

DESENVOLVIMENTO DE CÓDIGO PARA A SIMULAÇÃO DO CRESCIMENTO DE GRÃO PELO MÉTODO DE MONTE CARLO 3-D¹

Augusto César Lacerda de Oliveira^{2,3}
Paulo Rangel Rios³

Resumo

A simulação computacional de processos é uma realidade nos dias atuais e muitas empresas recorrem a simulações computacionais para a melhoria da qualidade de seus produtos. Contudo, a simulação de fenômenos, como é o caso da simulação da recristalização primária e do crescimento normal de grão, vem sendo empregada de maneira um tanto quanto modesta, contudo, isso não significa dizer que as tentativas de utilização destes métodos não tenham sido iniciadas. O presente trabalho descreve o desenvolvimento de um código de Monte Carlo para a simulação do Crescimento Normal e Isotrópico de grão 3-D. Os resultados demonstram que a simulação é capaz de gerar microestruturas similares às encontradas nos materiais policristalinos após um recozimento e que a cinética obedece à lei parabólica do crescimento de grão.

Palavras-chave: Simulação; Crescimento de grão; Monte Carlo.

SOURCE CODE DEVELOPMENT TO THE 3-D GRAIN GROWTH SIMULATION BY MONTE CARLO METHOD

Abstract

The processes computational simulation is a reality nowadays and several companies use computational simulations to improve the quality of its products. On the other hand, the application of phenomenon simulations, as primary recrystallization and normal grain growth, has been modest; however, it does not mean that attempts to use these methods do not have begun in this area. The present work describes the development of a Monte Carlo source code to simulate the 3-D normal grain growth. The results demonstrate that the simulation is able to generate microstructures similar to those found in polycrystalline materials after annealing and that the kinetics obeys the grain growth parabolic law.

Key words: Simulation; Grain growth, Monte Carlo.

¹ Contribuição técnica apresentada na 61º Congresso Anual da ABM, de 24 a 27 de julho de 2006, Rio de Janeiro – RJ

² Centro de Pesquisas da CSN, Companhia Siderúrgica Nacional, Rua 4, nº 33, Bairro Conforto, CEP 27269-900, Volta Redonda, RJ augusto.oliveira@csn.com.br

³ Programa de pós-graduação em Engenharia Metalúrgica – Escola de Engenharia Industrial metalúrgica de Volta Redonda – Universidade Federal Fluminense, Av. dos Trabalhadores 420, Vila Santa Cecília, CEP 27255-125, Volta Redonda, RJ

1 INTRODUÇÃO

O fenômeno do crescimento de grão pode ser conceituado como o aumento uniforme no tamanho de grão após o término da recristalização primária, quando um policristal é submetido a um recozimento.⁽¹⁾ O crescimento de grão, apesar de permitir uma definição breve, é muito complexo quando se deseja realizar uma abordagem sistemática da cinética do fenômeno, que envolve grandes transformações na rede de contornos de grão durante o recozimento de um policristal.⁽¹⁾ O objetivo deste trabalho é descrever a fase de desenvolvimento do código de Monte Carlo que foi empregado para o modelamento do crescimento de grão 3-D. A revisão dos conceitos fundamentais do fenômeno em questão foge ao escopo deste trabalho, contudo, mais informações podem obtidas em uma recente revisão realiza por de Oliveira.⁽²⁾

Atualmente, os modelos para a simulação do crescimento de grão são divididos em modelos analíticos e computacionais. Dentre os modelos computacionais, existe a divisão entre os modelos contínuos e os discretos.

Neste trabalho, é descrita toda a metodologia para o desenvolvimento de um código computacional para a simulação do crescimento de grão 3-D por um modelo computacional discreto, o método de Monte Carlo.

2 DESENVOLVIMENTO DO CÓDIGO DE MONTE CARLO

Para o desenvolvimento do código de Monte Carlo é necessária a utilização de uma linguagem de programação de computadores. Neste ponto, pode-se optar pela linguagem Fortran ou, até mesmo, a linguagem C. A opção dependerá de escolha pessoal e não possui nenhum efeito sobre o método de Monte Carlo.

A partida para qualquer código de computador que se destine à simulação de fenômenos em Engenharia dos Materiais, por meio de um espaço discretizado, como é o caso do método de Monte Carlo, se dá pela definição do sistema inicial.⁽²⁾

2.1 Definição do Sistema Inicial

O sistema inicial consiste do sistema propriamente dito em que ocorrerá a simulação computacional e, ainda, das configurações de orientações cristalográficas de cada posição do reticulado discreto. O primeiro requisito para a definição do sistema é o tamanho do mesmo, assim, como se deseja realizar uma simulação em um reticulado discreto 3-D, define-se a geometria que corresponderá ao sistema. O cubo representa a geometria em que ocorrerá a simulação, assim, para a determinação do sistema, define-se somente a aresta do cubo que o contém. Outras geometrias também são possíveis, contudo, seriam responsáveis somente pelo aumento de complexidade geométrica para o modelamento do crescimento de grão. Em um sistema cúbico de aresta a igual a 10, por exemplo, teríamos um volume total de 1000 unidades de volume. As 1000 unidades de volume, quando unidas, descrevem o reticulado discreto da simulação. De posse do sistema da simulação, para o método de Monte Carlo, deve-se definir o estado inicial do sistema, ou seja, para cada uma das 1000 unidades de volume é preciso definir a sua orientação cristalográfica. Neste caso, orientação cristalográfica possui a mesma definição para os policristais e, inclusive, os mesmos significados para a simulação do crescimento de grão (i.e., o crescimento de grão se dá por mudanças de orientações cristalográficas). Contudo, ao contrário do policristal, a orientação cristalográfica na

simulação computacional não é definida pela rotação da rede cristalina, mas sim, é definida por um número inteiro que faz alusão a esta rotação.

O método de Monte Carlo, geralmente, utiliza matrizes aleatórias de orientações cristalográficas para iniciar a simulação do crescimento de grão, ou seja, cada uma das 1000 unidades de volume são definidas com um número aleatório de 1 até 1000, sem repetição. O conceito atrás da palavra repetição é devido ao fato de que, na simulação de Monte Carlo, não pode haver coalescimento artificial de orientações cristalográficas. Por exemplo, se existem dentre as 1000 unidades de volume duas orientações definidas como 5, existe a probabilidade de ocorrer, em algum momento da simulação, o encontro das duas orientações 5. Este encontro prejudica o andamento da simulação, pois, além de reduzir um grão do sistema artificialmente, as rotinas que analisam os resultados obtidos para cada passo da simulação podem retornar valores errôneos. Desta forma, segundo diversos autores,^(3,4) a melhor prática é a utilização das matrizes aleatórias. Outras formas de definição do sistema inicial também podem ser utilizadas, contudo, são mais complexas, pois requerem outros métodos de simulação que trabalham em conjunto com o método de Monte Carlo, como é o caso dos polígonos de Voronoi e o método dos Autômatos Celulares.⁽²⁾

2.2 Início da Simulação de Monte Carlo

De posse do sistema inicial, inicia-se a simulação do método de Monte Carlo realmente. Mais uma vez, foge ao escopo deste trabalho um detalhamento minucioso de todos os passos para os cálculos de energia e equações utilizadas para a simulação do crescimento de grão pelo método de Monte Carlo. O detalhamento completo das equações de energia pode ser obtido em de Oliveira.⁽²⁾

O método de Monte Carlo inicia escolhendo uma das 1000 unidades de volume do reticulado discreto, aleatoriamente. Após esta escolha, pela definição de três coordenadas de 1 até 10, o método calcula a energia inicial do sistema, aplicando as equações de energia.⁽²⁾ Assim, de posse desta energia inicial, o sistema tenta alterar a orientação cristalográfica da unidade de volume sorteada, pela troca de sua orientação pela orientação de uma das 26 unidades de volume vizinhas, também de forma aleatória. As 26 orientações vizinhas são distribuídas em 6 primeiras, 12 segundas e 8 terceiras unidades de volume, conforme mostra a Figura 1.

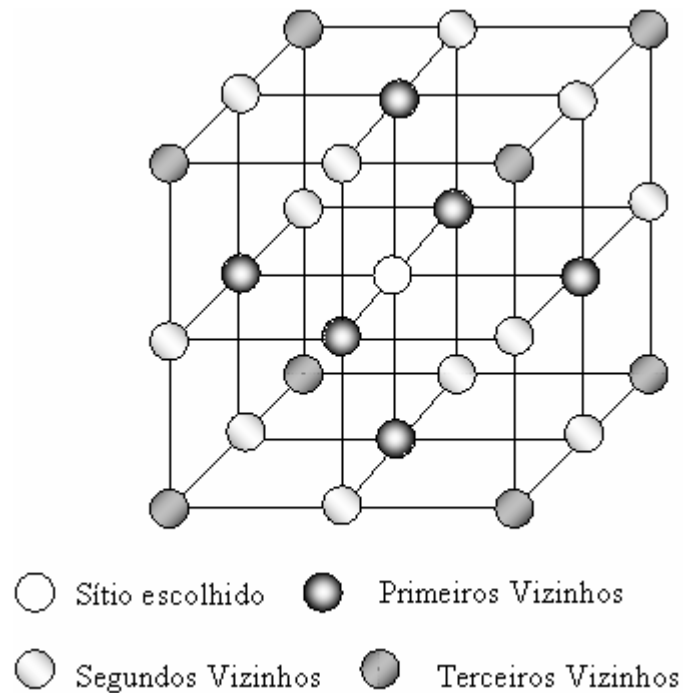


Figura 1. Definição das 6 primeiras, 12 segundas e 8 terceiras unidades de volume vizinhas à unidade de volume sorteada.⁽²⁾

Após esta definição de vizinhos o método calcula a energia final devido à troca de orientação cristalográfica do volume sorteado, assim, após esta etapa, é possível realizar o cálculo da variação da energia livre devido à tentativa de troca de reorientação. Desta forma, muitas unidades de volume são progressivamente definidas com uma mesma orientação cristalográfica. Neste ponto, pode-se conceituar grão na simulação computacional como um conjunto de unidades de volume de mesma orientação cristalográfica e contíguas.

A simulação computacional para o crescimento de grão apresenta a dificuldade da impossibilidade da definição de um sistema infinito, contudo, tal limitação pode ser contornada pela adoção da metodologia da condição de contorno periódica, que define que as unidades de volume externas (i.e., as unidades localizadas nas faces do cubo e vértices) possuam unidades vizinhas opostas a estas no lado oposto do cubo. Mais detalhes podem ser encontrados em de Oliveira.⁽²⁾

2.3 Análises Metalográficas do Sistema

A atuação do método de Monte Carlo termina neste ponto, após esta etapa, iniciam-se as rotinas de metalografia ou análise do sistema. Estas rotinas permitem obter, a partir do sistema cúbico computacional, os valores de número de grãos, tamanho de cada grão que compõe o sistema, tamanho médio de grão, número de lados de cada grão, número de médio de lados e outras variáveis que se deseje obter. A obtenção de variáveis que definem a cinética de crescimento de grão podem ser obtidas diretamente da microestrutura 3-D computacional, a dificuldade neste caso, ao contrário dos materiais policristalinos, não é a reconstrução da rede de contornos de grão 3-D, mas sim, esta reside na complexidade das rotinas que devem ser implementadas para cada variável de interesse. Na próxima seção serão descritos os resultados obtidos pela simulação do crescimento de grão pelo método de Monte

Carlo, com as principais variáveis de interesse que descrevem a cinética do crescimento normal e isotrópico de grão.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados descritos a seguir foram obtidos a partir de simulações realizadas com o método de Monte Carlo, em uma distribuição isotrópica de energias interfaciais, sistema cúbico de tamanho 300x300x300 e 1000 passos de Monte Carlo.

3.1 Evolução Microestrutural

Da mesma forma que nos materiais reais, no método de MC, também se observa que a evolução microestrutural se dá pelo aumento de alguns grãos do agregado em conjunto com o desaparecimento de outros. Os volumes iniciais dos grãos são alterados devido à migração de contornos de grão. Assim, de maneira a manter um compromisso de ausência de vazios e a constância de volume, alguns grãos crescem e outros encolhem. Como pode-se observar nas Figuras 2a e 2b, o método de Monte Carlo nos conduz a uma microestrutura similar àquelas que encontramos nos materiais reais.

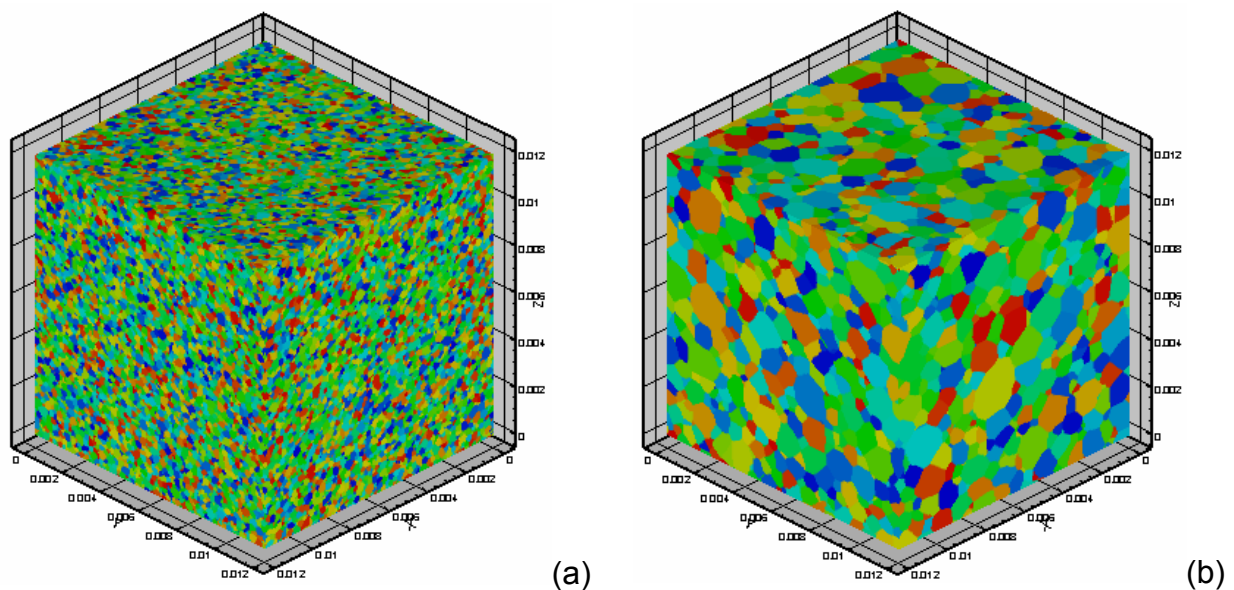


Figura 2. Evolução microestrutural 3-D para os tempos de 50 (a) e 1000 (b) passos de Monte Carlo.

3.2 Expoente de Crescimento de Grão - n

A Figura 3 mostra o comportamento do tamanho médio de grão versus o tempo da simulação para o crescimento de grão 3-D. Os expoentes de crescimento de grão n obtidos dos ajustes destes gráficos assumem que o tamanho de grão médio inicial é desprezível para grandes tempos da simulação, como ocorre neste caso.

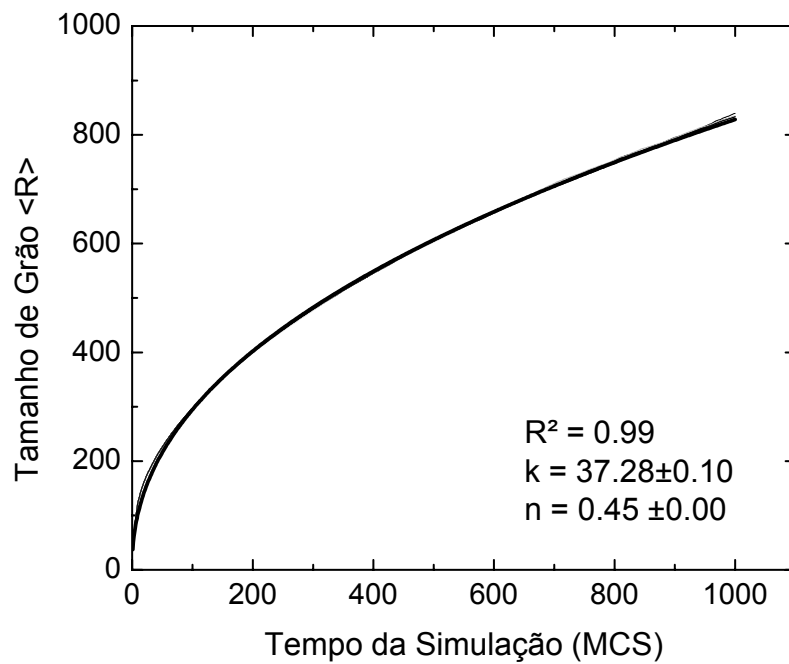


Figura 3. Cinética do crescimento de grão para a simulação de Monte Carlo.

O valor do expoente do crescimento de grão n foi de $\sim 0,45$, concordando com os resultados obtidos por outros autores^(3,4) e outros métodos de simulação do crescimento de grão.^(5,6)

4 CONCLUSÕES

Baseado nos resultados obtidos pelas simulações realizadas pode-se concluir que:

- As premissas assumidas para o desenvolvimento do código são coerentes, visto que este simula o crescimento de grão de forma satisfatória.
- O código gera microestruturas similares às encontradas nos materiais policristalinos após recozimento.
- O valor do expoente de crescimento de grão n concorda com os resultados obtidos por outros autores e outros métodos de simulação.

Agradecimentos

ACL de Oliveira agradece à CAPES, pela bolsa de mestrado. PR Rios agradece aos apoios do CNPq e da FAPERJ.

REFERÊNCIAS

- 1 RIOS, P.R.. Crescimento de grão e recristalização secundária. Texturas e relações de orientação 2 (2003) 85-106.
- 2 de OLIVEIRA, A.C.L.. Simulação do Crescimento Normal e Isotrópico de grão em 3-D por meio do método de Monte Carlo. Volta Redonda 2004. Dissertação de Mestrado - Universidade Federal Fluminense / UFF/EEIMVR.
- 3 RADHAKRISNAN, B.; ZACHARIA, T.. Simulation of Curvature-Driven Grain Growth by using a Modified Monte Carlo Algorithm. Metallurgical and Materials Transactions A, vol. 26A, 1995. 167-1890 p.
- 4 HOLM, E.A.. Modeling Microstructural Evolution in single-phase, composite and two-phase polycrystals. The University of Michigan, 1992. Ph.D. Thesis. 15-21 p.
- 5 KAWASAKI, K.; NAGAI, T.; NAKASHIMA, K.. Vertex models for two-dimensional grain growth. Philosophical Magazine B, vol. 60, 1989. 399-421 p.
- 6 KRILL III, C.E.; CHEN, L.-Q.. Computer Simulation of 3-D grain growth using a phase-field model. Acta Materialia, 50, 2002. 3057-3073 p.