

# Simulación Monte Carlo del crecimiento de grano

Oldani, C.

Centro Regional Córdoba (CEMCO-CIMM)

## RESUMEN

Es sumamente importante entender y predecir el crecimiento de grano en aceros. El método Monte Carlo ha sido usado en simulaciones por computadora en varios campos diferentes del conocimiento. La simulación del crecimiento de grano usando este método es especialmente atractiva ya que

- se reproduce adecuadamente el comportamiento estadístico de los átomos.
- la evolución microestructural no utiliza simplificaciones geométricas.

Se llevó a cabo la simulación del crecimiento de grano de una aleación monofásica calculando la energía libre de cada "átomo" en la red (con su orientación cristalográfica actual) y comparando ese valor con otro calculado con una orientación random diferente. Cuando la energía libre resultante es menor o igual al valor inicial, la nueva orientación reemplaza la previa. La medición del tiempo es en Paso Monte Carlo (MCS), que involucra una serie de intentos a través de la red.

Se estudió la incorporación de partículas inhibitoras del crecimiento de grano y las características de su influencia con respecto al movimiento del borde de grano.

Los resultados muestran un buen acuerdo con las microestructuras obtenidas por tratamiento térmico en aceros de bajo carbono.

## 1. INTRODUCCIÓN

El tamaño de grano es una característica muy importante en la evaluación de las propiedades de los materiales ya que es uno de los parámetros más importantes en el control de la microestructura.

Tradicionalmente el estudio del crecimiento de grano se ha realizado mediante la comparación cuantitativa de micrografías, muchas veces con el auxilio de computadoras y softwares de análisis de imagen. Reciente-

mente, con el desarrollo del poder de procesamiento de las computadoras, surgió una nueva posibilidad: extender el uso de las computadoras para simular el crecimiento de grano.

Srolovitz <sup>[1, 2]</sup> propuso la metodología más conocida y empleada en la simulación de crecimiento de grano utilizando el método Monte Carlo. Hay una relación muy interesante entre la base conceptual del método Monte Carlo y las características físicas del crecimiento de grano: como ambos están muy relacionados con la estadística y los procesos azarosos, el método permite representar el fenómeno muy bien <sup>[3]</sup>.

## 2. DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO

Lo primero a realizar en el método MC consiste en la representación de la microestructura como una matriz 2D, en donde cada sitio corresponde a un elemento de borde o de interior. El contenido de cada elemento representa su orientación cristalográfica. Los bordes de grano son regiones ficticias que separan superficies con diferentes orientaciones (*Fig. 1*). En nuestro caso se discretizó una microestructura real de un acero de bajo carbono de uso eléctrico.

La simulación propiamente dicha consiste de cuatro pasos:

- a) cálculo de la energía libre de un elemento de la matriz ( $G_i$ ) con su orientación cristalográfica actual ( $Q_i$ ), basada en sus vecinos.
- b) elección aleatoria de una nueva orientación cristalográfica para ese elemento ( $Q_f$ ).
- c) nuevo cálculo de la energía libre del mismo elemento pero con su nueva orientación ( $G_f$ ).

d) Comparación de los dos valores ( $G_f$  -  $G_i$ ). Se elige la configuración que minimice la energía.

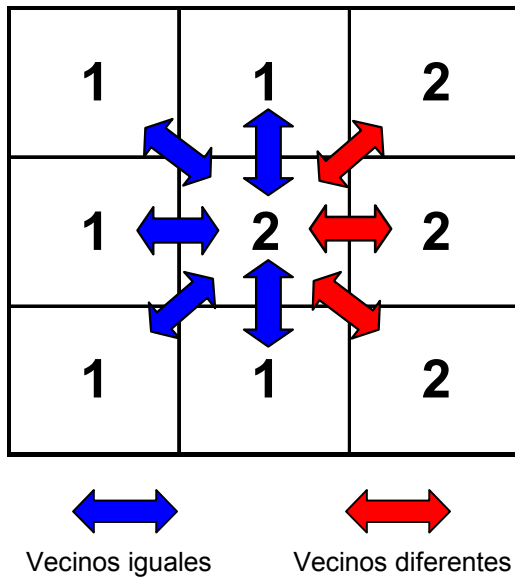


Fig. 1: Ejemplo de cálculo de energía libre del elemento central de la matriz ( $Q_i = 2$ ).

Estos cuatro pasos se repiten millones de veces en posiciones random de la matriz.

El Hamiltoniano que describe las interacciones entre vecinos cercanos, que representa la energía de borde de grano, es:

$$H = -J \sum_{i,j} (\delta_{s_i s_j} - 1)$$

donde  $s_i$  es una de las  $Q$  orientaciones posibles en el elemento  $i$  de la matriz y  $\delta_{s_i s_j}$  es el delta de Kronecker que es 1 cuando dos elementos son iguales y si no es 0. La probabilidad de transición  $W$  es:

$$W = \begin{cases} \exp(-\Delta G / k_b T) & \Rightarrow \Delta G > 0 \\ 1 & \Rightarrow \Delta G \leq 0 \end{cases}$$

donde  $\Delta G$  es el cambio de energía libre debido a la alteración de la orientación.

En el valor de  $J$  se incluyó la interacción de las partículas, representadas por puntos invariantes, así como la variación de la energía interfacial para el movimiento del borde.

### 3. EXPERIMENTAL

El software se desarrolló utilizando el compilador FORTRAN 90. El programa se ejecutó en una PC, la que mostró buena velocidad para la simulación en 2D.

La visualización de la matriz se llevó a cabo a través de un programa desarrollado en VisualBasic.

### 4. RESULTADOS

Las experiencias se llevaron a cabo en una matriz de 200x200. Se midió la evolución dimensional de los granos por medición del área ocupada por cada uno. Además se determinó el tamaño de grano por el método de las intersecciones (ASTM E 112).

Se pudo modelar en un grado aceptable el anclaje de los bordes de grano por la presencia de partículas. Esto genera la aparición de granos muy grandes característicos de un crecimiento anormal, lo que se confirma en la realidad.

Para la comparación de los resultados del método de simulación, se realizaron tratamientos térmicos de recocido descarburante en aceros de bajo carbono de uso eléctrico [4].

### Referencias

- [1] M.P. Anderson, D.J. Srolovitz, G.S. Grest, P.S. Shani, "Computer simulation of grain growth - I. Kinetics" Acta Metallurgica, N°32, pp 783-792, 1984.
- [2] M.P. Anderson, D.J. Srolovitz, G.S. Grest, P.S. Shani, "Computer simulation of grain growth - II. Grain size distribution, topology and local dynamics" Acta Metallurgica, N°32, pp 733-801, 1984.
- [3] P. Blikstein, A.P. Tschiptschin, "Monte Carlo simulation of grain growth" Mat. Research, Vol2, N°3, pp 133-137, 1999.
- [4] C. Oldani, P.S. Silveti, "Microstructure and texture evolution during the annealing of a lamination steel" Scripta Materialia, Vol 43, N°2, pp 129-134, 2000.

Para mayor información contactarse con:

Carlos Oldani – coldani@inticemcor.gov.ar

[Volver a página principal](#) ◀