

COMPARAÇÃO DAS DISTRIBUIÇÕES DE TAMANHO DE GRÃO E NÚMERO DE FACES POR GRÃO ANALÍTICAS E SIMULADAS PELO MÉTODO DE MONTE CARLO¹

Paulo Rangel Rios²
Celso Luiz Moraes Alves³

Resumo

Baseando-se na teoria dos Average N-hedra, onde os grãos metálicos são tratados como poliedros simétricos de faces curvas, Rios e Glicksman obtiveram equações analíticas para distribuição do número de faces por grão e para a raiz cúbica do volume por grão. Estas distribuições analíticas foram comparadas às distribuições correspondentes obtidas neste trabalho por simulação computacional utilizando o método de Monte Carlo. A densidade de probabilidade do número de faces analítica e simulada apresentam concordância razoável. Já a distribuição da raiz cúbica normalizada do volume analítica e simulada não apresentam uma concordância tão boa embora haja uma melhora em relação à concordância obtida com a teoria tradicional de Hillert. Um resultado melhor foi obtido por Rios e Glicksman quando a metodologia foi aplicada à simulação de Wakai que utilizou o método do “surface evolver”. A razão pela qual a teoria dá um melhor resultado com o método de simulação de Wakai et al. do que com a de Monte Carlo não está clara mas provavelmente está relacionada à melhor representação geométrica dos grãos gerados pela simulação utilizando o “evolver” do que a simulação utilizando Monte Carlo.

Palavras-chave: Microestrutura; Crescimento de grão; Métodos analíticos; Policristais.

COMPARISON OF GRAIN SIZE AND NUMBER OF FACES PER GRAIN DISTRIBUTION OBTAINED BY AN ANALYTICAL METHOD AND BY MONTE CARLO SIMULATION

Abstract

Based on the theory of average N-hedra where the grains are represented as symmetrical polyhedra with curved faces, Rios and Glicksman obtained analytical distributions for the number of faces per grain and of the cubic root of the volume per grain. These analytical distributions were compared to the correspondent distributions obtained in this work by computer simulation using the Monte Carlo method. The analytical and simulated probability density function of the number of faces per grain show reasonable agreement. However, only fair agreement occurs between the analytical and simulated distributions of the cubic root of volume per grain. Although the agreement is slightly better than the agreement obtained with Hillert's distribution. A better result was obtained by Rios and Glicksman when the same methodology was applied to the simulation of Wakai et al. who used the surface evolver methodology. The reason why the theory gives a better agreement with evolver than Monte Carlo simulation is not fully clear but it is likely to be related to the better geometric representation of the grains generated by the evolver than by the Monte Carlo simulation.

Key words: Microstructure; Grain growth; Analytical methods; Polycrystals.

¹ *Contribuição técnica ao 63º Congresso Anual da ABM, 28 de julho a 1º de agosto de 2008, Santos, SP, Brasil*

² *Prof. PhD em Engenharia Metalúrgica, Prof. Titular do curso de pós-graduação em Engenharia Metalúrgica da Universidade Federal Fluminense – UFF*

³ *Bolsista de Iniciação Científica do CNPq aluno de graduação em Engenharia Metalúrgica da Universidade Federal Fluminense – UFF Volta Redonda RJ*

1 INTRODUÇÃO

Quando a recristalização primária se completa, o sistema não está completamente em seu estado de equilíbrio energético, pois, ainda há a energia livre associada às interfaces ou contornos de grão. Esta energia livre interfacial decresce à medida que ocorre o crescimento de grão.

O crescimento de grão é um fenômeno de fundamental importância nos estudos de engenharia e ciência dos materiais, por isso, têm sido desenvolvidos modelos computacionais que simulam o crescimento de grão. O modelo apresentado neste trabalho simula o Crescimento de Grão pelo Método de Monte Carlo (MMC).^(1,2) O MMC simula o crescimento de grão minimizando um Hamiltoniano que representa a energia livre interfacial do sistema. Como é de se esperar, o crescimento dos grãos em um determinado volume estudado - que permanece constante durante a análise - ocorre da forma que determinados grãos crescem à custa de outros reduzindo assim o número total de grãos presentes.

Os grãos são tratados nesse trabalho como poliedros simétricos de faces curvas⁽³⁾ denominados *average-N-hedra* ou *ANHs*. A utilização destes poliedros substitui a aproximação tradicional que consiste em supor que os grãos sejam esféricos. A grande vantagem desta abordagem é que, ao contrário da aproximação esférica, propriedades topológicas, tais como, número de faces por grão são preservadas. Neste trabalho, utilizando-se o MMC, foram obtidas as distribuições de frequência/densidade de probabilidade da raiz cúbica normalizada do volume (o que é equivalente ao "raio" do grão) e a distribuição do número de grãos com N faces. Estas distribuições foram comparadas com distribuições obtidas por método analítico baseado nos *average-N-hedra* por Rios e Glicksman.⁽⁴⁾

2 SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL PELO MÉTODO DE MONTE CARLO.

O Método de Monte Carlo^(1,2) aplicado ao crescimento de grão em 3D é modelado gerando inicialmente uma malha cúbica (matriz) de 300 x 300 x 300, totalizando 27.000.000 de pontos. Uma descrição detalhada do procedimento empregado na simulação pode ser encontrado na literatura.⁽¹⁾

Das microestruturas 3D simuladas podem ser extraídas todas as informações a respeito da geometria e distribuições utilizadas abaixo.

3 TEORIA DE RIOS E GLICKSMAN^(3,4)

A seguir, será descrita a análise das distribuições de número de faces por grão e tamanhos de grão baseada em trabalho recentemente desenvolvido e ainda não publicado por Rios e Glicksman.⁽⁴⁾ Esta análise consiste em obter certos parâmetros da própria simulação e utilizá-los para obter, por métodos analíticos, as distribuições de número de faces por grão e tamanhos de grão. Rios e Glicksman partem da premissa que os grãos podem, em média, ser representados por poliedros simétricos os *Average N-hedra* ou *ANHs*.⁽³⁾

A teoria ANHs descreve que os grãos podem ser representados como poliedros regulares de faces curvas. Estes grãos possuindo faces curvas podem ser classificados como côncavos ou convexos de acordo com o seu número de faces. Segundo a análise topológica e métrica apresentada por Rios e Glicksman,⁽⁵⁾ foi possível uma análise apurada dos dados e a construção de determinadas relações demonstradas abaixo.

$$V(N,t)^{1/3} = v(N)^{1/3} \lambda(N,t) \quad (1)$$

Onde $v(N)^{1/3}$ é fator volumétrico e λ é um fator de escala.

Para cada grão com N faces, assume-se que λ é o mesmo para todos esses grãos, sendo seu valor somente função do tempo. Uma teoria anterior, desenvolvida por Hillert, admite que λ é uma constante, sendo idêntico para todos os grãos. Como será visto abaixo esta não é uma hipótese realista.

$$V(N,t)^{1/3} = v(N)^{1/3} \lambda(N,t) = v(N)^{1/3} \lambda_N(t) \quad (2)$$

Elevando-se ambos os termos da equação (2) ao quadrado e aplicando a diferencial total, temos:

$$\frac{dV^{2/3}}{dt} = \frac{\partial v^{2/3} \lambda_N^2}{\partial N} \frac{dN}{dt} + v^{2/3} \frac{d\lambda_N^2}{dt} \quad (3)$$

Tomando como valor de referência para λ o valor de λ correspondente aos grãos de volume crítico apresentados pela teoria ANHs, temos:

$$\lambda = \frac{V(N_C)^{1/3}}{v(N_C)^{1/3}} = \frac{V(N_C)^{1/3}}{v_C^{1/3}} \quad (4)$$

Onde $v_C = 9,8703795$.⁽³⁾

Para estados auto-similares à razão λ_N/λ tem que ser independente do tempo, portanto:

$$\frac{d\lambda_N^2}{dt} = \frac{\lambda_N^2}{\lambda^2} \frac{d\lambda^2}{dt} \quad (5)$$

Substituindo a Eq. (5) na Eq. (3) obtemos:

$$\frac{dV^{2/3}}{dt} = \frac{\partial v^{2/3} \frac{\lambda_N^2}{\lambda^2}}{\partial N} \frac{dN}{dt} \lambda^2 + v^{2/3} \frac{\lambda_N^2}{\lambda^2} \frac{d\lambda^2}{dt} \quad (6)$$

Dividindo a Eq. (6) por $d\lambda^2/dt$, definindo $d\lambda^2/dt=1/\eta$ e rearranjando, obtêm-se:

$$U(N) = \frac{dN}{d \ln \lambda^2} = \frac{\frac{dV^{2/3}}{dt} \frac{\eta}{v^{1/3} \frac{\lambda_N}{\lambda}} - v^{1/3} \frac{\lambda_N}{\lambda}}{2 \frac{\partial v^{1/3} \frac{\lambda_N}{\lambda}}{\partial N}} \quad (7)$$

A Eq. (7) desenvolvida é utilizada na função densidade de probabilidade acumulada - $F(N)$ - e na densidade de probabilidade - $f(N)$ - apresentadas por Rios e Glicksman.⁽⁵⁾

$$F(N) = 1 - \exp\left(\int_4^N \frac{3dx}{2U(x)}\right) \quad (8)$$

$$f(N) = \frac{dF(N)}{dN} \quad (9)$$

O ponto ótimo de aplicação da Eq (7) consiste no ponto onde esta função possua raiz e sua derivada seja nula - Eq. (10) e Eq. (11).

$$\frac{dN}{d \ln \lambda^2} = \frac{\frac{dV^{2/3}}{dt} \frac{\eta}{v^{1/3} \frac{\lambda_N}{\lambda}} - v^{1/3} \frac{\lambda_N}{\lambda}}{2 \frac{\partial v^{1/3} \frac{\lambda_N}{\lambda}}{\partial N}} = 0 \quad (10)$$

$$\frac{d\left(\frac{dN}{d \ln \lambda^2}\right)}{dN} = 0 \quad (11)$$

Através das simulações, retiraram-se os seguintes dados: a distribuição de freqüência do número de lados dos grãos (N), a raiz cúbica do volume ($V^{1/3}$) em função de N , a raiz cúbica do volume normalizado ($V^{1/3}/\langle V^{1/3} \rangle$) e também a distribuição de freqüência de $V^{1/3}/\langle V^{1/3} \rangle$ subdividida em intervalos de 0,1 em 0,1.

4 RESULTADOS

Através dos dados simulados determinou-se λ_N/λ como uma função de N .

$$u(N) = \frac{\langle V(N)^{1/3} \rangle}{\langle V^{1/3} \rangle} \quad (12)$$

A figura 1 representa $u(N)$ em função de N . Realizando um ajuste dos pontos da simulação de Monte Carlo obteve-se $u(N)$, definida como uma função parabólica dentro de um intervalo de N . O coeficiente de correlação entre os dados simulados e a função $u(N)$ definida é 0,99838.

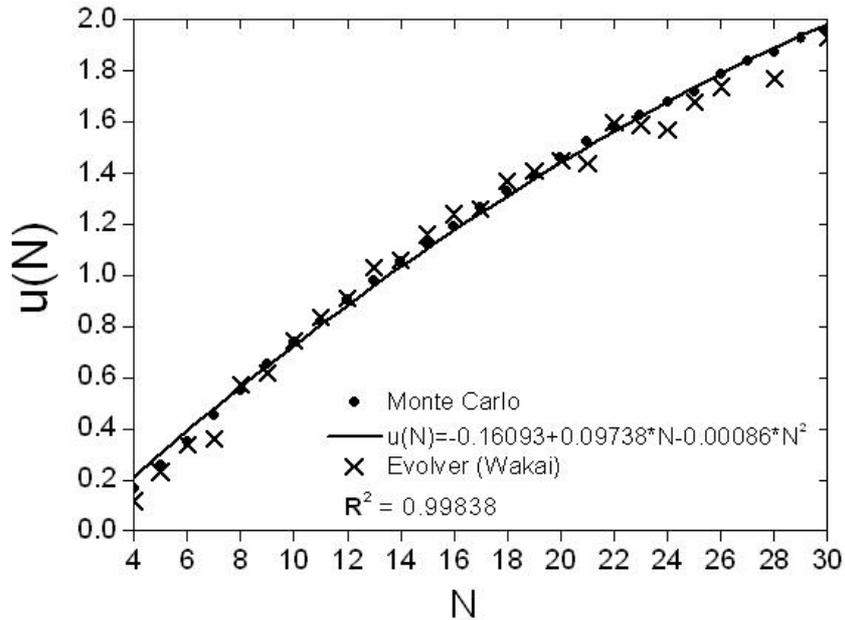


Figura 1. Gráfico da raiz cúbica normalizada do volume.

Para comparação, utilizaram-se na Figura 1 os dados simulados por Wakai.⁽⁶⁾

Dado que⁽³⁾ $\lambda_N = \frac{\langle V(N)^{1/3} \rangle}{v(N)^{1/3}}$ e $\lambda = \frac{\langle V^{1/3} \rangle}{\langle v_C^{1/3} \rangle}$ obtém-se

$$\frac{\lambda_N}{\lambda} = u(N) \frac{v_C^{1/3}}{v(N)^{1/3}} \quad (13)$$

Como $u(N)$ foi definida pelo ajuste dos pontos das simulações e $v(N)^{1/3}$ pode ser encontrada em Rios e Glicksman,⁽³⁾ determinaram-se os pontos que compõem o gráfico de λ_N/λ (figura 2).

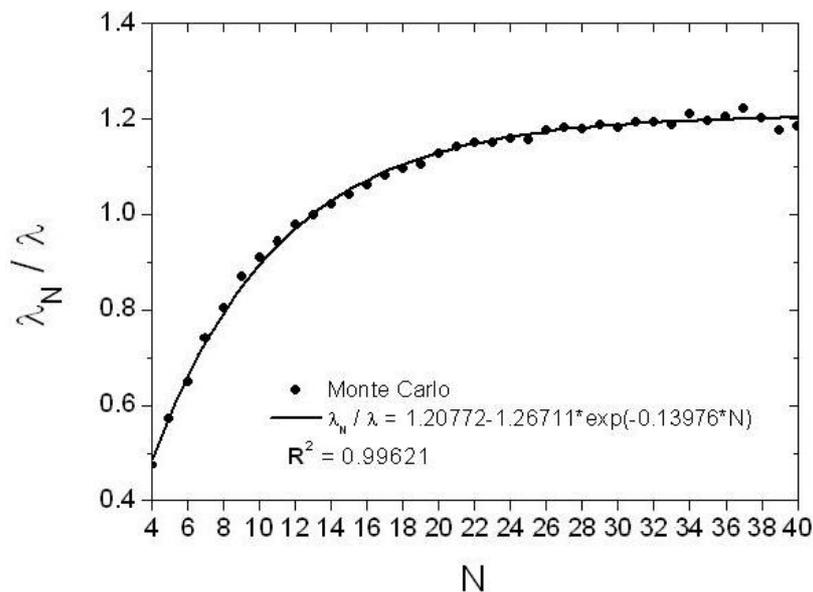


Figura 2. Gráfico para a determinação da função λ_N/λ . Na teoria de Hillert $\lambda_N/\lambda = 1$, para todo o valor de N . O gráfico mostra que tal suposição não é verdadeira embora λ_N/λ fique entre 0.8 e 1.2 para $N > 10$.

Pelo ajuste dos pontos da Figura 2 determinou-se a função λ_N/λ que possibilitou a solução do sistema de equações Eq. (10) e Eq. (11), determinando o valor de N_{max} e o valor de η .

Obtida a função λ_N/λ e o valor de η desenvolveu-se a densidade de probabilidade – Eq. (9) – demonstrada na Figura 3 e a densidade de probabilidade acumulada – Eq. (8) – demonstrada na Figura 4.

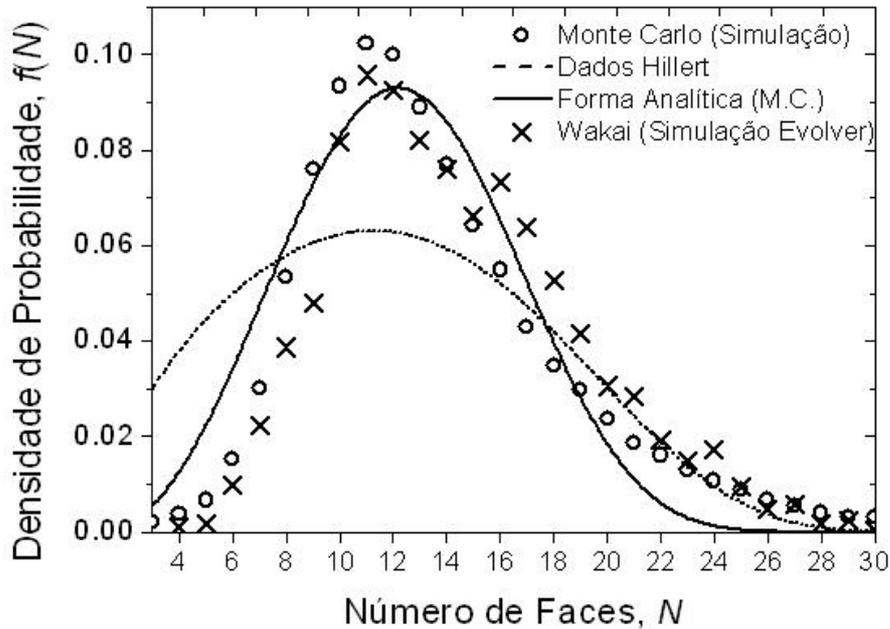


Figura 3. Gráfico da densidade de probabilidade.

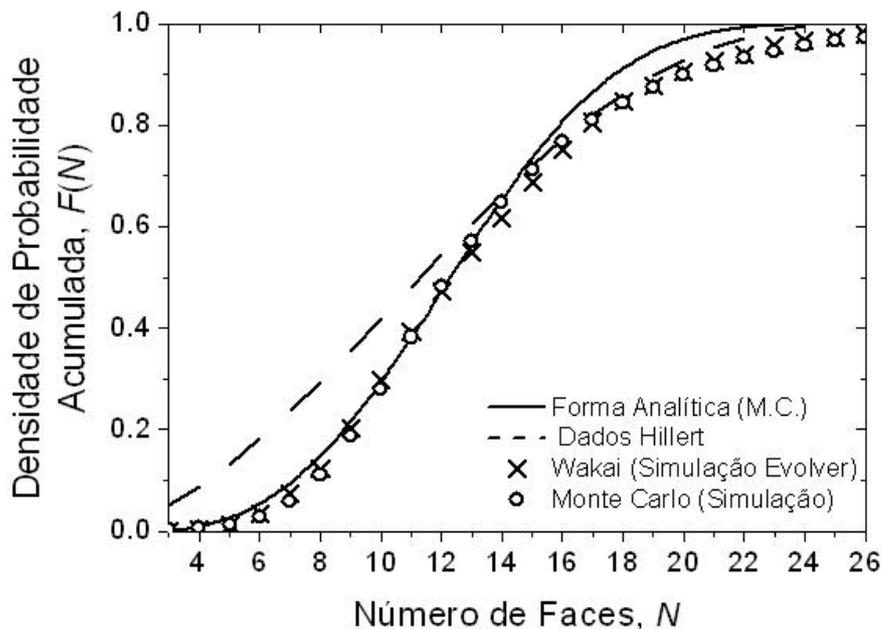


Figura 4. Gráfico da densidade de probabilidade acumulada.

Ao determinar a densidade de probabilidade ($g(u)$) em função de $u(N)$, obtém-se:

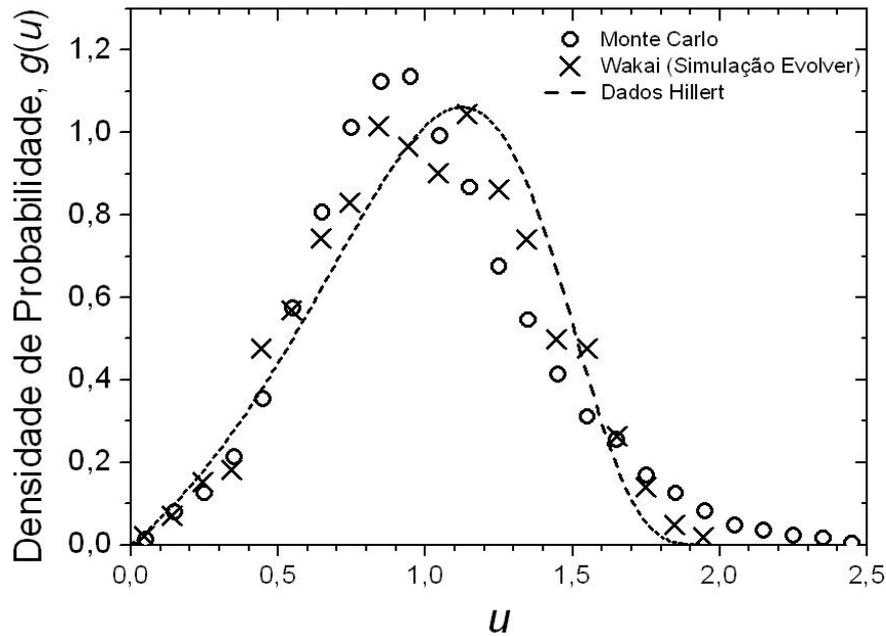


Figura 5. Gráfico da densidade de probabilidade $g(u)$ em função relação a $u(N)$.

5 DISCUSSÃO

A Figura 3 mostra que os valores extraídos da distribuição de freqüência da simulação são melhores descritos pela teoria analítica de Rios e Glicksman⁽⁴⁾ do que pela teoria Hillert.⁽⁷⁾ Os dados simulados por Wakai⁽⁶⁾ são apresentados como referência.

Observando a figura 4 conclui-se que os dados da simulação de Monte Carlo são bastante próximos dos dados obtidos por Wakai.⁽⁶⁾

A figura 5 mostra que nem a curva analítica de Rios e Glicksman nem a teoria de Hillert, concordaram bem com a simulação por Monte Carlo. Rios e Glicksman, não mostrado neste trabalho, obtiveram, no entanto, uma boa concordância da teoria analítica com os resultados de Wakai. Em resumo, a teoria analítica de Rios e Glicksman foi capaz de descrever bem os resultados de Wakai, usando valores de λ_N/λ da simulação de Wakai. Contudo o mesmo procedimento, quando aplicado à simulação de Monte Carlo não forneceu resultados tão bons, embora a teoria de Rios e Glicksman tenha obtidos resultados melhores do que a de Hillert, especialmente na distribuição de número de faces por grão.

A razão pela qual a teoria descreveu bem a simulação de Wakai (Evolver), mas não tão bem a presente simulação (Monte Carlo) não está de todo clara. Uma possibilidade a ser investigada é que os grãos gerados pela simulação de Monte Carlo, não sejam bem representados pelos poliedros simétricos utilizados por Rios e Glicksman. Ao contrário, sabe-se que simulações utilizando Evolver produzem grãos que são geometricamente e cineticamente bem descritos pelos poliedros simétricos empregados por Rios e Glicksman.

6 CONCLUSÕES

Com o desenvolvimento apresentado e os resultados obtidos, pode-se concluir:

- O método de simulação Monte Carlo é bastante eficiente na geração de matrizes que apresentam configurações de uma malha muito semelhante a uma amostra no mundo real.
- Aplicando-se a teoria analítica de Rios e Glicksman na simulação de Monte Carlo obtiveram-se resultados razoavelmente bons, melhores que do que os encontrados por Hillert. Contudo, ao realizar o mesmo desenvolvimento da teoria aplicando os dados da simulação do Evolver obtém-se resultados melhores que os obtidos por Monte Carlo.
- Existe a necessidade de investigação, em trabalhos futuros, se os grãos gerados pela simulação de Monte Carlo não são bem representados pelos poliedros simétricos utilizados por Rios e Glicksman.

Agradecimentos

Este trabalho teve o suporte do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq e a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, FAPERJ.

REFERÊNCIAS

- 1 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.
- 2 SROLOVITZ, D. J.; ANDERSON, M.P.; GREY, G.S.; SAHNI, P.S. Grain growth in two dimensions. Scripta Metallurgica, Vol. 17, pp. 241-246, 1983.
- 3 RIOS, P.R.; GLICKSMAN M.E. Modeling Polycrystals with Regular Polyhedra. Materials Research, Vol. 9, No 2, pp. 231-239, 2006.
- 4 Rios PR, Glicksman ME, Polyhedral model for self-similar grain growth, Acta Mater (2007), doi:10.1016/j.actamat.2007.11.010
- 5 RIOS, P.R.; GLICKSMAN M.E. Topological and metrical analysis of normal grain growth in three dimensions. Acta Materialia 55 (2007) 1565-1571.
- 6 WAKAI, FUMIHIRO ; ENOMOTO, NAOYA ; OGAWA, HIROSHI. Three-dimensional microstructural evolution in ideal grain growth – general statistics. Acta Materialia 48 (2000) 1297-1311.
- 7 HILLERT, M. On the theory of normal and abnormal grain growth. Acta Metallurgica, Vol 13 - 1965.