

MODIFICACIONES A LA SIMULACIÓN DEL CRECIMIENTO DE GRANO POR MONTE CARLO

Carlos R. Oldani e Ignacio E. Lucero

*Departamento Materiales y Tecnología, Universidad Nacional de Córdoba, Av. Vélez sársfield 1611
Córdoba X5016GCA, Argentina, coldani@efn.uncor.edu*

Palabras clave: Aceros eléctricos, Crecimiento de grano, Monte Carlo, Simulación.

Resumen. El proceso de recocido de aceros de bajo carbono usados en máquinas eléctricas, comercialmente conocidos como laminaciones, juega un papel importante en la producción de este tipo de aceros. En esta operación, una atmósfera descarburante produce importantes efectos tales como el crecimiento de grano ferrítico y una textura cristalográfica magnéticamente favorable.

El crecimiento de grano durante el tratamiento de recocido se puede simular con el método de Monte Carlo. Este es un modelo probabilístico propuesto inicialmente para esta aplicación por Srolovitz en 1984. Este modelo permite tener en cuenta las interacciones termodinámicas entre átomos usando una microestructura discretizada, y usar las estrechas relaciones entre las bases conceptuales del método Monte Carlo y las características físicas del crecimiento de grano.

En este trabajo se proponen algunas nuevas aproximaciones al modelo Monte Carlo aplicado al crecimiento de grano ferrítico. El trabajo se focaliza en el uso de una matriz reducida que tiene en cuenta sólo los puntos de borde de grano y en la incorporación del proceso de agitación térmica escalada.

1 INTRODUCCIÓN

Las *laminaciones de uso eléctrico* son chapas de acero que constituyen el núcleo de motores y transformadores de baja potencia. Requieren de ciertos aspectos metalúrgicos que le dan la calidad magnética necesaria para el uso al cual están destinadas. Durante el procesamiento, un tratamiento térmico de recocido descarburante posterior al punzonado, produce los siguientes efectos (C.Oldani, 2003) :

- elimina tensiones residuales del matrizado
- descarburación a muy bajos contenidos en carbono
- aumenta el tamaño de grano ferrítico
- genera una textura cristalográfica magnéticamente favorable.

Dentro de estos efectos, el crecimiento de grano es la variable más importante y se ha podido determinar que el tamaño óptimo se encuentra en el orden de los 150 μm (C.Oldani y P.Silvetti, 2000). Las características del acero, como la composición química, presencia de partículas de segunda fase, grado de deformación plástica y características de procesamiento, fijan la posibilidad de alcanzar este tamaño medio de grano.

Debido a la importancia que tiene el control del tamaño de grano en éste y otros sistemas, se han utilizado diversos métodos para tratar de simularlo aunque en la actualidad se usa casi exclusivamente las simulaciones Monte Carlo.

El método Monte Carlo es un modelo probabilístico propuesto inicialmente por Srolovitz en 1984 (D.J.Srolovitz et al., 1984). El modelo permite tener en cuenta las interacciones termodinámicas entre átomos usando una microestructura discretizada y usar las estrechas relaciones entre las bases conceptuales del método Monte Carlo y las características físicas del crecimiento de grano.

En este trabajo se proponen algunas modificaciones al modelo Monte Carlo original aplicado a la simulación del crecimiento de grano ferrítico que sufren los aceros eléctricos (laminaciones) durante el proceso de recocido descarburante. Para ello se utiliza una matriz reducida que tiene en cuenta sólo los puntos bordes de grano y se incorporan algoritmos de agitación térmica escalados.

2 EL MÉTODO MONTE CARLO

Para incorporar la complejidad de la topología del borde de grano, se requiere discretizar una microestructura. En nuestro caso, la microestructura 2D se generó como una red discreta utilizando el modelo de teselaciones aleatorias (A.Martín et al., 1998). A cada sitio de red se le debe asignar un número entre 1 y Q correspondiente a la orientación cristalográfica del grano en el cual este embebido. Se debe elegir un Q suficientemente grande para que sea infrecuente que los granos de igual orientación queden tocándose. Así se ve que regiones contiguas con igual orientación tienen igual valor en la matriz, lo que significa que son parte de un mismo grano. Los bordes de grano serán las interfases entre superficies adyacentes de distinto valor (Fig.1).

Constituida la matriz, se deben seguir cuatro pasos fundamentales:

1. calcular la energía libre de un elemento de la matriz tomando para ello su orientación actual en relación con las orientaciones de los elementos vecinos
2. elegir aleatoriamente una nueva orientación para el elemento
3. volver a calcular la energía libre en base a la nueva orientación del elemento y

- a la de sus vecinos (las cuales no cambian), y
- comparar las dos energías calculadas y conservar la que minimice la energía.

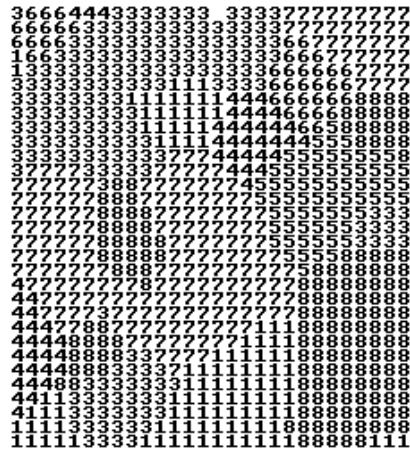


Figura 1: Representación discretizada de una microestructura

Los pasos se repiten millones de veces sobre los puntos de la microestructura elegidos al azar. El resultado final es una simulación de la disminución de la energía libre del sistema, que es el motor del crecimiento de grano.

El cálculo de la energía libre en cada punto se realiza mediante:

$$E_i = -J \sum_j (\delta(i, j) - 1)$$

donde J es un factor de escala y δ es la función de Kroneker, una función lógica de comparación entre un elemento i y otro j. La sumatoria se extiende a todos los elementos vecinos inmediatos al punto elegido.

A J normalmente se le asigna el valor 1 porque sólo interesa saber la diferencia entre la energía inicial y final, para decidir el cambio de orientación. Para comparar y aceptar un cambio de orientación se recurre a la probabilidad P, sabiendo que si el cambio en la energía asociada con la reorientación, ΔE , es menor o igual a cero, la reorientación es aceptada automáticamente.

$$\begin{cases} \Delta E \leq 0 \rightarrow P = 1 & (\text{aceptación automática}) \\ \Delta E > 0 \rightarrow P = \exp\left(-\frac{J \Delta E}{k_b T}\right) \end{cases} \quad [1]$$

- donde:
- ΔE = variación de la energía
 - k_b = constante de Boltzmann
 - T = temperatura absoluta
 - J = factor de escala que vincula la energía con el área que representa un punto

El tiempo se considera proporcional a la cantidad de reorientaciones probadas. Un paso Monte Carlo (MCS) es igual a N*N pruebas, donde N representa el tamaño de la matriz de estructura..

3 NUEVAS CONSIDERACIONES

3.1 Simulación con matriz reducida de bordes de grano

Todos los trabajos publicados que fueron consultados, sortean puntos al azar dentro de toda la matriz de estructura. Se puede asegurar que una gran cantidad de puntos sorteados se encontrarán dentro de un grano y no existirá la posibilidad de que el punto cambie de orientación. Por ello proponemos un modelo que sólo trabaje con los puntos de borde de grano (I.Lucero, 2006). El objetivo es acortar los tiempos de procesamiento.

Para esto, inicialmente se deben detectar los puntos que son bordes de grano dentro de la matriz y durante la simulación se requiere seguir cada cambio de orientación para determinar las modificaciones que se han producido en la distribución de los puntos de borde de grano.

Para lograr el objetivo de bajar los tiempos de ejecución, se optó por verificar en cada cambio de orientación de un punto, si el punto y sus vecinos tienen vecinos de distinta orientación. Para simplificar el bucle, se crearon tres matrices paralelas a la matriz de orientaciones: una matriz de punteros cuyos valores señalan la ubicación del punto en la matriz estructura, una matriz reducida donde se guardan las coordenadas de los puntos que son actualmente borde de grano y una matriz de vecinos donde cada dato representa la condición o no de borde de grano de ese punto.

El sorteo de puntos se realiza sobre la matriz reducida mediante una sola coordenada, la que está asociada a la posición x,y de la matriz de estructura. De esta manera se evita iterar sobre puntos que no tienen ninguna posibilidad de modificación. Las matrices creadas se actualizan permanentemente. Por otro lado, la selección de orientaciones posibles se realizó sólo sobre aquellos vecinos inmediatos al punto elegido ya que sólo esas pueden ser orientaciones con posibilidades para el cambio.

3.2 Simulación con agitación térmica

Ya que el fenómeno de movimiento de bordes de grano depende de la agitación térmica de los átomos, este efecto se debe incluir en el proceso de crecimiento. En la mayoría de los trabajos sobre el tema en cuestión, se utiliza como probabilidad de transición al algoritmo “Metropolis” (ecuación [1]). Sin embargo, hemos notado que el algoritmo propuesto por Glauber permite afectarlo de coeficientes que nos sirven para adecuar el modelo. La probabilidad de transición responderá en este caso a:

$$\begin{cases} \Delta E \leq 0 \rightarrow P = 1 & (\text{aceptación automática}) \\ \Delta E > 0 \rightarrow P = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{J \Delta E}{k_b T}\right)} \end{cases}$$

donde T es la temperatura en °K, k_b la constante de Boltzmann y J es un factor de escala relacionado con la energía de borde específica.

Como en nuestro caso estamos tratando de representar la evolución de la microestructura de un acero real del cual se tienen datos experimentales, deberemos tener valores reales de T y de J.

Para J existe muy poca información salvo el método de cálculo de Saito (Y.Saito y Enamoto, 2002). La relación entre J y la energía de borde de grano se puede expresar como:

$$\gamma = Z' N' J$$

donde γ es la energía de borde grano, la cual se tomó como 0.8 Joules/m² [6], Z' es el número de coordinación, 8 para la ferrita de nuestro caso y N' es el número de átomos por unidad de superficie, cuyo valor se tomó igual a $1 \times 10^{19} \text{ m}^{-2}$ [6]. Esto permite calcular J como: $J = 1 \times 10^{-20}$ Joules.

La temperatura tal como está introducida en la función de probabilidad de Glauber, agrega el efecto de agitación térmica sobre el crecimiento de grano puramente por tensión superficial (curvatura de grano). Así, afecta el modo y no el ritmo (velocidad) en que crecen los granos.

Con el valor calculado de J se realizaron diversas corridas del programa de simulación para observar el efecto de la temperatura sobre la evolución microestructural.

4 RESULTADOS

4.1 Matriz de borde de grano

Se validó el método propuesto corroborando que disminuyeran los tiempos de ejecución y que la morfología de los granos obtenidos no variara con respecto al método original. Para ello se llevaron a cabo 30 simulaciones de matriz 500x500, con $Q=40$ y hasta 1000 MCS. En las Fig. 2 a y b se comparan los tiempos de ejecución de cada MCS (obtenidos mediante el reloj interno de la máquina), para el modelo original y la modificación propuesta. Se observa que al final de los 1000 MCS se ha disminuido el tiempo acumulado de ejecución significativamente.

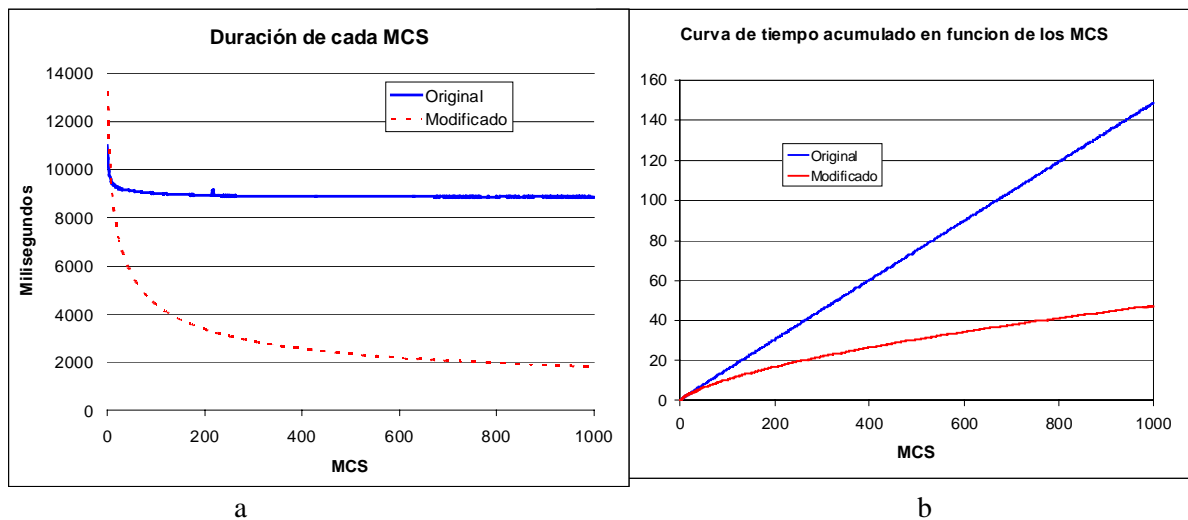


Figura 2: a) Evolución del tiempo de ejecución de cada MCS
b) Tiempo acumulado de ejecución para el método original y el modificado

En las Fig. 3 a y b se compara la evolución de los diámetros medios durante las simulaciones y en las Fig. 4 a y b se ven las microestructuras resultantes. Ambos modelos muestran idéntico comportamiento.

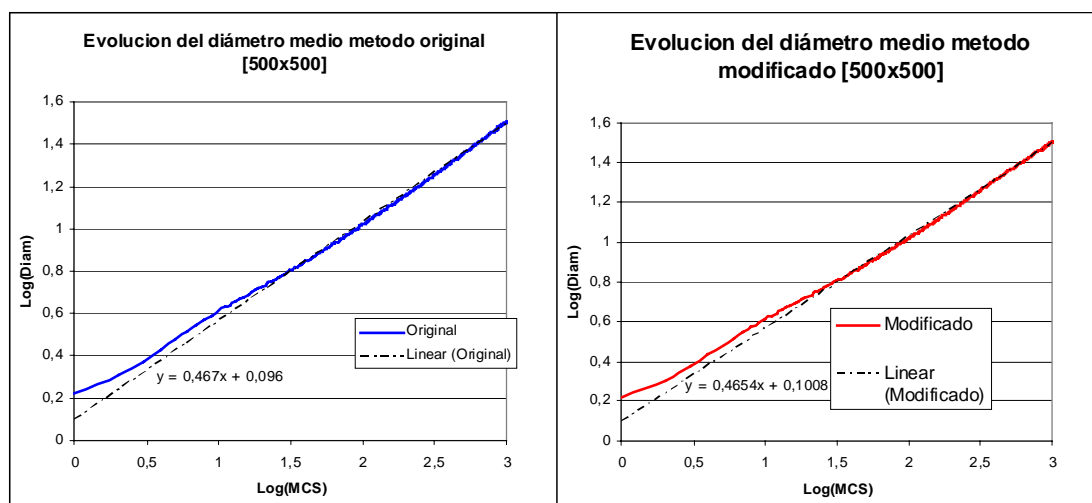


Figura 3: Curvas de crecimiento en el método original y en el modificado 500x500; Q=40, 1000 MCS

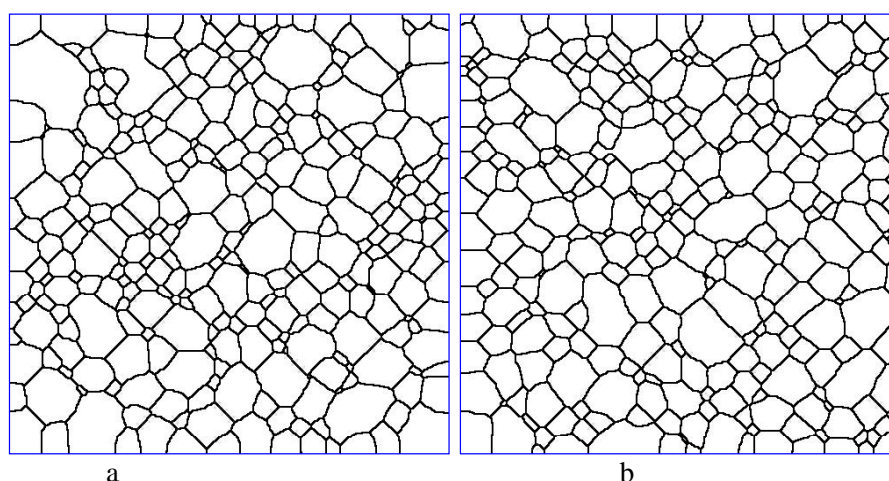


Figura 4: Microestructuras finales obtenidas por ambos métodos

4.2 Agitación térmica

De los resultados de las corridas se puede deducir que el aumento de la temperatura, aumenta el grado de cambios por agitación térmica ($\Delta E > 0$), efecto que se va potenciando por la disminución en la probabilidad de cambios con $\Delta E < 0$. En la Fig. 5 se compara el crecimiento que experimentan los granos a distintas temperaturas. se observa que el diámetro medio final resulta más chico mientras más alta sea la temperatura en la simulación. Esto se contradice con la experiencia real. Sin embargo, un escalado del modelo nos permite revertir esta situación, estableciendo constantes a fin de lograr una correspondencia entre los valores simulados con los valores físicos experimentales. Lo que se hizo fue multiplicar la probabilidad de transición por una función experimental del tipo Arrhenius.

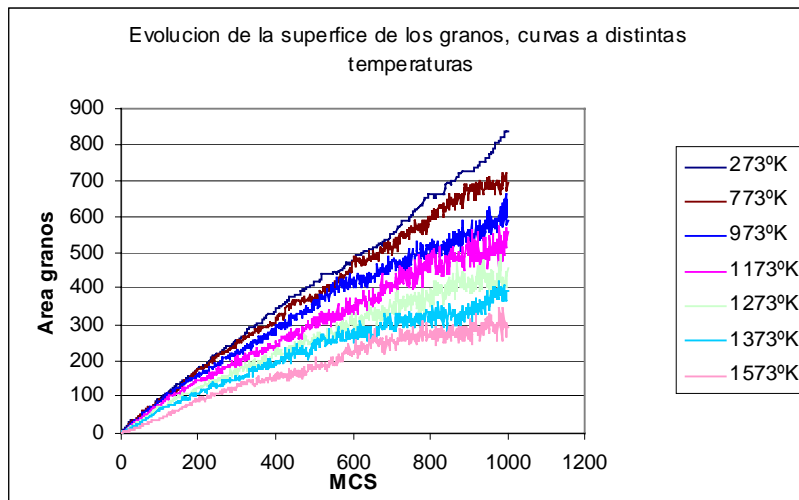


Figura 5: Evolución de los tamaños de grano en función a la temperatura

Para ello se propone usar la frecuencia de agitación atómica:

$$P = M * P_{Glauber} = \frac{M}{1 + \exp\left(\frac{J \Delta E}{k_b T}\right)}$$

$$M = M_0 * \exp\left(-\frac{G}{k T}\right)$$

Los valores de las constantes M_0 y G se obtuvieron a partir de los resultados experimentales de los tratamientos térmicos [1]. En la Fig. 6 se ve como se modifican las curvas de crecimiento siguiendo las tendencias experimentales.

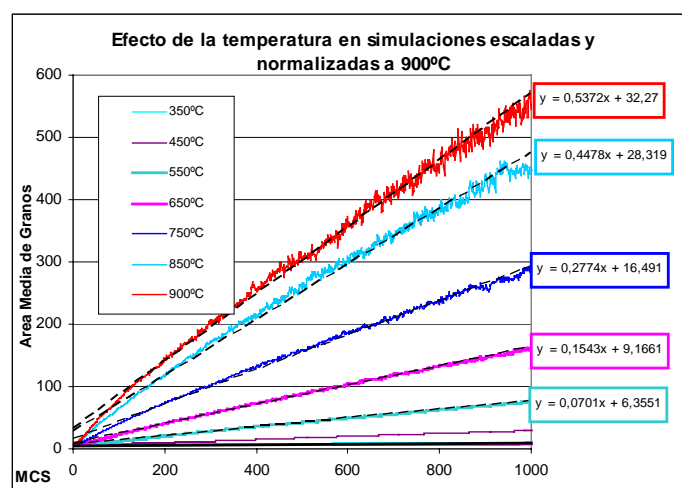


Figura 6: Simulaciones escaladas a distintas temperaturas
500x500; Q=40; 1000 MCS

Es de hacer notar que en este trabajo se realizaron modificaciones al método Monte Carlo en 2D, a pesar de que la realidad es en 3D. La incorporación de una dimensión no variará el

fenómeno sustancialmente pero sí lo hará en el número de sitios de red que se deben analizar. Esto provoca que la cantidad de cálculos se vuelva tan grande que ya no se pueda utilizar un equipo común y se requiera el uso de supercomputadoras que permitan disminuir los tiempos de procesamiento. En este sentido están trabajando en los laboratorios de Sandia en Albuquerque-Estados Unidos, que posee enormes recursos computacionales.

5 CONCLUSIONES

De este trabajo se puede concluir que:

- Se desarrolló un programa para simular el crecimiento de grano en aceros de uso eléctrico mediante el método Monte Carlo
- Se propone la utilización de una matriz reducida con los puntos de borde grano, siendo éstos los únicos que intervienen en la simulación.
- Se verificó que esta alternativa responde en forma similar al método Monte Carlo original y que los tiempos de procesamientos se disminuyen sensiblemente.
- Se agregó el fenómeno de agitación térmica a través del algoritmo de Glauber. El escalado de esta función de probabilidad de transición utilizando datos experimentales, permite seguir el proceso de crecimiento de grano real de un acero de uso eléctrico.

REFERENCIAS

- I. Lucero. Simulación de la cinética del crecimiento de grano en aceros. Trabajo Final de la Carrera de Ingeniería Mecánica Electricista – FCEFYN – Universidad Nacional de Córdoba (2006)
- A. Martín, M. Tellaeché y J. Gil-Sevillano. Un generador aleatorio de microestructuras virtuales 3D. *Rev. Metal. Madrid*, 34 (mayo) (1998), p. 314-318
- C. Oldani. Crecimiento de grano en aceros de uso eléctrico. Tesis Doctoral Universidad Nacional de Córdoba, (2003)
- C. Oldani y P. Silveti. Microstructure and texture evolution during the annealing of a lamination steel. *Scripta Mater.* Vol. 43 (2000), p. 129-134
- D.J. Srolovitz, M.P. Anderson, G.S. Grest y P.S.Sahni. Computer simulation of grain growth. *Acta Metall.* Vol. 32, N° 5 (1984), p. 783-791
- Y. Saito y M. Enamoto. Monte Carlo Simulation of Grain Growth. *Iron and Steel Research Laboratories*, Kawasaki Steel Corporation, Kawasaki-cho, Chiba, Chiba-ken, 260 Japan.