

MODELAMENTO DO CRESCIMENTO DE GRÃO PELO MÉTODO DO MONTE CARLO EM 3D⁽¹⁾

Viviane Soares Brandão⁽²⁾

Thiago Gonçalves Dalpian⁽³⁾

Paulo Rangel Rios⁽⁴⁾

José Adilson de Castro⁽⁵⁾

Augusto Cesar Lacerda de Oliveira⁽⁶⁾

Resumo: Através de simulações computacionais utilizando o método de Monte Carlo em três dimensões, verifica-se a evolução microestrutural durante o crescimento de grão. As distribuições de tamanho de grão e distribuições de números de faces são comparadas com expressões analíticas e com simulações que empregam diferentes técnicas, retiradas de artigos publicados anteriormente. Os resultados foram satisfatórios, uma vez que obteve uma boa concordância entre as simulações e as teorias analíticas.

Palavras-chave: crescimento de grão; microestrutura; simulação computacional; Monte Carlo.

Abstract: Through computational simulations using method Monte Carlo in three dimensions, it is verified microstructural evolution during the grain growth. The grain size distributions and faces numbers distributions are compared with analytical expressions and simulations that use different techniques, removed of published articles previously. The results had been satisfactory, a time that got a good agreement between the simulations and analytical theories.

Keywords: Grain growth; microstructure; computer simulation; Monte Carlo

(1) Contribuição técnica a ser apresentada na Seção Técnica Iniciação Científica-Tecnológica, integrante do 61º Congresso Anual da ABM – Internacional nos dias 24 a 27 de julho 2006 Rio de Janeiro

(2) Graduanda em Engenharia Metalúrgica / Aluna de Iniciação Científica da Universidade Federal Fluminense – UFF Volta Redonda RJ

(3) Graduando em Engenharia Mecânica / Aluno de Iniciação Científica da Universidade Federal Fluminense – UFF Volta Redonda RJ

(4) Prof. PhD em Engenharia Metalúrgica, coordenador do curso de pós-graduação em Engenharia Metalúrgica da Universidade Federal Fluminense – UFF

(5) Prof. PhD em Engenharia Metalúrgica, Volta Redonda RJ

(6)Doutorando em Engenharia Metalúrgica da Universidade Federal Fluminense – UFF Volta Redonda RJ

INTRODUÇÃO

Quando a recristalização primária se completa, o sistema não está completamente em seu estado de equilíbrio energético, pois as interfaces ou contornos de grão contribuem para o alto nível de energia livre do sistema. Assim, para eliminar esse excesso de energia livre ocorre o crescimento de grão.

O Crescimento de grão então pode ser definido como o crescimento de determinados grãos à custa de outros de modo a diminuir a área total de contornos. À medida que ocorre o crescimento de grão, esta energia decresce e idealmente ela seria minimizada quando a amostra se tornasse um monocristal.

Durante o decréscimo dessa energia, a microestrutura se aproxima do estado auto similar, onde após um tempo as distribuições de tamanho e forma dos grãos permanecem invariantes, quando adequadamente normalizados.

A lei parabólica que descreve a cinética do crescimento de grão tem sido obtida empiricamente a partir de determinações experimentais. A lei parabólica do crescimento de grão proposta por Beck⁽¹⁾ é dada por:

$$\langle R \rangle = K \cdot t^n \quad (1)$$

onde $\langle R \rangle$ é o tamanho médio do grão, K e n são parâmetros dependentes do material e da temperatura e t é o tempo de recozimento após término da recristalização.

O estado auto-similar e a lei parabólica associada à distribuição do tamanho de grão são resultados fundamentais no crescimento de grão.

O crescimento de grão pode ser tratado como um dos problemas fundamentais em ciência dos Materiais. Várias propriedades físicas dos materiais policristalinos estão diretamente relacionadas com o tamanho médio de grão, logo, o entendimento deste fenômeno é vital na otimização das propriedades físicas dos materiais.

Modelos analíticos foram empregados para prever aspectos topológicos de microestruturas. Contudo, esses modelos são muito simplificados para descrever evoluções microestruturais reais. Sendo assim, técnicas computacionais para simular o crescimento de grão foram desenvolvidas.

A técnica computacional utilizada neste trabalho foi o modelo de Monte Carlo empregado ao crescimento de grão. Este modelo baseia-se na minimização da energia do sistema, através de interações entre pontos, dispostos em uma malha discretizada, comportando-se como uma certa quantidade de átomos, visando representar o comportamento real dos átomos durante o crescimento de grão.

Este trabalho consiste em averiguar a potencialidade da técnica de Monte Carlo para o crescimento de grão em três dimensões, comparando as distribuições de tamanho de grão e distribuições de números de faces com expressões analíticas e com simulações que empregam diferentes técnicas, retiradas de artigos publicados anteriormente.

MATERIAL E MÉTODOS

O código computacional, que simula o crescimento de grão em três dimensões utilizando o método de Monte Carlo, foi desenvolvido em linguagem Fortran 90/95 pelo Núcleo de Modelamento Microestrutural (NMM) da Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda da Universidade Federal Fluminense e as simulações foram realizadas pelo aluno de graduação Thiago Gonçalves Dalpian. Deve-se primeiramente ter a capacidade de entender satisfatoriamente o fenômeno crescimento de grão e, posteriormente, conhecer e saber aplicar a ferramenta de programação Fortran.

O algoritmo executa uma série de Passos de Monte Carlo (MCS) e em determinados passos predefinidos gera matrizes com as configurações de uma certa malha e ou trás saídas com informações sobre os grãos. Enfim, procura-se simular o que aconteceria com uma dada amostra no mundo real.

A matriz consistiu de uma malha cúbica 300 x 300 x 300 com 27.000.000 orientações num tempo de 1000 Passos de Monte Carlo (MCS), com a utilização dos 26 vizinhos mais próximos (figura1) e temperatura de 1000 TMC(Temperatura Monte Carlo), visando representar o comportamento real dos átomos durante o crescimento de grão.

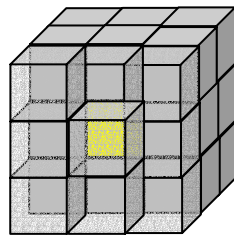


Figura1 - Malha Cúbica com 26 vizinhos mais próximos.

O programa fornece as microestruturas 3D, a cinética do crescimento de grão ($\langle R \rangle$ para cada passo de Monte Carlo), distribuição de tamanho de grão e distribuição de número de faces de grão.

Após a realização das simulações, foram utilizados editores gráficos para a análise dos dados simulados e experimentais, comparando-os com as distribuições analíticas, equações (2), (3) e (4), segundo Rios⁽²⁾, descritas a seguir:

▪ Distribuição de Rios:

$$\varphi(z, \nu) = \frac{z \cdot \varepsilon(\nu)^2 \cdot H_0 \cdot \nu^{\frac{H_0}{2}}}{(\varepsilon(\nu)^2 \cdot z^2 - \nu \cdot \varepsilon(\nu) \cdot z + \nu)^{1 + \frac{H_0}{2}}} \cdot \exp \left[-\frac{H_0 \cdot \nu}{\sqrt{4 \cdot \nu - \nu^2}} \left(\arctan \left(\frac{2 \cdot \varepsilon(\nu) \cdot z - \nu}{\sqrt{4 \cdot \nu - \nu^2}} \right) + \arctan \left(\frac{\nu}{\sqrt{4 \cdot \nu - \nu^2}} \right) \right) \right] \quad (2)$$

$$\text{Onde } z = \frac{R}{\langle R \rangle} ; \varepsilon(\nu) = \frac{\langle u \rangle^2}{\langle u^2 \rangle} \text{ e } u = \frac{R}{R_{cr}}$$

E H_0 pode ser determinado numericamente de:

$$H_0(u, v) = \int_0^{u_{\max}} \varphi(u, v, H_0) \cdot u \, du - \int_0^{u_{\max}} f(u, v, H_0) \cdot u^2 \, du$$

- Distribuição de Hillert:

$$h_z(z) = (2 \cdot e)^3 \cdot \frac{\frac{64}{27} \cdot z}{\left(2 - \frac{8}{9} \cdot z\right)^5} \cdot \exp\left(-\frac{6}{2 - \frac{8}{9} \cdot z}\right) \quad (3)$$

- Distribuição de Weibull:

$$f(z, \beta) = \beta \left(\Gamma\left(1 + \frac{1}{\beta}\right) \right)^\beta \cdot z^{\beta-1} \cdot \exp\left(-\left(\Gamma\left(1 + \frac{1}{\beta}\right) \right)^\beta \cdot z^\beta\right) \quad (4)$$

Onde β é um parâmetro da distribuição e Γ é a função gama.

RESULTADOS/ DISCUSSÃO

Auto-similaridade

Na figura 2 pode-se observar que a distribuição normalizada de tamanhos de grão é auto-similar, ou seja, são invariantes com o tempo.

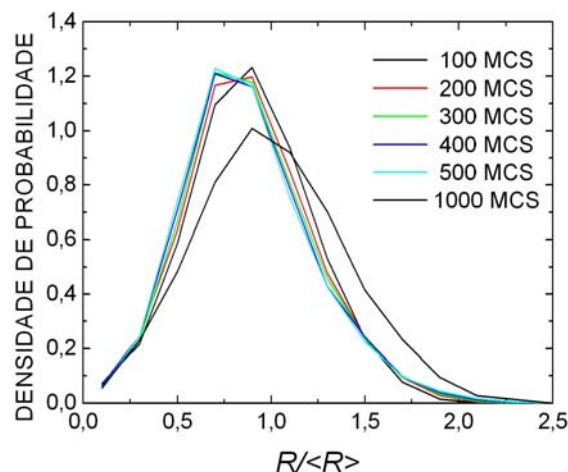


Figura 2 – Distribuição do tamanho médio dos grãos

Lei Parabólica

A figura 3 mostra que, após uma regressão dos dados da simulação computacional baseada na lei parabólica, obtêm-se k de 43,15 e um valor de n de 0,42, o que mesmo num sistema pequeno, está próximo ao limite teórico 0,5.

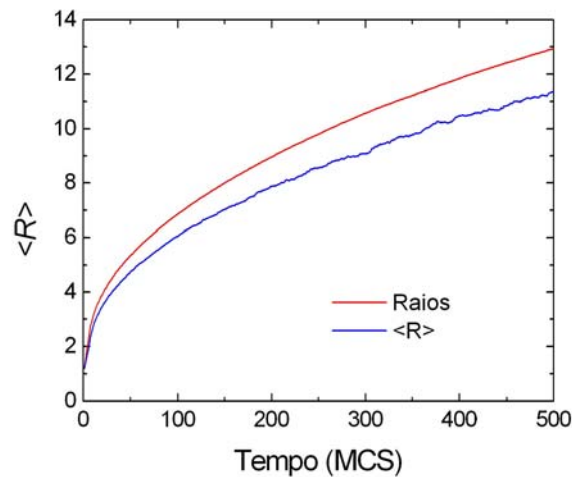


Figura 3 – Cinética do crescimento de grão

Distribuição de tamanho de grão

A figura 4 mostra a distribuição de tamanho de grão simulada comparada com as distribuições analíticas de Rios e de Hillert, equações (2) e (3) respectivamente. A técnica dos mínimos quadrados foi utilizada para ajustar a equação (4). O coeficiente de correlação (R) é elevado: 0,998. A concordância é boa.

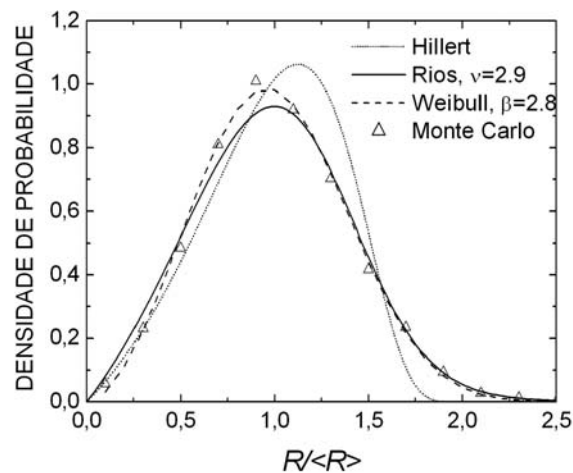


Figura 4 – Comparação da expressão analítica, de Rios, Eq.(2), e Weibull, Eq.(4) com simulação Monte Carlo 3D de Oliveira et al.⁽³⁾. A concordância é boa. A distribuição de Hillert, Eq. (3), é mostrado apenas para efeito de comparação.

Distribuição de número de faces do grão

A figura 5 mostra a distribuição do número de faces de grão simulada comparada com as distribuições analíticas de Rios e de Hillert, equações (2) e (3) respectivamente. A técnica dos mínimos quadrados foi utilizada para ajustar a equação (4). O coeficiente de correlação (R) é elevado: 0,968. A concordância é razoável.

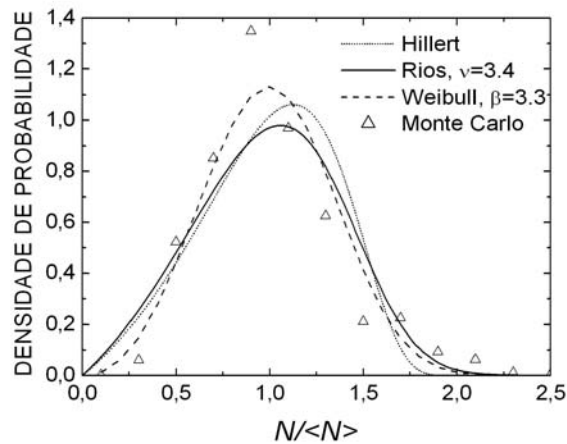


Figura 5 – Comparação da expressão analítica, de Rios, Eq.(2), e Weibull, Eq.(4) com simulação Monte Carlo 3D de Oliveira et al. ⁽³⁾. A concordância é razoável. A distribuição de Hillert, Eq. (3), é mostrado apenas para efeito de comparação.

Comparação de distribuições analíticas com simulações computacionais e dados experimentais

Comparação de distribuições analíticas, equação (2) e (3), com distribuições de tamanho de grão 3D obtidas através de simulações computacionais e dados experimentais foi feita. Essas distribuições de tamanho de grão 3D foram extraídas de: Fuchisaki et al. ⁽⁴⁾ e de Weygand et al. ⁽⁵⁾ que utilizaram o método Vertex; de Wakai et al. ⁽⁶⁾ que utilizou Evolver; de Krill e Chen ⁽⁷⁾ que usou o método Phase-Field; e de Zhang et al. ⁽⁸⁾ que mediu a distribuição de tamanho de grão no ferro puro cortado em série.

A figura 6 ilustra essa comparação. A técnica dos mínimos quadrados foi utilizada para ajustar a equação (4). O coeficiente de correlação é 0,991. A concordância entre todos os dados é boa.

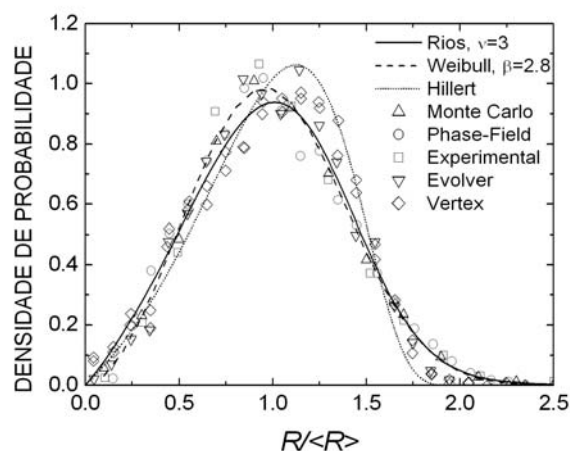


Figura 6 – Comparação da expressão analítica, de Rios, Eq.(2), e Weibull, Eq.(4) com todos os métodos retirados de trabalhos anteriores ⁽⁴⁻⁸⁾. A concordância é boa. A distribuição de Hillert, Eq. (3), é mostrado apenas para efeito de comparação.

CONCLUSÃO

- O código em desenvolvimento para o crescimento de grão em 3D simulou de maneira satisfatória a evolução microestrutural.
- A simulação computacional foi validada pela lei parabólica.
- A evolução da distribuição do tamanho dos grãos alcança o estado auto-similar.
- As expressões analíticas, Eq.(2), proposta por Rios⁽²⁾ e Eq.(4), distribuição de Weibull, descreveram razoavelmente as distribuições de número de faces tridimensionais e, satisfatoriamente as distribuições de tamanho de grão tridimensionais obtidas através de simulações computacionais de uma extensa variedade de técnicas: Vertex^(4,5), Evolver⁽⁶⁾, Phase-Field⁽⁷⁾, Monte Carlo⁽³⁾ e de medidas experimentais de ferro puro⁽⁸⁾.
- A distribuição teórica do tamanho de grão de Hillert não foi verificada na prática. Uma razão dada para explicar esta discordância é que na prática, o crescimento de grão raramente segue experimentalmente a mudança de uma ordem de grandeza no tamanho de grão, de modo que não possa ter havido um tempo suficiente de alcançar o estado de crescimento assintótico.

AGRADECIMENTOS

Esse trabalho teve o suporte do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoa de Nível Superior, CAPES e a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, FAPERJ.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. PADILHA, A.F.; SICILIANO JR, F. **Encruamento, recristalização, crescimento de grão e textura**. São Paulo: Associação Brasileira de Metalurgia e Materiais, 2005.
2. RIOS, P.R.; DALPIAN, T.G.; BRANDÃO, V.S.; CASTRO, J.A.; OLIVEIRA, A.C.L. Comparison of analytical grain size distributions with three-dimensional computer simulations and experimental data. **Scripta Materialia**, v. 54, p. 1633-1637, 2006.
3. OLIVEIRA, A.C.L. Simulação do crescimento normal e isotrópico de grão em 3-D por meio do método de Monte Carlo (Dissertação de Mestrado). Volta Redonda: Universidade Federal Fluminense, 2005.
4. FUCHIZAKI K.; KUSABA T.; KAWASAKI K. **Philos Mag B**, v. 71, p. 333, 1995
5. WEYGAND D.; BRECHET Y.; LEPINOUX J.; GUST W. Three-dimensional grain growth: a vertex dynamics simulation. **Philos Mag B**, v. 79, p. 703, 1999
6. WAKAI F.; ENOMOTO N.; OGAWA H. Three-Dimensional Microstructural Evolution In Ideal Grain Growth-General Statistics. **Acta Materialia**, v. 48, p. 1297, 2000
7. KRILL III C.E.; CHEN L.Q. Computer simulation of 3-D grain growth using a phasefield model. **Acta Mater**, v. 50, p. 3057, 2002.
8. ZHANG C.; SUZUKI A.; ISHIMARU T.; ENOMOTO M. Characterization of Three-Dimensional Grain Structure in Polycrystalline Iron by Serial Sectioning **Metall Mater**, v. 35A, p. 1927, 2004.
9. FONSECA, G.S. O crescimento de grão em uma liga de Al-1% massa Mn (Dissertação de Doutorado em Andamento). Volta Redonda: Universidade Federal Fluminense, 2005.