

MODELAMENTO DO CRESCIMENTO ANORMAL DE GRÃO USANDO O MÉTODO DE MONTE CARLO¹

Celso Luiz Moraes Alves²
Paulo Rangel Rios³
Wesley Luiz da Silva Assis⁴

Resumo

Desenvolveu-se um modelo computacional usando o Método de Monte Carlo para simular o crescimento anormal de grão em uma matriz ancorada, ou seja, onde há somente o crescimento do grão anormal na matriz. Esse modelo foi usado para verificar a atual proposta de crescimento anormal de grão que foi inicialmente explorada por Rios e Glicksman. Essa proposta de crescimento anormal de grão se baseia na teoria dos "average N-hedra" (ANHs) e propõem que o crescimento anormal de grão aconteça com o grão anormal ganhando faces ao longo do seu crescimento. Comparando os resultados do modelo desenvolvido nesse trabalho com a teoria proposta por Rios e Glicksman, observou-se que os resultados do modelo mostraram-se em concordância com tais teorias propostas. Sendo assim, concluiu-se que, de fato, a proposta Rios e Glicksman é válida para os casos de crescimento anormal de grão em matriz ancorada, pois o grão anormal do modelo ganhou número de lados à medida que sua fração volumétrica aumentava.

Palavras-chave: Crescimento grão; Crescimento anormal; Monte Carlo.

MODELING OF ABNORMAL GRAIN GROWTH USING THE MONTE CARLO METHOD

Abstract

A computational model using Monte Carlo Method was developed in order to simulate the abnormal grain growth in a pinned matrix in which, only, the abnormal grain growth occurs in matrix. This model was used to check the actual proposal of abnormal grain growth in which was initially explored by Rios and Glicksman. This proposal of abnormal grain growth is based on the "average N-hedra" (ANHs) theory and it proposes that the abnormal grain growth happens with the abnormal grain gains faces during its growth. To comparing the model results which was developed in this work with the theory proposed by Rios and Glicksman, it was observed that the model results were in concordance with this theory proposal. Thus, it was concluded that the Rios and Glicksman's proposal for abnormal grain growth is truthful in a pinned matrix because the abnormal grain in the model gained number of faces as its volume fraction increased.

Key words: Grain growth; Abnormal grain growth; Monte Carlo.

¹ Contribuição técnica ao 67º Congresso ABM - Internacional, 31 de julho a 3 de agosto de 2012, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

² Eng. Metalúrgico, Mestrando em Eng. Metalúrgica, Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda (EEIMVR), Universidade Federal Fluminense (UFF), Brasil; clmalves@yahoo.com.br.

³ Prof. PhD em Eng. Metalúrgica, Prof. Titular pós-graduação em Eng. Metalúrgica, UFF, Brasil.

⁴ Eng. Químico, Mestre e Dr. em Eng. Metalúrgica, EEIMVR, UFF, Brasil.

1 INTRODUÇÃO

Quando a recristalização primária se completa, o sistema não está completamente em seu estado de equilíbrio energético, pois, ainda há energia livre associada às interfaces ou contornos de grão. Esta energia livre interfacial decresce à medida que ocorre o crescimento de grão. No chamado crescimento normal de grão, todos os contornos de grão movimentam-se livremente a fim de minimizar a energia e atingir o equilíbrio. Nesse processo, observa-se que a distribuição de tamanho de grão permanece uniforme.⁽¹⁾

Depois do crescimento normal de grão, surge outro fenômeno chamado de crescimento anormal de grão ou recristalização secundária.⁽²⁾ Nesse processo observa-se que alguns grãos maiores passam a ter taxas de crescimento mais elevadas que os grãos menores, sendo, portanto, os controladores ou dominantes no processo de crescimento de grão.⁽¹⁾ Esses grãos maiores, à medida que crescem, passam a ter volume muito maior do que os demais grãos da matriz.

A Figura 1⁽³⁾ mostra uma micrografia na qual há a presença de um grão que teve crescimento anormal, possuindo, portanto, um volume muito maior que os demais grãos.

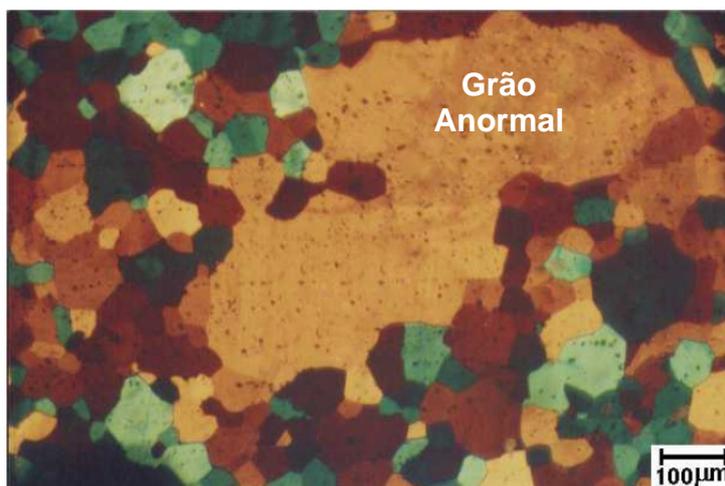


Figura 1. Microestrutura com presença de grão anormal.⁽³⁾

Uma usual aproximação feita no estudo da cinética de crescimento anormal de grão é considerar o tamanho dos grãos através do “raio do grão”. Assim, sendo R_A o raio do grão anormal e R_M o raio médio dos grãos da matriz, o crescimento anormal de grão pode ser expresso pela Equação 1.

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{R_A}{R_M} \right) > 0 \quad (1)$$

Embora a Equação 1 expresse bem a ideia do crescimento anormal de grão, esta equação por levar em consideração o tamanho de grão como “raio do grão”, a mesma, então, desconsidera aspectos topológicos importantes, como por exemplo curvatura, número de faces etc.

A fim de abordar detalhadamente o crescimento anormal de grão considerando os aspectos topológicos, Rios e Glicksman⁽¹⁾ propõem uma nova teoria para o crescimento anormal baseada na teoria dos “average-N-hedra” ou “ANHs”, na qual os grãos são tratados como poliedros simétricos de faces curvas.^(1,3,4)

A Figura 2 apresenta alguns poliedros de faces curvas da teoria dos ANHs.⁽¹⁾

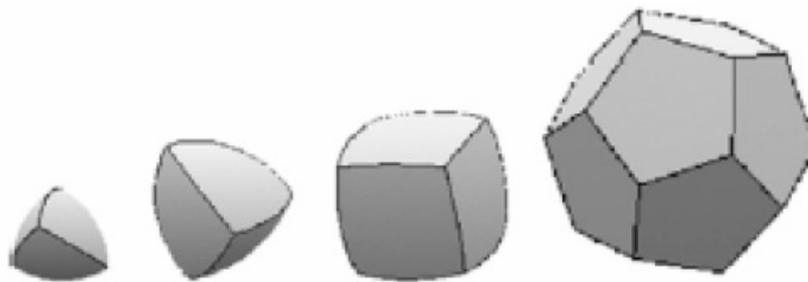


Figura 2. Construção de quatro ANHs com distância vértice-vértice igual à unidade. Da esquerda para a direita, o número de faces (N) é igual a 3, 4, 6 e 12, respectivamente.⁽¹⁾

A fim de explorar e checar a concordância dos resultados de simulações computacionais com a teoria proposta por Rios e Glicksman⁽¹⁾, nesse trabalho serão estudados o crescimento anormal de grão usando o Método de Monte Carlo,^(5,6) visto que esse método permite o estudo dos aspectos topológicos presentes na teoria dos ANHs.^(1,4,5,7)

A Figura 3 apresenta um exemplo de microestrutura gerada com resultados obtidos pelo Método de Monte Carlo. Observa-se que a mesma muito se assemelha com as microestruturas reais.

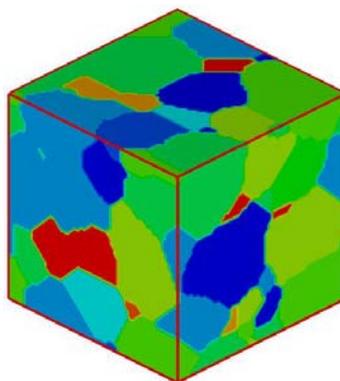


Figura 3. Microestrutura gerada pelos resultados obtidos no modelo de Monte Carlo.

Nesse trabalho, são abordados resultados do crescimento anormal de grão em matriz ancorada, ou seja, onde há o crescimento somente do grão anormal. Fisicamente, isso ocorre quando a mobilidade das interfaces dos grãos da matriz metálica são impedidas pela presença de partículas dispersas na interior da matriz. Essa dispersão de particulados permitiria o ancoramento das interfaces e as mesmas perderiam a mobilidade. Portanto, não aconteceria o crescimento de grão.

2 MATERIAL E MÉTODOS

2.1 Critério Topológico para o Crescimento Anormal de Grão

A teoria ANHs descreve que os grãos podem ser representados como poliedros regulares de faces curvas. Portanto, esses poliedros tem uma curvatura nas interfaces, podendo ser classificados como côncavos ou convexos de acordo com o seu número de faces.^(1,2)

A Equação 2 apresenta a função que descreve a curvatura, H , das faces. Esta equação é função de dois fatores principais: número de faces do poliedro, N , e fator de escala métrico, λ (caracterizado pela distância vértice-vértice no poliedro).

$$H = \frac{2}{\lambda} \operatorname{sen} \left(\frac{\pi}{6} - \frac{\alpha}{2} \right) \left[\left(\cot \frac{\omega}{2} \operatorname{sen} \frac{\alpha}{2} - \operatorname{csc} \frac{\omega}{2} \operatorname{sen} \frac{\alpha}{2} - \cot \frac{\pi}{p} \right) \right]^{-1} \quad (2)$$

$$p = 6 - \frac{12}{N} \quad (3)$$

$$\alpha = 4 \arctan \sqrt{1 - 2 \sec \left(\frac{\pi}{2(N-2)} \right) \cos \left(\frac{\pi(2N-3)}{6(N-2)} \right)} \quad (4)$$

$$\omega = \pi + 2 \arctan \left(\operatorname{sen} \frac{\alpha}{2} \tan \frac{\pi}{p} \right) - 2 \arccos \left(-\frac{1}{3} \right) \quad (5)$$

Rios e Glicksman⁽¹⁾ defendem que poliedros com $N \leq 13$ têm faces convexas e tendem a desaparecer e poliedros com $N \geq 14$ têm faces côncavas e tendem a crescer. Portanto, o poliedro crítico (N_C) será definido para $N_C = 13,397332571$.⁽¹⁾ Esse poliedro apresenta $H = 0$. O poliedro crítico (N_C) também é chamado de ANH crítico.⁽¹⁾

Dessas considerações acima, pode-se admitir que em uma matriz ancorada, na qual permita somente o crescimento do grão anormal, uma aproximação razoável é admitir que a matriz de grãos normais possa ser aproximada do ANH crítico. Assim, o número médio de interfaces dos grãos, N_M , é igual à N_C . Assim, como resultado, a área média superficial (A_M) será igual à área do ANH crítico (A_C) e, por fim, o volume médio (V_M) igual ao volume médio do ANH crítico (V_C). Portanto, a relação de volume do grão anormal (V_A) com o volume médio dos grãos da matriz, V_M , pode ser definido segundo a Equação 6.

$$\frac{V_A}{V_M} = \frac{V_A}{V_C} \quad (6)$$

Outra consideração razoável que é levada em conta durante o crescimento anormal é o fato de que a distância vértice-vértice (λ) dos poliedros é aproximadamente constante e igual ao a distância vértice-vértice média dos grãos da matriz.

Assim, quando se considera a cinética de crescimento do grão a de uma esfera tem-se a Equação 7.

$$\left(\frac{V_A}{V_M} \right)^{1/3} \approx \frac{R_A}{R_M} \quad (7)$$

Rios e Glicksman⁽¹⁾ defendem que pela teoria dos ANHs, $V^{1/3} \propto N^{1/2} \lambda$. Portanto, conclui-se os resultados apresentados na Equação 8.

$$\frac{d(R_A/R_C)}{dt} = \frac{d(V_A/V_C)^{1/3}}{dt} = \frac{d(N_A/N_C)^{1/2}}{dt} \quad (8)$$

Portanto, evidencia-se que das considerações anteriores e em comparação com a Equação 1 que, topologicamente, o crescimento do grão anormal ocorre com o aumento do número de faces do grão anormal na matriz. Assim, a Equação 9 expressa quantitativamente esse fato.

$$\frac{dN_A}{dt} > 0 \quad (8)$$

2.2 Método de Monte Carlo

O Método de Monte Carlo aplicado ao crescimento de grão anormal em 3D é modelado gerando inicialmente uma malha cúbica (matriz) de 100 x 100 x 100,

totalizando 1.000.000 de pontos. Cada ponto ou sítio dessa malha recebe um número aleatório de 1 até 1.000.000, e este é definido com a orientação do grão. Lembrando-se que cada sítio, visa demonstrar o comportamento real dos átomos durante o crescimento de grão.

O algoritmo executa passos repetitivos onde é sorteado um sítio compreendido na malha e faz-se então uma análise das orientações dos seus 26 vizinhos mais próximos em 3D.

Nesse ponto do processo é averiguada a possibilidade de mudança de orientação, visto que o crescimento de determinados grão se dão à custa de outros. A verificação de possibilidade de mudança é feita da seguinte forma: a cada um dos vinte e seis vizinhos mais próximos do sítio escolhido é dada uma unidade de energia, em seguida, realiza-se a contagem dos vizinhos de orientações diferentes a do sítio central. Depois de contabilizado a quantidade de orientações diferentes, sorteia-se um dentre os vinte e seis vizinhos mais próximos e substitui a orientação do sítio central por esta sorteada. Faz-se novamente a contagem de vizinhos mais próximos com orientações diferentes do vizinho central (lembrando que este agora possui uma nova orientação). Terminada a contagem, analisa-se a variação de energia do processo, lembrando que a quantidade de orientações diferentes em cada contagem representa a energia livre. A Figura 4 apresenta um diagrama do cálculo de variação de energia.

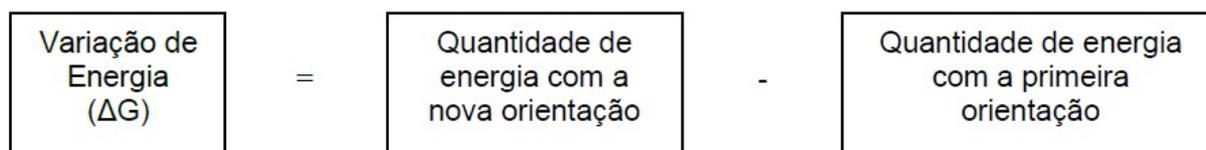


Figura 4. Balanço de energia do modelo de Monte Carlo.

A Figura 5 demonstra o crescimento em 2D a fim de facilitar o entendimento do método.

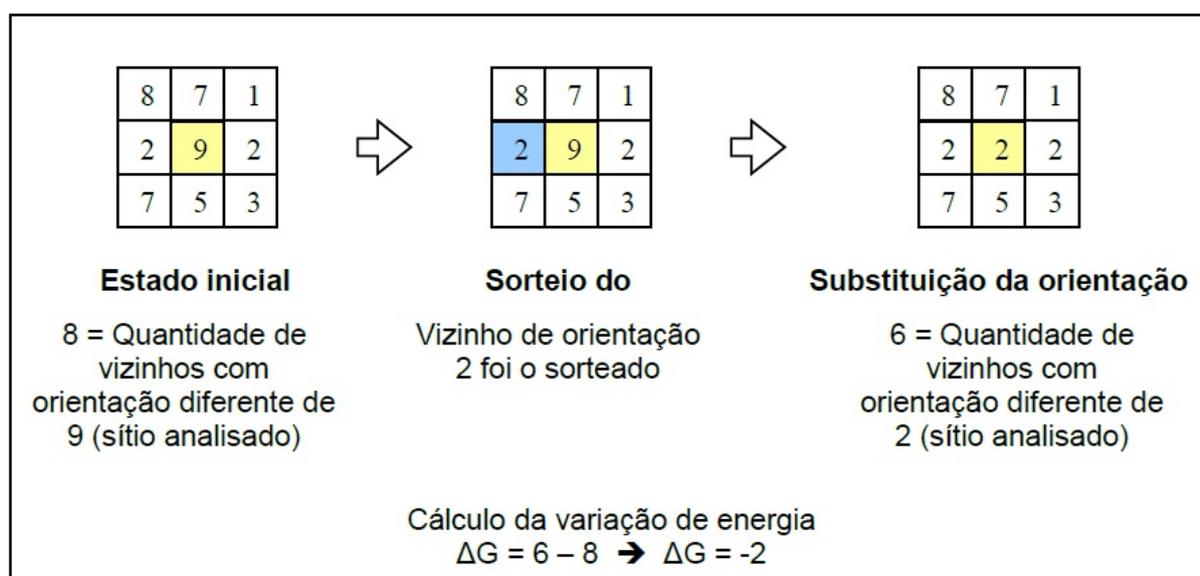


Figura 5. Método de Monte Carlo em 2D.

Calculada a variação de energia (ΔG), realiza-se a mudança ou não pela nova orientação sugerida. Da Termodinâmica tem-se que o sistema tende a reduzir sua energia. Portanto pode-se dizer se ocorrerá ou não a substituição de orientação de

acordo com o sinal de ΔG . Se $\Delta G > 0$ não há alteração de orientação, permanecendo a original e não ocorrendo o crescimento de grão naquele sítio. Se $\Delta G = 0$ há uma probabilidade de alterar a orientação e se $\Delta G < 0$ altera-se para a nova orientação acontecendo o crescimento de grão. Analisando o exemplo citado na Figura 4 observa-se que o grão de orientação 2 cresceu, tomando o grão de orientação 9, pois ocorreu uma minimização da energia total do sistema.

2.3 Método de Monte Carlo no Crescimento Anormal de Grão

Considerando a metodologia proposta para o crescimento de grão acima apresentada, fizeram-se alterações no modelo para simular o crescimento anormal de grão.

No modelo do grão anormal considerou-se inicialmente o crescimento normal de até determinado tempo de simulação definido como dado de entrada. A partir desse tempo, definiu-se um grão que daria origem ao grão anormal. Fez-se, portanto, o crescimento somente desse grão e estudou-se o aspecto topológico discutido acima. Durante a simulação do crescimento do grão anormal, os demais grãos não cresciam, para garantir a ideia do ancoramento da matriz, já discutida anteriormente. Portanto, para simular o crescimento anormal de grão, o modelo de Monte Carlo iniciava-se com crescimento normal de grão até o Tempo de Monte Carlo (TMC) igual a 50. Nesse momento, fazia-se um mapeamento da distribuição de lados dos grãos e identificava o grão com maior número de lados na matriz. Identificado o grão com maior número de lados, este era escolhido como o grão que teria o crescimento anormal.

A partir do TMC=50 ocorria o crescimento somente do grão anormal, através dos sorteios de Monte Carlo somente nas interfaces do grão anormal.

Dados de distribuição de lados, número de faces do grão anormal e fração volumétrica do grão anormal foram estudados a partir do TMC=50.

3 RESULTADOS

Seguem os resultados das simulações propostas nesse trabalho. Todos os resultados foram obtidos para o caso de matrizes ancoradas, na qual houve somente o crescimento do grão anormal a partir de TMC=50. As matrizes tem característica de contornos periódicos durante toda a simulação.

A Figura 6 apresenta a evolução microestrutural do grão anormal em uma matriz de 100 x 100 x 100, nos TMC iguais a 50, 75 e 150, respectivamente.

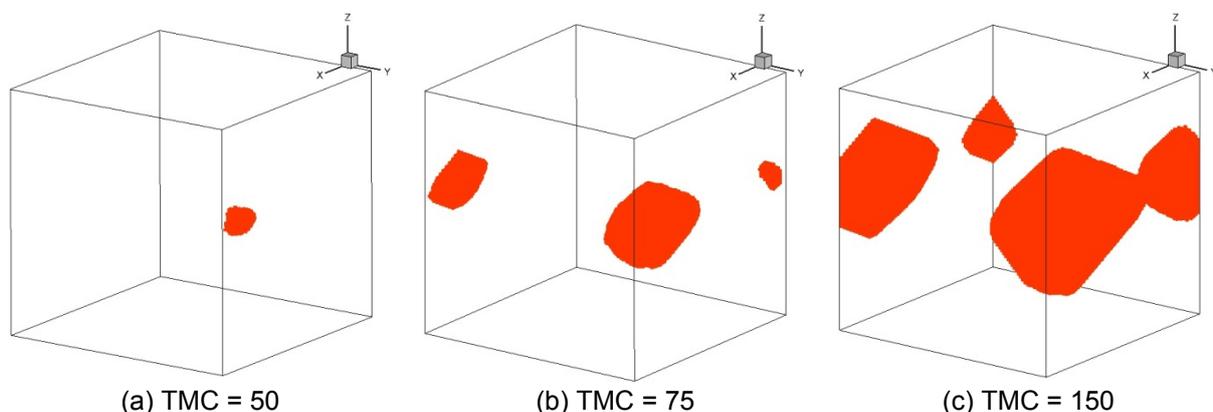


Figura 6. Evolução microestrutural do grão anormal na matriz de simulação para (a) TMC = 50, (b) TMC = 75 e (c) TMC = 150.

A Figura 7 apresenta o resultado da simulação do número de faces do grão anormal versus TMC.

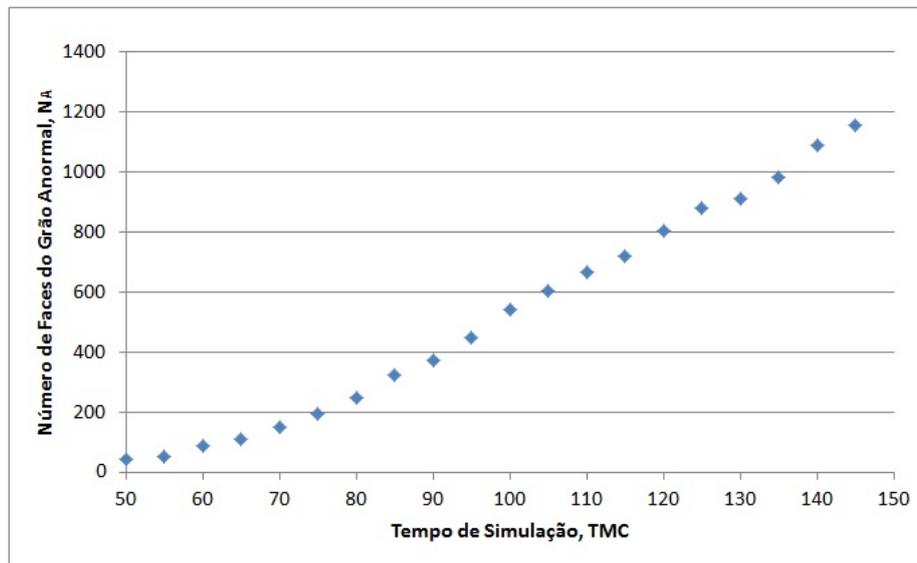


Figura 7. Número de faces do grão anormal versus TMC.

A Figura 8 mostra a evolução da fração volumétrica, V_V , do grão anormal ao longo da simulação.

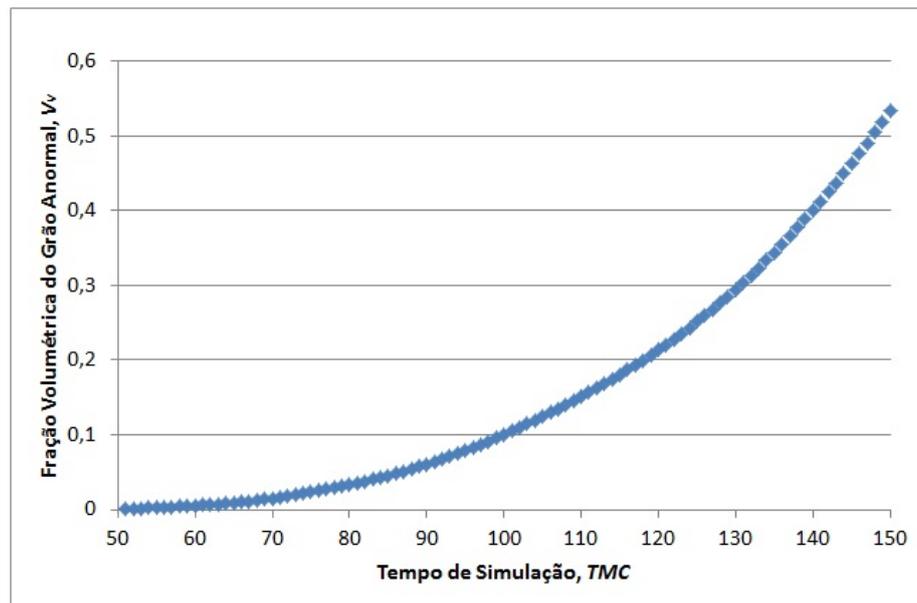


Figura 8. Fração volumétrica do grão anormal ao longo do tempo de simulação.

A Figura 9 traz um comparativo de resultados da distribuição do número de lados dos grãos da matriz ao longo da simulação do crescimento do grão anormal.

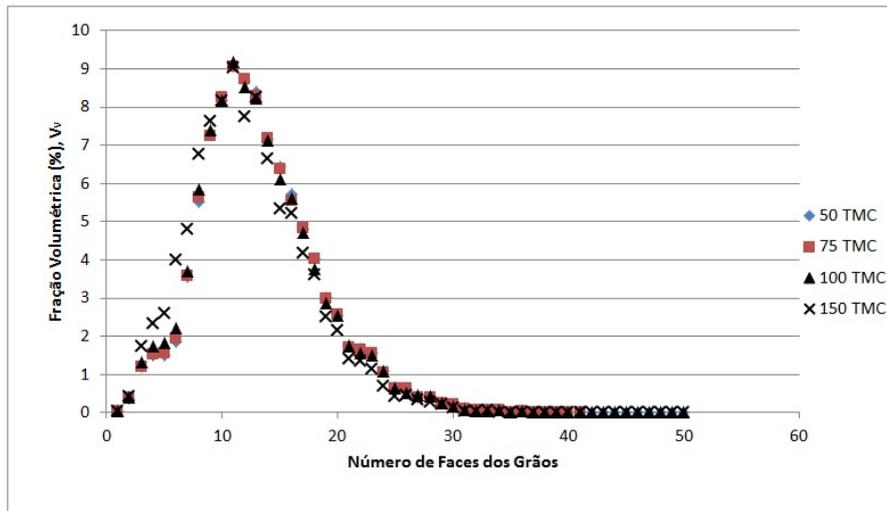


Figura 9. Distribuição do número de lados dos grãos durante o crescimento do grão anormal.

4 DISCUSSÃO

Observa-se pela Figura 6 que fisicamente, na matriz simulada, há um aumento no volume do grão anormal, o que significa que realmente há o crescimento anormal do grão. Portanto, o modelo está representando o fenômeno físico desejado. Isso também é evidente ao analisar a Figura 8, pois nessa figura observa-se que, no início da simulação, a fração volumétrica do grão que daria origem ao grão anormal era de, aproximadamente, 0,002. Contudo, com o avanço dos tempos de simulação para o crescimento do grão anormal, a simulação ao atingir o TMC=150, mais da metade de toda a matriz tem a orientação do grão anormal – a fração volumétrica do grão anormal, em TMC=150, é aproximadamente a 0,53. Esse aumento da fração volumétrica ao longo da simulação é bastante expressivo, como pode ser constatado ao observar o comportamento da curva.

Analisando os resultados apresentados na Figura 7, observa-se que o grão anormal no início do seu crescimento apresentava, aproximadamente, 35 faces, isto é, tinha interface com 35 grãos diferentes. À medida que houve avanço da simulação, o número de faces do grão anormal cresceu expressivamente, chegando ao final da simulação (TMC=150) com, aproximadamente, 1.180 faces.

Em todo tipo de modelamento é importante garantir que o modelo represente o fenômeno de estudo desejado, pois se o modelo não representar o fenômeno, os resultados podem ser equivocados e as conclusões drásticas. Portanto, com esse sentimento, analisou-se a distribuição de frequência do número de lados dos grãos da matriz, pois como a matriz do modelo tem uma condição contorno periódica, à medida que o grão anormal cresce e toma proporções significativas dentro da matriz de simulação, há o aparecimento do impingement entre as interfaces do grão anormal. A partir do aparecimento do impingement, a matriz deixa de representar bem o fenômeno. Portanto, com o aumento da fração volumétrica do grão anormal e o aparecimento do impingement há uma redução na quantidade de grãos normais da matriz e isso pode alterar o perfil das curvas de distribuição de frequência do número de lados dos grãos, alterando toda a representatividade do fenômeno desejado através do modelamento. Assim, a análise dessas curvas foi com a finalidade de checar a veracidade e representatividade do fenômeno pela matriz de simulação.

A Figura 9 apresenta as distribuições de frequência (em percentual) do número de lados dos grãos da matriz em diversos TMC. Observa-se na Figura 9 que as curvas quase se sobrepõem em todos os TMC analisados (TMC = 50, 75, 100 e 150). Portanto, não evidencia-se significativa alteração nas distribuições de frequência do número de lados ao longo da simulação do crescimento anormal, garantindo que o modelo represente bem o fenômeno de estudo.

5 CONCLUSÃO

Conclui-se que o modelo de Monte Carlo usado para simular o crescimento do grão anormal em matriz ancorada é consistente, pois os resultados das simulações e a microestrutura gerada do modelo representam fisicamente o fenômeno desejado.

Analisando os resultados apresentados na Figura 7, pode-se concluir que o modelo de Monte Carlo proposto para simular o crescimento anormal de grão, em uma matriz ancorada, está em conformidade com as teorias propostas por Rios e Glicksman.⁽¹⁾ Esses pesquisadores defendem a teoria dos ANHs, na qual o crescimento do grão anormal, em uma matriz ancorada, acontece pelo ganho do número de faces do grão anormal. Isso foi evidenciado na simulação pelo aumento significativo do número de lados do grão anormal com o avanço do tempo de simulação.

Pode-se concluir também que a matriz analisada manteve suas características fundamentais para garantir boa fidelidade e representatividade do fenômeno estudado, desconsiderando a ocorrência de impingement do grão anormal em matriz com contorno periódico. A evidência desse fato é observada na Figura 9 onde a distribuição de frequência (em percentual) do número de lado permanece quase inalterada ao longo de toda a simulação do crescimento anormal. Essa relativa constância na distribuição de frequência do número de lados garante uniformidade na matriz ancorada, mesmo com o crescimento do grão anormal.

Agradecimentos

Os autores desse trabalho expressam profundo agradecimento a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, CAPES, ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq e a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, FAPERJ, por todo suporte fornecido durante o desenvolvimento desse trabalho.

REFERÊNCIAS

- 1 RIOS, P. R. e GLICKSMAN, M.E. Topological theory of abnormal grain growth. **Acta Materialia**, vol. 54, pp. 5313-5321, 2006.
- 2 PADILHA, A.F. e SICILIANO JR, F. Encruamento, recristalização, crescimento de grão e textura. São Paulo: **Associação Brasileira de Metalurgia e Materiais**, 2005.
- 3 FONSECA, G. S. Estudo do Crescimento de Grão em uma liga Al-1% massa Mn – Dissertação de Doutorado - **PG Engenharia Metalúrgica**, UFF, Volta Redonda, 2007.
- 4 RIOS, P.R.; GLICKSMAN M.E. Modeling Polycrystals with Regular Polyhedra. **Materials Research**, Vol. 9, No 2, pp. 231-239, 2006.
- 5 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- **PG Engenharia Metalúrgica**, UFF, Volta Redonda, 2005.
- 6 SROLOVITZ, D. J.; ANDERSON, M.P.; GRETT, G.S.; SAHNI, P.S. Grain growth in two dimensions. **Scripta Metallurgica**, Vol. 17, pp. 241-246, 1983.

- 7 RIOS, P.R. e ALVES, C.L.M. Comparação das distribuições de tamanho de grão e número de faces por grão analíticas e simuladas pelo Método de Monte Carlo. In: ABM 63, 2008, Santos. **Anais do 63^o Congresso Anual da ABM**. São Paulo: ABM, pp. 2247-2254, 2008.