



VII Encontro de Iniciação Científica e
Tecnológica
VII ENICT
ISSN: 2526-6772
IFSP – Câmpus Araraquara
20 e 21 de outubro de 2022



OTIMIZAÇÃO DA CURVA MESTRA DE SINTERIZAÇÃO PREVENDO O CRESCIMENTO DE GRÃOS DO ESTÁGIO FINAL

HUYRÁ ESTEVÃO DE ARAÚJO¹, LETÍCIA CRISTINA TEIXEIRA BASSANI²

¹ Professor Doutor, IFSP - Câmpus Hortolândia, huyraestevao@ifsp.edu.br

² Graduanda em Engenharia de Controle e Automação, IFSP - Câmpus Hortolândia, leticia.c.teixeira00@gmail.com

Área de conhecimento (Tabela CNPq): Materiais Cerâmicos – 3.03.05.02-0

RESUMO: A curva mestra de sinterização (MSC) foi originalmente elaborada a partir da suposição de um mecanismo de difusão dominante em todo o processo de sinterização. No entanto, no decorrer dos anos surgiram diversos conceitos que afirmaram a importância de parâmetros como a porosidade e o tamanho do grão nessa etapa do processamento cerâmico devido a influenciarem na energia de ativação e, desse modo, nas propriedades finais obtidas e nas perdas no processo. Trabalhos recentes incluíram no conceito da MSC a evolução do crescimento de grãos, evidenciando a diferença entre as curvas de retração e de tamanho de grão, principalmente no estágio final da sinterização. Assim, mostrando necessidades de energias de ativação diferentes entre os estágios. Com isso, esse novo modelo permitiu uma maior concordância entre a predição da MSC e sua evolução na prática, levando a otimização do processo. Nessa perspectiva, objetivou-se construir a MSC com base na equação de tamanho de grão em linguagem Python, no intuito da obtenção de uma maior eficiência na sinterização de forma a evitar perdas o máximo possível. Os resultados apresentaram coerência com a literatura e alcançaram o objetivo de otimização, portanto, sendo satisfatórios.

PALAVRAS-CHAVE: curva mestra de sinterização; energia de ativação; estágios; python; simulação; sinterização.

INTRODUÇÃO

O desenvolvimento tecnológico e do processamento dos materiais estão diretamente relacionados. Destacando-se os cerâmicos pela grande aplicabilidade nos mais variados setores da indústria devido a sua complexa estrutura cristalina que proporciona diversas possibilidades de propriedades como elétricas, mecânicas, térmicas e óticas. A sinterização é a etapa do processamento cerâmico no qual muitas das características da peça cerâmica final são definidas e, devido a isso, é considerada uma das mais importantes. No entanto, a complexidade das cerâmicas desfavorece a compreensão das relações entre os parâmetros externos com os resultados internos do material, principalmente durante a sinterização. Assim, o conhecimento ainda é empírico, resultando em diversas perdas no decorrer do processamento. Diante do exposto, o objetivo do presente trabalho é de reduzir essas perdas por meio da aplicação de modelos matemáticos otimizados que descrevem a Curva Mestra de Sinterização em linguagem Python.

A curva mestra de sinterização (MSC) de Su e Johnson (SU; JOHNSON, 1997) surgiu simplificando muito o processo e tornando possível a predição das densidades da sinterização com base na suposição de um mecanismo de difusão dominante em todo o processo de sinterização, no qual a evolução da microestrutura é considerada apenas em forma da densidade alcançada. A precisão preditiva, no entanto, não é completamente satisfatória, não refletindo a realidade física. Dado isso, contra essas suposições, surgiram no decorrer dos anos diversos conceitos que se embasaram na importância de outros parâmetros durante a sinterização e suas consequentes influências na necessidade de energia de ativação nos estágios de sinterização, em especial o final, o qual altera muitas das propriedades da cerâmica e a quantidade de perdas no processo.

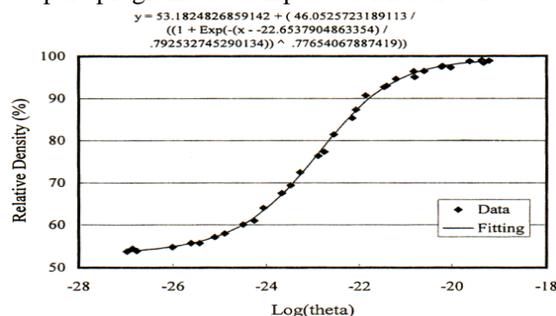
Com isso, esse modelo permitiu uma maior concordância entre a predição da MSC e a evolução da sinterização na prática, levando a uma maior otimização do processo. Nessa perspectiva, foi desenvolvido um programa em linguagem Python no intuito de auxiliar na construção da MSC com base na equação de Park e colaboradores (PARK et. al., 2009) de modo a prever com maior precisão a sinterização do material cerâmico, evidenciando a diferença com a MSC de Su e Johnson (SU; JOHNSON, 1997), principalmente no estágio

final, como meio de afirmação de sua maior eficiência na sinterização de forma a evitar perdas o máximo possível no decorrer dessa etapa do processamento cerâmico.

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A curva mestra de sinterização (MSC) de Su e Johnson (SU; JOHNSON, 1997) possui um conceito muito amplo e muito aplicado devido sua simplicidade pela suposição de um mecanismo de difusão dominante em todo o processo de sinterização. A aplicação desse conceito em trabalhos como de Teng e colaboradores (TENG et. al.,2002) comprovaram sua possibilidade de fato como é mostrado na Figura 1.

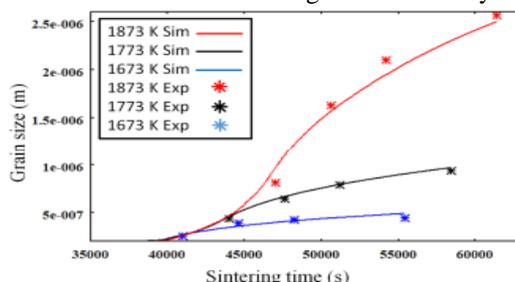
FIGURA 1. A Curva Mestre de Sinterização (MSC) das amostras de zircônia, calculada e exibida na planilha "MSC" pelo programa de computador Master Curve.



Fonte: TENG et. al. (2002).

No entanto, o estágio final da sinterização é um dos principais desafios da sinterização para a obtenção de cerâmicas de alta densidade e alta performance devido ao acoplamento complexo entre a taxa de eliminação de porosidade/crescimento de grãos e mecanismos de transição (PARK et. al., 2009). Assim, abordagens como as equações de Park e colaboradores (equação 1) e Olevsky (equação 2) foram elaboradas para prever com maior precisão a região de transição de crescimento de grão complexo da sinterização do estágio final.

FIGURA 2. Exemplo do modelo de crescimento de grãos de Olevsky com o efeito de porosidade.



Fonte: KERBART; et. al. (2020).

METODOLOGIA

O desenvolvimento do software foi embasado em três grandes pilares: 1. Bibliotecas Python e Equações; 2. Interface e importação de dados e 3. Cálculos e convecção da Curva Mestre de Sinterização de Tamanho de grão.

1. Biblioteca Python e Equações.

No intuito da otimização do software e para possibilitá-lo, algumas bibliotecas em Python foram estudadas para serem aplicadas como:

- a) Math: fornece acesso às funções matemáticas básicas definidas pelo padrão C como senos, logaritmos e etc.. Permitindo a resolução de equações complexas.
- b) Xlsxwriter: módulo do Python para escrever arquivos do Excel, o qual suporta mais funções do Excel do que qualquer um dos módulos alternativos. Assim, usado para trabalhar com os dados experimentais;
- c) NumPy e Biblioteca Pandas: Essas duas bibliotecas permitem trabalhar com dados e tabelas.
- d) Tkinter: é uma das ferramentas que Python oferece para desenvolvimento de interfaces.
- e) Matplotlib: usa o Python Script para escrever gráficos e plotagens bidimensionais.
- f) Scipy: SciPy é o pacote principal de rotinas científicas em Python devido a operar de forma eficiente em matrizes numpy e com o uso do matplotlib.

A equação de Park e colaboradores (PARK et. al., 2009) incrementou o conceito de MSC de Su e Johnson (SU; JOHNSON, 1997) ao considerar a evolução do crescimento de grãos como um mecanismo de sinterização indispensável. A equação 1 mostra o resultado da formulação da relação do tamanho de grão com os demais parâmetros convencionais da MSC. Esse modelo permite uma melhor compreensão das diferenças da trajetória de sinterização que é a base da otimização da sinterização.

$$\Theta = \int_0^t \left(\frac{G_0}{G}\right)^w \frac{1}{T} \exp\left(\frac{-Q}{RT}\right) dt \quad (1)$$

Onde,

G_0 – tamanho de grão inicial;

G – tamanho de grão real;

w – expoente de mecanismo de sinterização (4 para contorno de grão e 3 para difusão de rede);

Q – energia aparente de ativação;

t – tempo;

T – temperatura;

R – Constante Universal dos Gases.

Para obter o crescimento de grãos (G) desconhecido na equação é possível aplicar modelos como o de Olevsky (equação 2).

$$G = \frac{K(T)}{G^p} \left(\frac{\theta_c}{\theta + \theta_c}\right)^n \quad (2)$$

Onde,

p, n – expoentes do mecanismo;

θ – porosidade;

θ_c – porosidade crítica;

$K(T)$ - termo de Arrhenius.

2. Interfaces e importação de dados.

Para a interação com usuário ser possível foi criado uma interface que permitiu a construção das Curvas Mestras de Sinterização. Para isso, a entrada dos dados é feita através da importação da Planilha do Microsoft Excel (.xlsx) para um retorno (saída) de gráficos das plotagens dos dados calculados (MSC). Deste modo, a entrada dos dados se dá por meio da energia de ativação inserida pelo usuário e um documento Excel, cuja a ordem das colunas é, respectivamente, de ‘t(min)’, ‘T(oC)’ e ‘Tamanho de grão(um)’. Como saída, haverá um gráfico com os dados do tamanho de grão conforme as taxas de tempo, temperatura e etc (log(Θ)).

3. Cálculos e convecção da Curva Mestre de Sinterização de Tamanho de grão.

O software usa a equação da literatura mostrada na fórmula 1 em código Python para construir as MSCs por meio dos dados aplicados. Assim, a curva de predição é feita através da simulação Python.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados do presente trabalho estão organizados conforme as três seções da metodologia: 1. Bibliotecas Python e Equações; 2. Interface e importação de dados e 3. Cálculos e convecção da Curva Mestre de Sinterização de Tamanho de grão. Segue algumas das aplicações já realizadas em coerência com a literatura.

1. Biblioteca Python e Equações.

FIGURA 3. Trechos do código do software com as Bibliotecas e módulos Python utilizados.

```
import scipy.interpolate as spl
import math
import matplotlib.pyplot as pl
import tkinter as tk
from PIL import Image as PIL_image, ImageTk as PIL_imageTk
from tkinter.filedialog import askopenfilename, askopenfile, asksaveasfile
import pandas
import xlswriter
from pandas import read_excel
import numpy as np
from scipy.interpolate import interp1d
```

Fonte: Elaborada pela Autora (2022).

FIGURA 4. Parte do código da fórmula de Park e colaboradores (PARK et. al., 2009).

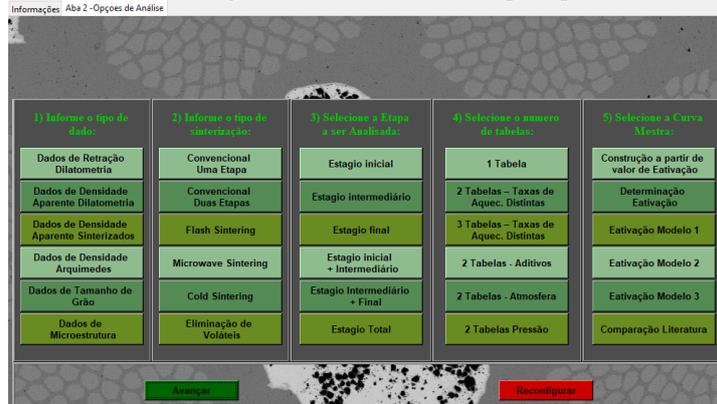
```
a = ((Go / (x['G(um)'][i])) ** w) * (1 / (x['T(oC)'][i])) * \
    (math.exp((-q) / (8.314 * (x['T(oC)'][i]))) * (x['t(min)'][i]))
Theta.append(a)

if a != 0:
    b = math.log(a, 10)
```

Fonte: Elaborada pela Autora (2022).

2. Interfaces e importação de dados.

FIGURA 5. Interface gráfica do Software na etapa ‘opções de análise’.

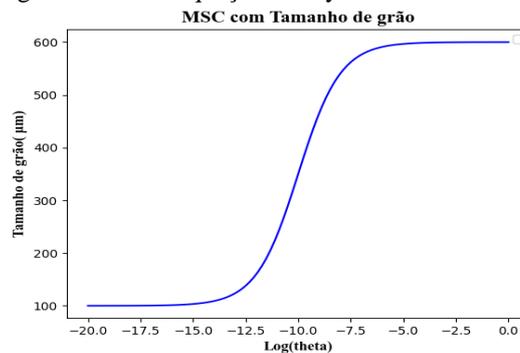


Fonte: Elaborada pela Autora (2022).

A discussão dos outros modelos e opções da interface estão fora do escopo desse trabalho.

3. Cálculos e convecção da Curva Mestre de Sinterização de Tamanho de grão.

FIGURA 6. Exemplo de plotagem obtida da equação em Python de Park e colaboradores (PARK et. al., 2009).



Fonte: Elaborada pela Autora (2022).

As principais bibliotecas Python mostradas na figura 3 permitiram e simplificaram a conversão da equação de Park e colaboradores (PARK et. al., 2009) no código Python da figura 4 e na interface da figura 5, a qual favoreceu uma melhor interação com o usuário e a aplicação dos dados experimentais para a construção da Curva Mestre de Sinterização de tamanho de grão conforme a figura 6. A MSC apresentou a forma sigmoidal em intervalos coerentes com a da literatura, permitindo a comprovação de sua aplicação de forma satisfatória.

CONCLUSÕES

As simulações das Curvas Mestre de Sinterização de tamanho de grão revelaram resultados coerentes com a literatura, sendo possível otimizar a MSC tradicional de Su e Johnson (SU; JOHNSON, 1997) por meio da curva plotada pelo software a partir das fórmulas elaboradas por Park e colaboradores (PARK et. al., 2009) conforme o planejado. Assim, foi concretizado o objetivo de redução das perdas no processo de sinterização das peças cerâmicas, otimizando a etapa da sinterização.

REFERÊNCIAS

- KERBART, G. et al. **Predicting final stage sintering grain growth affected by porosity**. Applied Materials Today, v. 20, p. 100759, set. 2020.
- PARK, S. J. et al. **Master Sintering Curve Formulated from Constitutive Models**. Journal of the American Ceramic Society, v. 92, n. 7, p. 1410–1413, jul. 2009.
- SU, H.; JOHNSON, D. L. **Practical approach to sintering**. American Ceramic Society Bulletin, v.76, n.2, p.72–76, 1997.
- TENG, M.-H.; LAI, Y.-C.; CHEN, Y.-T. **A Computer Program Of Master Sintering Curve Model To Accurately Predict Sintering Results**. Western Pacific Earth Sciences, v. 2, n. 2, p. 171–180, 2002.