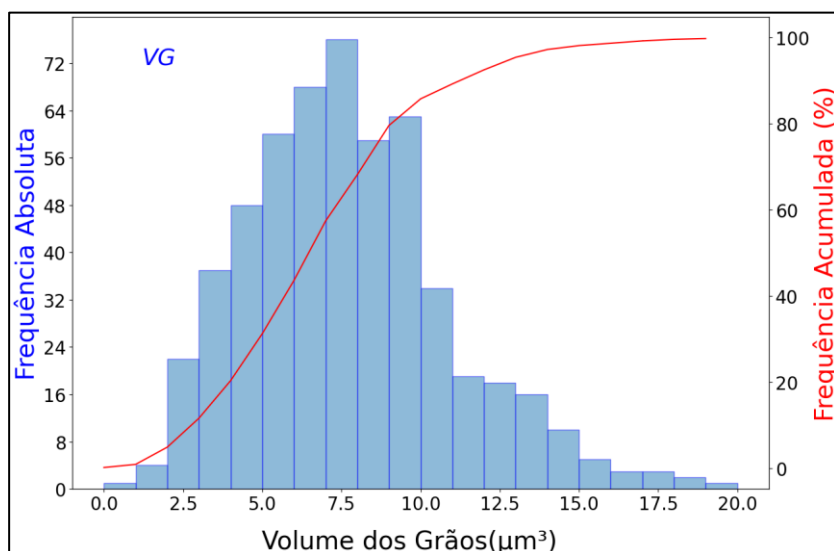
Fonte: do autor.

Figura 7.5. Histogramas obtidos da simulação das Figuras 7.1, 7.2 e 7.3 (1ª, 2ª e 3ª simulação respectivamente), para o volume dos grãos (VG).

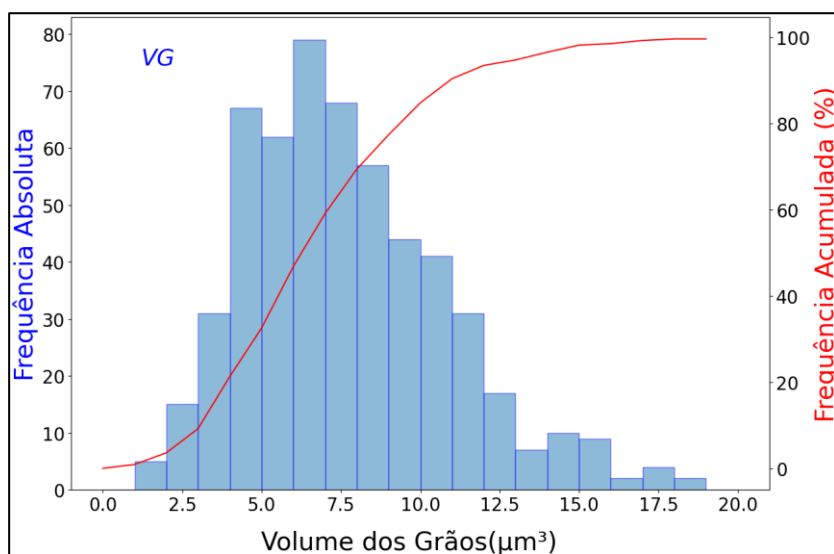
1ª Simulação
(Figura 7.1)



2ª Simulação
(Figura 7.2)



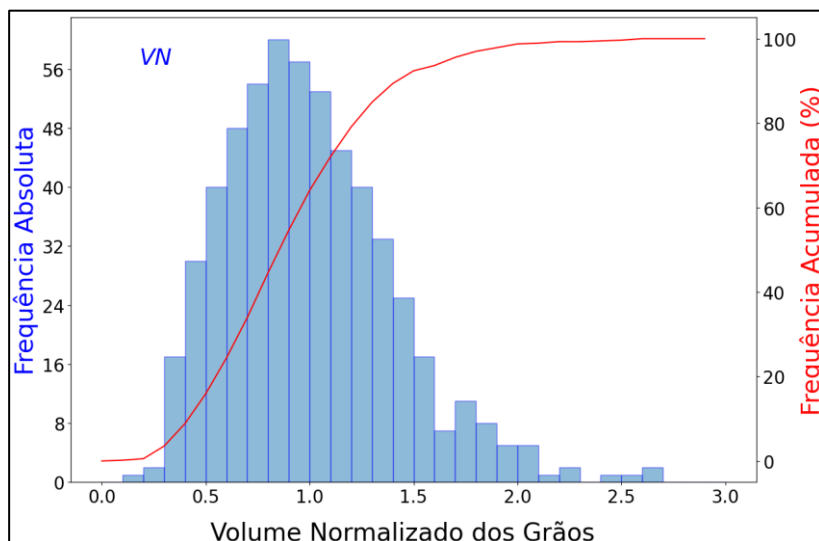
3ª Simulação
(Figura 7.3)



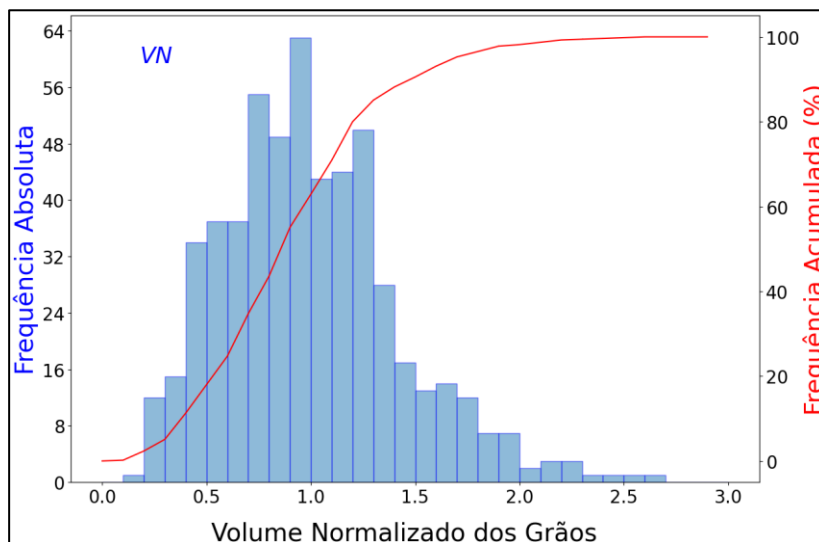
Fonte: do autor.

Figura 7.6. Histogramas obtidos da simulação das Figuras 7.1, 7.2 e 7.3 (1ª, 2ª e 3ª simulação respectivamente), para o volume normalizado (VN).

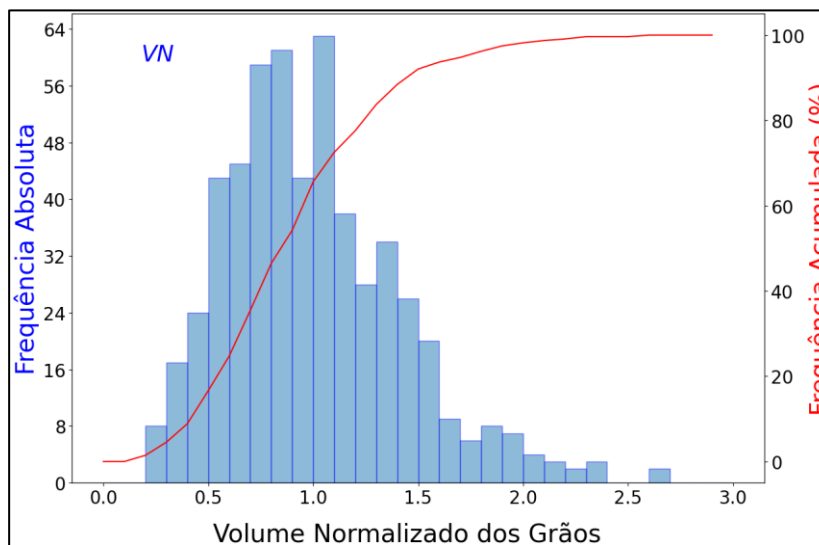
1ª Simulação
(Figura 7.1)



2ª Simulação
(Figura 7.2)



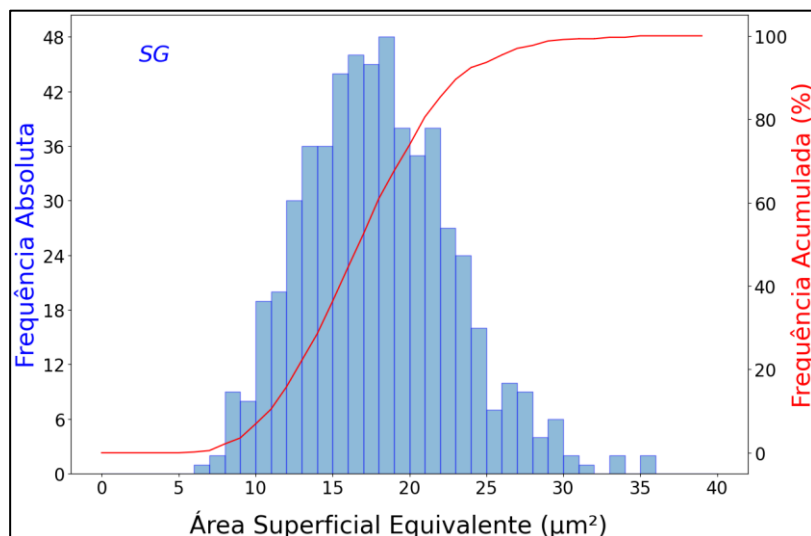
3ª Simulação
(Figura 7.3)



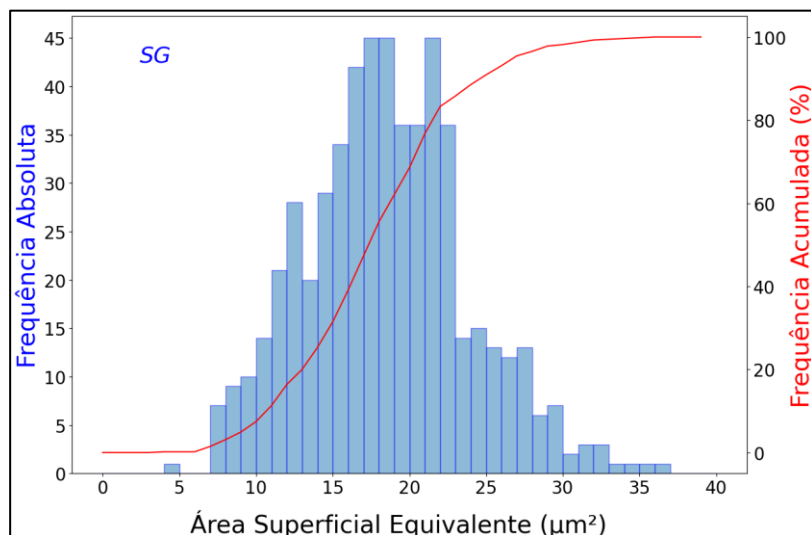
Fonte: do autor.

Figura 7.7. Histogramas obtidos da simulação das Figuras 7.1, 7.2 e 7.3 (1ª, 2ª e 3ª simulação respectivamente), para a área superficial equivalente (SG).

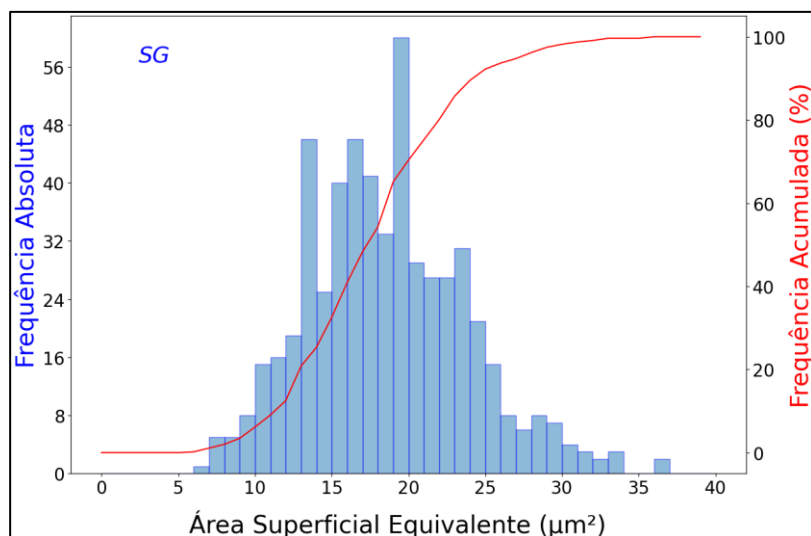
1ª Simulação
(Figura 7.1)



2ª Simulação
(Figura 7.2)



3ª Simulação
(Figura 7.3)



Fonte: do autor.

Em relação à distribuição dos dados de DG , pela própria aparência do histograma, e ainda pelos valores da média e mediana encontrados serem muito próximos, indica que a distribuição de valores é relativamente simétrica, com o centro dos dados sendo bem representado pela média, sem viéses significativos na distribuição dos dados (sem *outliers* influenciando a média para cima ou para baixo).

Ainda, entre as três simulações, apesar de visualmente devido a aleatoriedade na distribuição das sementes terem sido geradas estruturas diferenciadas (Figuras 7.1, 7.2 e 7.3), em relação aos valores médios encontrados para DG , VG , e VN , praticamente não ocorrem diferenças entre as simulações. Assim, qualquer uma das três simulações pode, mesmo isoladamente, representar relativamente bem as características principais e os valores médios para este ambiente (200x200x200 células e 1000 sementes iniciais).

Comparando-se o valor médio de DG obtido teoricamente de $2,42 \mu m$ com o médio calculado sem os grãos da superfície de $2,39 \mu m$, percebe-se uma diferença muito pequena, mas para mais. Dessa forma, na média os grãos que foram eliminados possuem, como resultado dos fenômenos que acontecem sobre estes durante a simulação, um valor de diâmetro médio maior que os grãos do interior.

Isto aparentemente indica que o impacto observado no valor deste parâmetro (DG), do maior crescimento do grão possibilitado pela ausência de grãos crescendo vindos do exterior da parte do metal simulado, é preponderante em relação ao impacto do menor crescimento de grão causado pelo conflito com a superfície.

Isto também pode ser visto como um indicativo de que, a utilização da matriz periódica seria neste quesito mais indicada de ser usada em relação a matriz não periódica. Contudo, ainda sim somente se eliminando estes grãos da superfície e duvidosos, como realizado neste trabalho, se suprime qualquer dúvida sobre os dados geométricos dos grãos individuais.

Por outro lado, curiosamente, quando da realização da eliminação dos grãos duvidosos, pode ser preferível a utilização da matriz não periódica, pois a matriz periódica também influencia a formação de parte dos grãos da sua respectiva segunda vizinhança das fronteiras externas, de um modo que não ocorre na utilização da matriz

não periódica. Assim a utilização da matriz não periódica simplifica o processo de eliminação dos grãos duvidosos pois estes estão somente na primeira vizinhança.

Conclui-se assim esta apresentação da metodologia de parametrização dimensional dos grãos recristalizados finais obtidos, onde se apresentou detalhadamente toda a conceituação empregada, com exemplos e discussão de resultados. Entretanto, foi-se muito além dos conceitos, sendo apresentado toda a parametrização lógica e computacional aplicada.

Considera-se que esta é uma etapa essencial para o devido necessário atendimento quanto ao viés científico em trabalhos de simulação computacional. Isto se dá, pois, mesmo em se definindo um conceito, o modo de como a sua efetiva parametrização computacional é realizado pode influenciar, e muito, tanto nos resultados encontrados, como na possibilidade de serem independentemente reproduzidos. Esta parametrização computacional detalhada não é comum na literatura, sendo sua apresentação como realizado uma relevante contribuição deste trabalho.

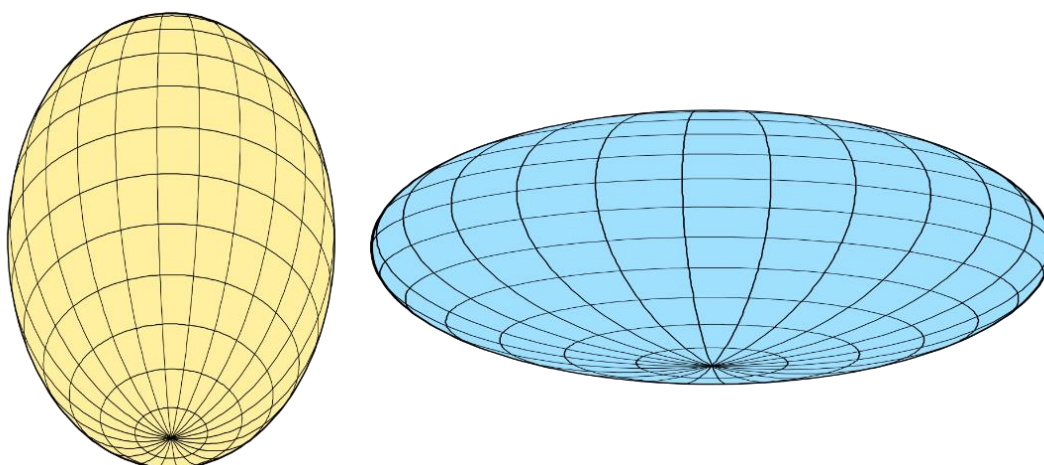
8 MODELAGEM DE GRÃOS ESFEROIDES COM AH

8.1 O esferoide

Certamente o formato mais utilizado para representar geometrica e conceitualmente os grãos recristalizados no momento anterior ao *impingement* é a esfera, sendo inclusive esta uma das premissas básicas deste trabalho. Entretanto, esta não é a única forma. Por exemplo, existem situações em metais com elevados graus de anisotropia, onde os grãos recristalizados podem crescer preferencialmente no formato de esferoides (GODIKSEN, 2007; GODIKSEN et al., 2008), entre mesmo outras possibilidades de formatos (ROMANOVA et al., 2023).

O esferoide, ou a forma elipsoidal esférica, é uma elipse de revolução, onde dois dos seus três semieixos (a , b e c) são iguais ($a = b$). Se $c > a$ se trata de um esferoide prolato, e caso $c < a$ se trata de um esferoide oblato. Se $c = a$ o esferoide se degenera para uma esfera. Estes esferoides podem simplifcadamente serem visualizados ao longo de um eixo principal como sendo uma esfera alongada, no caso do prolato, ou como sendo uma esfera achatada, no caso do oblato. A Figura 8.1 apresenta suas imagens ilustrativas.

Figura 8.1. Imagens ilustrativas do esferoide prolato (a esquerda) e do esferoide oblato (a direita).



Fonte: Adaptado de <https://en.wikipedia.org/wiki/Spheroid>. Acessado em 16 dez. 2024.

As principais relações e equações analíticas que descrevem os esferoides são conhecidas⁸. Por convenção, seus dois distintos comprimentos ao longo dos semi-eixos são denominados a e c , e a orientação do esferoide se dá simétrica ao eixo z . Dessa forma, sua representação paramétrica é dada por:

$$x = a \sin \theta \cos \phi \quad (8.1)$$

$$y = a \sin \theta \sin \phi \quad (8.2)$$

$$z = c \cos \theta \quad (8.3)$$

Onde:

a é o semi-eixo relativo ao raio da seção equatorial, x e y .

c é o semi-eixo relativo ao alongamento no eixo z .

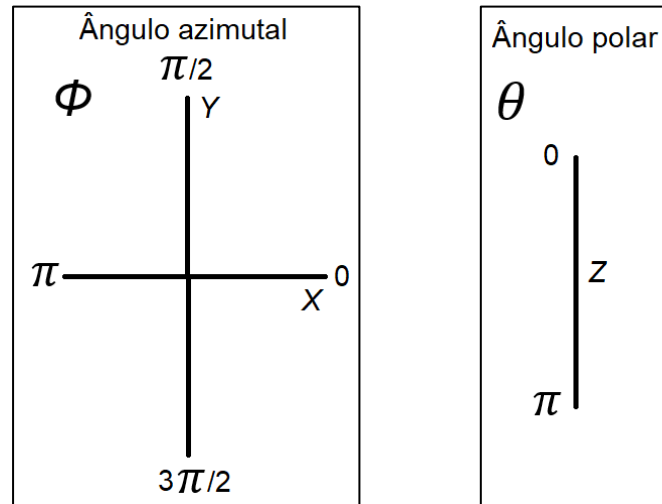
θ é o ângulo polar, onde $\theta \in [0, \pi]$.

ϕ é o ângulo azimutal, onde $\phi \in [0, 2\pi[$.

O ângulo polar (θ) é a medida da inclinação do eixo z (análogo a uma latitude), onde no polo norte ($z = c$) θ é 0, no equador ($z = 0$) $\theta = \pi/2$, e no polo sul ($z = -c$) $\theta = \pi$. Já o ângulo azimutal (ϕ) é mais análogo a uma longitude, onde no eixo x positivo $\phi = 0$, no eixo y positivo $\phi = \pi/2$, no eixo x negativo $\phi = \pi$, e por fim no eixo y negativo $\phi = 3\pi/2$. A Figura 8.2 ilustra esta disposição dos ângulos azimutal e polar.

⁸ Disponível em <https://mathworld.wolfram.com/Spheroid.html>, e <https://en.wikipedia.org/wiki/Spheroid>. Acessados em 17 dez 2024.

Figura 8.2. Representação dos valores sobre as coordenadas x , y e z dos ângulos azimutal (ϕ) e polar (θ).



Fonte: do autor.

Assim, $\sin \theta$ controla a posição no plano horizontal (xy), $\cos \theta$ controla a posição ao longo do eixo vertical (z), e $\cos \phi$ e $\sin \phi$ controlam a direção no plano xy para determinar as coordenadas x e y .

A razão de anisotropia geométrica (ou razão axial), é dada por:

$$K_a = c/a \quad (8.4)$$

A equação cartesiana do esferoide é dada por:

$$\frac{x^2+y^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1 \quad (8.5)$$

Adicionalmente, o volume de um esferoide e a sua área superficial podem ser encontrados por:

$$V_{Esferoide} = \frac{4}{3} \pi a^2 c \quad (8.6)$$

$$S_{Ep} = 2\pi a^2 \left[1 + \frac{c}{a e_p} \arcsin(e_p) \right] \quad (8.7)$$

$$e_p = \sqrt{1 - \frac{a^2}{c^2}} \quad (8.8)$$

$$S_{Eo} = 2\pi a^2 \left(1 + \frac{1-e_o^2}{2 e_o} \tanh^{-1}(e_o) \right) \quad (8.9)^9$$

$$e_o = \sqrt{1 - \frac{c^2}{a^2}} \quad (8.10)$$

Onde:

$V_{Esferoide}$ é o volume do esferoide,

S_{Ep} é a área superficial do esferoide prolato,

S_{Eo} é a área superficial do esferoide oblato,

e_p é a excentricidade do esferoide prolato, e

e_o é a excentricidade do esferoide oblato.

8.2 O AH adaptado ao esferoide

Em essência a técnica de AH é a mesma a já apresentada para o crescimento esférico, somente adaptada ao novo formato geométrico na forma de esferoides. Para isso, no pseudocódigo do Quadro 6.1 (linha 15), no lugar da equação cartesiana da esfera, usa-se a equação cartesiana do esferoide, Equação (8.5).

Entretanto, no caso dos esferoides prolatos ($K_a > 1$), na equação cartesiana deve-se isolar o c , e, no caso dos esferoides oblato ($K_a < 1$), deve-se isolar o a . Assim as equações ficam:

⁹ $\tanh^{-1}(e_o) = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+e_o}{1-e_o} \right)$

$$c = \sqrt{k_a^2(x^2 + y^2) + z^2} \quad (8.11)$$

$$a = \sqrt{x^2 + y^2 + k_a^2 z^2} \quad (8.12)$$

Onde a Equação (8.11) é empregada nas simulações com os esferoides prolatos, e a Equação (8.12) nas simulações com os esferoides oblato.

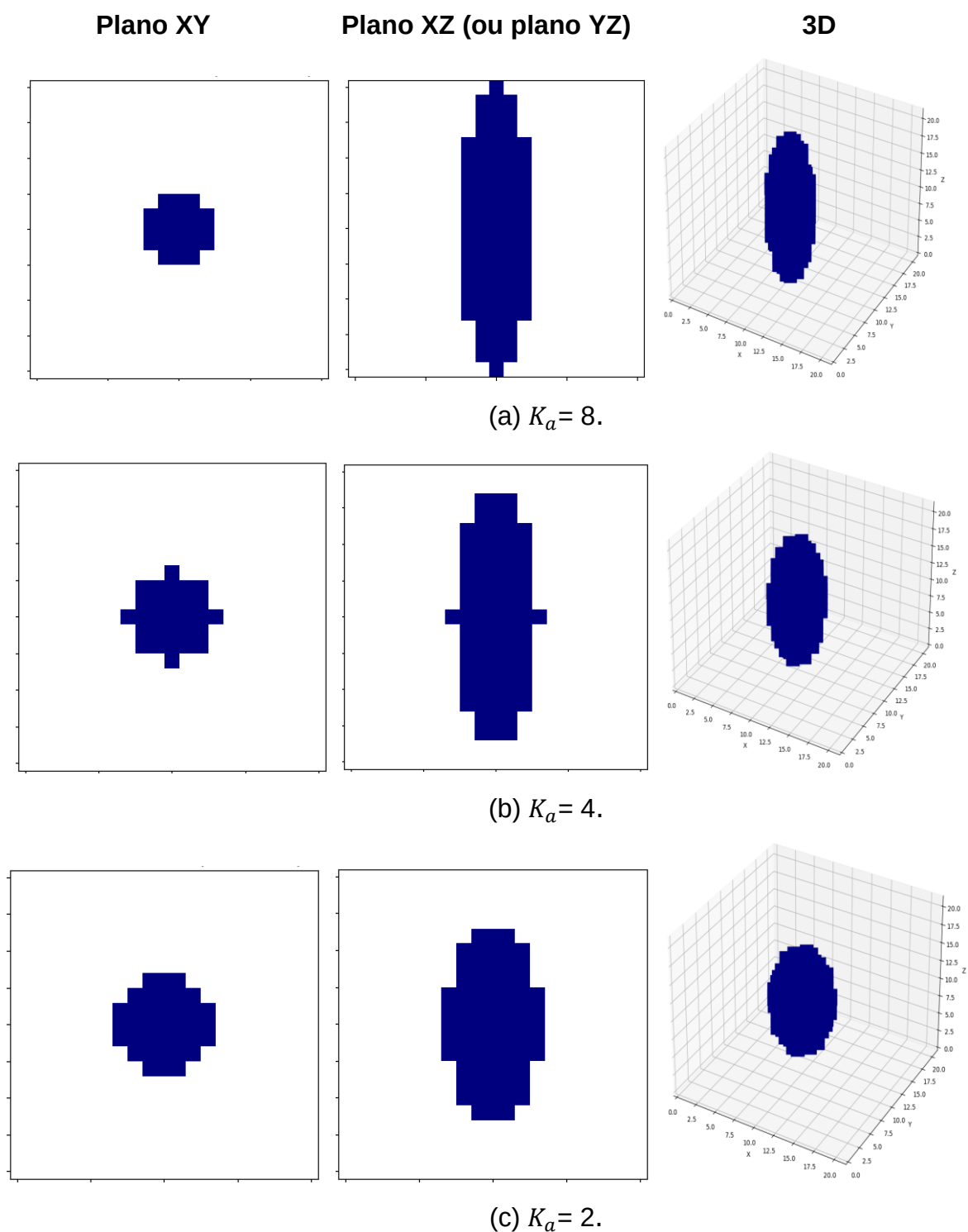
O valor do *passo* a ser considerado será o de 0,5, como feito anteriormente na modelagem das esferas, de modo a se garantir a hibridização total com eficiência computacional.

Entretanto, como o esferoide não possui a simetria da esfera, o *passo* será aplicado como controle para a evolução do seu eixo mais proeminente. Assim, se o esferoide for prolato ($K_a > 1$), a evolução do *passo* será empregada como controle sobre a evolução do valor de c , mas se o esferoide for oblato ($K_a < 1$), a evolução do *passo* será empregada como controle sobre a evolução do valor de a .

Isto é necessário, pois assim se tem uma condição mais restritiva de evolução sobre o eixo menos proeminente. Se o controle fosse feito em relação ao eixo menos proeminente, um *passo* de 0,5 iria induzir no eixo mais proeminente grandes “saltos” a cada laço da simulação, atrapalhando a hibridização e a evolução deste.

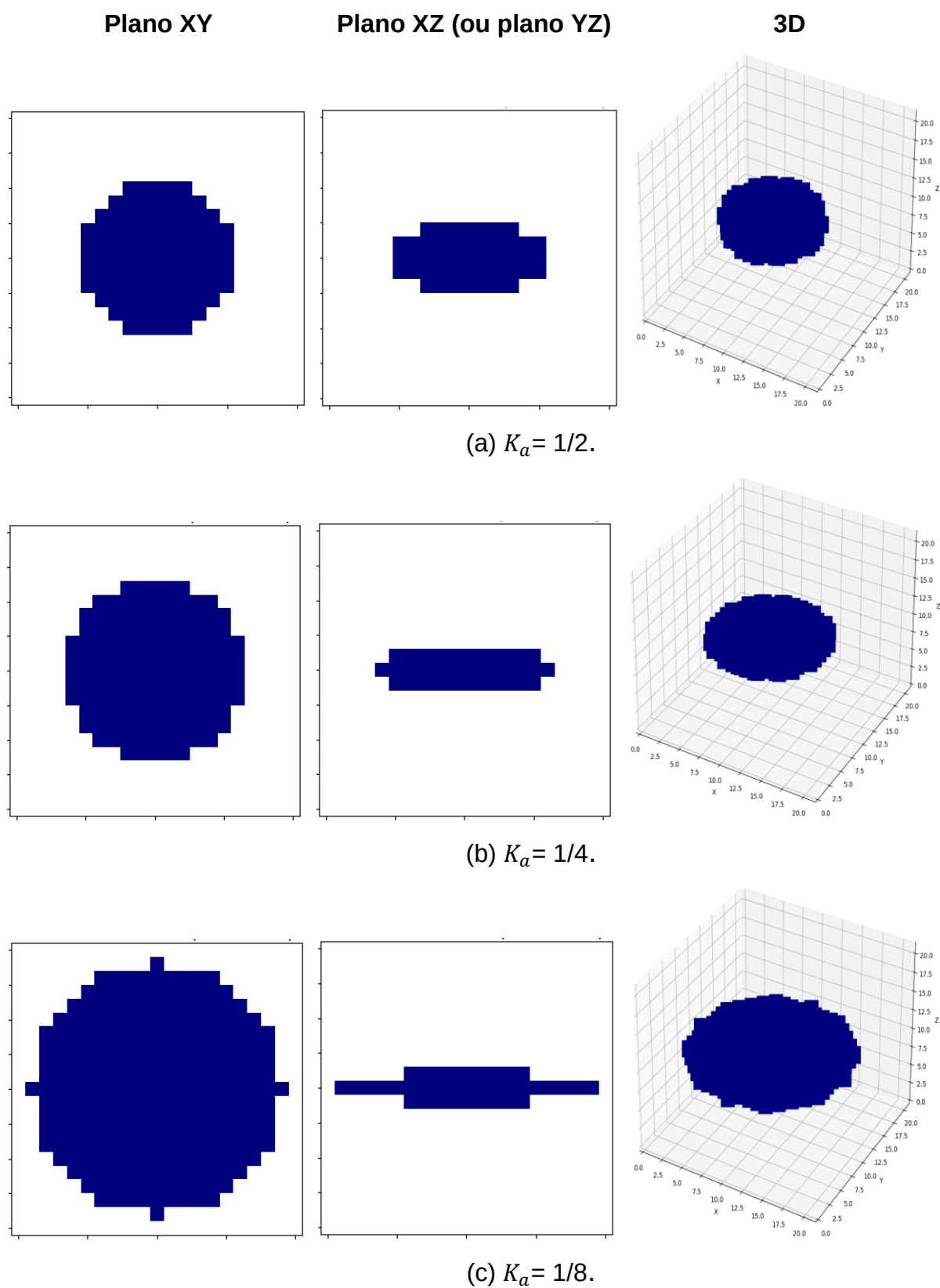
Para ilustrar o AH aplicado ao formato de esferoides, realizou-se simulações simples, a partir de uma única semente posicionada no seu centro, em um ambiente de 21x21x21 células e em um ambiente de 201x201x201 células. Simulações foram realizadas considerando K_a de 8, 4, 2, 1/2, 1/4 e 1/8, de modo a cobrir um espectro de valores de alongamentos e achatamentos. As Figuras 8.3 a 8.6 apresentam algumas imagens destas simulações e a Tabela 8.1 apresenta alguns de seus parâmetros obtidos.

Figura 8.3. Imagens a 3% de transformação de simulações de esferoides prolatos a partir de uma única semente no centro de um ambiente de 21x21x21 células. Semente e células transformadas na cor azul.



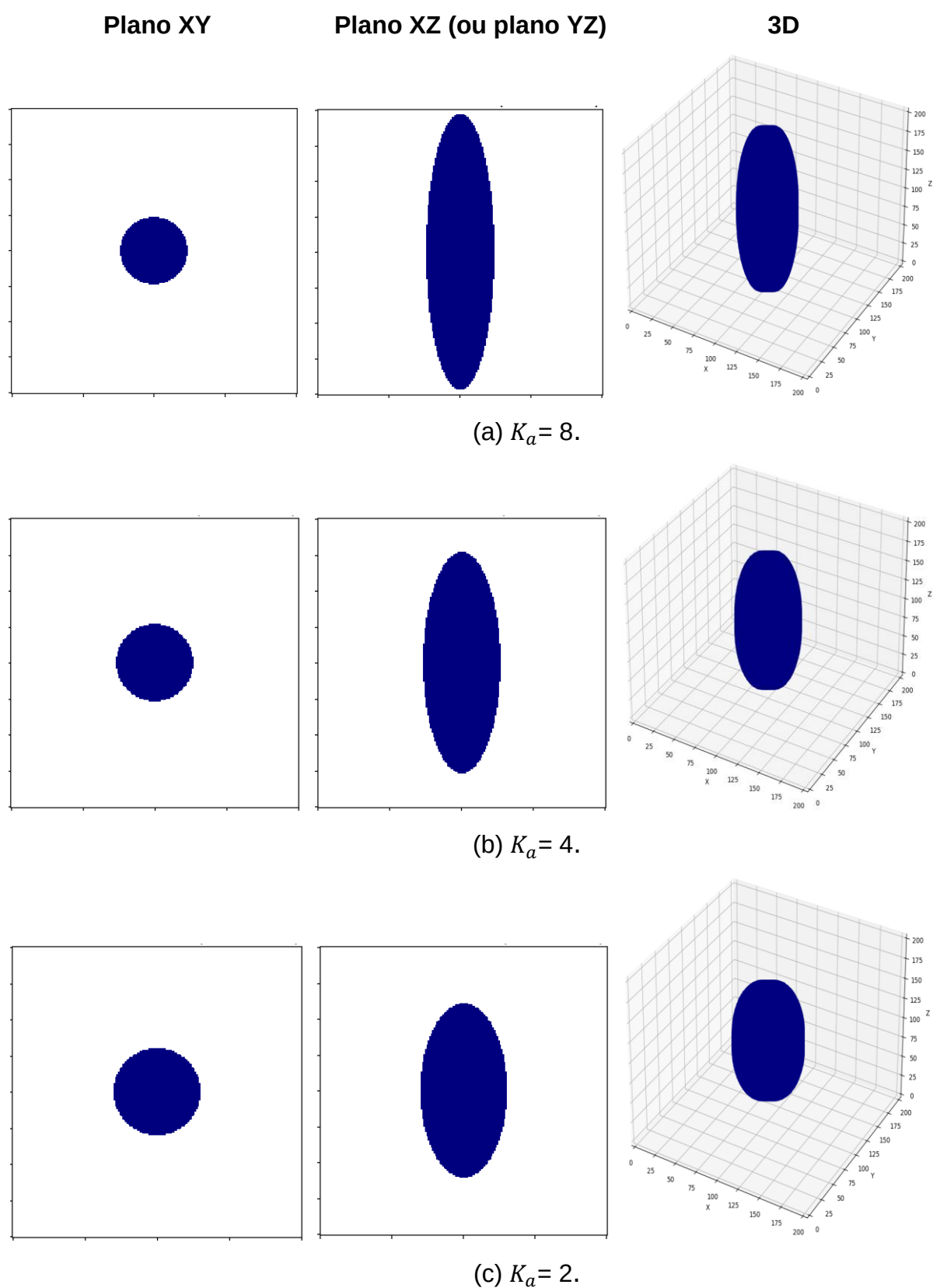
Fonte: do autor.

Figura 8.4. Imagens a 3% de transformação de simulações de esferoides oblato a partir de uma única semente no centro de um ambiente de 21x21x21 células. Semente e células transformadas na cor azul.



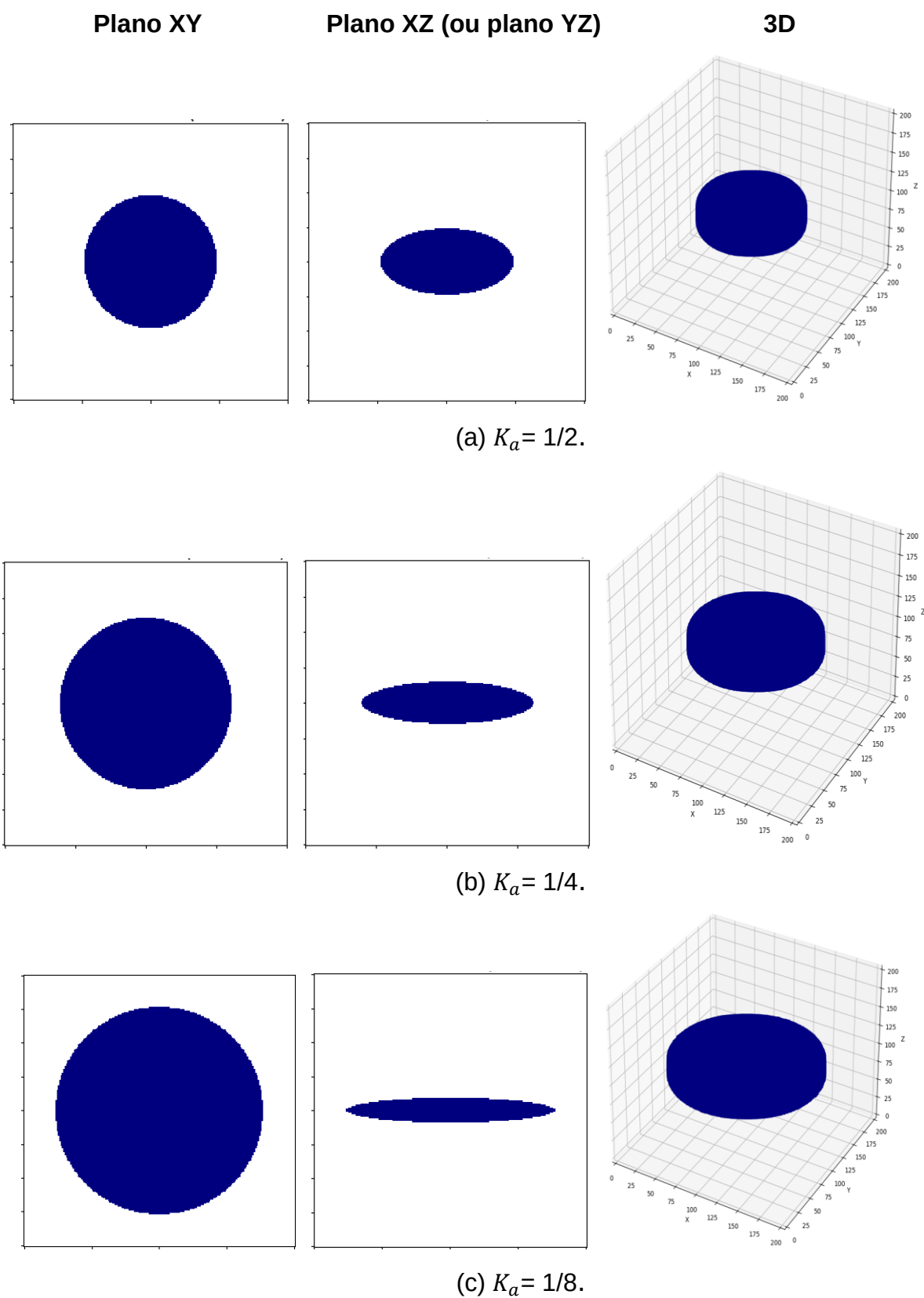
Fonte: do autor.

Figura 8.5. Imagens a 3% de transformação de simulações de esferoides prolatos a partir de uma única semente no centro de um ambiente de 201x201x201 células. Semente e células transformadas na cor azul.



Fonte: do autor.

Figura 8.6. Imagens a 3% de transformação de simulações de esferoides oblato a partir de uma única semente no centro de um ambiente de 201x201x201 células. Semente e células transformadas na cor azul.



Fonte: do autor.

Tabela 8.1. Simulações completas em ambientes com 21x21x21 células e com 201x201x201 células, iniciando com uma única célula localizada no seu centro, para diversos valores de K_a .

Ambiente (Nº Células)	K_a	Nº total de Laços	Nº Total de Células Pesquisadas	
			Nº	(%) ⁽¹⁾
21x21x21 (9.261) ⁽²⁾	8	115	349.038	3.769
	4	83	242.130	2.615
	2	60	165.738	1.790
	1/2	49	153.126	1.653
	1/4	85	347.958	3.757
	1/8	163	753.846	8.140
201x201x201 (8.120.601) ⁽²⁾	8	1.149	329.288.490	4.055
	4	825	227.551.722	2.802
	2	600	155.564.394	1.916
	1/2	490	141.869.454	1.747
	1/4	849	323.145.750	3.979
	1/8	1.625	705.629.622	8.689

(1) (Nº Total Células Pesquisadas/Nº Total Células do Ambiente) x 100%

(2) 100% das células do ambiente foram transformadas em todas as simulações.

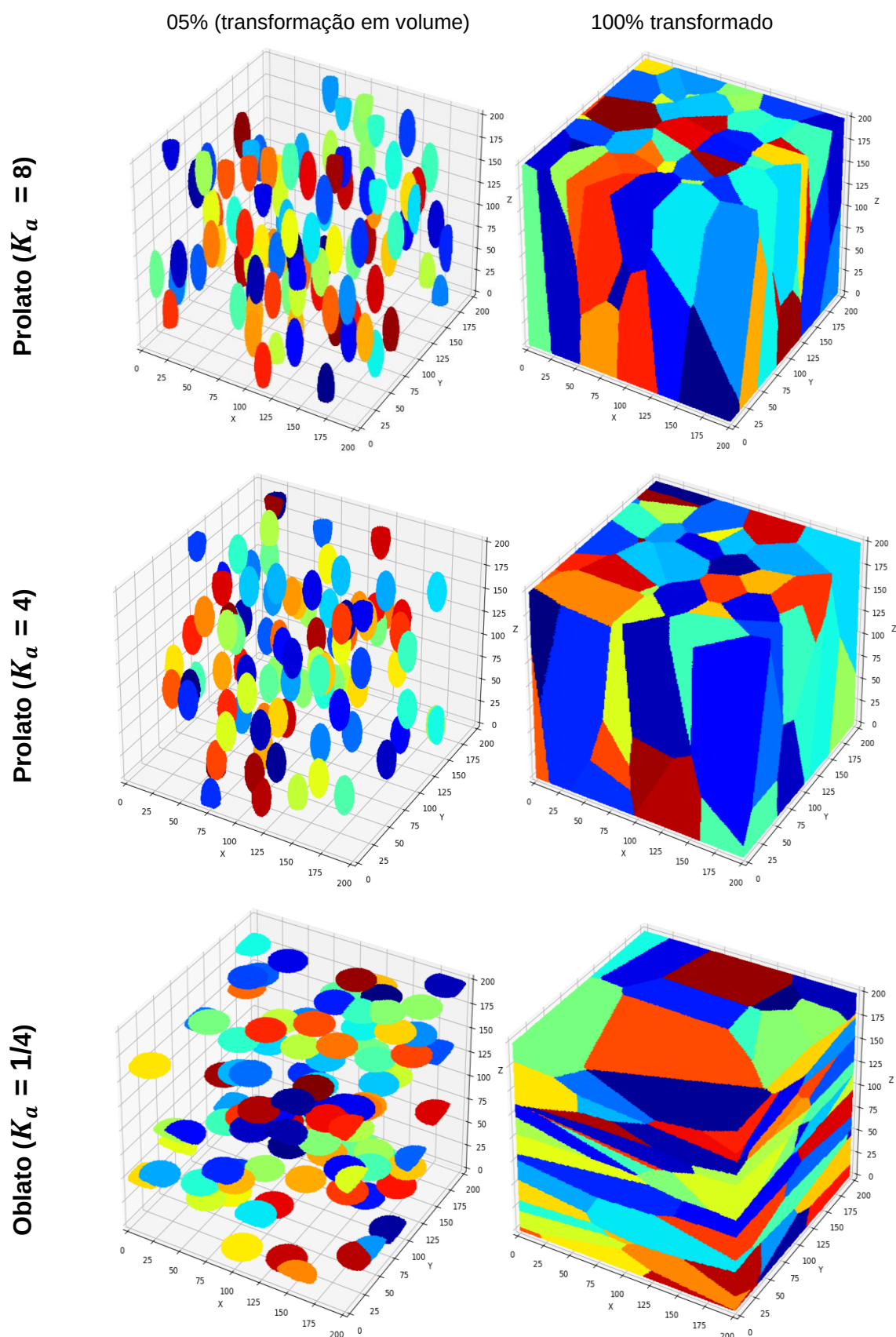
Fonte: do autor.

8.3 A microestrutura formada por grãos esferoides

Para ilustrar o efeito dos esferoides e de sua geometria (valor de K_a) na aparência das microestruturas geradas, realizou-se simulações em um ambiente com 200x200x200 células. Estas simulações foram conduzidas para 100 sementes aleatoriamente distribuídas, considerando K_a de 8, 4, e 1/4, de modo a cobrir um espectro de valores geométricos.

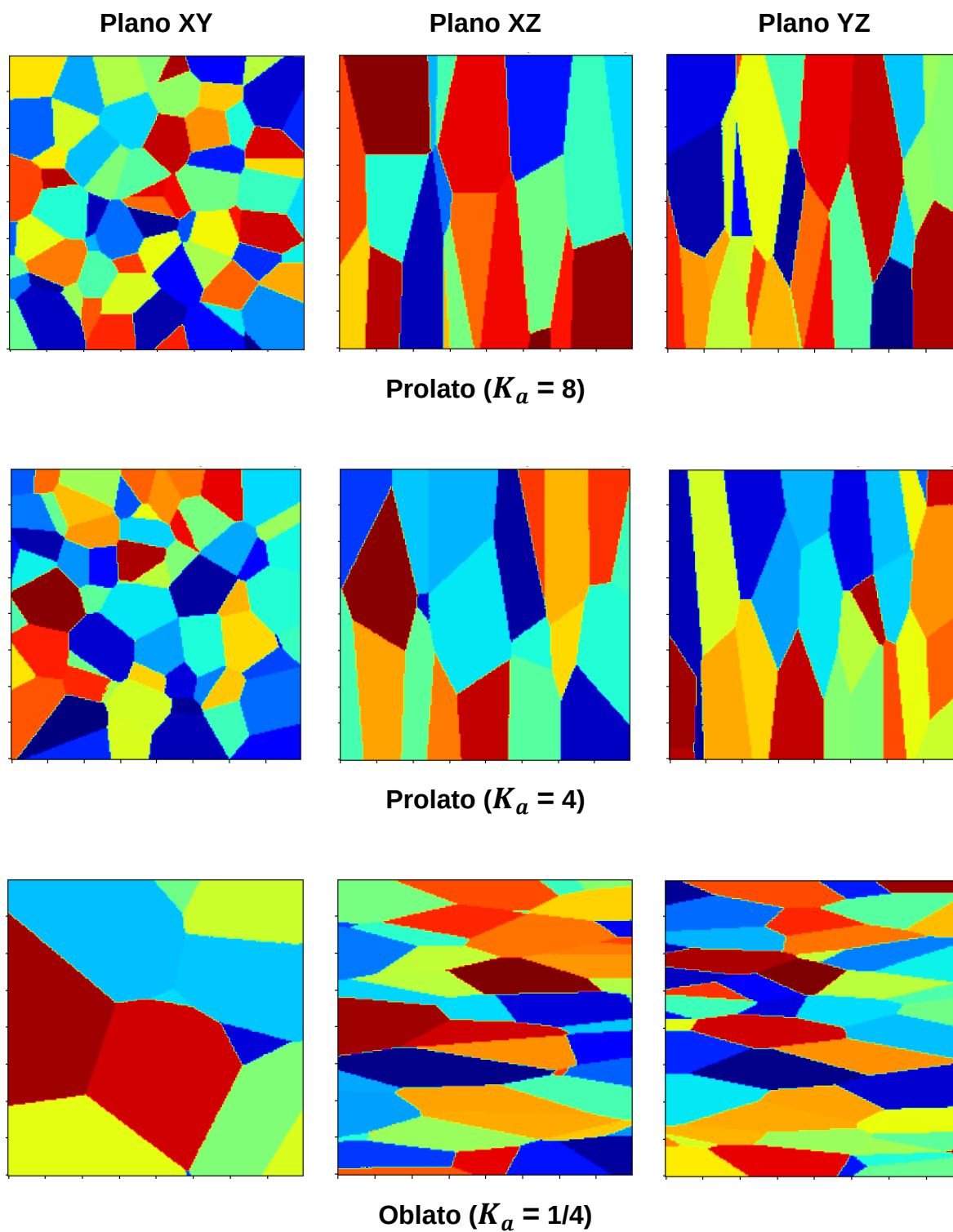
As Figuras 8.7 e 8.8 apresentam algumas imagens destas simulações. Ainda, neste mesmo ambiente, mas com 1000 sementes iniciais aleatoriamente distribuídas, realizou-se uma simulação considerando o K_a de 4, cujas imagens estão na Figura 8.9, e, eliminando os grãos que tocam a superfície pelo procedimento anteriormente detalhado (Seção 7.3), as imagens resultantes estão na Figura 8.10.

Figura 8.7. Imagem 3D das microestruturas geradas por grãos esferoides, com 100 sementes iniciais aleatórias em ambiente com 200x200x200 células.



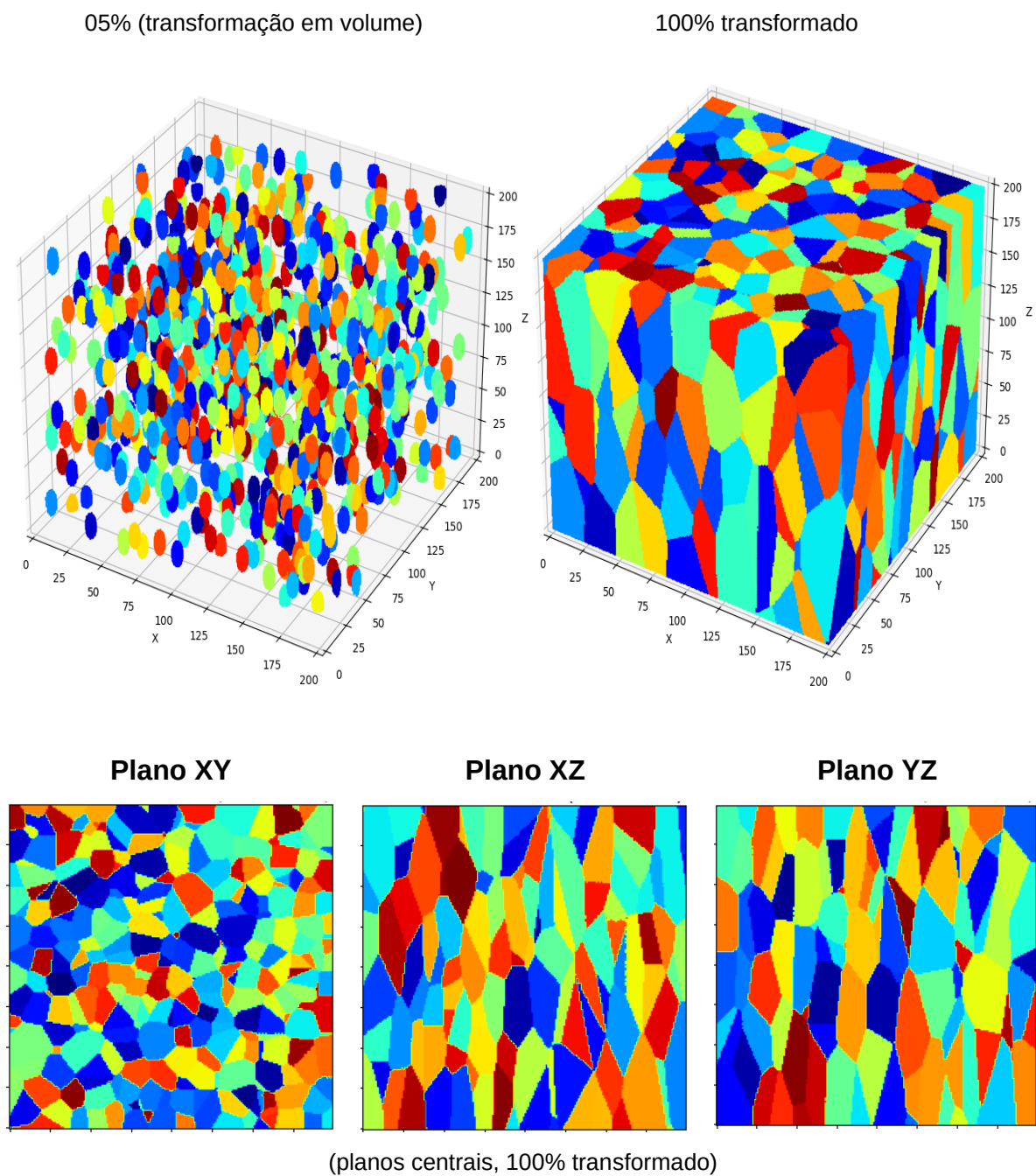
Fonte: do autor

Figura 8.8. Imagem dos planos centrais das microestruturas geradas por grãos esferoides dos experimentos da Figura 8.6 (100 sementes iniciais aleatórias em ambiente com 200x200x200 células).



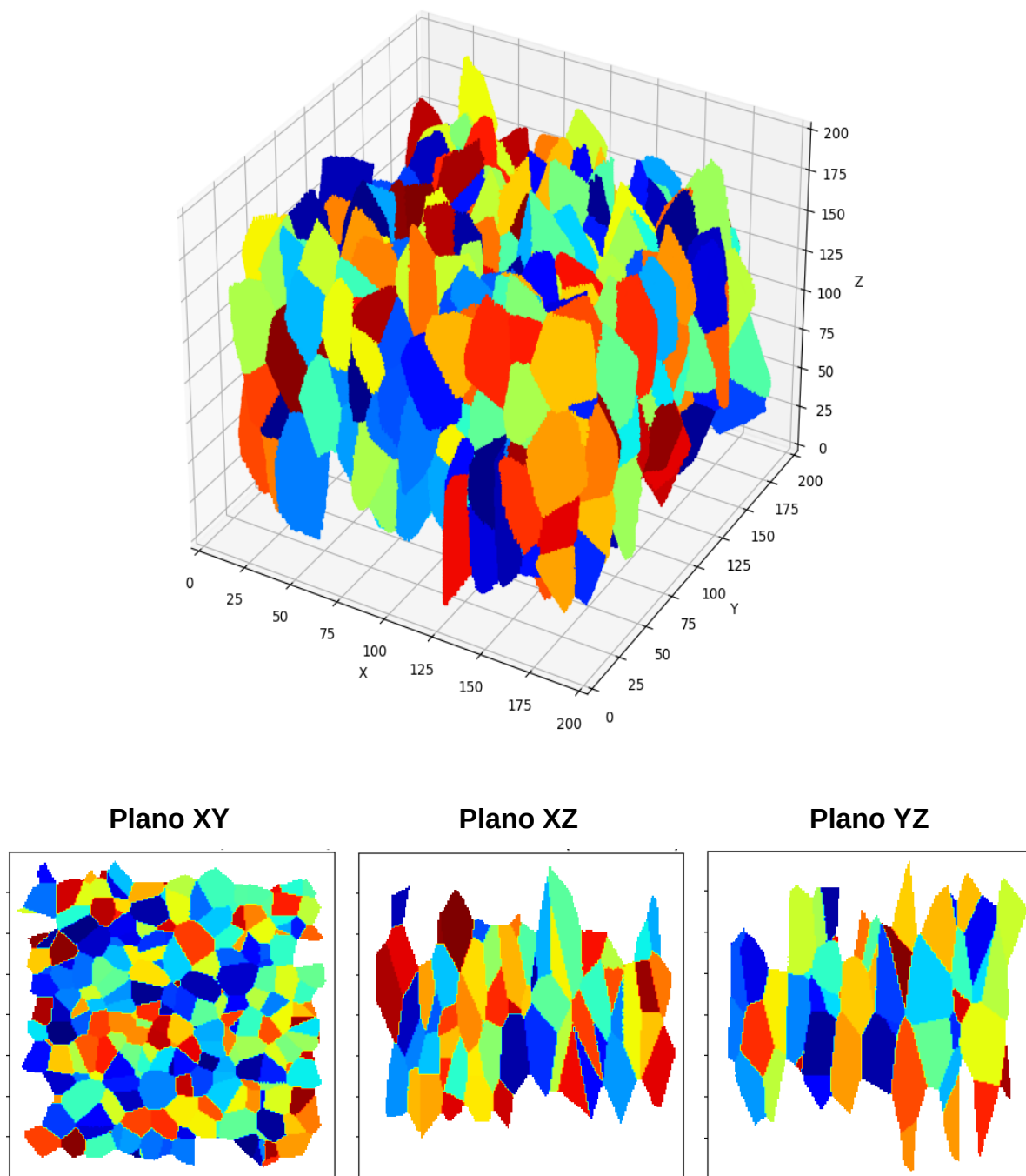
Fonte: do autor

Figura 8.9. Imagens 3D e dos planos centrais das microestruturas geradas por grãos esferoides prolatos ($K_a = 4$), com 1000 sementes iniciais aleatórias em ambiente com 200x200x200 células.



Fonte: do autor.

Figura 8.10. Imagens 3D e dos planos centrais das microestruturas geradas pelo experimento da Figura 8.8 (grãos esferoides prolatos ($K_a = 4$), com 1000 sementes iniciais aleatórias em ambiente com 200x200x200 células), com a eliminação dos grãos que tocam a superfície (482 grãos restantes e 518 grãos eliminados).

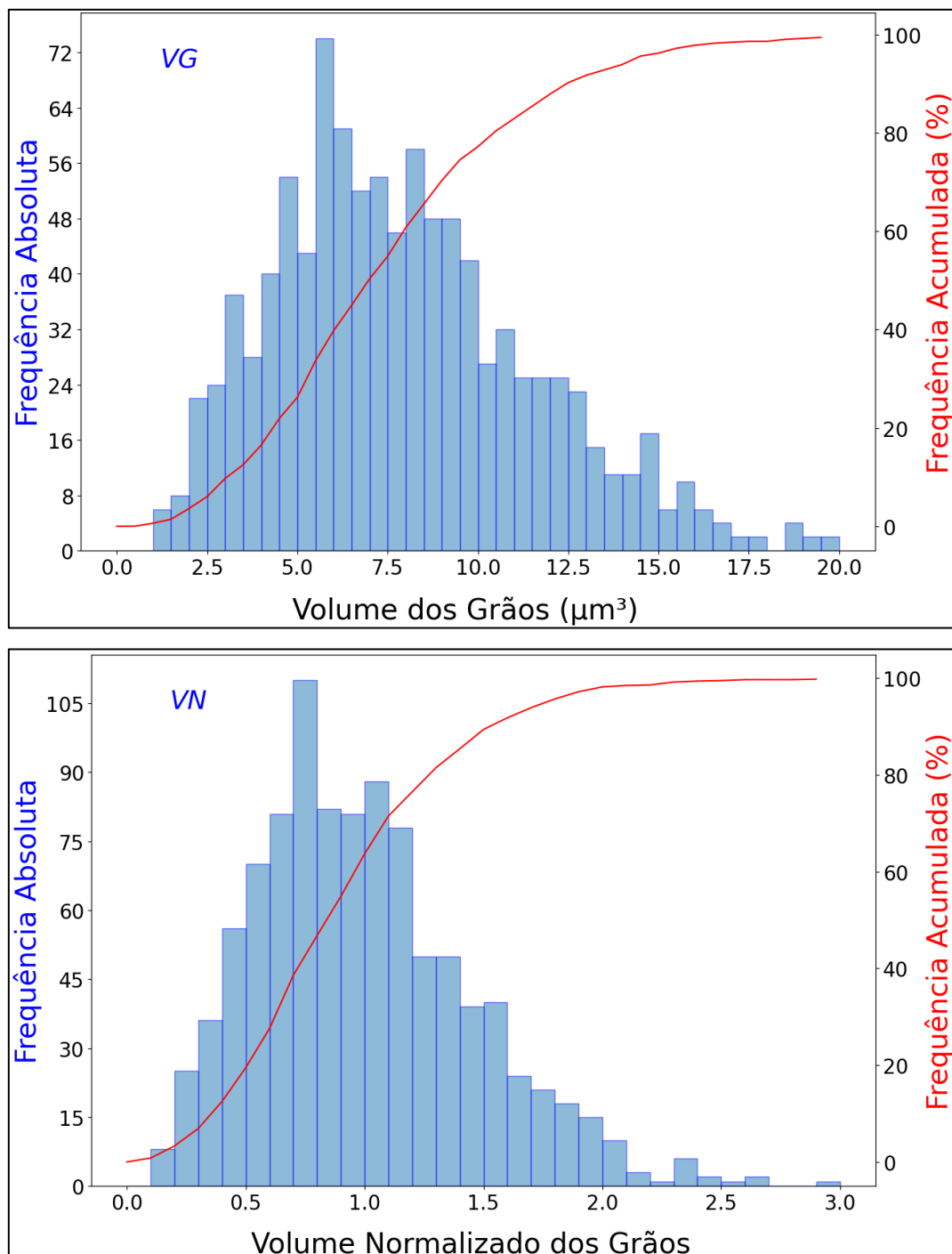


(planos centrais)

Fonte: do autor.

Considerando r como $0,1 \mu\text{m}$, e verificando a distribuição do volume dos grãos obtidos para a microestrutura da Figura 8.10, obteve-se os histogramas apresentados na Figura 8.11 e os resultados constantes da Tabela 8.2.

8.11. Histogramas de distribuição para o volume dos grãos e volume normalizado dos grãos para a simulação da Figura 8.9 (482 grãos restantes).



Fonte: do autor.

Tabela 8.2. Valores médios e selecionados encontrados para o volume dos grãos (VG) e para o volume dos grãos normalizado (VN).

Parâmetro	Simulação	Valor médio	Desvio padrão	Mediana	Valor mínimo	Valor Máximo
$VG (\mu\text{m}^3)$	Figura 8.9	8,00	3,75	7,46	1,05	28,81
VN		1	0,47	0,93	0,13	3,60

Nota: Simulações com 482 grãos finais que não tocam os limites de uma matriz original de 1000 grãos.

Fonte: do autor.

8.4 Rotacionando os esferoides

Um objeto tridimensional qualquer pode ser esfericamente rotacionado dentro de um ambiente discreto por um processo específico de transformação matricial (AMMERAAL; ZHANG, 2008; DE BERG et al., 2008; HUGHES et al., 2014). Entretanto, no caso dos esferoides, é possível adicionalmente se obter expressões analíticas que possibilitam se realizar sua rotação arbitrária no espaço.

Por uma transformação matricial, se encontra para o esferoide rotacionado as seguintes expressões (GAELZER, 2019):

$$x' = x \sin \theta \cos \phi + y \sin \theta \sin \phi + z \cos \theta \quad (8.13)$$

$$y' = x \cos \theta \cos \phi + y \cos \theta \sin \phi - z \sin \theta \quad (8.14)$$

$$z' = x \sin \phi - y \cos \phi \quad (8.15)$$

Onde x' , y' , z' são relacionados ao novo eixo de coordenadas do sistema rotacionado, que faz um ângulo θ com o eixo Z e um ângulo ϕ no plano XY .

Substituindo diretamente estas expressões nas respectivas equações cartesianas, obtêm-se:

$$c = \sqrt{A^2 + k_a^2 (B^2 + C^2)} \quad (8.16)$$

$$a = \sqrt{A^2 + B^2 + k_a^2 C^2} \quad (8.17)$$

Onde:

$$A = x \cos \phi \sin \theta + y \sin \phi \sin \theta + z \cos \theta \quad (8.18)$$

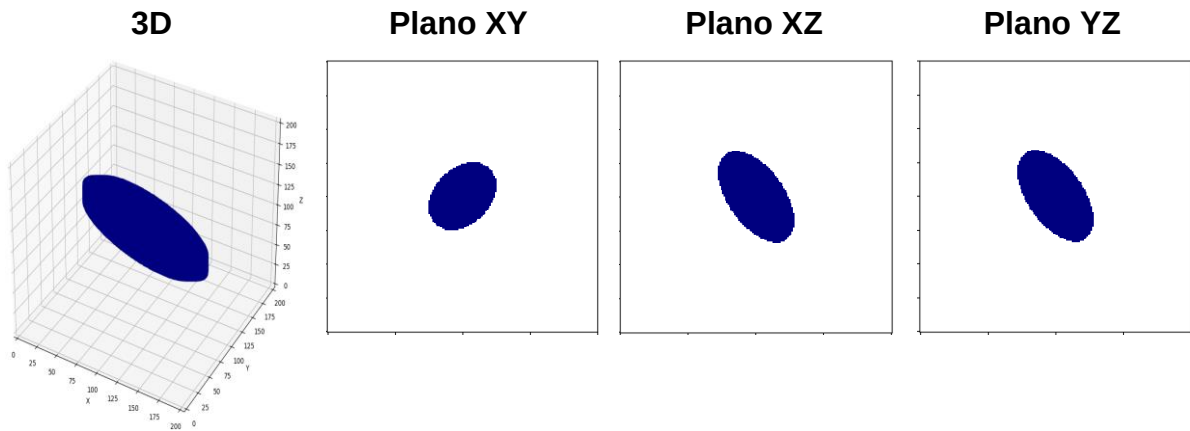
$$B = x \cos \phi \cos \theta + y \sin \phi \cos \theta - z \sin \theta \quad (8.19)$$

$$C = x \sin \phi - y \cos \phi \quad (8.20)$$

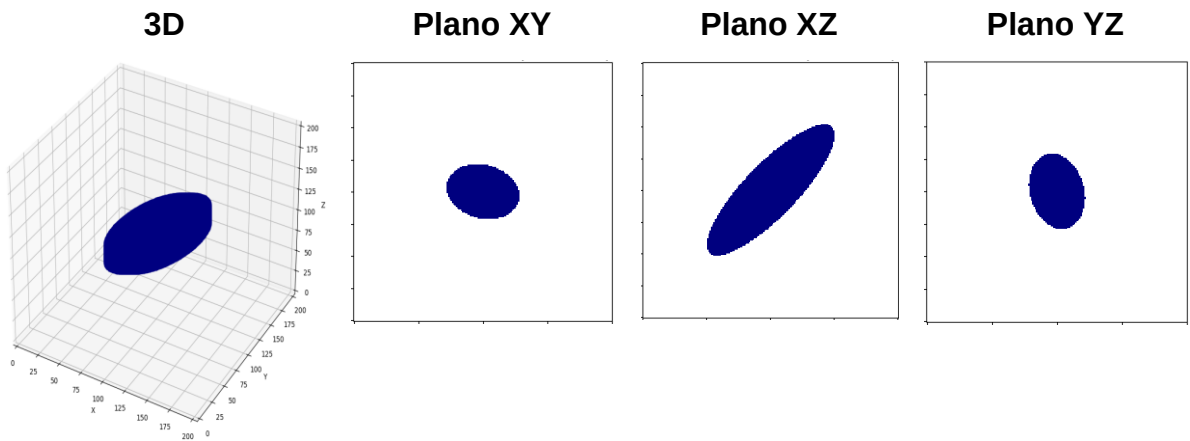
Nestes casos, a Equação (8.16) é empregada nas simulações com os esferoides prolatos, e a Equação (8.17) nas simulações com os esferoides oblatos.

Para ilustrar algumas possibilidades de rotações, as Figuras 8.12 e 8.13 apresentam simulações em um ambiente de 201x201x201 células, com esferoides prolatos ($K_a = 4$) e com esferoides oblatos ($K_a = 1/4$). Na Figura 8.12 se tem apenas uma única semente central, e na Figura 8.13 se tem 100 sementes aleatoriamente distribuídas.

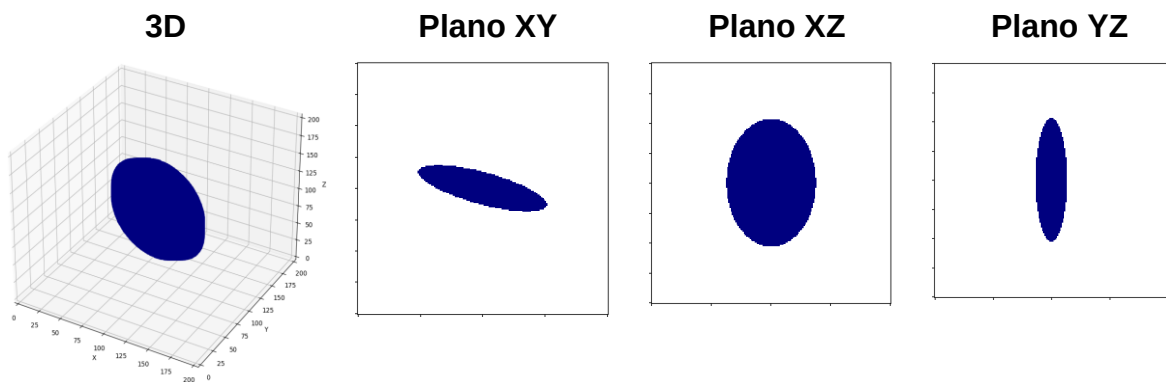
Figura 8.12. Imagens 3D e dos planos centrais de grãos esferoides gerados em simulações em ambiente com 201x201x201 células com 1 única semente central com 2% de transformação.



(a) Esferoide prolato ($K_a = 4$), $\phi = \pi/4$ rad e $\theta = \pi/4$ rad.



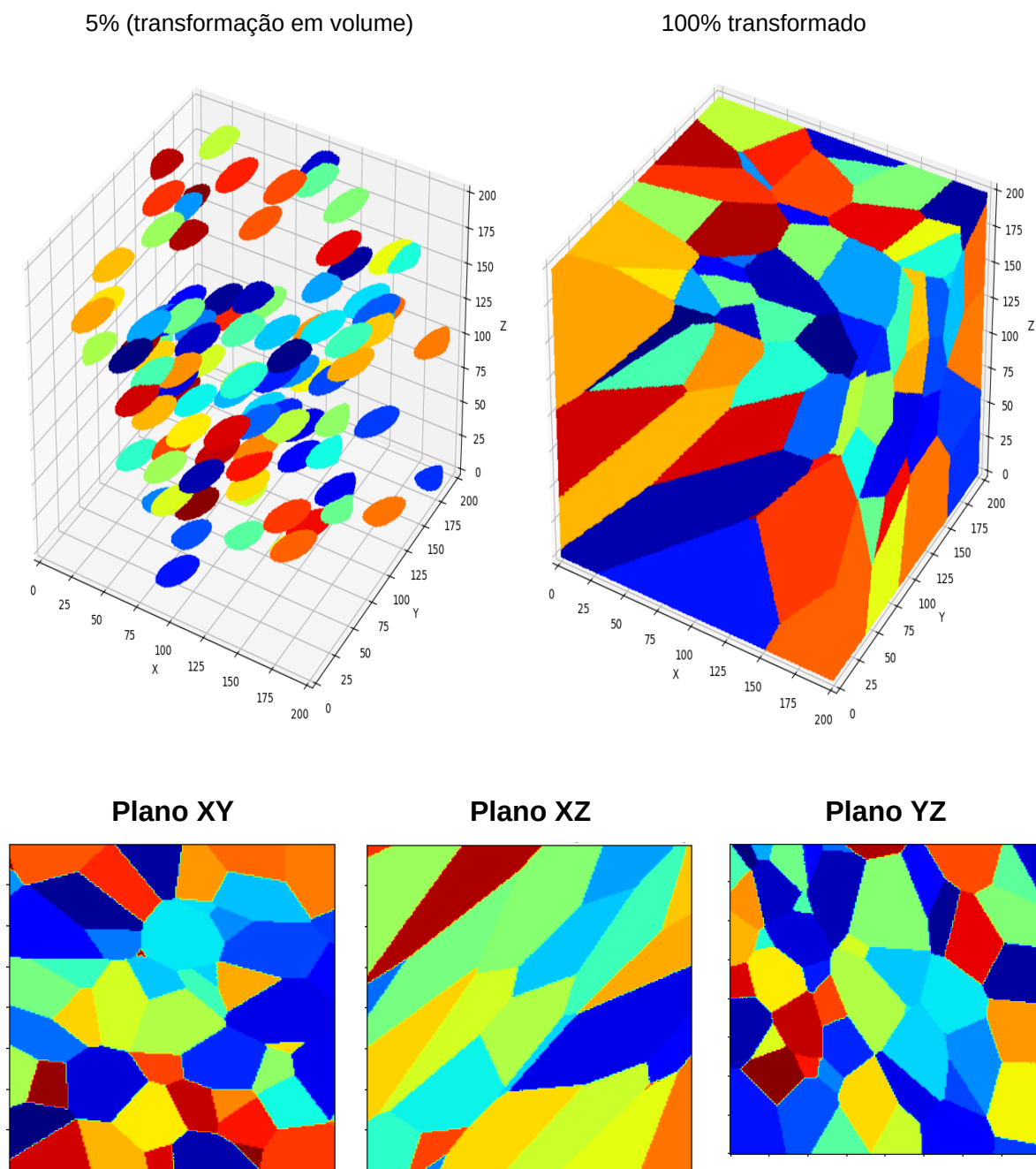
(b) Esferoide prolato ($K_a = 4$), $\phi = 7\pi/12$ rad e $\theta = \pi/4$ rad.



(c) Esferoide oblato ($K_a = 1/4$), $\phi = 7\pi/12$ rad e $\theta = \pi/4$ rad.

Fonte: do autor.

Figura 8.13. Ambiente com 100 sementes aleatoriamente distribuídas, todas com grãos esferoides prolatos ($K_a = 4$), ângulo azimutal (Φ) de $7\pi/12$ rad, e ângulo polar (θ) de $\pi/4$ rad.



(planos centrais, 100% transformado)

Fonte: do autor.

8.5 Heterogeneidade anisotrópica

Como apresentado, a anisotropia textural é uma propriedade dos materiais metálicos na qual as características cristalográficas, como a orientação dos grãos, não são distribuídas de maneira uniforme (DIETER, 1981; REED-HILL, 1982). Isso ocorre devido à formação de uma textura cristalográfica, que é o alinhamento preferencial de certos planos cristalográficos em direções específicas, resultante de processos de deformação plástica, tratamentos térmicos ou combinações desses fatores (BRAHME et al., 2006; MISHIN; MEHL; PAPACONSTANTOPOULOS, 2005; RIOS; PADILHA, 2007).

Essa anisotropia afeta propriedades físicas e mecânicas, como a resistência à tração, ductilidade, condutividade elétrica e expansão térmica, dependendo da direção analisada no material. Em metais laminados ou trefilados, ou mesmo em rotas de deformação mais sofisticadas (MORAIS; CORRÊA; LOPES, 2021), por exemplo, a anisotropia textural é comum e influencia o comportamento do material em aplicações estruturais e funcionais (GOTTSTEIN, 2004; REED-HILL, 1982).

A proposta do uso dos grãos esferoides é poder simular uma anisotropia advinda da recristalização. Entretanto, uma adicional situação interessante pode ocorrer quando a anisotropia apresentada por um material metálico não é homogênea ao longo de sua extensão. Essa heterogeneidade pode se manifestar, por exemplo, em regiões com orientações cristalográficas distintas, como uma área com orientação preferencial no crescimento dos grãos e outra com uma orientação ou condições diferenciadas (BOURDIN et al., 2023; SIDOR et al., 2008).

Essa variação, frequentemente associada a processos de deformação plástica ou recozimento, pode ser observada em diferentes escalas espaciais, desde o nível microscópico até o macroscópico. Como resultado, diversas zonas texturais podem se formar no material, cada uma com características e orientações cristalográficas predominantes, influenciando diretamente suas propriedades mecânicas e funcionais. Um exemplo extremo de heterogeneidade macroscópica é o aço de Damasco, cuja microestrutura é verdadeiramente peculiar (VERHOEVEN; PETERSON, 1992).

Assim, em um primeiro momento se visualiza como sendo possível simular computacionalmente estas diferentes regiões anisotrópicas também por grãos esferoides, mas desde que seja possível usar distintos padrões de orientações dos grãos ao longo da matriz em uma mesma simulação.

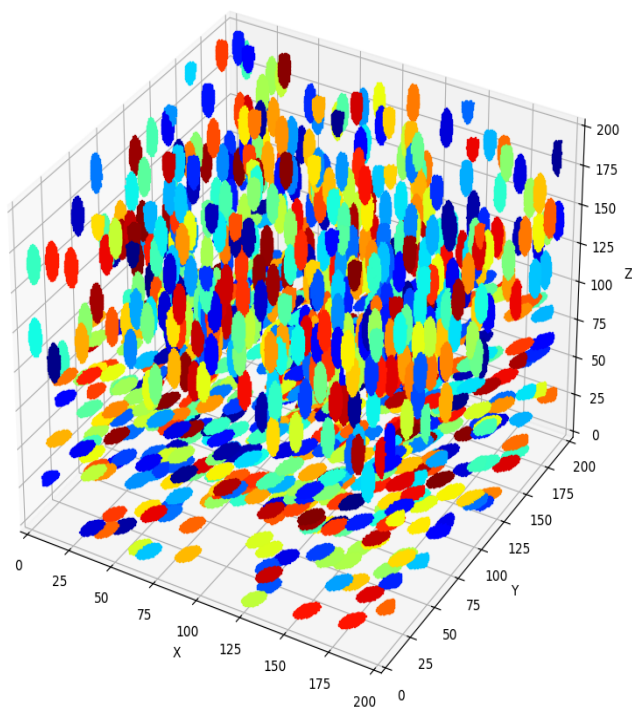
Para ilustrar essa capacidade, foi realizada uma simulação em um domínio tridimensional de $200 \times 200 \times 200$ células, contendo 1000 sementes distribuídas aleatoriamente, todas em formato de esferoides prolatos ($K_a = 4$). Os grãos formados na metade inferior do domínio em relação ao eixo z possuem a mesma orientação entre si, enquanto os da metade superior em relação ao eixo z compartilham outra orientação distinta (no exemplo $\Phi = 0$ e $\theta = 0$ na metade superior e $\Phi = 7\pi/12$ rad e $\theta = \pi/4$ rad na metade inferior).

Assim, as orientações das duas metades são diferentes, destacando a heterogeneidade obtida neste processo hipotético simulado, onde duas regiões distintas são formadas. As Figuras 8.14 e 8.15 ilustram esta simulação, onde se observa claramente uma heterogeneidade na microestrutura obtida. A Figura 8.16 apresenta a microestrutura da Figura 8.14 no seu estágio final mas sem os grãos que tocam a superfície.

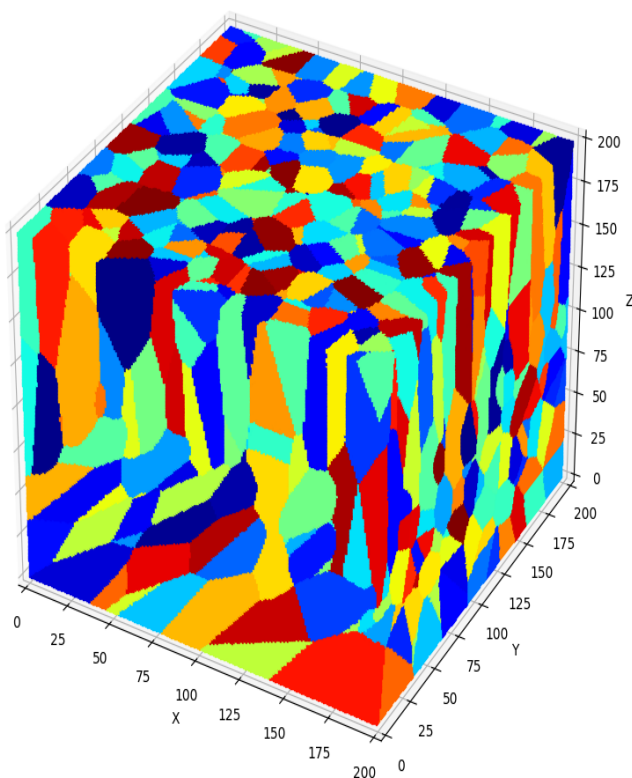
Considerando r como $0,1 \mu\text{m}$, e verificando a distribuição do volume dos grãos obtidos para as microestruturas das Figuras 8.16, obteve-se os histogramas de distribuição para o volume dos grãos e volume normalizado dos grãos (VG e VN) para apresentados na Figura 8.17 e os resultados constantes da Tabela 8.3.

Figura 8.14. Simulação em ambiente com 200x200x200 células e 1000 sementes iniciais aleatoriamente distribuídas, com grãos com formato esferoide ($K_a = 4$), sendo que na metade superior da matriz possuindo a orientação base ($\Phi = 0$ e $\theta = 0$), e na metade inferior com uma orientação direcionada ($\Phi = 7\pi/12$ rad e $\theta = \pi/4$ rad).

5 % transformação



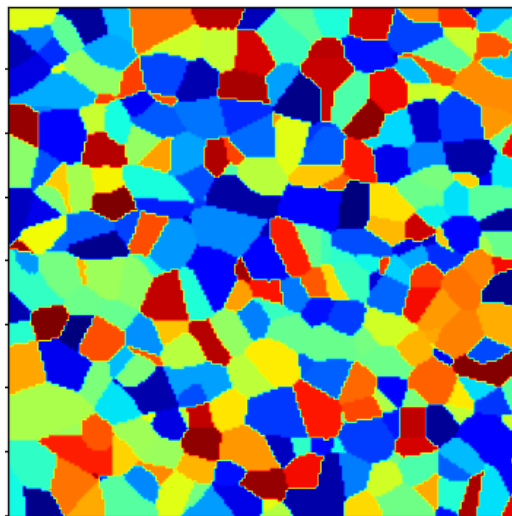
100% transformado



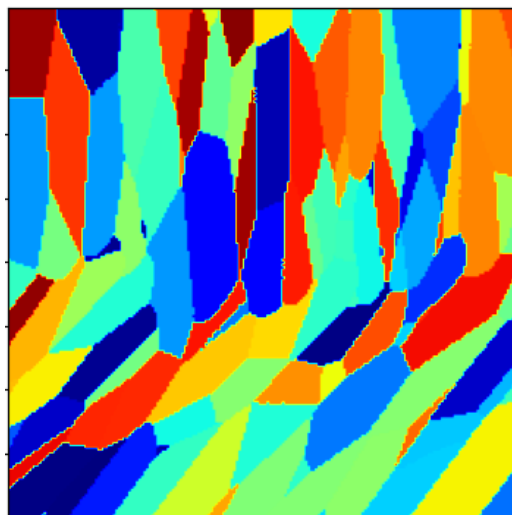
Fonte: do autor.

Figura 8.15. Imagens dos planos centrais da simulação da Figura 8.14.

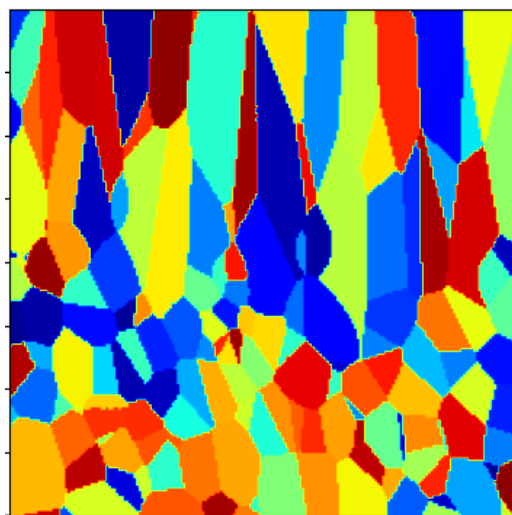
Plano XY



Plano XZ

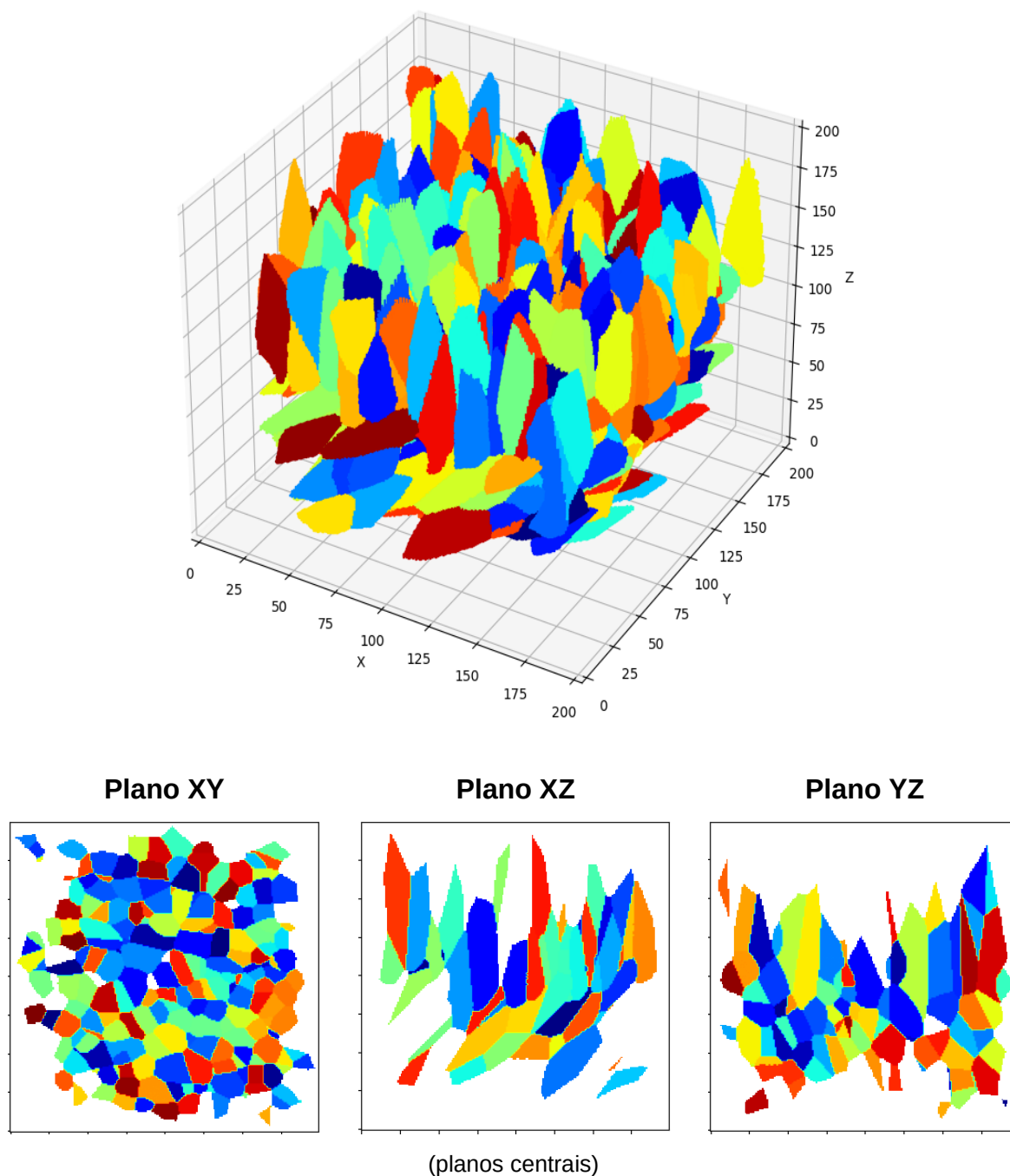


Plano YZ



Fonte: do autor.

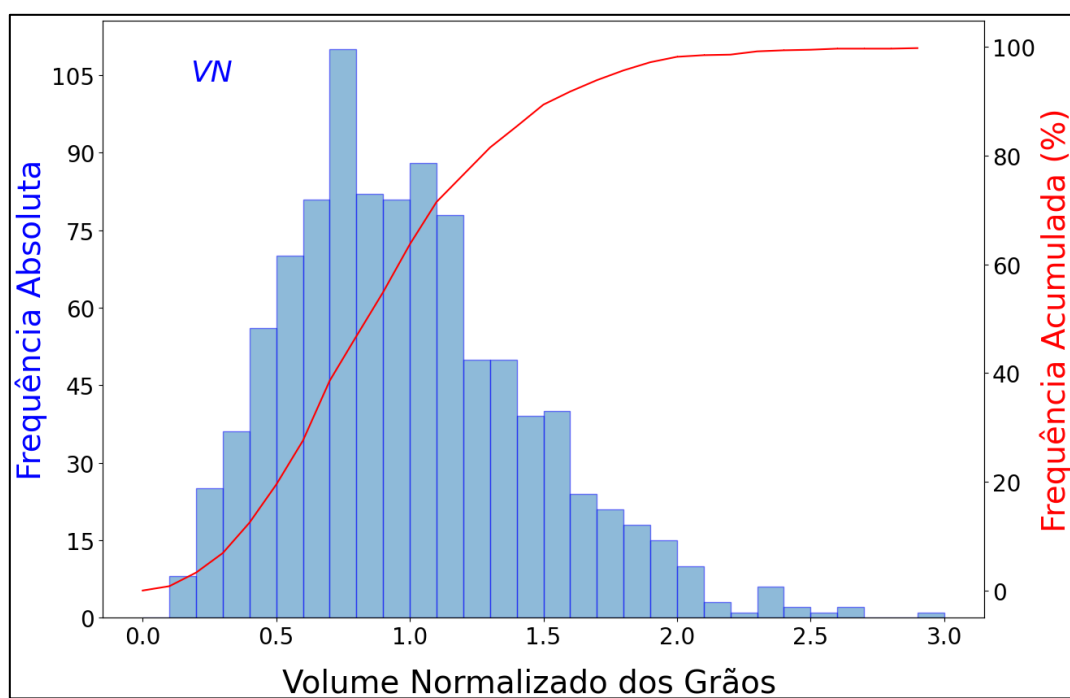
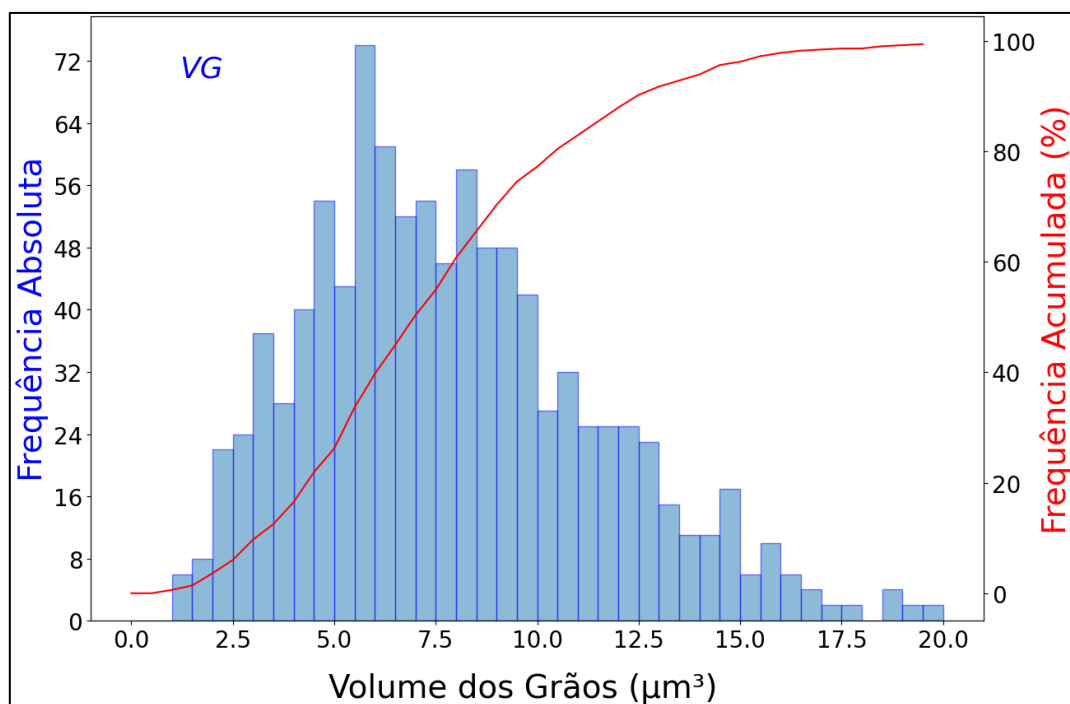
Figura 8.16. Imagens 3D e dos planos centrais das microestruturas geradas pelo experimento da Figura 8.14, com a eliminação dos grãos que tocam a superfície (414 grãos restantes e 586 grãos eliminados).



Legenda. Grãos esferoides prolatos ($K_a = 4$) com duas orientações distintas na matriz (a metade superior da matriz possui a orientação base ($\Phi = 0$ e $\theta = 0$), e na metade inferior uma orientação direcionada ($\Phi = 7\pi/12$ rad e $\theta = \pi/4$ rad).), com 1000 sementes iniciais aleatórias em ambiente com 200x200x200 células,

Fonte: do autor.

8.17. Histogramas de distribuição para o volume dos grãos e volume normalizado dos grãos (VG e VN) para a simulação da Figura 8.16 (414 grãos restantes).



Fonte: do autor.

Tabela 8.3. Valores médios e selecionados encontrados para o volume dos grãos (VG) e para o volume dos grãos normalizado (VN).

Parâmetro	Simulação	Valor médio	Desvio padrão	Mediana	Valor mínimo	Valor Máximo
$VG (\mu\text{m}^3)$	Figura 8.9	8,00	3,75	7,46	1,05	28,81
VN		1	0,47	0,93	0,13	3,60

Notas: Simulações com 414 grãos finais que não tocam os limites de uma matriz original de 1000 grãos.
Fonte: do autor.

Por fim, ressalta-se que não foi objetivo deste capítulo esgotar este assunto, que pode ser ainda muito desenvolvido, mas apenas o de apresentar introdutoriamente por meio de simulações computacionais com AH do efeito de grãos esferoides sobre as microestruturas geradas e algumas das diversas possibilidade de estudos resultantes.

9 PARAMETRIZAÇÃO DA ÁREA SUPERFICIAL DISCRETA

9.1 Conceitualização

Entre os aspectos morfológicos a serem determinados, um dos mais importantes é o da área superficial dos grãos durante a recristalização, visto que muitos fenômenos importantes ocorrem exatamente na superfície dos grãos. No Capítulo 7 foram determinados diversos parâmetros, mas todos dependentes do volume dos grãos (número de células matriciais que o grão contém), incluindo a área superficial. Para isto aquela foi considerada como uma área equivalente, ou seja, a área superficial caso os grãos fossem sempre esféricos. Entretanto esta é uma suposição que após o *impingement* não é correta.

Na verdade, a própria teoria analítica estabelecida para o estudo da cinética dos processos de recristalização e da obtenção do caminho microestrutural também adota simplificações como esta, talvez por isso, associa seus resultados a expressões fenomenológicas com componentes empíricos, como a de Avrami, de modo a procurar corrigir distorções deste tipo.

Neste capítulo vamos discutir e apresentar uma técnica alternativa para a determinação da área superficial real, no ambiente discreto, e sem necessidade deste tipo de simplificação do formato do grão.

O primeiro ponto para a sua determinação é realizar a cuidadosa apresentação do próprio conceito de área superficial a ser adotado, o que por si somente já pode ser desafiador. Apesar de ser aparentemente um conceito trivial em muitas situações do universo contínuo, nas simulações opera-se em um ambiente discreto, que conforme visto na Seção 3.4, e mesmo no Capítulo 5, diversas formas de degeneração do espaço podem naturalmente ocorrer.

A definição mais natural seria considerar a área superficial como a soma de todas as faces expostas de todas as células do objeto considerado, no caso os grãos. Assim esta será uma área superficial pelas faces totais. Este conceito para a

determinação da área superficial discreta pelas faces totais está plenamente alinhado ao realizado na literatura em diversos estudos para a determinação de área superficial de objetos discretos (LIU et al., 2010; UDUPA, 1994). Entretanto, tal metodologia, apesar de ser muito utilizada, pode sistematicamente resultar em valores super estimados, maiores que os reais. Isto obviamente vai influenciar, além da própria área superficial, em todos os valores das grandezas que dependem desta.

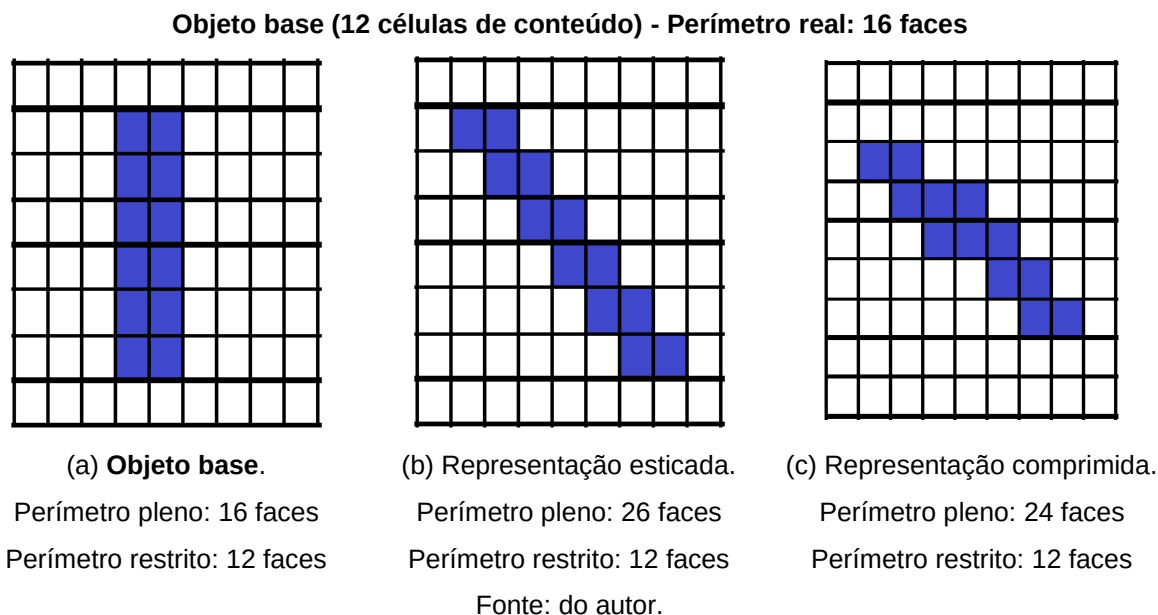
Entretanto o principal problema de tal método é que ele é muito dependente da orientação do objeto no espaço, ou seja, um mesmo objeto pode “produzir” áreas superfícias pelas faces totais muito diferentes dependendo apenas de sua orientação no espaço. Como os grãos resultantes podem se orientar das mais diversas formas, esta técnica simplesmente não é apropriada para a análise de grãos.

Uma técnica alternativa, que será a adotada neste trabalho, será definir a área superficial de um objeto discreto (no caso os grãos recristalizados) como sendo uma grandeza proporcional a quantidade de células deste objeto que estão no seu contorno com pelo menos uma das faces em contato com o ambiente exterior ao referido grão. Esta será chamada de área superficial pelas faces restrita, ou somente pelas faces. Este termo será sempre usado para deixar claro a natureza das medidas efetuadas.

Este critério pode ser considerado mais representativo para medir a área exposta em um ambiente matricial discreto multi-orientado, já que considera apenas as interações mais relevantes entre as células diretamente adjacentes, evitando interferências mais tênues, como pelas arestas ou vértices, que podem surgir naturalmente na orientação dos grãos. Esta metodologia tende a fornecer um valor de área superficial que pode refletir melhor as interações de superfície, além de minimizar erros devido a natural orientação dos grãos na rede matricial.

Para melhor visualização da diferença entre ambas técnicas, a Figura 9.1 apresenta uma situação hipotética simples, onde ao invés de volume e área se tem área e perímetro, com algumas formas de representação do mesmo objeto mantendo constante o seu número de células (outras formas de representação são possíveis).

Figura 9.1. Em (a) um objeto base retangular em uma matriz bidimensional, contendo 12 células de área e tendo um perímetro real de 16 faces, e em (b) e (c) duas de suas representações em orientações diferentes da orientação base.



Neste exemplo, ambas as técnicas apresentam erros, inclusive significativos em determinadas configurações. Entretanto, a verificação pelo número de faces (a técnica restrita) apresenta uma propriedade muito interessante: uma menor variabilidade nos resultados em função da configuração que a variabilidade apresentada pela técnica plena.

Assim espera-se que a área pelas faces restrita seja uma técnica menos dependente da rotação que o cálculo das áreas pela face plena.

Outro ponto, conforme o exemplo e mesmo intuitivamente, é que os valores a serem encontrados para a área superficial pelas faces restrita quando comparados com os reais possam ser tendenciosamente menores (diferentemente da técnica de área superficial pelas faces plena que tende a gerar valores usualmente maiores que os reais).

Assim, além desta discussão e apresentação do conceito de área superficial discreta a ser efetivamente adotado (a área superficial pelas faces restrita), se torna

relevante conhecer qual seria esta eventual subestimação média no seu valor (LINDBLAD, 2005), mas aplicado aos grãos recristalizados, e da determinação de alguma técnica de correção.

Por fim, sobre a nomenclatura, neste capítulo se adotará adicionalmente ao já apresentado as definições relacionadas no Quadro 9.1.

Quadro 9.1. Nomenclatura parâmetros adicionais empregados.

Símbolo	Definição	Unidade [SI]
C_{ni}	Conjunto de células no interior de um grão n que não tocam pelas faces a sua superfície	-
C_{ns}	Conjunto de células da superfície de um grão n	-
k_s	constante de proporcionalidade da superfície discreta para contínua	[adimensional]
NC_e	Nº células matriciais de cada grão em cada uma das direções dos eixos cartesianos antes do <i>impingement</i>	-
PC_h	Valor do <i>passo</i> acumulado em r , c ou a	-
SFR	Área superficial pela face média dos grãos simulados	[m ²]
SF	Área superficial pela face média dos grãos simulados corrigida	[m ²]
SFR_n	Área superficial pela face de um grão n específico	[m ²]
SF_n	Área superficial pela face de um grão n específico corrigida	[m ²]
SVR	Razão entre o somatório da área superficial pela face pelo volume de todo o metal simulado (é a medida da área superficial disponível no metal)	[m ² /m ³]
SV	Razão entre o somatório da área superficial pela face corrigida pelo volume de todo o metal simulado	[m ² /m ³]

Fonte: do autor.

9.2 A área superficial pelas faces restrita

Seguindo o conceito da área superficial pelas faces restrita, considerando uma célula matricial em uma posição específica qualquer (coordenadas i, j, k), conforme visto no Capítulo 5, as células da sua vizinhança pela face são:

$$N_F^6 = \{(i+1, j, k), (i-1, j, k), (i, j+1, k), (i, j-1, k), (i, j, k+1), (i, j, k-1)\} \quad (9.1)$$

Onde N_F^6 é o conjunto de coordenadas das 6 células vizinhas pela face a célula central considerada. Considerando as definições do Quadro 9.1, e aplicando o critério de vizinhanças da Equação (9.1), obtem-se para a determinação do número de células do interior do grão (as células que não estão na superfície), a Equação (9.2):

$$C_{ni} = \sum_{i=1}^{C_x} \sum_{j=1}^{C_y} \sum_{k=1}^{C_z} \left[\left(\delta_{n, MA_{i,j,k}} \right) \times \left(\delta_{n, MA_{i+1,j,k}} \right) \times \left(\delta_{n, MA_{i,j+1,k}} \right) \times \right. \\ \left. \left(\delta_{n, MA_{i,j,k+1}} \right) \times \left(\delta_{n, MA_{i+1,j+1,k}} \right) \times \right. \\ \left. \left(\delta_{n, MA_{i+1,j,k+1}} \right) \times \left(\delta_{n, MA_{i,j+1,k+1}} \right) \right] \quad (9.2)$$

Na equação (9.2) se tem dentro dos somatórios sete independentes funções delta de Kronecker em multiplicação direta. A primeira função delta $\left(\delta_{n, MA_{i,j,k}} \right)$ verifica se as coordenadas (i, j, k) contém uma célula do grão n considerado, similarmente ao já empregado pela Equação (7.8). As demais seis funções delta da equação (9.2) verificam respectivamente se cada uma das seis vizinhanças pelas faces da coordenada (i, j, k) que pertençam ao seu conjunto N_F^6 , ou seja, se as coordenadas $(i+1, j, k)$, $(i, j+1, k)$, $(i, j, k+1)$, $(i-1, j, k)$, $(i, j-1, k+1)$, $(i, j, k-1)$ contém uma célula do grão n considerado.

Somente se todas estas sete funções delta de Kronecker indicadas na equação (9.2) resultarem em 1 cada uma o valor será contabilizado, indicando assim que a coordenada (i, j, k) tanto pertence ao grão n como também está fora da sua superfície.

Com o valor de C_{ni} , pode-se facilmente encontrar número de células da superfície (C_{ns}), pela sua diferença do número de células total do grão (C_n), e deste se obter o valor da área superficial pelas faces de qualquer grão (SFR_n), a saber:

$$C_{ns} = C_n - C_{ni} \quad (9.3)$$

$$SFR_n = C_{ns} \times r^2 \quad (9.4)$$

Ainda, para a obtenção da área superficial pelas faces média dos grãos (SFR), e para a área superficial disponível por unidade de volume do metal (SVR), pode-se usar:

$$C_s = \frac{\sum_1^{N_s} C_{ns}}{N_s} \quad (9.5)$$

$$SFR = C_s \times r^2 \quad (9.6)$$

$$SVR = \frac{\sum_1^{N_s} C_{ns}}{2 V_m} \quad (9.7)$$

Um aspecto que resulta da técnica empregada para o cálculo, foi a divisão por 2 indicada na Equação (9.7). Como se mede a área superficial individual de cada grão, e a mesma em teoria é em cada ponto compartilhada entre dois grãos vizinhos, a simples soma direta das áreas de vários grãos iria resultar no seu valor total em duplicidade. Assim esta divisão por 2 neste somatório é necessária.

9.3 Parametrização da esfera e do esferoide

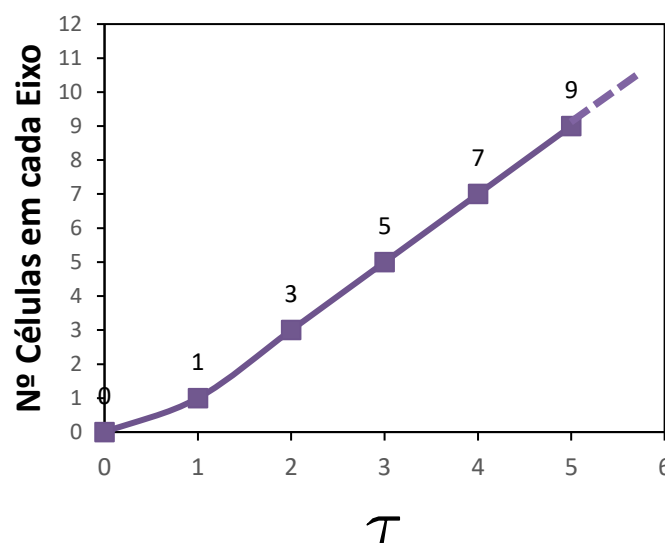
Antes de se evoluir com o cálculo pela metodologia apresentada da área superficial pelas faces de microestruturas recristalizadas, utiliza-se primeiro esta metodologia para o estudo de um único grão recristalizado em formatos específicos,

no caso no formato esférico e no de esferoides. Para estes objetos é possível facilmente se obter analiticamente os seus volumes e áreas superficiais, conforme as Equações (3.1) e (3.9) para a esfera e as Equações (8.6) a (8.10) para os esferoides.

Assim, por comparação entre o obtido pelas simulações e o calculado analiticamente, poderá ser feita a verificação da assertividade da metodologia proposta, e realizar adequações, pelo ao menos para estas formas geométricas específicas.

Para os AC (Capítulo 5), o tempo discreto (τ), conceito introduzido na seção 3.9, se relaciona com o nº células matriciais de cada grão em cada uma das direções dos eixos cartesianos (NC_e) conforme a Figura 9.2.

Figura 9.2. Evolução do nº células matriciais em cada uma das direções dos eixos cartesianos de cada grão (NC_e) versus o tempo discreto (τ).



Fonte: do autor.

Na Figura 9.2, observa-se que quando $\tau = 0$, tem-se somente a matriz do metal a ser simulada, sem ainda nenhuma semente, portando o $NC_e = 0$. Após este momento, quando $\tau = 1$, considera-se que já temos as sementes em seus estados iniciais, mas sem ainda nenhuma replicação, portando $NC_e = 1$. Em seguida, a cada

laço de replicação o valor de NC_e irá incrementar de 2 em 2, enquanto o valor de τ incrementa de 1 em 1.

Este comportamento ocorre para todos os AC estudados no Capítulo 5, independente da vizinhança de pesquisa adotada e da respectiva figura gerada (por exemplo octaedro, cuboctaedro ou cubo), mas sendo válido somente até o momento do *impingement*.

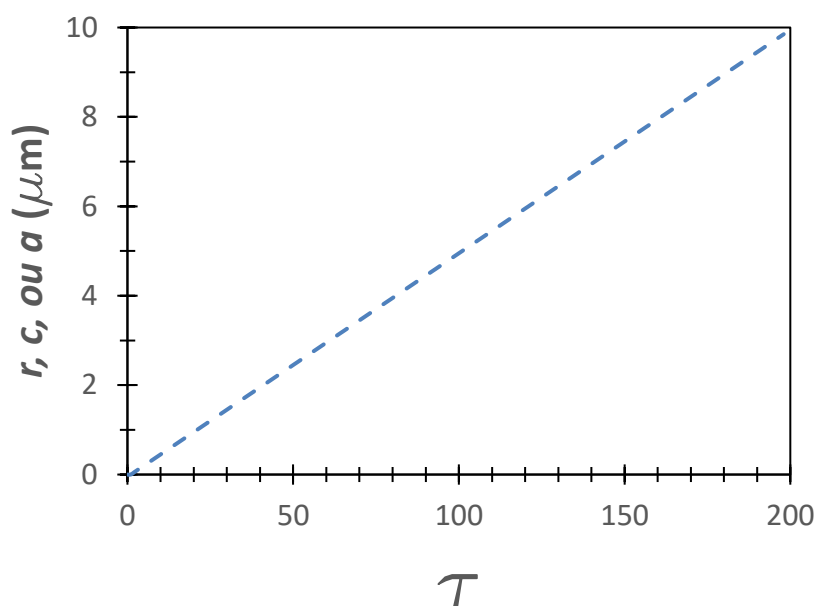
Entretanto, com os AH o comportamento apresentado na Figura 9.2 não é rigorosamente observado. Isto ocorre devido a hibridização, pois nem todos os laços correspondem obrigatoriamente a uma replicação do autômato, mesmo antes do *impingement*.

Apesar disto, até o momento do *impingement*, nos AH o valor de NC_e pode ser na média diretamente associado aos parâmetros dimensionais dos grãos em formação. Com isto se pode se relacionar os parâmetros de controle da hibridização (PC_h), que são o r , o c ou o a , com o tempo discreto (τ).

Assim, pode-se verificar nas simulações com AH um claro padrão de evolução do PC_h (r , c ou a) com τ . Para o *passo* = 0,5 e a resolução r de $0,1 \mu m$, encontra-se a Equação (9.8), representada na Figura 9.3.

$$PC_h = \text{passo acumulado em } r, c \text{ ou } a = \begin{cases} 0, & \text{para } \tau = 0 \\ (\tau - 1)/20, & \text{para } \tau > 0 \end{cases} \quad (9.8)$$

Figura 9.3. Evolução do PC_h (r , c ou a) em função do tempo discreto (τ) em um período considerado que seja anterior ao *impingement*.

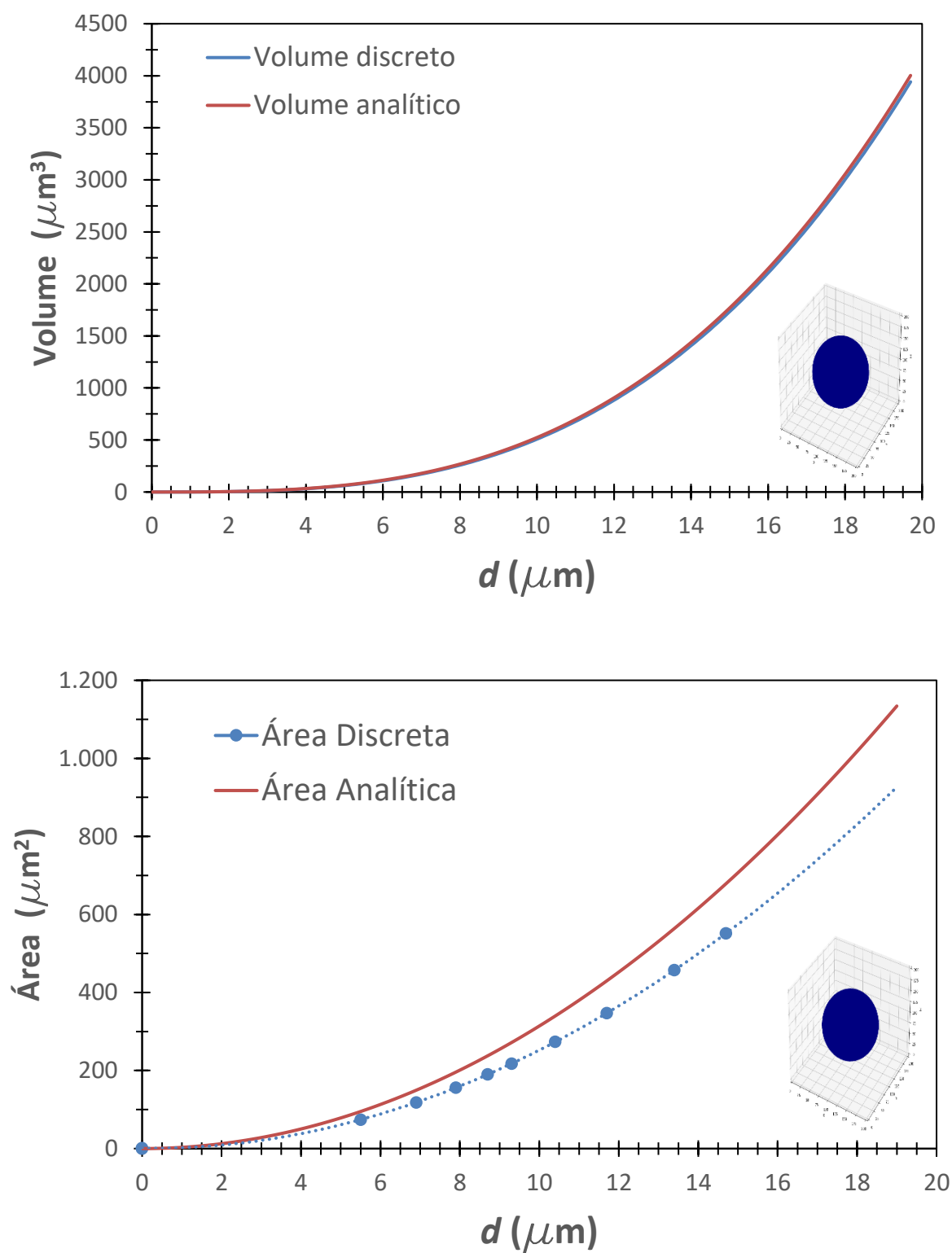


Fonte: do autor.

Com isto se pode relacionar os volumes e áreas dos grãos com os valores dos PC_h (r , c ou a) em evolução nas simulações. Para esta verificação foram realizadas simulações em um ambiente com 201x201x201 células e uma única semente central, tanto com o grão evoluindo em forma de esfera como de esferoides, com a resolução r de $0,1 \mu\text{m}$.

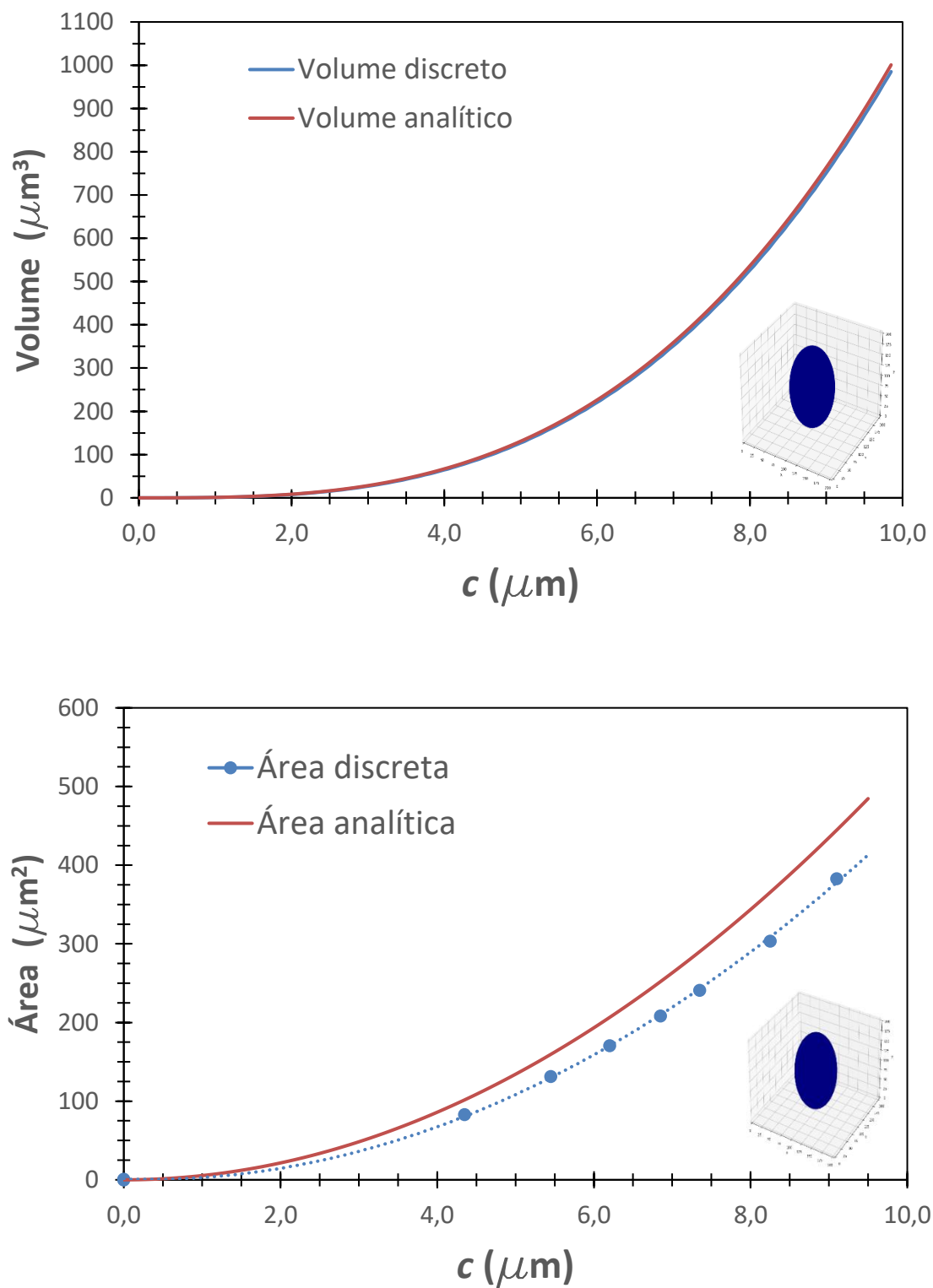
As Figuras 9.4 a 9.7 ilustram a relação do volume discreto e o calculado analiticamente, e da área superficial discreta pelas faces e a calculada analiticamente, em função do diâmetro d para a esfera ou dos parâmetros c e a para alguns esferoides. Na evolução dos gráficos das áreas discretas, os pontos apresentados são dos valores efetivamente obtidos, sendo as curvas em tom de azul apenas curvas de tendência polinomial adicionadas para fins de ilustração do comportamento.

Figura 9.4. Evolução na esfera do volume discreto e analítico (acima) e da área superficial pelas faces discreta e analítica (abaixo) em função do diâmetro discreto.



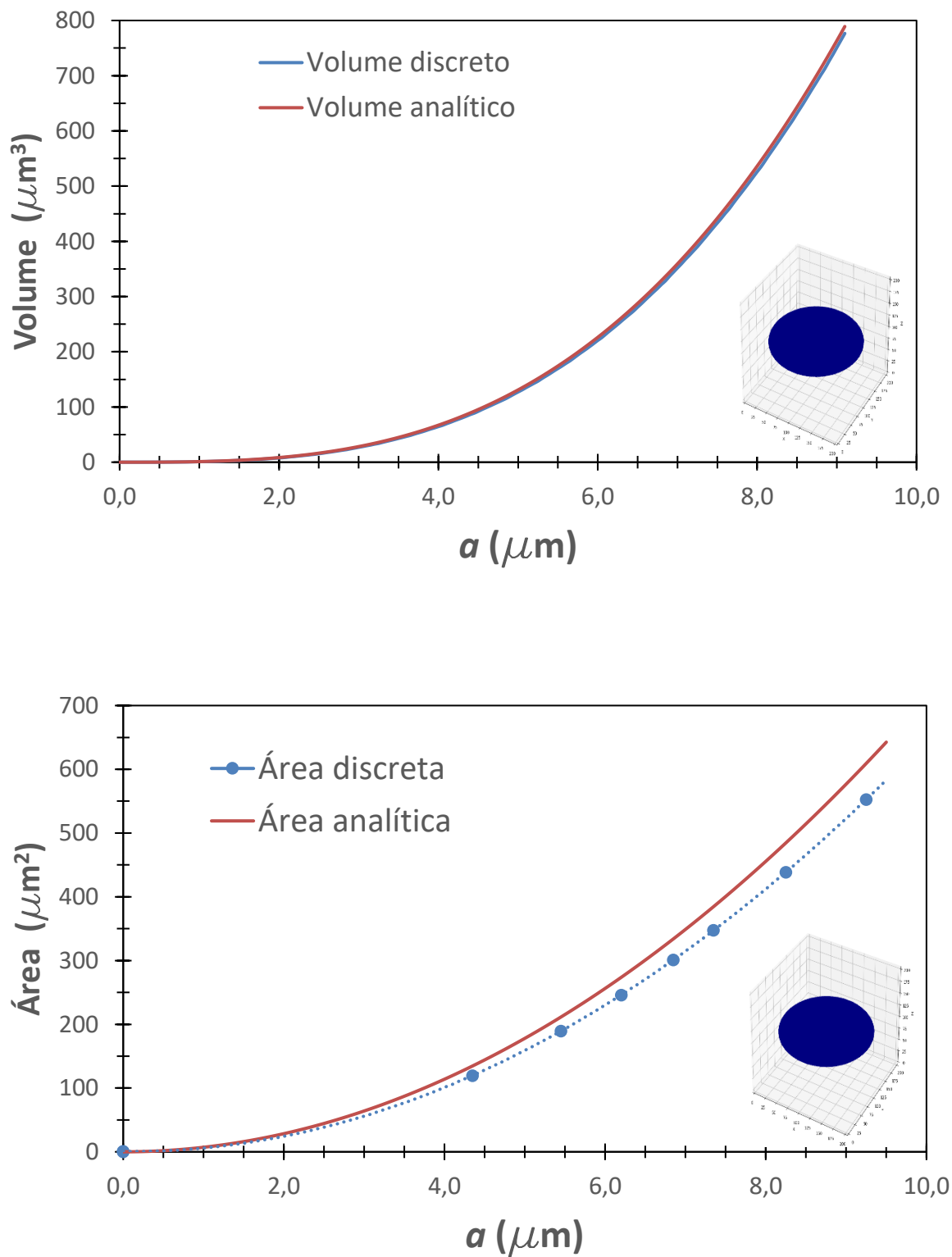
Fonte: do autor.

Figura 9.5. Evolução para o esferoide prolato ($K_a = 2$) na orientação base ($\Phi = 0$ e $\theta = 0$), do volume discreto e analítico (acima) e da área superficial pelas faces e analítica (abaixo), em função do parâmetro c discreto.



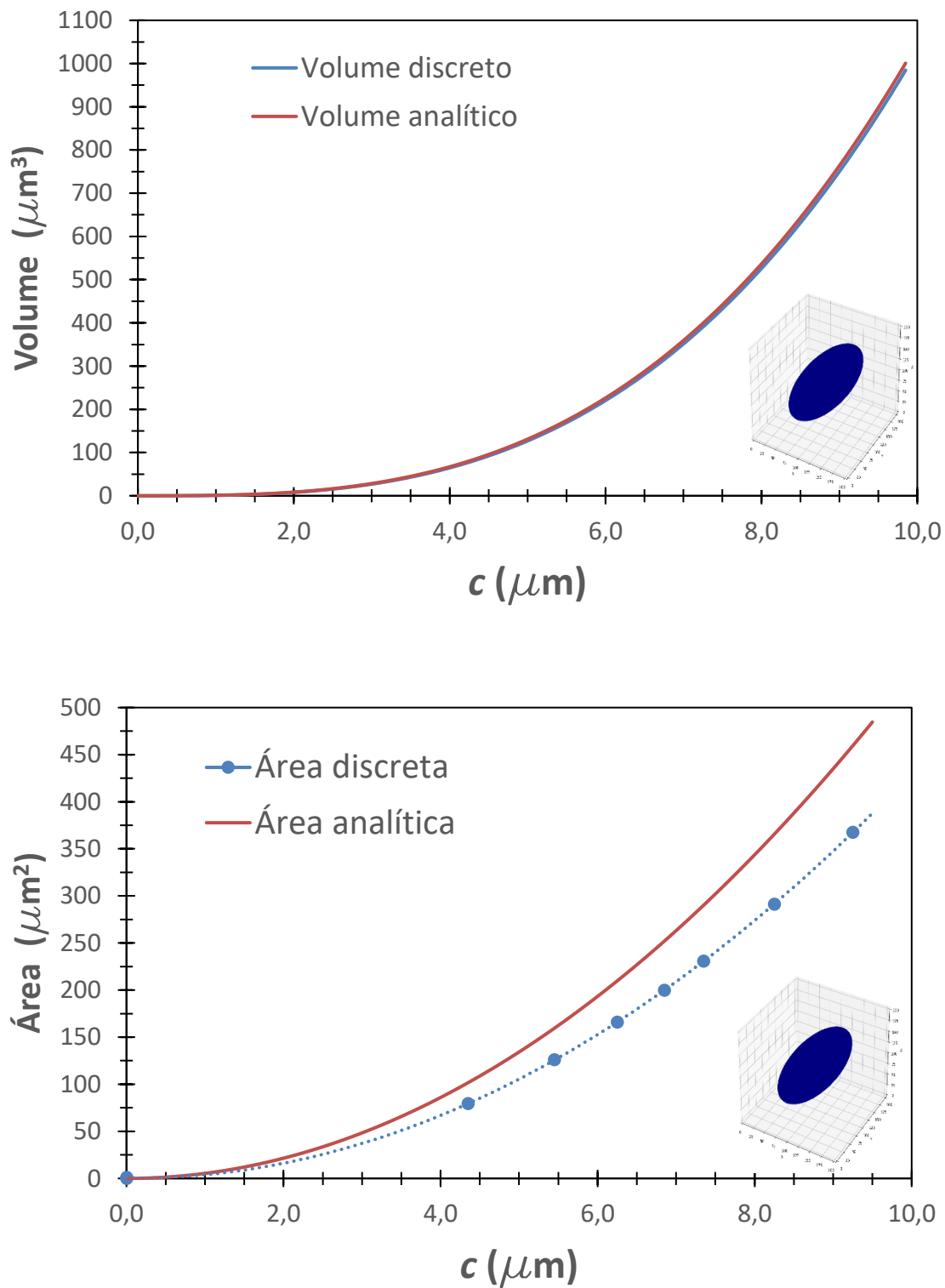
Fonte: do autor.

Figura 9.6. Evolução para o esferoide oblato ($K_a = 1/4$) na orientação base ($\Phi = 0$ e $\theta = 0$), do volume discreto e analítico (acima) e da área superficial pelas faces e analítica (abaixo), em função do parâmetro a discreto.



Fonte: do autor.

Figura 9.7. Evolução para o esferoide prolato ($K_a = 2$) na orientação $\Phi = \pi/4$ rad e $\theta = \pi/4$ rad, do volume discreto e analítico (acima) e da área superficial pelas faces e analítica (abaixo), em função do parâmetro c discreto.



Fonte: do autor.

Conforme ilustrado nas Figuras 9.4 a 9.7, verificou-se que os volumes analíticos e discretos têm um comportamento similar para todos os formatos verificados (esfera e esferoides). Ainda, os volumes analíticos são aproximadamente apenas 1,5% superior aos volumes discretos nos valores máximos apresentados. Assim fica comprovado que o método empregado para o cálculo do volume discreto (Seção 7.2) resulta em valores realmente muito próximos dos volumes teóricos calculados analiticamente, não sendo considerado a necessidade de nenhuma forma de correção.

Ainda pelas Figuras 9.4 a 9.7, verificou-se que as áreas superficiais calculadas analiticamente e discretas geradas pela face restrita têm um comportamento similar para todos os formatos verificados. Entretanto, os valores das áreas calculadas analiticamente foram sistematicamente entre 10-20% superiores aos valores das áreas discretas calculadas pelas faces restritas, dependendo da simulação.

Assim, estima-se um fator de correção médio geral aproximado de 15%, ou um fator de multiplicação de 1,15, denominado de constante de proporcionalidade da superfície discreta para contínua (k_s), para se obter a área superficial corrigida (SF_n ou SF) e a área superficial disponível pelo volume do metal corrigida (SV), ou seja:

$$SF_n = k_s \times SFR_n \quad (9.9)$$

$$SF = k_s \times SFR \quad (9.10)$$

$$SV = k_s \times SVR \quad (9.11)$$

Dessa forma, espera-se que esta técnica apresentada irá resultar, dentro dos limites dos experimentos realizados, em valores de áreas superficiais dos grãos com um erro final estimado em $\pm 10\%$. Apesar da magnitude do erro e de ser uma técnica aproximada, ela possibilita uma série de análises mais aprofundadas de forma que a utilização somente da área equivalente, considerando que o grão teria sempre o formato esférico mesmo após o *impingement*, usualmente empregada, não é capaz de atender com a mesma assertividade.

9.4 Resultados e discussões

Para ilustrar o cálculo da área superficial pela metodologia apresentada, utiliza-se simulações já realizadas em ambientes de 200 x 200 x 200 células e 1000 sementes iniciais aleatoriamente distribuídas.

Para o crescimento esférico, serão utilizadas as simulações exibidas nas Figuras 7.1 a 7.3, cujo resultados de áreas superficiais estão apresentados na Tabela 9.1, e respectivos histogramas de distribuição na Figura 9.8.

Para o crescimento no formato de esferoide será utilizado a simulação exibida na Figura 8.9, cujo resultados de áreas superficiais estão apresentados também na Tabela 9.1, e respectivo histograma de distribuição na Figura 9.9.

Tabela 9.1. Valores médios e selecionados para a área superficial pelas faces dos grãos (SF_n) de três simulações de crescimento esférico e um esferoide.

Forma	Simulação (Nº) ⁽¹⁾	SF_n (μm^2)					SV ($\mu\text{m}^2/\mu\text{m}^3$)
		Valor médio ⁽⁴⁾	Desvio padrão	Mediana	Valor mínimo	Valor máximo	
Esfera	1 (Figura 7.1)	19,57	5,03	19,37	7,07	36,85	1,60
	2 (Figura 7.2)	20,27	5,43	20,14	5,36	39,08	1,57
	3 (Figura 7.3)	20,33	5,28	20,05	7,19	37,50	1,59
	Média ⁽²⁾	20,06	-	-	6,54	37,81	1,59
Esferoide ⁽³⁾	4 (Figura 8.9)	23,92	6,95	23,63	7,45	50,51	2,00

Notas:

(1) Simulações 1, 2, 3 e 4 com respectivamente 565, 550, 553 e 482 grãos finais que não tocam os limites (1000 grãos iniciais em cada simulação).

(2) Média dos valores das simulações 1, 2 e 3.

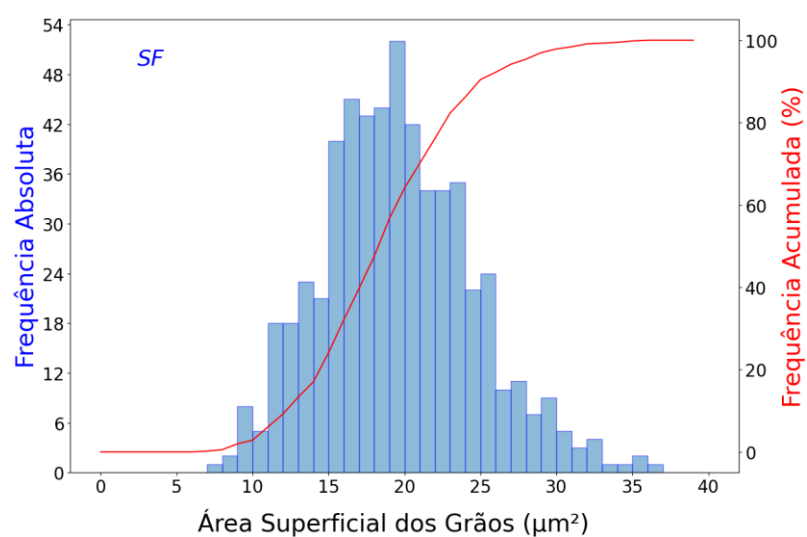
(3) Esferoide prolato ($K_a = 4$, $\Phi = 0$ e $\theta = 0$).

(4) O mesmo que SF .

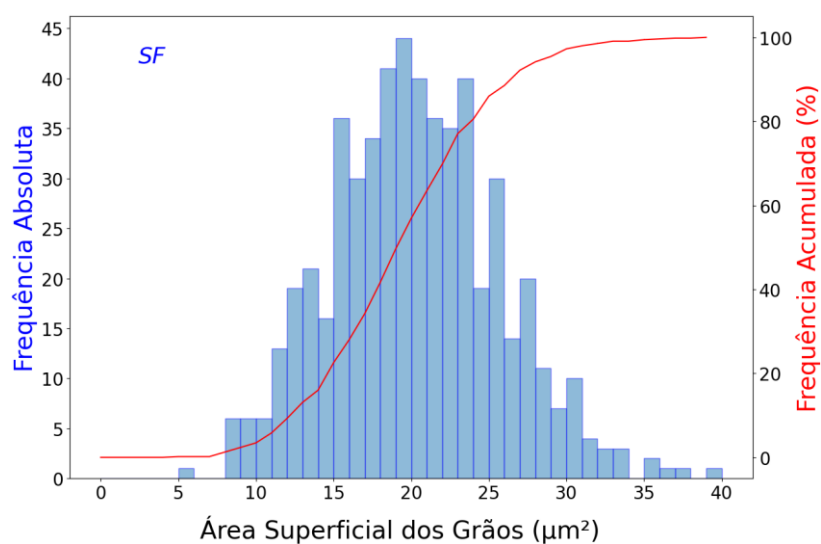
Fonte: do autor.

Figura 9.8. Histogramas obtidos da simulação das Figuras 7.1, 7.2 e 7.3 (respectivamente 1ª, 2ª e 3ª simulações da Tabela 9.1), para a distribuição dos valores da área superficial pelas faces dos grãos (SF_n).

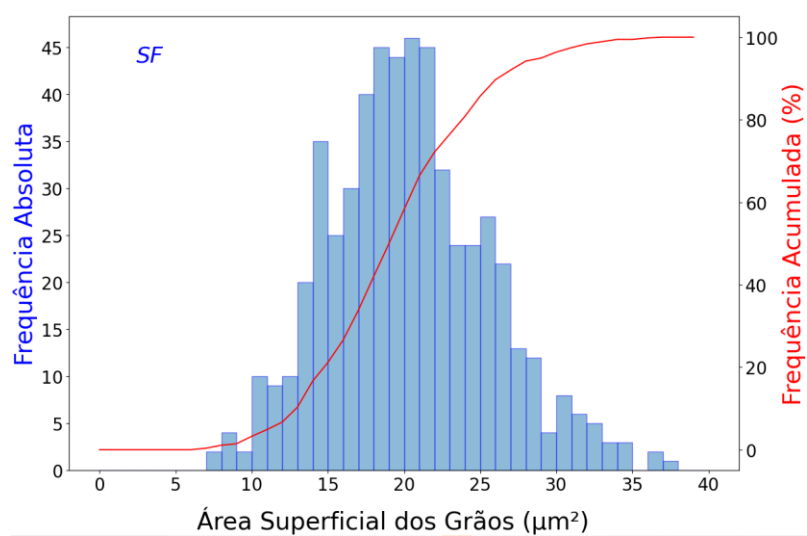
1ª Simulação
(Figura 7.1)



2ª Simulação
(Figura 7.2)

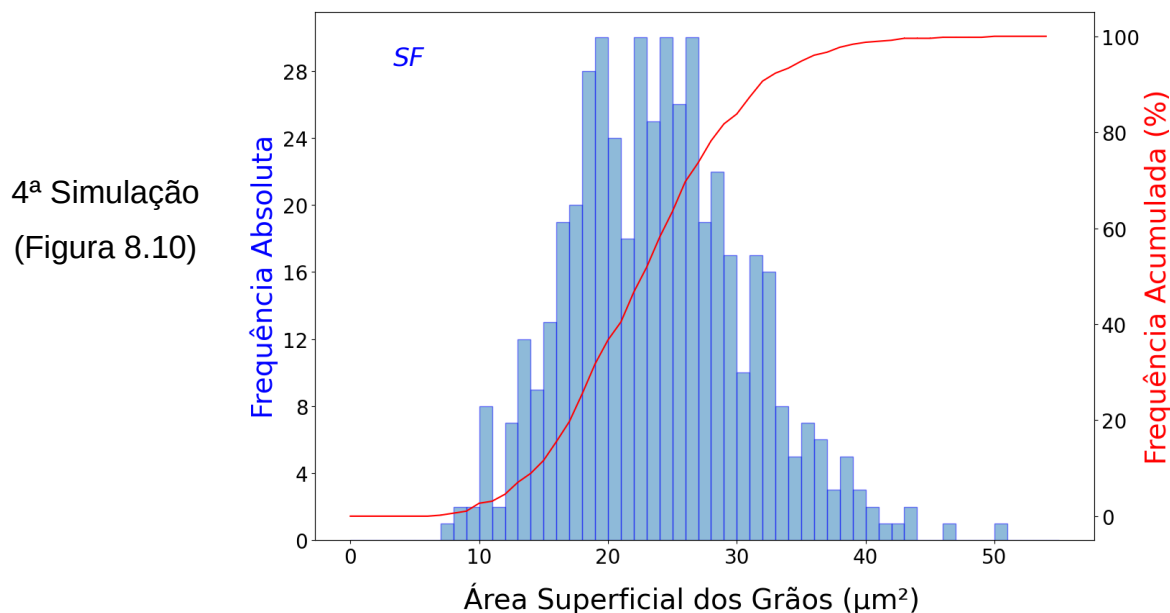


3ª Simulação
(Figura 7.3)



Fonte: do autor.

Figura 9.9. Histograma obtidos da simulação da Figura 8.9 (4ª simulação da Tabela 9.1), para a distribuição dos valores da área superficial pelas faces dos grãos (SF_n).



Fonte: do autor.

Em relação a distribuição dos dados de SG e SV , pela aparência dos histogramas, e ainda pelos valores encontrados para a média serem um pouco maiores que os da respectiva mediana, indicam que a distribuição de valores possui uma leve tendência à direita (cauda um pouco mais longa para valores altos), ou uma leve assimetria positiva. Entretanto como as diferenças não foram tão grandes, a média ainda representa razoavelmente bem o centro da distribuição.

10 MODELAGEM DO CAMINHO MICROESTRUTURAL DISCRETO

Conforme já apresentado na Seção 3.7, a Equação (3.11), ou equação do caminho microestrutural (OLIVEIRA et al., 2006; RIOS; PADILHA, 2003), relaciona SV_{RN} (quantidade de área superficial nas interfaces entre as regiões recristalizadas e as não recristalizadas por unidade de volume) com X_r (fração volumétrica transformada real).

Como o valor de X_r pode ser diretamente obtido das simulações, é possível calcular os valores de SV_{RN} e, conseqüentemente, traçar as respectivas curvas do caminho microestrutural JMAK. Conforme descrito no Capítulo 4, o módulo base de recristalização gera diversos arquivos a cada simulação. Um desses arquivos, com a extensão “SCp”, contém vários parâmetros computacionais da simulação, incluindo o número de células transformadas (N_{CT}) em função do passo da simulação. Assim, utilizando apenas do valor da quantidade total de células da matriz (C_n), é possível relacionar X_r com N_{CT} , conforme mostrado a seguir:

$$X_r = \frac{N_{CT}}{C_n} \quad (10.1)$$

Substituindo a Equação (10.1) na Equação (3.11) se obtêm:

$$SV_{RN} = 3 \left(\frac{4 \pi N_s}{3} \right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - \left(\frac{N_{CT}}{C_n} r^3 \right) \right] \left[\ln \left(\frac{C_n}{C_n - (N_{CT} r^3)} \right) \right]^{\frac{2}{3}} \quad (10.2)$$

A utilização da Equação (10.2) para a geração do caminho microestrutural é um método plenamente válido, e que utiliza de dados obtidos da modelagem discreta associado ao modelo fenomenológico. Assim, o uso da Equação (10.2) pode ser considerado um processo híbrido, pois utiliza informações obtidas das simulações em conjunto com equações fenomenológicas tradicionais provenientes de estudos experimentais (universo contínuo).

Entretanto, nas simulações, como se tem acesso a todos os voxels do material, e pelos métodos de parametrização anteriormente apresentados (Capítulos 5 e 7), é possível obter diretamente todas as informações desejadas, como o SV_{RN} e a X_r , por

meios exclusivamente discretos. Nesse caso, não são necessários o uso de expressões fenomenológicas ou quaisquer outras métricas.

Assim, o processo híbrido é entendido como de certo modo um recurso limitado, pois permite estimar algumas informações, mas não todas. Além disso, pode mascarar a qualidade da modelagem, uma vez que essa técnica híbrida tende, de certa forma, a direcionar os resultados de acordo com o modelo fenomenológico, tornando-os potencialmente mais alinhados aos comportamentos esperados, ainda mais se associado a algum índice de correção.

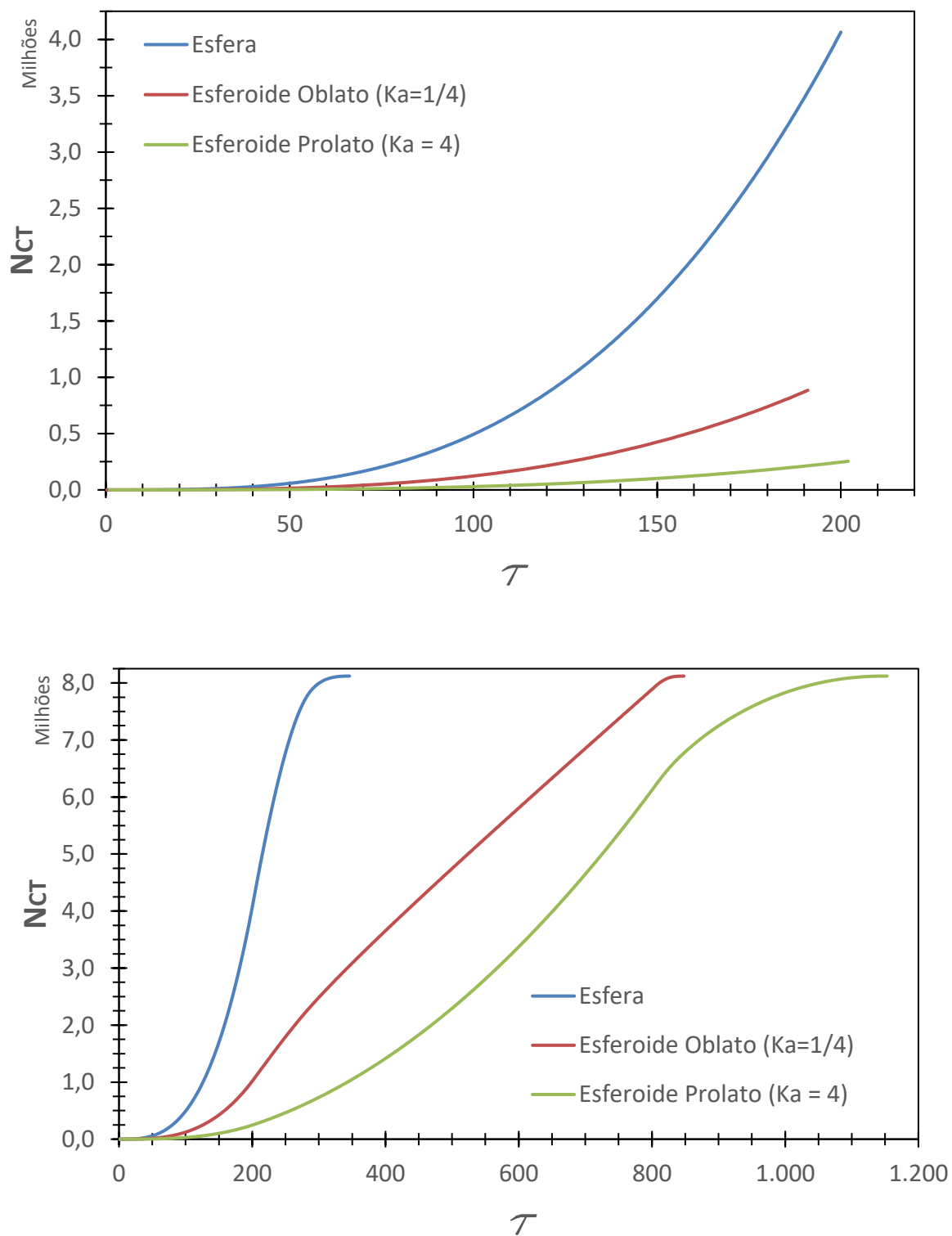
Desta forma, neste trabalho será apresentado uma modelagem do caminho microestrutural totalmente discreta, sem se utilizar para a sua elaboração dos modelos fenomenológicos tradicionais como o de Avrami ou o JMAK.

10.1 A fração volumétrica transformada

Conforme apresentado pela Equação (10.1), o valor de X_r já pode ser obtido diretamente das simulações. Como se tem a evolução de N_{CT} com o tempo discreto (τ), pode-se obter X_r em função de τ .

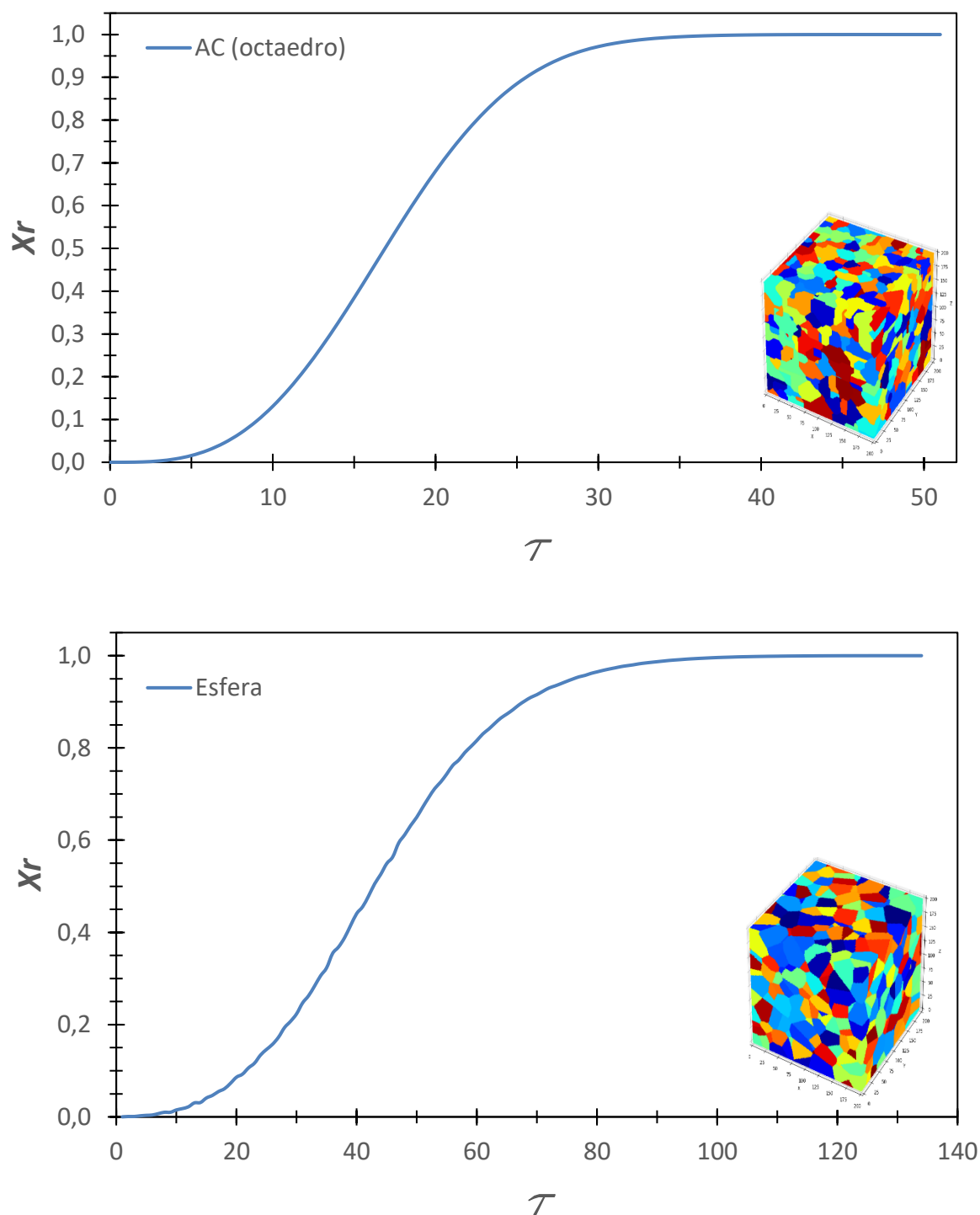
A Figura 10.1 ilustra exemplos desta relação para algumas simulações realizadas anteriormente em ambiente com $201 \times 201 \times 201$ células e uma única semente central em seu centro, com crescimento dos grãos segundo três diferentes padrões: esférico, esferoide prolato ($K_a = 4$) e esferoide oblato ($K_a = 1/4$), ambos esferoides na orientação base ($\phi = 0$ e $\theta = 0$).

Figura 10.1. Evolução de N_{CT} em função do tempo discreto (τ), destacando o período anterior ao *impingement* com os próprios limites da matriz (acima), e para toda a simulação (abaixo), em ambiente com 201x201x201 células e uma única semente central em seu centro.



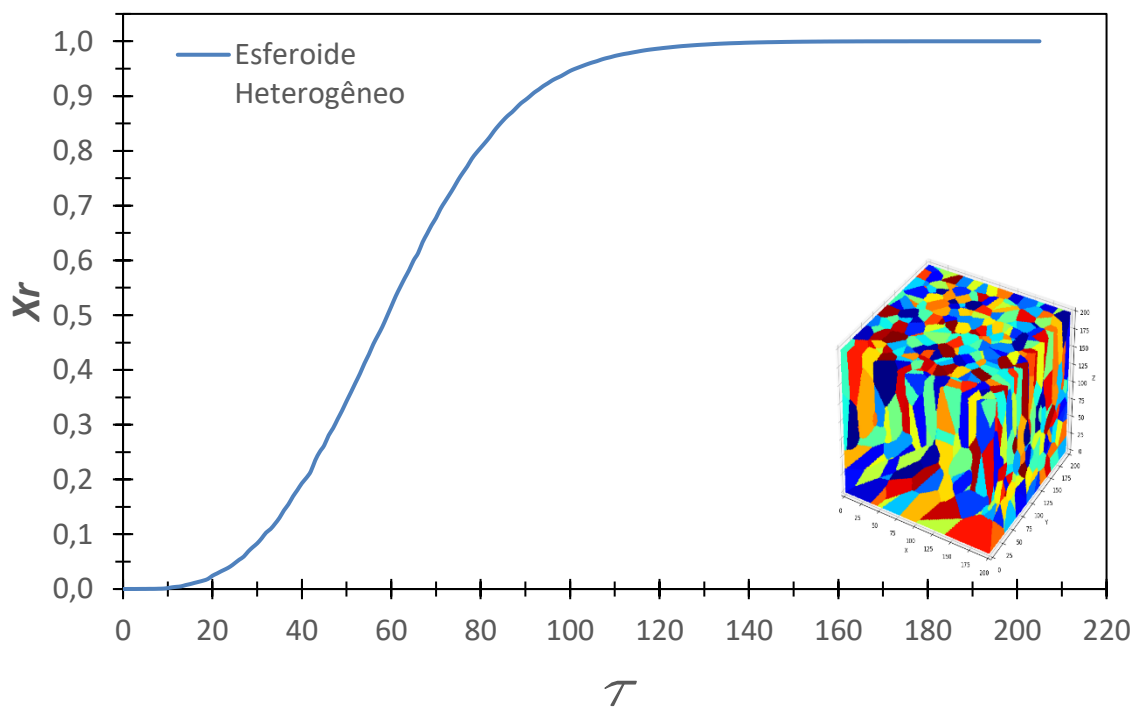
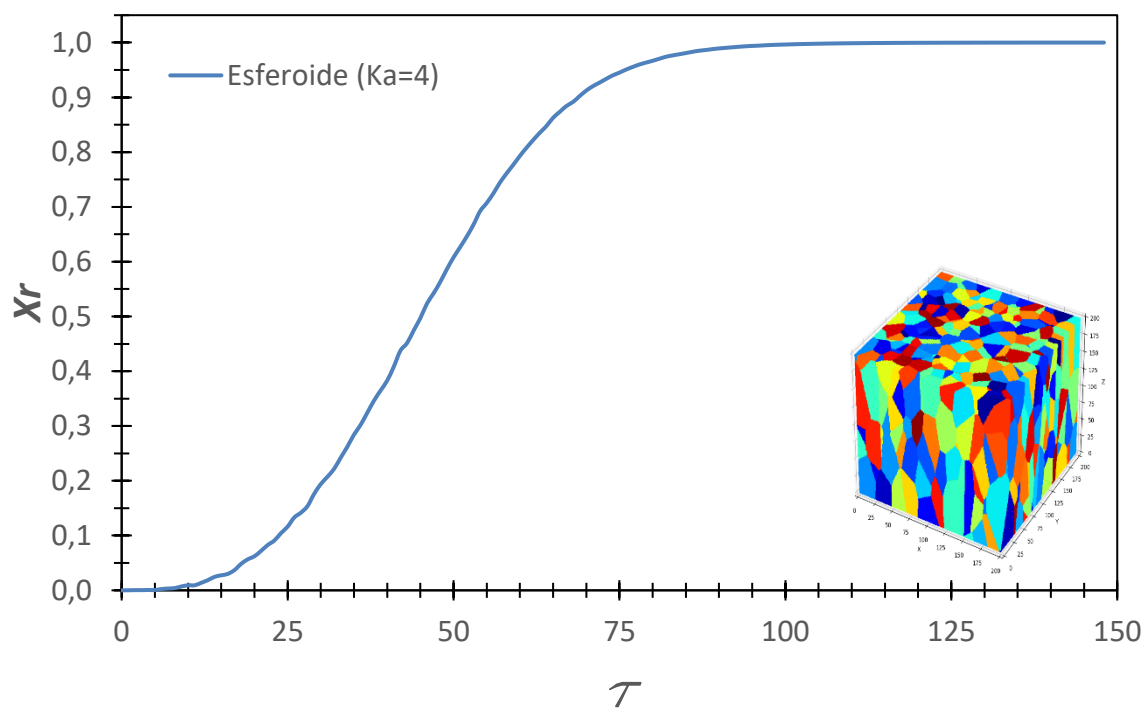
Fonte: do autor.

Figura 10.2. Evolução de X_r em função do tempo discreto (τ) em um ambiente de 200x200x200 células e 1000 sementes iniciais aleatoriamente distribuída. Acima para uma modelagem com AC com pesquisa de vizinhança pelas faces (grãos octaédricos), e abaixo com AH com grãos esféricos.



Fonte: do autor.

Figura 10.3. Evolução de X_r em função do tempo discreto (τ) em um ambiente de 200x200x200 células, 1000 sementes iniciais aleatoriamente distribuídas, e grãos em formato de esferoides prolatos ($K_a = 4$). Acima na orientação base ($\Phi = 0$ e $\theta = 0$), e abaixo para $Z \geq 100$ na orientação base e $Z < 100$ com $\Phi = 7\pi/12$ rad e $\theta = \pi/4$ rad.



Fonte: do autor.

10.2 O caminho microestrutural

Para obter o caminho microestrutural se precisará saber de como se dá a evolução de SV_{RN} com o tempo discreto (τ), e com isto será possível relacionar o SV_{RN} com o X_τ . Do Capítulo 9 já se mostrou possível obter o número de células total nas faces e a respectiva área total pelas faces.

Para se determinar o número de células, e consequentemente a área, somente entre as superfícies recristalizadas e não recristalizadas, pode-se usar as seguintes equações:

$$C_{RN}|_{(\tau)} = \sum_{i=1}^{C_x} \sum_{j=1}^{C_y} \sum_{k=1}^{C_z} \left\{ \delta_{CS}(MA_{i,j,k}) \wedge \left[\left(\delta_{MA_{NN}, MA_{i+1,j,k}} \right) \vee \left(\delta_{MA_{NN}, MA_{i,j+1,k}} \right) \vee \left(\delta_{MA_{NN}, MA_{i,j,k+1}} \right) \vee \left(\delta_{MA_{NN}, MA_{i+1,j+1,k}} \right) \vee \left(\delta_{MA_{NN}, MA_{i+1,j,k+1}} \right) \vee \left(\delta_{MA_{NN}, MA_{i,j+1,k+1}} \right) \right] \right\} |_{(\tau)} \quad (10.3)$$

$$SF_{RN}|_{(\tau)} = kS \times r^2 \times C_{RN}|_{(\tau)} \quad (10.4)$$

$$SV_{RN}|_{(\tau)} = \frac{SF_{RN}|_{(\tau)}}{V_m} \quad (10.5)$$

Onde:

CS é o conjunto de grãos no metal identificados individualmente;

n é o números de identificação individual do grão verificado;

n_{seeds} é o número total de grãos recristalizados;

$C_{RN}|_{(\tau)}$ é o número total de células na superfície entre a região recristalizada e não recristalizada em um determinado tempo discreto (τ);

C_x , C_y e C_z são o número total de células do metal ao longo do comprimento respectivamente dos eixos x , y e z ;

MA é a matriz tridimensional que representa o metal simulado;

MA_{NN} é o estado da matriz metal para a região originária ainda não recristalizada (no caso padrão adotado neste trabalho no valor 0);

r é a resolução das células cúbicas [unidade de comprimento, SI];

$SF_{RN}|_{(\tau)}$ é a área superficial discreta pelas faces restrita entre a região recristalizada e não recristalizada [m^2], em um determinado tempo discreto (τ);

$SV_{RN}|_{(\tau)}$ é a razão da área superficial discreta pelas faces restrita entre a região recristalizada e não recristalizada pelo volume [m^2/m^3], em um determinado tempo discreto (τ);

V_m é o volume total de MA [unidade de volume, SI];

ks é a constante de proporcionalidade de superfície discreta para contínua (Capítulo 9);

$\delta_{CS}(MA_{i,j,k})$ é a função indicativa de conjunto, que é igual a 1 se $(MA_{i,j,k} \in CS)$ e é igual a 0 caso contrário;

$\delta_{MA_{NN}, MA_{i,j,k}}$ é a função delta de Kronecker, que é igual a 1 se $(MA_{i,j,k} = MA_{NN})$ e 0 caso contrário; e

$\wedge$ e $\vee$ são respectivamente os operadores lógicos AND (“E”) e OR (“OU”).

Na Equação (10.3) se tem dentro dos somatórios sete independentes funções. A primeira é uma função indicativa de conjunto ($\delta_{CS}(MA_{i,j,k})$) que verifica se as coordenadas (i, j, k) em MA contém uma célula de algum grão recristalizado.

Já as demais seis são funções delta de Kronecker, conectadas pelo operador OR. Estas verificam respectivamente se qualquer uma das seis vizinhanças pelas faces da coordenada (i, j, k) que pertençam ao seu conjunto N_F^6 conforme Equação (9.1), ou seja, se as coordenadas $(i+1, j, k)$, $(i, j+1, k)$, $(i, j, k+1)$, $(i-1, j, k)$, $(i, j-1, k+1)$, $(i, j, k-1)$ contém uma célula da matriz originária (região não recristalizada).

Assim se qualquer uma destas seis vizinhanças pertencer a região não recristalizada, o conjunto das seis funções delta irá retornar com 1, e apenas se nenhuma pertencer irá retornar com 0.

Somente se a primeira função indicativa de conjunto e se o conjunto das seis funções delta indicadas na equação (10.3) resultarem ambas em 1 cada, o valor será contabilizado, indicando assim que a coordenada (i, j, k) tanto pertence a uma região recristalizada como também está na vizinhança com uma região não recristalizada.

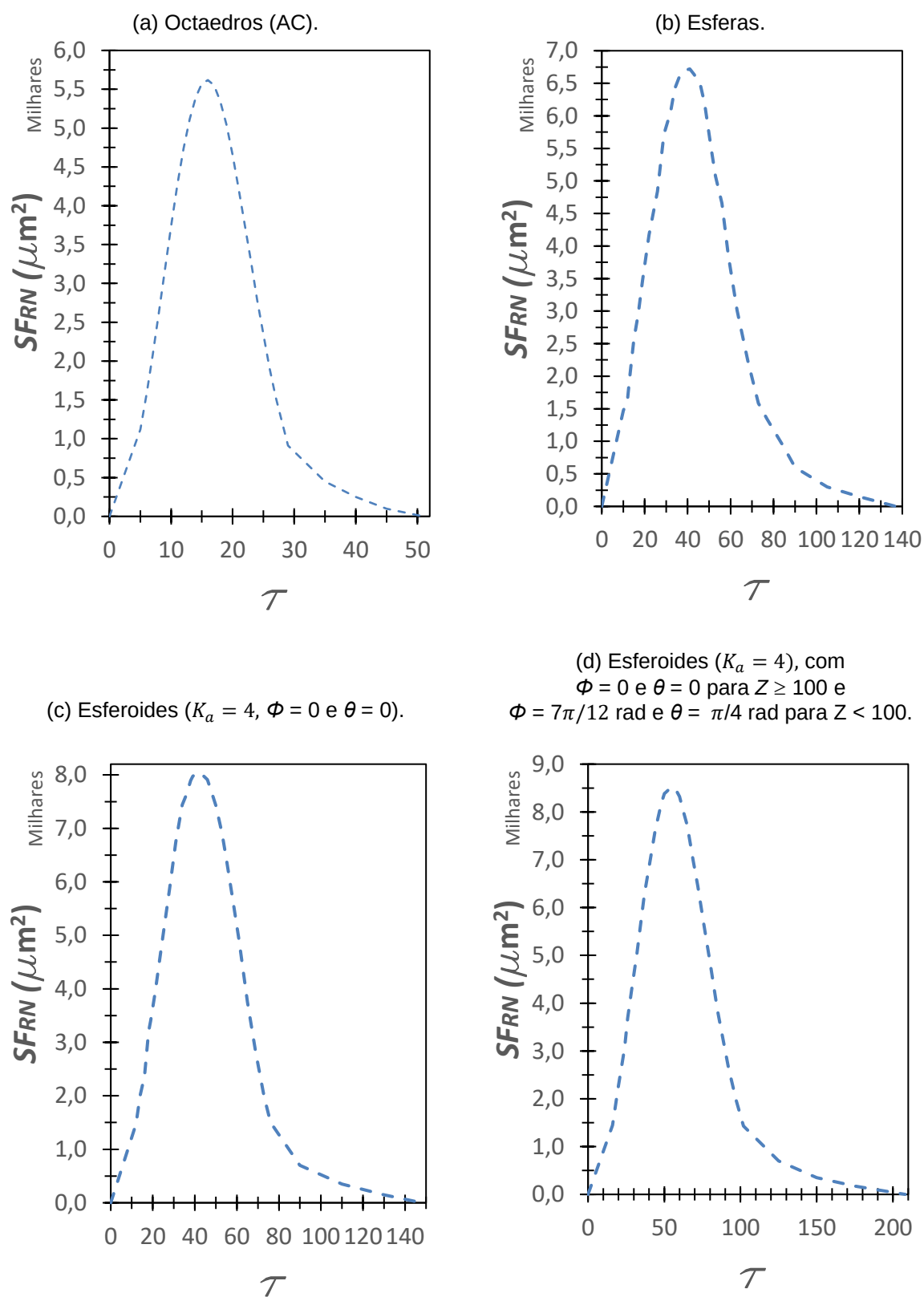
Uma curiosidade é que a Equação (10.3) pode ser formulada alternativamente de outros modos lógico matemáticos. Por exemplo, pode-se substituir a função indicativa de conjunto $(\delta_{CS}(MA_{i,j,k}))$ por uma função delta de Kronecker conforme $[1 - (\delta_{MA_{NN}, MA_{i,j,k}})]$ que se teria o mesmo efeito, pelo ao menos nas situações estudadas.

Por fim, o coeficiente 1,15 da Equação (10.4) é o fator de correção da área discreta para área contínua apresentado na Seção 9.3.

Para ilustração, a Figura 10.4 apresenta a evolução de SV_{RN} em função de τ para as simulações das Figuras 10.2 e 10.3, e finalmente as Figuras 10.5 a 10.8 apresentam a evolução de SV_{RN} em função de X_r (o caminho microestrutural) também para as simulações das Figuras 10.2 e 10.3.

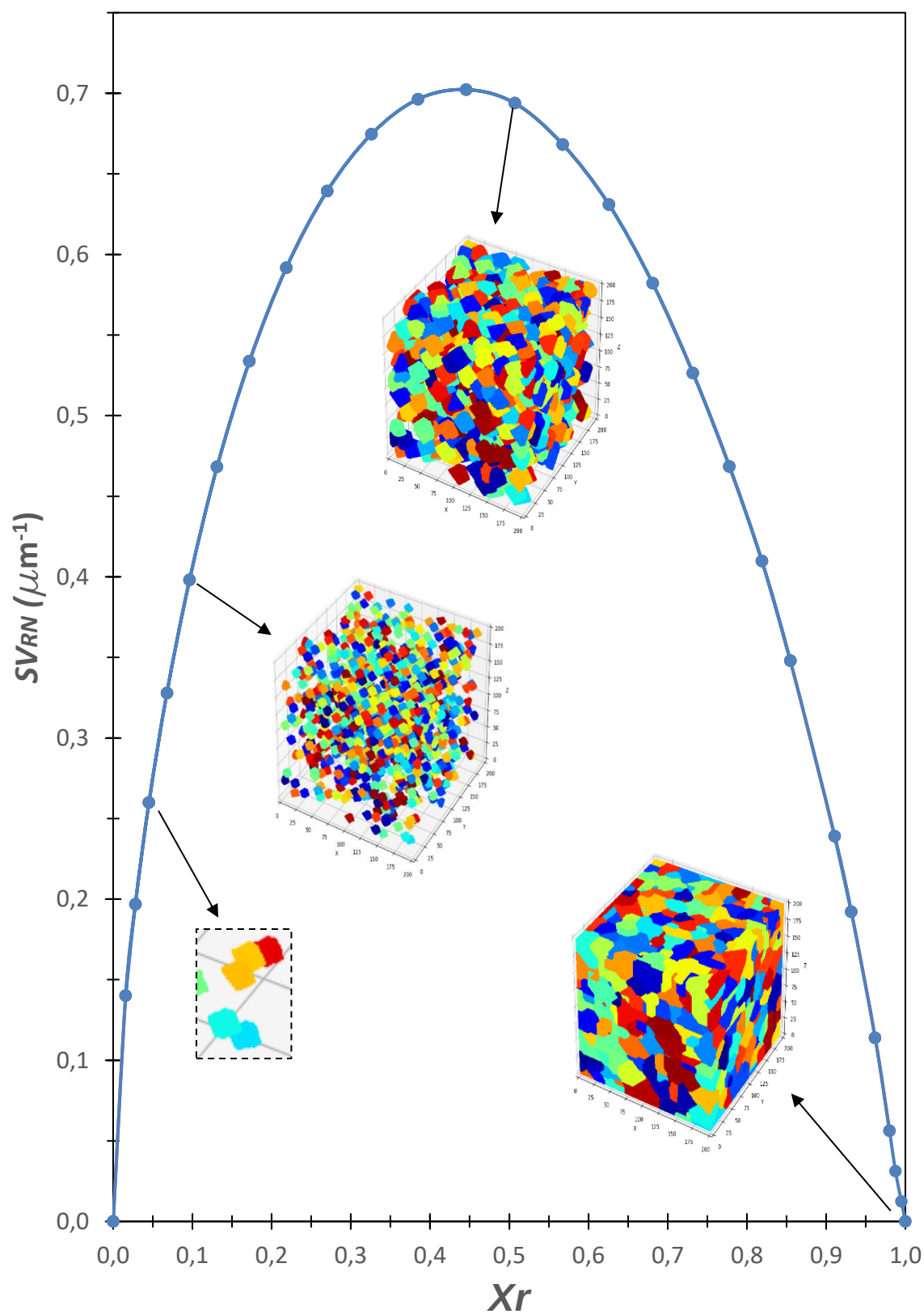
Dessa forma finalmente se pode obter, de modo totalmente discreto (sem o uso do suporte de qualquer equação fenomenológica), a curva do caminho microestrutural para um processo de recristalização clássico, conforme as premissas consideradas.

Figura 10.4. Evolução da área superficial entre as regiões recristalizadas e não recristalizadas (SV_{RN}) em função do tempo discreto (τ).



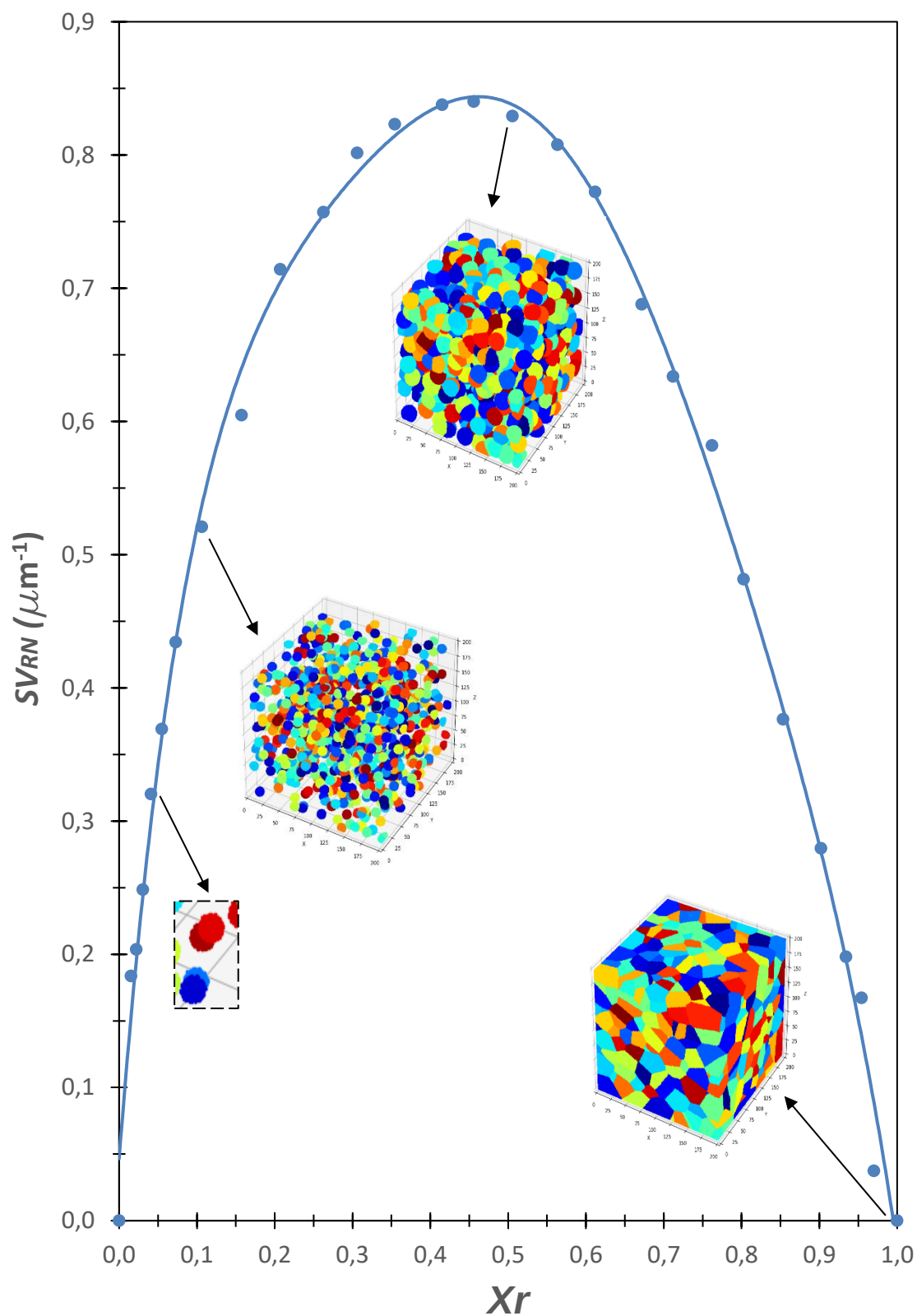
Fonte: do autor.

Figura 10.5. Curva do caminho microestrutural para grãos de crescimento octaédrico (AC, 1000 sementes aleatórias, ambiente 200x200x200 células).



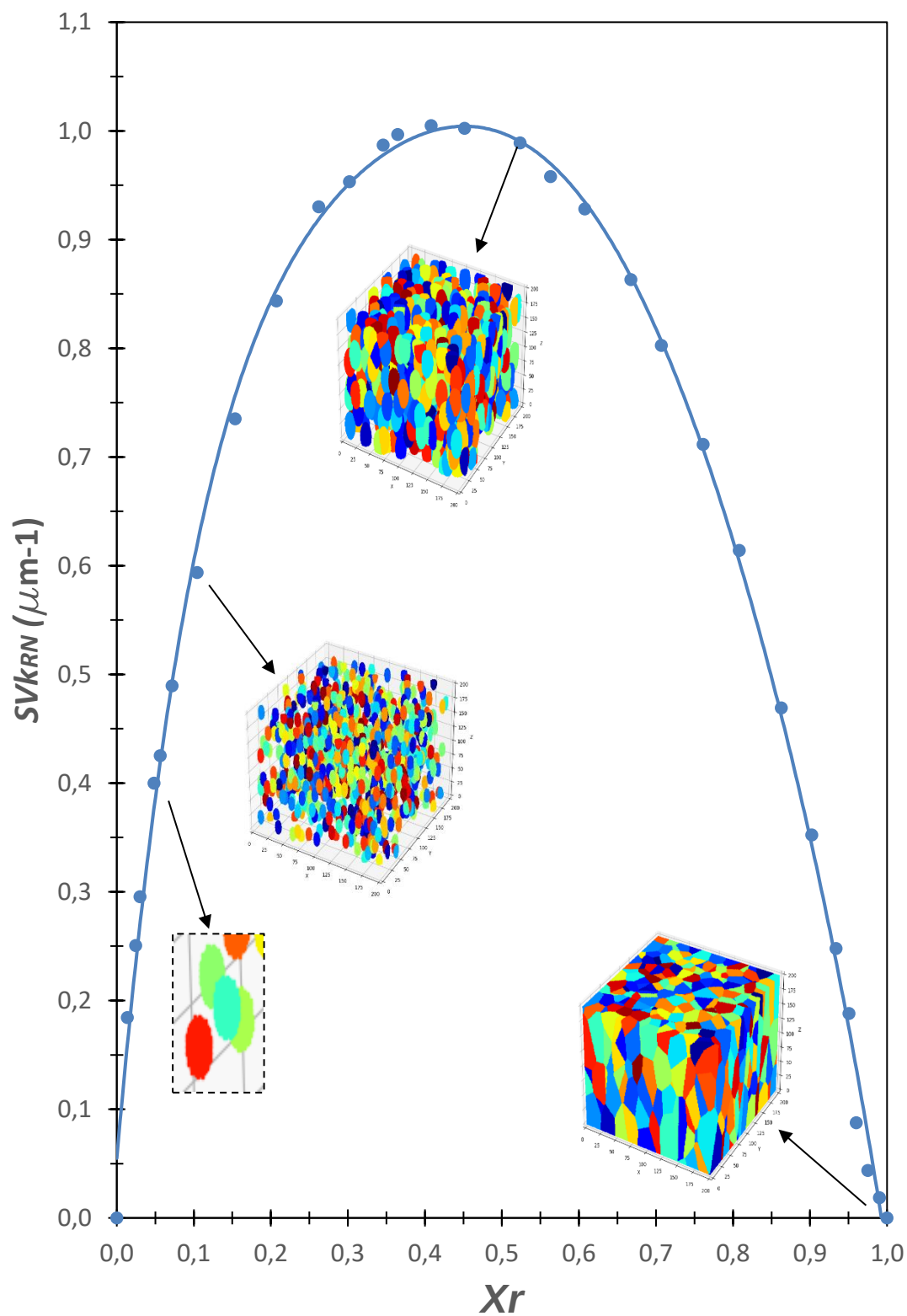
Fonte: do autor.

Figura 10.6. Curva do caminho microestrutural para grãos de crescimento esférico (1000 sementes aleatórias, ambiente 200x200x200 células).



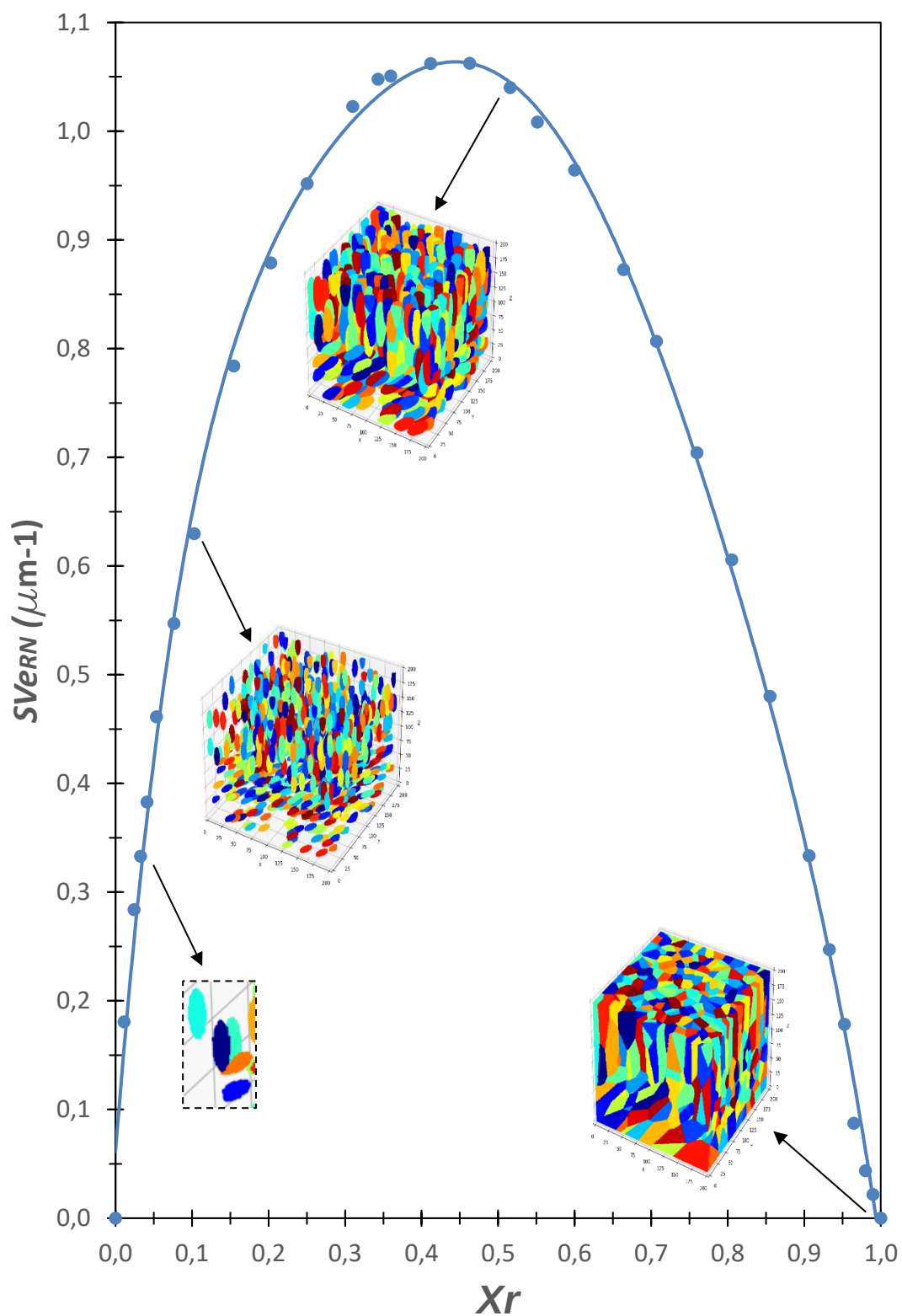
Fonte: do autor.

Figura 10.7. Curva do caminho microestrutural para grãos de crescimento esferoide ($K_a = 4$, $\Phi = 0$ e $\theta = 0$), 1000 sementes aleatórias, ambiente 200x200x200 células.



Fonte: do autor.

Figura 10.8. Curva do caminho microestrutural para grãos de crescimento esferoide ($K_a = 4$, com $\Phi = 0$ e $\theta = 0$ para $Z \geq 100$ e $\Phi = 7\pi/12$ rad e $\theta = \pi/4$ rad para $Z < 100$, 1000 sementes aleatórias, ambiente 200x200x200 células).



Fonte: do autor.

10.3 Aplicação prática

Complementando o trabalho desenvolvido até o momento e a consequente possibilidade de realização das modelagens associadas aos cálculos discretos dos volumes e áreas, pode-se finalmente realizar a verificação, pelo ao menos introdutoriamente, da sua adequação a uma prática real da recristalização em metais.

Para isto será utilizado um estudo experimental de Vandermeer e Rath (V&R), que analisaram o processo de recristalização em temperaturas entre 450° e 600°C em ferro puro constituído por um único cristal deformado a 70% por laminação (VANDERMEER; RATH, 1989).

Este trabalho foi selecionado, pois além de ser um estudo clássico na área e de disponibilizar o respectivo caminho microestrutural para a recristalização estudada, existe adicionalmente sobre este estudo de V&R uma análise independente realizada por Salazar, Assis e Rios (SAR) com modelagem computacional por AC (SALAZAR; ASSIS; RIOS, 2008). Isto possibilitará, além da verificação dos próprios resultados experimentais da recristalização em si de V&R, também se comparar com os resultados das abordagens de verificação computacional realizados por SAR.

As simulações realizadas por SAR foram feitas em ambiente com 300x300x300 células e 220 sementes iniciais fixas (nucleação por saturação de sítios) e aleatoriamente distribuídas, o que resulta em uma densidade de $2,4 \times 10^{-6}$ grãos/ μm^3 . (ou 2400 grãos/ mm^3). Nos seus cálculos SAR consideraram a resolução r adotada de 1,5 μm . Ainda, o modelo de AC empregado por SAR realiza sua pesquisa pelas faces, o que resulta em grãos com formato octaédrico antes do *impingement* (OLIVEIRA et al., 2006). Por fim, SAR considera para seus AC a matriz como sendo periódica (OLIVEIRA et al., 2006), e a teoria JMAK é utilizada para balizamento (SALAZAR; ASSIS; RIOS, 2008).

Repetiu-se esta modelagem nas mesmas condições das realizações por SAR para a matriz ambiente e do número de sementes (nucleação por saturação de sítios), e com a mesma resolução r , portanto com a mesma densidade de grãos por volume. Entretanto, neste estudo a modelagem foi realizada tanto por meio de AC com

crescimento pelas faces (grãos em formato octaédrico), como também realizado por SAR para facilitar a comparação, mas também utilizando AH com crescimento esférico que é uma condição mais diretamente relacionada com a geometria dos grãos recristalizados em crescimento no experimento realizado de acordo com V&R.

Conforme preconizado desde o início deste estudo, todas as modelagens realizadas neste trabalho são realizadas sempre considerando uma matriz não periódica e todos os grãos crescem na mesma velocidade (antes do *impingement* todos os grãos são iguais).

Ainda, e talvez o mais importante, para a geração do caminho microestrutural neste trabalho, somente foram utilizados os resultados discretos diretamente obtidos das simulações conforme os procedimentos discretos apresentados anteriormente.

Assim, neste trabalho, **absolutamente nenhuma equação fenomenológica de suporte, como a teoria JMAK, foi empregada** complementarmente pela modelagem com AC ou AH. Ainda, absolutamente nenhum fator de ajuste adicional específico para este experimento sob qualquer justificativa foi utilizado.

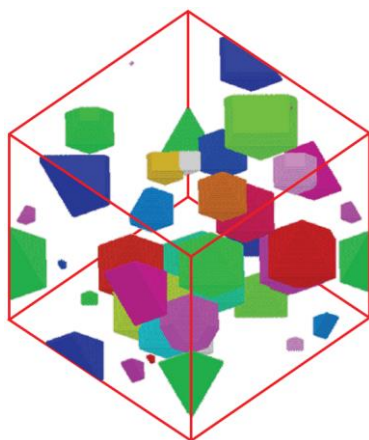
A Figura 10.9 apresenta imagens ilustrativas da modelagem realizada por SAR e as obtidas neste trabalho para AC e AH, todas tanto na condição de 15% de transformação em volume e como de transformação completa.

A Figura 10.10 apresenta uma imagem da microestrutura apresentada por V&R, em aproximadamente 5% de transformação em volume, e para comparação apresenta imagens equivalentes da simulação realizada neste trabalho com AH, tanto em 3D como nos planos centrais.

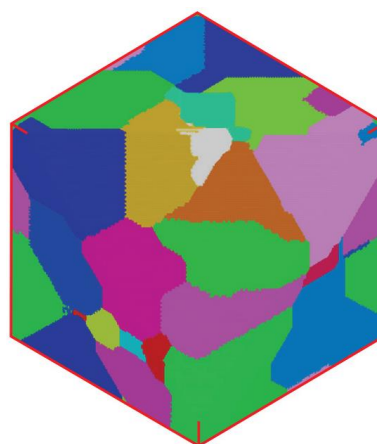
Por fim, a Figura 10.11 apresenta comparativamente o caminho microestrutural obtido por V&R e SAR, e também o obtido neste trabalho.

Figura 10.9. Imagens das simulações obtidas por SAR e neste trabalho em ambiente de 300x300x300 células com 220 grãos aleatoriamente distribuídos.

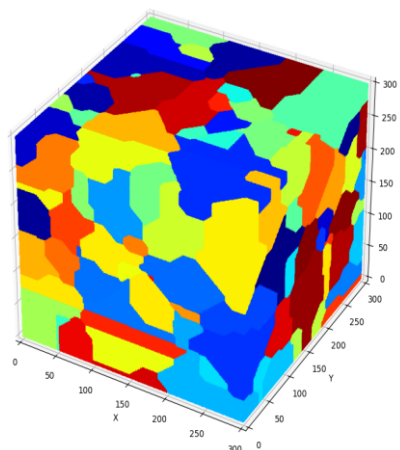
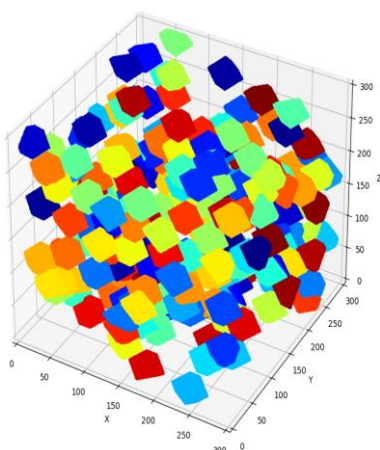
15% de transformação



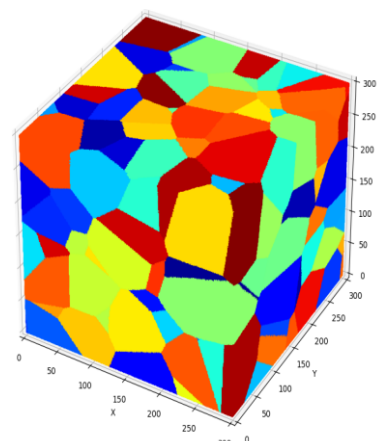
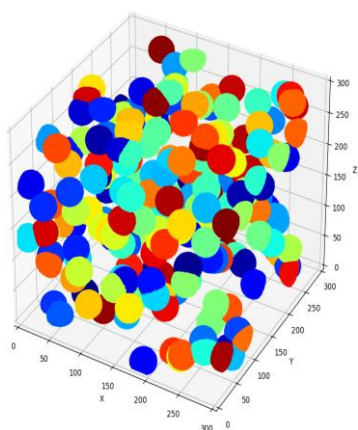
100% transformação



(a) SAR (AC com grãos de crescimento octaédrico).



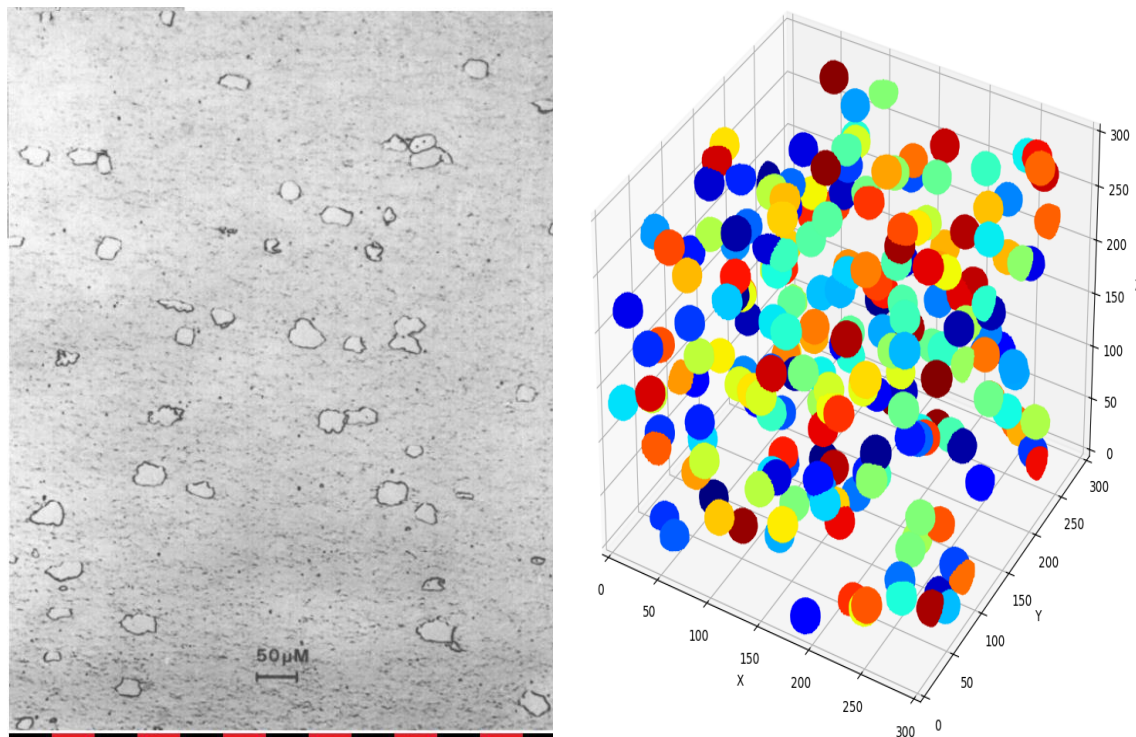
(b) Este trabalho (AC com grãos de crescimento octaédrico).



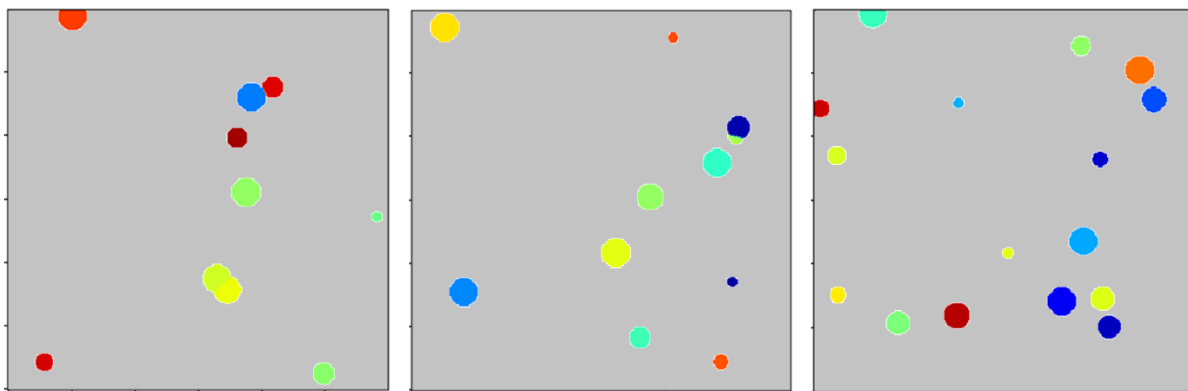
(c) Este trabalho (AH com grãos de crescimento esférico).

Fonte: (a) de (SALAZAR; ASSIS; RIOS, 2008, p. 111), (b) e (c) do autor.

Figura 10.10. Imagem real e das simulações com AH de crescimento esférico, todas com $\approx 5\%$ de transformação volumétrica e densidade média de 2400 grãos/mm³.



(cada traço de cor representa aprox. 50 μm)



Legenda: Todas as imagens na mesma escala aproximada entre si (indicativo na fotomicrografia).

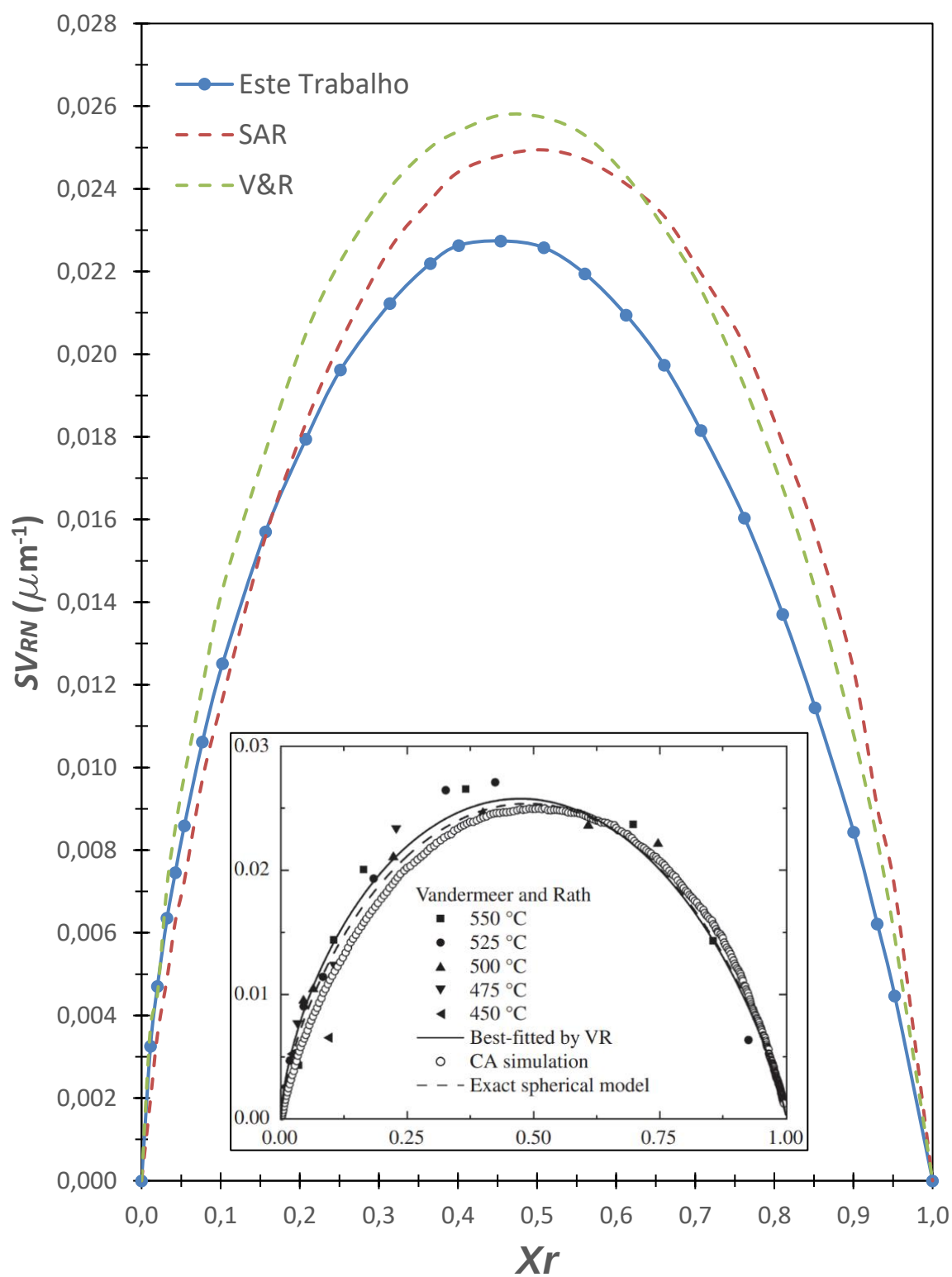
Acima a esquerda: fotomicrografia obtida em ferro puro laminado a 80%, com 10 minutos de recozimento a 500°C, alcançando $\approx 5\%$ de transformação em volume.

Acima a direita: imagem 3D da simulação.

Abaixo: imagens da simulação dos planos centrais (respectivamente XY, XZ e YZ), sendo o fundo na cor cinza representando a região não recristalizada.

Fonte: Fotomicrografia (VANDERMEER; RATH, 1989, p. 393), restante do autor.

Figura 10.11. Curvas do caminho microestrutural obtidas por V&R, SAR e neste trabalho, onde no interior se apresenta o gráfico original do estudo de SAR.



Fonte: gráfico maior do autor, com dados retirados de SAR e deste trabalho; gráfico interno menor retirado diretamente de SAR (SALAZAR; ASSIS; RIOS, 2008, p. 112).

Observando a Figura 10.9a (resultados de SAR), pode-se perceber qualitativamente os efeitos da matriz periódica com a identificação visual de alguns grãos crescendo em lados opostos da matriz. Ainda, nesta Figura 10.9a alguns grãos em crescimento apresentam ter tamanhos variados mesmo antes do *impingement*. Estas condições são diferentes das consideradas nas modelagens deste trabalho.

Entretanto, registra-se que ambas são condições plenamente válidas para adoção nas modelagens, apenas diferenciando as estratégias adotadas em ambas as abordagens. Ainda, comparando as Figuras 10.9a e 10.9b, ou Figuras 10.9a e 10.9c, a densidade de grãos na Figura 10.9a aparenta ser visualmente ser bem inferior.

Por fim, como já informado várias vezes, no modelo deste trabalho todos as sementes dos grãos recristalizados surgem ao mesmo tempo (saturação de sitios), e crescem em velocidades equivalentes entre si. Assim o tempo real de transformação, ou o perfil de evolução da transformação ao longo do tempo real, não é relevante na modelagem em si, não tendo nenhum impacto sobre a mesma. O mesmo se pode dizer sobre a temperatura.

Obviamente que estes, o tempo real e a temperatura, são dois parâmetros fundamentais para aplicações práticas. Entretanto, no momento, devido as premissas adotadas, estes importantes parâmetros são unicamente de tratamento e inclusão posterior a modelagem, portanto sem nenhum impacto na modelagem em si. Entretanto, a inclusão destes importantes parâmetros é um assunto necessário para desenvolvimentos futuros.

11 CONSIDERAÇÕES FINAIS

11.1 Cumprimento dos Objetivos Específicos

Todos os objetivos previstos, geral e específicos, foram atendidos:

- O algoritmo para a simulação da recristalização pela técnica de autômatos celulares (AC) tridimensionais foi conceitualmente elaborado;

- O algoritmo para a simulação da recristalização pela técnica de autômatos híbridos (AH) tridimensionais, tanto para grãos com crescimento em formato esférico como no formato de esferoides (prolatos ou oblatos), foi conceitualmente elaborado;

- Estes algoritmos foram devidamente implementados computacionalmente na forma de um programa computacional em linguagem Python, denominado **SimCres v. 1.0**, que plenamente possibilita a realização da simulação da recristalização em si, como também realiza a parametrização metalúrgica dos aspectos dimensionais dos novos grãos formados, além de realizar a respectiva visualização gráfica tridimensional (3D) e em planos selecionados (2D) dos grãos em formação e formados; e

- Foram realizados vários ensaios *in sílico*, possibilitando a melhor compreensão da técnica, assim como a verificação e validação dos resultados.

Assim o objetivo geral, de elaborar conceitualmente e implementar um programa computacional para a simulação e estudo da recristalização pelo crescimento de grãos equiaxiais em um material metálico, cuja nucleação ocorra por saturação de sítios (todos os núcleos formados no início da simulação), e que seja homogênea (distribuição totalmente aleatória das sementes), foi plenamente atendido.

11.2 Contribuições e destaques

- Modelagem com Autômatos Celulares (Capítulo 5):

Em um ambiente tridimensional matricial formado por células cúbicas, são três as primeiras vizinhanças canônicas (que não podem ser reduzidas) não orientadas a partir de uma única célula (um voxel): a vizinhança pelas faces (VF ou conjunto V_F^6), a vizinhança pelas arestas (VA ou conjunto V_A^{12}), e a vizinhança pelos vértices (VV ou conjunto V_V^8). A VF possui 6 elementos, a VA possui 12 elementos, e a VV possui 8 elementos, totalizando 26 células vizinhas. Somando a célula central, tem-se 27 células, ou uma submatriz de 3x3x3 elementos. As células que compõe estas três vizinhanças canônicas são todas distintas entre si.

Com combinações destas primeiras vizinhanças canônicas não orientadas se obtêm quatro outras primeiras vizinhanças: VF/VA (ou conjunto V_{FA}^{18}), VF/VV (ou conjunto V_{FV}^{14}), VA/VV (ou conjunto V_{AV}^{20}), e VF/VA/VV (ou conjunto π) ou simplesmente VP (vizinhança plena). A soma das três vizinhanças canônicas e destas quatro vizinhanças combinadas formam o conjunto de todas as possíveis primeiras vizinhanças não orientadas de uma célula.

A VF possui certa similaridade conceitual com a vizinhança de Von Neumann, assim como a VP possui certa similaridade conceitual com a vizinhança de Moore.

Cada conjunto de vizinhanças evolui na matriz segundo um arranjo espacial específico (rede característica de repetição). A partir de uma única semente, todas as vizinhanças de busca indicadas são plenas (buscam e exploram 100% do ambiente), exceto as buscas isoladas pela VA ou pela VV, que exploram respectivamente apenas 50% ou 25% das células da matriz. Entretanto, com uma semente geminada dupla, no caso da busca pela VA, ou uma semente geminada quadrupla, no caso da busca pela VV, é possível se atingir uma plenitude de 100% de células exploradas no ambiente.

Barreiras e irregularidades internas não impedem a evolução das pesquisas por sobre o ambiente, desde que exista um caminho livre mínimo que permita que a busca evolua conforme sua rede de repetição.

Durante a evolução do algoritmo, o número de células pesquisadas é muito maior que o número de células transformadas, na mesma razão que o número células que cada conjunto de vizinhanças de busca original possui. Assim a busca pela VF faz na média 6 pesquisas para cada transformação (vizinhança de busca mais eficiente neste quesito), enquanto a busca pela VP faz na média 26 pesquisas para cada célula transformada (vizinhança de busca menos eficiente neste quesito).

Cada vizinhança de busca gera grãos que na fase de crescimento livre (antes de terem seu formato influenciado diretamente por interferências causadas por outros grãos ou pelos limites do ambiente) possui um determinado formato característico. Para a busca pela VF os grãos têm formato octaédrico, para a busca pela VF/VA têm formato da classe de cuboctaedro, e para a busca pela VP têm formato cúbico. Entretanto, de modo geral a forma geométrica final dos grãos será bem irregular e influenciada pela escolha da vizinhança de busca utilizada e também pelo posicionamento das sementes.

O número de laços para se completar uma simulação depende da vizinhança de busca considerada. Pesquisas pela VF são as que necessitam de mais laços, enquanto as pesquisas regidas pela VV, como a VP, necessitam de menos laços. Isto indica que a escolha da vizinhança de busca vai influenciar na parametrização futura do tempo.

Em relação a seleção da vizinhança de busca mais adequada, focando em uma futura parametrização metalúrgica, duas se destacaram: a evolução pela VF e a evolução pela VF/VA.

É inegável que a busca pela VF apresenta a priori algumas vantagens competitivas, como possuir a maior eficiência (menor custo computacional) entre todas considerando o quesito da razão entre o número de células pesquisadas e transformadas, e por ser conceitualmente a mais simples. Provavelmente por isto, a busca pela VF é de longe a mais empregada na literatura na modelagem de crescimento de grãos por autômatos celulares.

Entretanto, a busca pela VF/VA é entre todas as formas de busca empregadas neste estudo com AC a que mais se aproxima (ou a que menos se distancia) de um formato esférico. Apesar disso, erros ainda existirão, pois o crescimento da células das

sementes pelas primeiras vizinhanças não orientadas (canônicas e combinadas), conforme o roteiro realizado neste trabalho, não é diretamente capaz de reproduzir um objeto ou estrutura esférica ou equiaxial.

- Modelagem de grãos esféricos com Autômatos Híbridos (Capítulo 6):

Entretanto, com os autômatos celulares híbridos (autômatos que possuem regras de transição controladas por funções contínuas), neste trabalho denominados por somente autômatos híbridos (AH), as deturpações do espaço de tridimensional de busca causadas pela pesquisa através das primeiras vizinhanças não orientadas nos AC determinísticos puros, que podem por exemplo naturalmente gerarem objetos em diversas formas como octaédros, cuboctaédros e cúbicos, devido a hibridização, podem não necessariamente interferirem no formato dos grãos gerados.

Assim, com os AH se realizou, sem absolutamente a necessidade de nenhum ajuste extra de correção ou algoritmo adicional, e mantendo a praticidade e vantagens do uso de AC, a simulação da recristalização de metais pelo crescimento de grãos equiaxiais, sendo estes matricialmente perfeitamente esféricos no estágio de crescimento dos grãos antes do contato com quaisquer barreiras.

É verdade que este problema já foi resolvido por outras técnicas de simulação, mas os AH se mostram uma alternativa potencialmente muito interessante, devido a associação da sua simplicidade computacional associada aos ótimos resultados, justificando uma atenção maior a esta técnica.

- Parametrização morfológica – volume discreto (Capítulo 7):

Para a análise morfológica dos grãos recristalizados finais formados, e da respectiva microestrutura gerada, neste trabalho se apresentou uma metodologia que, apesar de ser diversa dos métodos já consagrados para a determinação das dimensões por meio da análise de imagens bi-dimensionais, permite se obter computacionalmente de modo automático, dentro dos limites do ambiente matricial e da própria metodologia apresentada, o volume individual de cada grão formado.

Com este valor do volume individual, pode-se também obter outros parâmetros, como o volume normalizado, o diâmetro equivalente e a área equivalente de cada grão. Ainda, pode-se obter os valores médios do material, assim como realizar estudos da sua distribuição de valores.

- Modelagem de grãos com crescimento esferoide via AH (Capítulo 8):

Apesar do sucesso na modelagem do formato esférico, outras possibilidades de formato existem. Uma das alternativas mais importantes são as de grãos em formato de esferoides. Para isto desenvolveu e apresentou todos os passos para a geração de grãos esferoides, sejam prolatos ou oblatos, baseada também em AH. Com a técnica apresentada podem ser gerados grãos esferoides com o alongamento ou achatamento quaisquer desejados.

Ainda, como os esferoides não possuem mais a simetria da esfera, se apresentou toda a metodologia que, baseada nas respectivas equações paramétricas e cartesianas dos esferoides, permite a sua geração em qualquer orientação espacial, e não apenas direcionada sobre os eixos principais.

Por fim, se apresentou a técnica para poder gerar heterogeneidade na distribuição dos grãos, fazendo que grãos diferentes possam seguir padrões de crescimento diferenciados, tanto no formato quanto na orientação.

Este somatório de técnicas possibilita a realização de vários estudos distintos da formação de microestruturas recristalizadas.

- Parametrização morfológica – área superficial discreta (Capítulo 9):

O método para a determinação do volume de cada grão, ou dos seus valores médios para o metal, já foram devidamente apresentados. Mas a área superficial é também uma grandeza de mais alta relevância, e a apresentação da área equivalente, derivada do volume de cada grão, não atende plenamente, servindo apenas como uma referência complementar.

Assim, foi desenvolvido e apresentado em detalhes uma metodologia para a determinação da área superficial de cada grão formado, assim como dos valores médios do material e de grandezas relacionadas, como a razão da área disponível pelo volume de material.

Esta área foi definida como sendo proporcional a quantidade de células da superfície dos grãos que possuem pelo ao menos uma face em contato com o exterior ao respectivo grão. Esta técnica abre a possibilidade da realização de vários estudos mais avançados e do consequente aumento do conhecimento sobre a microestrutura gerada.

- Caminho microestrutural discreto (Capítulo 10):

Com o somatório do conhecimento e das técnicas desenvolvidas neste trabalho até o momento, foi possível gerar as curvas de variação do volume transformado ao longo do tempo discreto, assim como as respectivas curvas do caminho microestrutural.

Um ponto de destaque na metodologia apresentada é que essas importantes curvas podem ser obtidas sem o uso ou a necessidade de qualquer equação fenomenológica de suporte, como a JMAK, tornando a simulação autossuficiente ao fornecer todos os dados necessários. Essa é uma contribuição relevante deste trabalho.

Por fim, a comparação dos resultados entre uma curva microestrutural simulada conforme a metodologia desenvolvida e uma curva microestrutural obtida em um experimento prático relatado na literatura mostrou excelente concordância, o que confirma que a técnica desenvolvida é promissora para futuros desenvolvimentos e estudos.

11.3 Sugestões para trabalhos futuros

Apenas como algumas sugestões para trabalhos futuros, têm-se que:

- Realizar a inclusão dos parâmetros tempo real e temperatura na modelagem da recristalização;

- Realizar o estudo mais aprofundado dos efeitos da nucleação ocorrendo segundo condições não aleatórias, como por exemplo em clusters ou em padrões específicos;

- Realizar o estudo da possibilidade da nucleação poder continuar ocorrendo parcialmente após o seu início, de modo que durante o crescimentos dos grãos recristalizados novas semente possam surgir e evoluir;

- Realizar o estudo da possibilidade de grãos diferentes (e/ou em estágios de crescimento diferentes) poderem evoluir em velocidades diferentes;

- Realizar o estudo mais aprofundado de efeitos de eventuais partes do metal que não venham a participar do processo de recristalização, como inclusões, precipitados, elementos em solução sólida ou nanopartículas;

- Realizar uma validação experimental mais abrangente dos resultados obtidos;

- Empregar recursos computacionais de alto desempenho para realizar ensaios sob condições mais complexas e computacionalmente exigentes; e

- Iniciar estudos e simulações de efeitos pós-recristalização primária, como a movimentação dos contornos de grãos, ou mesmo recristalização secundária.

Este trabalho trouxe uma contribuição ao estado da arte no estudo da modelagem computacional da recristalização, ao apresentar um método inovador para determinar com boa precisão a evolução do volume e da área superficial real dos grãos ao longo do processo. A abordagem desenvolvida destaca-se por permitir a

construção da curva do caminho microestrutural da recristalização sem a necessidade de empregar equações fenomenológicas de suporte, uma prática comum em métodos tradicionais.

Esse avanço não apenas aprimora a compreensão detalhada dos fenômenos microestruturais envolvidos, mas também oferece uma alternativa mais direta, precisa e potencialmente mais universal para o estudo da recristalização em diferentes materiais e condições.

Ademais, a ausência de dependência de modelos fenomenológicos amplia as possibilidades de aplicação da técnica a cenários variados, reduzindo limitações impostas por suposições ou simplificações típicas desses modelos. Dessa forma, o método proposto estabelece bases sólidas para futuras investigações, abrindo um vasto leque de estudos subsequentes que podem explorar diferentes materiais, condições experimentais e técnicas de simulação avançadas.

Com isso, este trabalho além de contribuir para o avanço do conhecimento científico na área, também, e talvez principalmente, proporciona as instituições de ensino e pesquisa, fundações e empresas vinculadas ao assunto a oportunidade de ampliar e desenvolver trabalhos voltados para a Engenharia de Materiais e Modelagem Computacional.

REFERÊNCIAS

ALEKSANDROV, M.; ZLATANOVA, S.; HESLOP, D. J. Voxelisation Algorithms and Data Structures: A Review. **Sensors**, v. 21, n. 24, p. 8241, 9 dez. 2021.

ALUR, R. et al. The algorithmic analysis of hybrid systems. **Theoretical Computer Science**, v. 138, n. 1, p. 3–34, fev. 1995.

ALVES, A. L. M.; ASSIS, W. L. DA S.; RIOS, P. R. Quantitative Metallographic Parameters to Describe Microstructures of Multiphase Materials. **Materials Research**, v. 26, 2023.

AMMERAAL, L.; ZHANG, K. **Computação Gráfica para Programadores Java**. 2nd. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2008.

ARAKI, T. The history of optical microscope. **Mechanical Engineering Reviews**, v. 4, n. 1, p. 16- 00242-16–00242, 2017.

ASSAN, A. E. **Método dos elementos finitos: primeiros passos**. 2a. ed. Campinas: Editora da Unicamp, 2003.

ASTM. **ASTM E 112-24: Test Methods for Determining Average Grain Size**. West Conshohocken, PA: ASTM International, 1 abr. 2024.

ATMAN, A. P. F.; DICKMAN, R.; MOREIRA, J. G. Phase diagram of a probabilistic cellular automaton with three-site interactions. **Physical Review E**, v. 67, n. 1, p. 016107, 17 jan. 2003.

BANDI, S.; THALMANN, D. Path finding for human motion in virtual environments. **Computational Geometry**, v. 15, n. 1–3, p. 103–127, fev. 2000.

BATISTA, R. C.; GOMES, M. DAS N. Modelagem Computacional Aplicada como uma Tecnologia no Currículo de Engenharia Mecânica. **Revista Mundi Engenharia, Tecnologia e Gestão (ISSN: 2525-4782)**, v. 5, n. 3, 14 jul. 2020.

BAYS, C. Introduction to Cellular Automata and Conway's Game of Life. Em: **Game of Life Cellular Automata**. London: Springer London, 2010. p. 1–7.

BEHZADI, S.; ALESHEIKH, ALI. A. Cellular Automata vs. Object-Automata in Traffic Simulation. **International Journal of Remote Sensing Applications**, v. 4, n. 1, p. 61, 2014.

BOCCARA, N. **Modeling Complex Systems**. New York, NY: Springer New York, 2010.

BOURDIN, F. et al. **Understanding the Relationship Between Heterogeneous Microstructure and tensile Properties Through Characterization of Plastic**

Strains Localization in Ti-6Al-4V Processed by WDED. 15th World Titanium Conference 2023. **Anais...**Edinburgh: jun. 2023. Disponível em: <https://imt-mines-albi.hal.science/hal-04167968/document?utm_source=chatgpt.com>. Acesso em: 26 dez. 2024

BRAGA, A. P.; CARVALHO, A. P. DE L. F.; LUDERMIR, T. B. **Redes Neurais Artificiais: teoria e aplicações.** 2nd. ed. Rio de Janeiro: LCT, 2007.

BRAGA, H. C.; MOITA, G. F.; ALMEIDA, P. E. M. DE. Comparação entre os Algoritmos de Busca pela Vizinhança de Von Neumann ou de Moore para Geração do Mapa de Distâncias em um Ambiente Construído. **Abakós**, v. 4, n. 2, p. 20, 19 maio 2016.

BRAHME, A. et al. 3D reconstruction of microstructure in a commercial purity aluminum. **Scripta Materialia**, v. 55, n. 1, p. 75–80, jul. 2006.

BRAKKE, K. **Beating Kelvin's Partition of Space.** Disponível em: <<https://kenbrakke.com/kelvin/kelvin.htm>>. Acesso em: 23 nov. 2024.

BRASIEL, H. C.; LIMA, D. A. Enhancing wildfire simulation with wind and vegetation parameters using Cellular Automata in Sete Cidades National Park: a study in the Brazilian Cerrado biome. **Trends in Computational and Applied Mathematics**, v. 25, n. 1, p. e01757, 2024.

CAHN, J. W. The kinetics of grain boundary nucleated reactions. **Acta Metallurgica**, v. 4, n. 5, p. 449–459, set. 1956.

CALLISTER JR., W. D.; RETHWISCH, D. G. **Materials Science and Engineering: An Introduction.** 10th. ed. [s.l: s.n.].

CAMPOS, A. T.; DA ROCHA FILHO, T. M. Determination of the Kardar–Parisi–Zhang equation from experimental data with a small number of configurations. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 392, n. 18, p. 3903–3908, set. 2013.

CARVALHO, N. J. S. et al. **Importância da Modelagem Computacional na Engenharia.** Jornada Acadêmica da Universidade Federal do Oeste do Pará. **Anais...**Santarém: UFOPA, 2015.

CASTRO, M. L. A.; CASTRO, R. O. Autômatos Celulares: implementações de Von Neumann, Conway e Wolfram. **Revista de Ciências Exatas e Tecnologia**, v. 3, n. 3, p. 89–106, 2008.

CDRH. **Assessing the Credibility of Computational Modeling and Simulation in Medical Device Submissions: Guidance for Industry and Food and Drug Administration Staff.** Rockville U.S. Department of Health and Human Services, FDA, Center for Devices and Radiological Health, , 17 nov. 2023. Disponível em: <<https://www.fda.gov/media/154985/download>>. Acesso em: 23 dez. 2024

CHAN, H. et al. Machine learning enabled autonomous microstructural characterization in 3D samples. **npj Computational Materials**, v. 6, n. 1, p. 1, 6 jan. 2020.

CHELGHOU, K. et al. Cellular Automata in the Hyperbolic Plane: Proposal for a New Environment. Em: [s.l.: s.n.]. p. 678–687.

CHEN, L.-Q. et al. Design and discovery of materials guided by theory and computation. **npj Computational Materials**, v. 1, n. 1, p. 15007, 25 nov. 2015.

COLPAERT, H. **Metalografia dos produtos siderúrgicos comuns**. 2. ed. São Paulo: Edgard Blücher, 1965.

COSTA, E.; SILVA, J.; SILVA, V. O uso do Scratch no ensino de Matemática: Pensamento Computacional, Investigação Matemática e os números de Ball. **Revista Professor de Matemática On line**, v. 12, n. 35, 2024.

CROOKS, A. Cellular Automata. Em: **International Encyclopedia of Geography**. [s.l.] Wiley, 2017. p. 1–9.

CUNDY, H. M.; ROLLETT, A. P. **Mathematical Models**. 2nd. ed. New York: Oxford, 1961.

D., C. H. The Microscopy of Metals. **Nature**, v. 104, n. 2621, p. 535–537, jan. 1920.

DARNBROUGH, J. E.; ROEBUCK, B.; FLEWITT, P. E. J. The influence of temperature and grain boundary volume on the resistivity of nanocrystalline nickel. **Journal of Applied Physics**, v. 118, n. 18, 14 nov. 2015.

DE BERG, M. et al. **Computational Geometry**. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2008.

DENG, X. et al. Topology optimization design of three-dimensional multi-material and multi-body structure based on irregular cellular hybrid cellular automata method. **Scientific Reports**, v. 12, n. 1, p. 5602, 4 abr. 2022.

DIETER, G. E. **Metalurgia Mecânica**. 2a. ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1981.

DOHERTY, R. D. et al. Current issues in recrystallization: A review. **Materials Today**, v. 1, n. 2, p. 14–15, 1998.

EDYVEAN, R.; HAMMOND, C. The metallurgical work of Henry Clifton Sorby and an annotated catalogue of his extant metallurgical specimens. **Historical Metallurgy**, v. 31, n. 2, p. 54–85, 1997.

FERREIRA, A. C. et al. Estudo Comparativo de Métodos de Avaliação da Recristalização para o Aço Inoxidável Ferrítico AISI 430E. **Tecnologia em Metalurgia Materiais e Mineração**, v. 11, n. 3, p. 260–266, 2014.

GAEZLER, R. Álgebra e Análise Tensoriais. Em: **Física-Matemática**. Porto Alegre: IF/UFRGS, 2019.

GARCIA-GUINEA, J. et al. **Analyzing materials in the microscopes: From the Sorby thin sections up to the non-destructive large chambers**. 2016.

GARDNER, M. Mathematical Games. **Scientific American**, v. 223, n. 4, p. 120–123, out. 1970.

GLICKSMAN, M. E.; RIOS, P. R.; LEWIS, D. J. Linear measures for polyhedral networks. **International Journal of Materials Research**, v. 100, n. 4, p. 536–542, 1 abr. 2009.

GODIKSEN, R. B. **Simulations of Recrystallization in Metals**. Roskilde: Technical University of Denmark, out. 2007.

GODIKSEN, R. B. et al. Three-dimensional geometric simulations of random anisotropic growth during transformation phenomena. **Scripta Materialia**, v. 58, n. 4, p. 279–282, fev. 2008.

GOMES, J.; VELHO, L. **Fundamentos da Computação Gráfica**. Rio de Janeiro: IMPA, 2008.

GONÇALVES, C. M. **Cinética da Recristalização e Evolução da Textura em Aço Inoxidável Ferrítico AISI 430 Estabilizado com Nióbio, Laminado a Frio e Submetido a Recozimentos Isotérmicos**. Master Dissertation—Belo Horizonte: Universidade Federal de Minas Gerais, 2015.

GOTTSTEIN, G. **Physical Foundations of Materials Science**. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2004.

HALLBERG, H. Approaches to Modeling of Recrystallization. **Metals**, v. 1, n. 1, p. 16–48, 28 out. 2011.

HALLBERG, H.; WALLIN, M.; RISTINMAA, M. Simulation of discontinuous dynamic recrystallization in pure Cu using a probabilistic cellular automaton. **Computational Materials Science**, v. 49, n. 1, p. 25–34, jun. 2010.

HESELBARTH, H. W.; GÖBEL, I. R. Simulation of recrystallization by cellular automata. **Acta Metallurgica et Materialia**, v. 39, n. 9, p. 2135–2143, set. 1991.

HUGHES, J. F. et al. **Computer Graphics: Principles and Practice**. 3rd. ed. [s.l.] Addison-Wesley, 2014.

HULL, R. et al. Stochasticity in materials structure, properties, and processing—A review. **Applied Physics Reviews**, v. 5, n. 1, 1 mar. 2018.

INCHBALD, G. **Wearie-Phelan Bubbles**. Disponível em: <<https://www.steelpillow.com/polyhedra/wp/wp.html>>. Acesso em: 24 nov. 2024.

JANSSENS, K. G. F. An introductory review of cellular automata modeling of moving grain boundaries in polycrystalline materials. **Mathematics and Computers in Simulation**, v. 80, n. 7, p. 1361–1381, mar. 2010.

JIANG, R. et al. A numerical study on physical characterizations of microwave scattering and emission from ocean foam layer. **Progress In Electromagnetics Research B**, v. 75, p. 91–109, 2017.

KIPER, G. **Polyhedra: a historical review**. Ankara: [s.n.].

LEON, P. A. et al. **Complex dynamics in a hexagonal cellular automaton**. 2011 International Conference on High Performance Computing & Simulation. **Anais...IEEE**, jul. 2011.

LI, R. et al. New understanding of static recrystallization from phase-field simulations. **MRS Bulletin**, v. 49, n. 6, p. 594–602, 20 jun. 2024.

LINDBLAD, J. Surface area estimation of digitized 3D objects using weighted local configurations. **Image and Vision Computing**, v. 23, n. 2, p. 111–122, fev. 2005.

LIU, X. et al. State-of-the-Art Review of the Simulation of Dynamic Recrystallization. **Metals**, v. 14, n. 11, p. 1230, 28 out. 2024.

LIU, Y.-S. et al. Surface area estimation of digitized 3D objects using quasi-Monte Carlo methods. **Pattern Recognition**, v. 43, n. 11, p. 3900–3909, nov. 2010.

LLOYD, J. T. Lord Kelvin demonstrated. **The Physics Teacher**, v. 18, n. 1, p. 16–24, 1 jan. 1980.

LYNCH, N.; SEGALA, R.; VAANDRAGER, F. Hybrid I/O automata. **Information and Computation**, v. 185, n. 1, p. 105–157, ago. 2003.

MAREK, M. Grid anisotropy reduction for simulation of growth processes with cellular automaton. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, v. 253, p. 73–84, jun. 2013.

MARTINKOVIČ, M.; MINARIK, S. Evaluation of Grain Deformation in Polycrystals. **Materials Science Forum**, v. 782, p. 41–44, abr. 2014.

MELVILLE, J. et al. A new efficient grain growth model using a random Gaussian-sampled mode filter. **Materials & Design**, v. 237, p. 112604, jan. 2024.

MISHIN, Y.; MEHL, M. J.; PAPACONSTANTOPOULOS, D. A. Phase stability in the Fe–Ni system: Investigation by first-principles calculations and atomistic simulations. **Acta Materialia**, v. 53, n. 15, p. 4029–4041, set. 2005.

MOELANS, N. New phase-field model for polycrystalline systems with anisotropic grain boundary properties. **Materials & Design**, v. 217, p. 110592, maio 2022.

MOISEENKO, D. D. et al. Recrystallization at Crack Surfaces as a Specific Fracture Mechanism at Elevated Temperatures—Cellular Automata Simulation. **Physical Mesomechanics**, v. 23, n. 1, p. 1–12, 2 jan. 2020.

MORAIS, F. L. D. DE; CORRÊA, E. C. S.; LOPES, W. Estudo da conformabilidade do aço inoxidável AISI 409 sob rotas complexas de deformação. **Tecnologia em Metalurgia, Materiais e Mineração**, v. 18, p. e2336, 2021.

MUKHOPADHYAY, P.; LOECK, M.; GOTTSTEIN, G. A cellular operator model for the simulation of static recrystallization. **Acta Materialia**, v. 55, n. 2, p. 551–564, jan. 2007.

MURR, L. E. Imaging systems and materials characterization. **Materials Characterization**, v. 60, n. 5, p. 397–414, maio 2009.

OLIVEIRA, V. T. DE et al. Desenvolvimento de um Código em 3D para Simular a Recristalização pelo Método do Autômato Celular. **Tecnologia em Metalurgia e Materiais**, v. 2, n. 4, p. 34–39, 2006.

PADILHA, A. F.; SICILIANO JR., F. **Encruamento, Recristalização, Crescimento de Grão e Textura**. 3a. ed. São Paulo: ABM, 2005.

PAROLIN, R. S.; IRALA, G. C.; DARÓS, A. Existência e Comportamento de Funções Média do Semicírculo. **Trends in Computational and Applied Mathematics**, v. 25, n. 1, p. e01717, 26 abr. 2024.

PAYTON, E. J. Revisiting Sphere Unfolding Relationships for the Stereological Analysis of Segmented Digital Microstructure Images. **Journal of Minerals and Materials Characterization and Engineering**, v. 11, n. 03, p. 221–242, 2012.

PAYTON, E. J. et al. Isotropic Growth on Cartesian Voxel Grids with von Neumann Neighborhoods for Rapid Generation of Synthetic Microstructures. **Metallography, Microstructure, and Analysis**, v. 13, n. 5, p. 954–965, 6 out. 2024.

PEDRAZA, A. J.; COUTINHO, C. A. B.; PAULA E SILVA, E. M. **Tratamentos Térmicos dos Aços**. Belo Horizonte: Edições COTEC, Depto Engenharia Metalúrgica, EEUFMG, 1983.

PENG, X. et al. A combined kinetic Monte Carlo and phase field approach to model thermally activated dislocation motion. **Computational Materials Science**, v. 230, p. 112490, out. 2023.

POOLE, D. **Álgebra Linear**. 1a. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2004.

PORZYCKI, J.; WAŚ, J. Modeling spatial patterns in a moving crowd of people using data-driven approach—A concept of Interplay Floor Field. **Safety Science**, v. 167, p. 106266, nov. 2023.

RAABE, D. Cellular Automata in Materials Science with Particular Reference to Recrystallization Simulation. **Annual Review of Materials Research**, v. 32, n. 1, p. 53–76, ago. 2002.

RAMOS, C. C. et al. Simulation of ideal material blocks using cellular automata. **Nonlinear Dynamics**, v. 111, n. 24, p. 22381–22397, 30 dez. 2023.

RANA, S.; MONDER, D. S.; CHATTERJEE, A. Thermodynamic calculations using reverse Monte Carlo: A computational workflow for accelerated construction of phase diagrams for metal hydrides. **Computational Materials Science**, v. 233, p. 112727, jan. 2024.

REED-HILL, R. E. **Princípios de metalurgia Física**. 2a. ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1982.

RHINES, F. N.; PATTERSON, B. R. Effect of the Degree of Prior Cold Work on the Grain Volume Distribution and the Rate of Grain Growth of Recrystallized Aluminum. **Metallurgical Transactions A**, v. 13, n. 6, p. 985–993, jun. 1982.

RICE, J. R. A Path Independent Integral and the Approximate Analysis of Strain Concentration by Notches and Cracks. **Journal of Applied Mechanics**, v. 35, n. 2, p. 379–386, 1 jun. 1968.

RIOS, P. R. et al. Nucleation and growth during recrystallization. **Materials Research**, v. 8, n. 3, p. 225–238, set. 2005a.

RIOS, P. R. et al. Comparison of analytical models with cellular automata simulation of recrystallization in two dimensions. **Materials Research**, v. 8, n. 3, p. 341–345, set. 2005b.

RIOS, P. R.; GLICKSMAN, M. E. Modeling polycrystals with regular polyhedra. **Materials Research**, v. 9, n. 2, p. 231–236, jun. 2006.

RIOS, P. R.; PADILHA, A. F. Microstructural path of recrystallization in a commercial Al-Mn-Fe-Si (AA3003) alloy. **Materials Research**, v. 6, n. 4, p. 605–613, dez. 2003.

RIOS, P. R.; PADILHA, A. F. **Transformações de Fase**. São Paulo: Artliber, 2007.

ROGSCH, C. The Influence of Moore and von-Neumann Neighbourhood on the Dynamics of Pedestrian Movement. Em: **Traffic and Granular Flow '15**. Cham: Springer International Publishing, 2016. p. 129–136.

ROMANOVA, V. A. et al. Crystal Plasticity Finite-Element Simulations for Quasistatic Deformation of Polycrystals in Terms of Explicit Dynamics. **PNRPU Mechanics Bulletin**, n. 5, p. 57–73, 6 dez. 2023.

ROY, S.; PAUL, S.; DAS, S. Temporally Stochastic Cellular Automata: Classes and Dynamics. **International Journal of Bifurcation and Chaos**, v. 32, n. 12, 30 set. 2022.

RUSSELL, S. J.; NORVIG, P. **Artificial intelligence: a modern approach**. 4th. ed. Hoboken: Pearson, 2021.

SALAZAR, T. C.; ASSIS, W. L. DA S.; RIOS, P. R. Simulation of recrystallization in iron single crystals. **Materials Research**, v. 11, n. 1, p. 109–115, mar. 2008.

SÁNCHEZ-CRUZ, H. et al. The Euler-Poincaré Formula Through Contact Surfaces of Voxelized Objects. **Journal of Applied Research and Technology**, v. 11, n. 1, p. 65–78, fev. 2013.

SBC. **Diretrizes da Sociedade Brasileira de Computação para o Ensino de Computação na Educação Básica. Relatório Técnico nº 001/2019**. [s.l.: s.n.]. Disponível em: <<https://books-sol.sbc.org.br/index.php/sbc/catalog/view/60/263/505>>. Acesso em: 14 dez. 2024.

SEITZ, M. J.; KÖSTER, G. Natural discretization of pedestrian movement in continuous space. **Physical Review E**, v. 86, n. 4, p. 046108, 15 out. 2012.

SEYED-SALEHI, M. Probabilistic cellular automata simulation of microstructure evolution: the role of model parameters on precision and uncertainty. **Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering**, v. 33, n. 1, p. 015011, 31 jan. 2025.

SHARMA, N. K. et al. Effective Young's Modulus of Ni–Al₂O₃ composites with particulate and interpenetrating phase structures: A multiscale analysis using object oriented finite element method. **Computational Materials Science**, v. 82, p. 320–324, fev. 2014.

SHIRZAD, K.; VINEY, C. A critical review on applications of the Avrami equation beyond materials science. **Journal of The Royal Society Interface**, v. 20, n. 203, 21 jun. 2023.

SHU, C. et al. Grain Knowledge Graph Representation Learning: A New Paradigm for Microstructure-Property Prediction. **Crystals**, v. 12, n. 2, p. 280, 18 fev. 2022.

SIDOR, J. et al. Microstructural and crystallographic aspects of conventional and asymmetric rolling processes. **Acta Materialia**, v. 56, n. 11, p. 2495–2507, jun. 2008.

SILVA, L. A. et al. **Modelagem Computacional na Engenharia de processos atual: do micro ao macro, modernidade e interdisciplinaridade**. II WENDEQ - Web Encontro Nacional de Engenharia Química. **Anais...**jul. 2022.

SIMÕES, M. G.; SHAW, I. S. **Controle e Modelagem Fuzzy**. 2nd. ed. São Paulo: Blucher, 2007.

SMITH, D. A.; NICHOLS, C. S. Aggregates of grain boundaries: structure and properties. **Materials Science and Engineering: A**, v. 166, n. 1–2, p. 29–34, jul. 1993.

SOHRABIAN, M. et al. Molecular dynamics study on mechanical properties of polycaprolactone/bioactive glass nanocomposites. **Computational Materials Science**, v. 243, p. 113098, jul. 2024.

SORBY, H. C. XII. On the microscopical structure of meteorites. **Proceedings of the Royal Society of London**, v. 13, p. 333–334, 31 dez. 1864.

SORBY, H. C. On some remarkable properties of the characteristic constituent of Steel. **Proceedings of the Yorkshire Geological Society**, v. 9, n. 2, p. 145–146, 6 jan. 1886.

SRIHARI, S. N. Representation of Three-Dimensional Digital Images. **ACM Computing Surveys**, v. 13, n. 4, p. 399–424, dez. 1981.

SROLOVITZ, D. J. et al. Computer simulation of recrystallization—II. Heterogeneous nucleation and growth. **Acta Metallurgica**, v. 36, n. 8, p. 2115–2128, ago. 1988.

SROLOVITZ, D. J.; GREEST, G. S.; ANDERSON, M. P. Computer simulation of recrystallization—I. Homogeneous nucleation and growth. **Acta Metallurgica**, v. 34, n. 9, p. 1833–1845, set. 1986.

STRUIJS, R. **Method for the Numerical Simulation of a Physical Phenomenon with a Preferential Direction**. USAUSPTO, , 26 ago. 2004.

SULLIVAN, R. M.; GHOSN, L. J.; LERCH, B. A. A general tetrakaidecahedron model for open-celled foams. **International Journal of Solids and Structures**, v. 45, n. 6, p. 1754–1765, mar. 2008.

SVYETLICHNYY, D. Frontal cellular automata for modelling microstructure evolution: Computational complexity analysis. **Computational Materials Science**, v. 230, p. 112478, out. 2023.

TAKAYAMA, Y. et al. A Significant Method for Estimation of the Grain Size of Polycrystalline Materials. **Materials Transactions, JIM**, v. 32, n. 3, p. 214–221, 1991.

TARIQ, J.; KUMARAVEL, A. **Construction of cellular automata over hexagonal and triangular tessellations for path planning of multi-robots**. 2016 IEEE International Conference on Computational Intelligence and Computing Research (ICCIC). **Anais...IEEE**, dez. 2016.

THIYAGASUNDARAM, P.; SANKAR, B. V.; ARAKERE, N. K. Elastic Properties of Open-Cell Foams with Tetrakaidecahedral Cells Using Finite Element Analysis. **AIAA Journal**, v. 48, n. 4, p. 818–828, abr. 2010.

THOMSON, W. LXIII. *On the division of space with minimum partitional area*. **The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science**, v. 24, n. 151, p. 503–514, 29 dez. 1887.

TOVAR, A. et al. Topology Optimization Using a Hybrid Cellular Automaton Method With Local Control Rules. **Journal of Mechanical Design**, v. 128, n. 6, p. 1205–1216, 1 nov. 2006.

TRAN, M. T. et al. Crystal plasticity finite element analysis of size effect on the formability of ultra-thin ferritic stainless steel sheet for fuel cell bipolar plate. **International Journal of Plasticity**, v. 154, p. 103298, jul. 2022.

TRIANATAYLLOU, S. A. A detailed study on implementing new approaches in the Game of Life. **Data and Metadata**, v. 2, p. 95, 29 dez. 2023.

UDUPA, J. K. Multidimensional Digital Boundaries. **CVGIP: Graphical Models and Image Processing**, v. 56, n. 4, p. 311–323, jul. 1994.

UMEMOTO, M.; HAI GUO, Z.; TAMURA, I. Effect of cooling rate on grain size of ferrite in a carbon steel. **Materials Science and Technology**, v. 3, n. 4, p. 249–255, 1 abr. 1987.

VANDERMEER, R. Microstructural descriptors and the effects of nuclei clustering on recrystallization path kinetics. **Acta Materialia**, v. 53, n. 5, p. 1449–1457, mar. 2005.

VANDERMEER, R. A.; JENSEN, D. J. Quantification of Microstructural Evolution and Texture Development During Recrystallization. **Texture, Stress, and Microstructure**, v. 26, n. 1, p. 263–279, jan. 1996.

VANDERMEER, R. A.; RATH, B. B. Modeling recrystallization kinetics in a deformed iron single crystal. **Metallurgical Transactions A**, v. 20, n. 3, p. 391–401, mar. 1989.

VAZ JR, M.; SOUZA NETO, E. A.; MUÑOZ-ROJAS, P. A. **Advanced Computational Materials Modeling: from classic to multi-scale techniques**. Singapore: WILEY-VCH, 2010.

VELHO, L.; GOMES, J. **Sistemas Gráficos 3D**. Rio de Janeiro: IMPA, 2007.

VERHOEVEN, J. D.; PETERSON, D. T. What is a damascus steel? **Materials Characterization**, v. 29, n. 4, p. 335–341, dez. 1992.

WEAIRE, D.; PHELAN, R. A counter-example to Kelvin's conjecture on minimal surfaces. **Philosophical Magazine Letters**, v. 69, n. 2, p. 107–110, fev. 1994.

WEAIRE, D.; RIVIER, N. Soap, cells and statistics—random patterns in two dimensions. **Contemporary Physics**, v. 25, n. 1, p. 59–99, 20 jan. 1984.

WILSON, R. C.; COLLINS, A. G. Ten simple rules for the computational modeling of behavioral data. **eLife**, v. 8, 26 nov. 2019.

WOLFRAM, S. Statistical mechanics of cellular automata. **Reviews of Modern Physics**, v. 55, n. 3, p. 601–644, 1 jul. 1983.

- WOLFRAM, S. Universality and complexity in cellular automata. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, v. 10, n. 1–2, p. 1–35, jan. 1984.
- WOLFRAM, S. **A New Kind of Science**. Champaign, IL: Wolfram Media, 2002.
- YANG, C. et al. Prediction of composite microstructure stress-strain curves using convolutional neural networks. **Materials & Design**, v. 189, p. 108509, abr. 2020.
- ZAITSEV, D. A. A generalized neighborhood for cellular automata. **Theoretical Computer Science**, v. 666, p. 21–35, 1 mar. 2017.
- ZHAO, C. et al. Enhancing understanding metal matrix composites through molecular dynamics simulation: A comprehensive review. **Computational Materials Science**, v. 239, p. 112993, abr. 2024.
- ZHI, Y. et al. Review on Cellular Automata for Microstructure Simulation of Metallic Materials. **Materials**, v. 17, n. 6, p. 1370, 16 mar. 2024.
- ZHOU, R. et al. Numerical Simulation of Microstructure Evolution of Directionally Annealed Pure Iron by Cellular Automata. **Metals**, v. 13, n. 2, p. 368, 11 fev. 2023.
- ZHU, C. et al. Phase-field model simulations of alloy directional solidification and seaweed-like microstructure evolution based on adaptive finite element method. **Computational Materials Science**, v. 160, p. 53–61, abr. 2019.
- ZILL, D. G.; CULLEN, M. R. **Equações Diferenciais**. 3a. ed. São Paulo: Makron Books, 2001. v. 1

APÊNDICE – Artigos

ARTIGOS ELABORADOS E SUBMETIDOS (relativo aos Capítulos 5 e 6):

(1) BRAGA, Henrique C., SILVA, Sidney N. Computational Crystallographic Investigation by Non-Oriented First Neighborhoods for The Simulation of Recrystallization in Metals Through Three-Dimensional Cellular Automata. 2025. *Artigo submetido para avaliação.*

(2) BRAGA, Henrique C., SILVA, Sidney N. Computational Simulation of Recrystallization in Metals via Equiaxial Growth of Nuclei Using Three-Dimensional Hybrid Automata. 2025. *Artigo submetido para avaliação.*

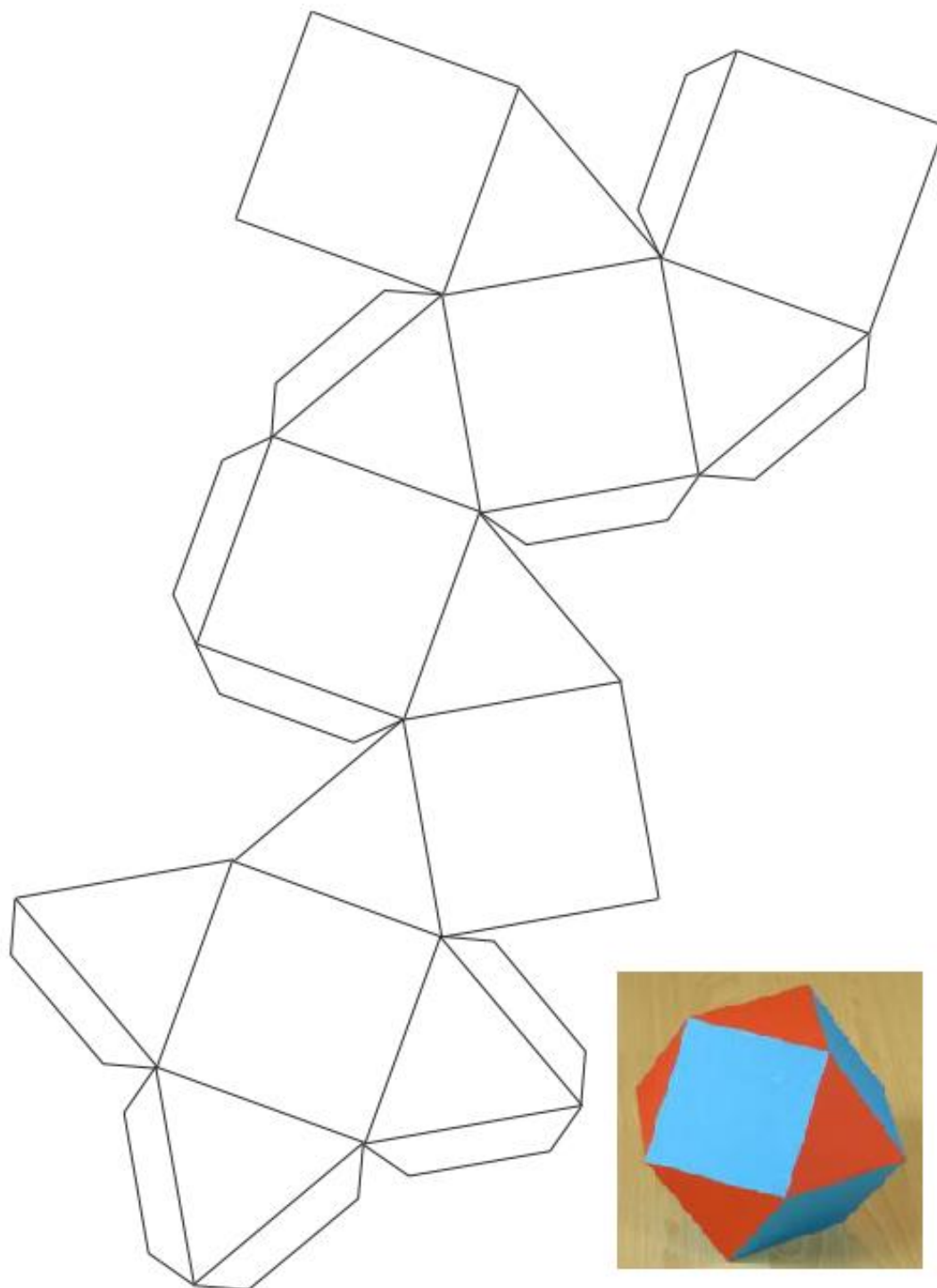
ARTIGOS PLANEJADOS (relativo aos Capítulos 7 a 10):

(3) Parametrização Morfológica – volume discreto, volume normal, diâmetro e área equivalentes.

(4) Modelagem de grãos com crescimento esferoide via AH.

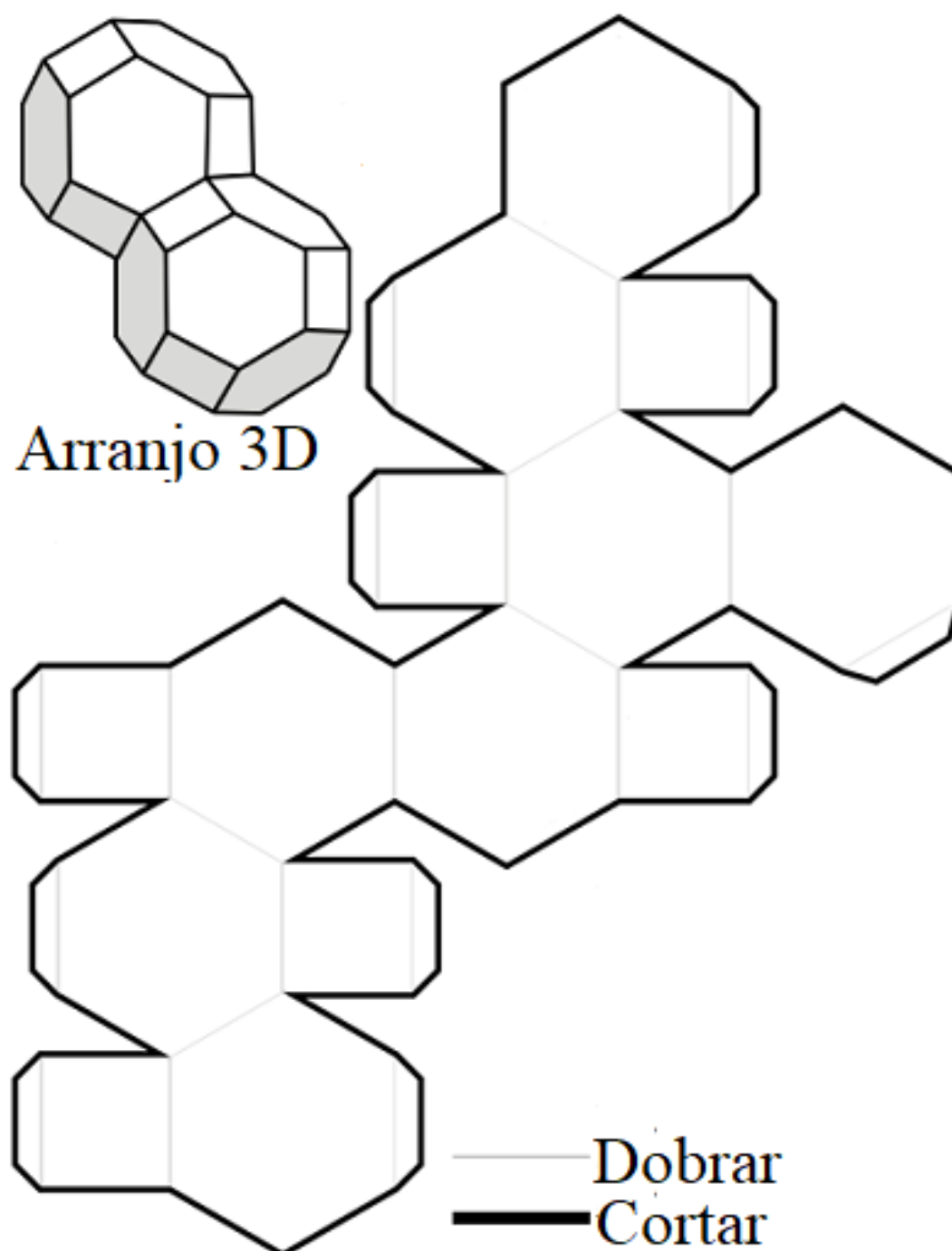
(5) Parametrização morfológica – área superficial discreta.

(6) Caminho microestrutural discreto.

ANEXO I – Modelo planificado para a construção do cuboctaedro.

Fonte: Adaptado de <https://www.polyhedra.net/en/model.php?name-en=cuboctahedron>. Acessado em 11 de jul. 2024.

ANEXO II – Modelo planificado para a construção do ortotetracaidecaédro.



Fonte: Adaptado de <https://zapatopi.net/kelvin/tetrakaidecahedra.pdf>. Acessado em 11 de nov. 2024.