

Escola Politécnica da Universidade de São Paulo
Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais



Trabalho de Formatura 1998

**Modelamento de crescimento de grão pelo
método de Monte Carlo**

Paulo Blikstein

orientador: André Paulo Tschiptschin



Grão, uma paixão (introdução)

Perspectiva histórica

Importância e história

A importância do crescimento de grão foi reconhecida pelos primeiros metalurgistas. Isso sem dúvida foi decorrente da conclusão de que o tamanho de grão afeta de forma dramática as propriedades de um material, e que o crescimento pode ocorrer em processos de fabricação bastante corriqueiros, tais como a fundição, a transformação mecânica e os tratamentos térmicos.

Um dos primeiros trabalhos experimentais a esse respeito foi de Mathewson e Phillips [HISTGG], em 1916, com ligas Latão-a Cu-Zn. O tamanho médio de grão foi correlacionado com as propriedades mecânicas e físicas das amostras de acordo com sua temperatura de recozimento.

Já no início do século dois tipos de crescimento de grão já eram investigados: o normal e o anormal. Para metais como o Latão-a mencionado anteriormente, o crescimento ocorria de forma gradual e resultava num aumento do tamanho médio dos grãos. Entretanto, para materiais com presença de uma dispersão de partículas de segunda fase na matriz, o crescimento "gradual" era fortemente inibido até uma determinada temperatura. Quando ultrapassada, grãos de grandes dimensões se desenvolviam abruptamente numa matriz de grãos pequenos. O primeiro tipo de crescimento ficou conhecido com normal ou contínuo, enquanto que o segundo foi denominado crescimento anormal ou exagerado.

Um exemplo bastante interessante desse segundo tipo é a fabricação de filamentos de Tungstênio para lâmpadas incandescentes, através da sinterização de pó de Tungstênio com adições de Tório. Outro exemplo conhecido há muito tempo é o dos aços ao Silício (3%Si) com teores mais elevados de Manganês e Fósforo, nas quais grãos muito grandes se desenvolviam com facilidade [HISTGG]. Isto é um autor?.

Na verdade, não se distinguia os termos "crescimento de grão" e "recristalização" nos primórdios da pesquisa metalúrgica. Altherthum apud Hu, foi o trabalho que reconheceu, em seu trabalho, a existência de dois tipos de "recristalização": uma promovida no trabalho a frio (ou seja, pela deformação) e outra pela "tensão superficial". Esse último tipo corresponde ao que chamamos hoje de crescimento de grão.

As primeiras pesquisas acerca do fenômeno foram realizadas através da variação da temperatura de recozimento. Poucos experimentos de crescimento isotérmico foram realizados. A conclusão mais comum, na época, era a de que para uma dada temperatura de tratamento térmico, o tamanho de grão aumentava rapidamente no começo do processo e então a taxa de crescimento decrescia gradativamente. A conclusão só poderia ser que haveria um "tamanho de grão final" para cada temperatura de tratamento, já que a velocidade de crescimento decrescia muito depois de um determinado tempo e não se havia determinado a lei de crescimento de grão. Essa baixa velocidade de crescimento, aliado ao desconhecimento teórico do fenômeno,

foram os responsáveis por essa conclusão equivocada.

Beck e a lei empírica clássica

Foi só com o impressionante trabalho de Beck et al. [BECK] que essa idéia foi derrubada. Realizando inúmeros experimentos de crescimento de grão isotérmicos, ele mostrou que a taxa decrescente de crescimento e o suposto "tamanho final de grão" eram apenas devidos ao efeito da espessura da amostra, e que a lei empírica que rege o processo de crescimento de grão é:

$$D = Kt^n \quad (3-1)$$

onde D é o diâmetro médio de grão, t é o tempo de tratamento, K e n são parâmetros que dependem da temperatura. O valor de n, o expoente do tempo, é menor ou (raramente) igual a 0,50, como veremos mais adiante. Na grande maioria dos casos n se aproxima de 0,50 na medida que nos aproximamos da temperatura de fusão da amostra.

A equação impõe que, para t=0, D=0, o que não ocorre na realidade. Uma forma alternativa e freqüentemente utilizada de expressar a mesma relação é:

$$D^{\frac{1}{n}} - D_0^{\frac{1}{n}} = Ct \quad (3-2)$$

onde D₀ é o tamanho médio de grão antes do crescimento, C é um parâmetro similar a K. As duas equações são equivalentes para o caso de um valor de D₀ desprezível em relação a D, o que ocorre em um grande número de aplicações.

A primeira conclusão, de que há um "tamanho final" de grão para cada temperatura deve-se provavelmente ao fato de que, como o crescimento é regido por uma lei logarítmica, o crescimento é extremamente lento para intervalos de tempo elevados.

Mecanismos de crescimento

Recristalização e Crescimento de grão

A recristalização primária é o um dos processos de redução de energia livre num material deformado que está sujeito a um tratamento térmico. Quando ela é considerada concluída, apesar de uma significativa redução de tensões internas e de energia livre, o metal ainda se encontra num estado metaestável: há grande quantidade de energia associada às interfaces entre os grãos. A diminuição dessa quantidade é a forma mais imediata para que o metal possa alcançar um estado de menor energia.

O potencial termodinâmico para o crescimento de grão é, portanto, a diminuição da energia livre associada aos seus contornos, ou seja, às superfícies que os separam. Em princípio o processo continua até que todas as interfaces sejam eliminadas (o material se transforma num monocrystal), mas na prática ele é sempre interrompido antes que isso ocorra. O resultado, portanto, é sempre um arranjo metaestável.

Nas palavras de Dutra [DUTRA]:

"O aumento no tamanho de grão necessariamente envolve a diminuição na área de contornos de grão por unidade de volume e, portanto, diminui a energia de superfície do contorno de grão por unidade de volume. Visto que este último fornece o potencial termodinâmico para o crescimento de grão, segue-se que, ao aumentar o tamanho de grão, por crescimento, automaticamente reduz-se o potencial termodinâmico para posterior crescimento. A velocidade de crescimento de grão, portanto, diminui e torna-se efetivamente zero quando a área de contornos de grão não é extensa suficiente para fornecer um potencial termodinâmico adequado para sustentar o crescimento de grão naquela temperatura particular de recozimento. Tal limitação de crescimento é derivada da"

própria natureza da cinética de crescimento de grão do material."

O processo ocorre pela movimentação dos contornos de grão. Cabe aqui, entretanto, um esclarecimento. Os "contornos de grão", tão famosos na metalurgia, não têm existência física. Não há, efetivamente, uma entidade "real" separando os grãos. O contorno de grão é apenas uma abstração que se refere à região de relativa desordem estrutural na região que separa dois cristais de orientação diferente. Nas palavras do prof. Ivan Falleiros [FALLEIROS]:

"Contorno de grão não é nada mais do que um conjunto de átomos fora de lugar".

Essa observação é especialmente importante porque um dos pontos fundamentais do modelo do presente trabalho é a fidelidade a esse conceito, ou seja, não há representação real do "contorno de grão" no modelo computacional.

Vale comentar que há uma diferença importante entre a recristalização primária (ou seja, no momento em que há formação e expansão de novos grãos) e o crescimento de grão propriamente dito: no primeiro processo, os contornos migram para longe do seus centros de curvatura, enquanto que no segundo eles migram em direção aos seus centros de curvatura. Isso ocorre porque os átomos do lado côncavo (ou seja, com menos ligações) tem tendência de migração para o lado convexo (com mais ligações). Essa diferença será importante quando considerarmos o equacionamento do fenômeno.

Há também uma diferença quantitativa em relação à energia liberada, e segundo Coterill [COTERILL]:

"Utilizando valores típicos para a energia de contorno de grão por unidade de área e para a mudança da área de contorno por unidade de volume, Beck mostrou que a energia liberada para um metal com diâmetro de grão médio de 10-2 mm, quando há crescimento de grão até 10-1 mm, é da ordem de 0,2 cal/mol. Isso é mais de cem vezes menor do que o valor liberado [...] durante a recristalização primária."

Movimentação de contornos de grão

A movimentação dos contornos de grão durante o crescimento de grão obedece a alguns princípios bastante elementares relacionados com a sua geometria.

O equilíbrio de tensões é alcançado quando os ângulos entre as fronteiras dos grãos obedecem à seguinte equação:

$$\frac{\gamma_{1-2}}{\sin \alpha_1} = \frac{\gamma_{2-3}}{\sin \alpha_2} = \frac{\gamma_{1-3}}{\sin \alpha_3} \quad (3-3)$$

onde

α são os ângulos entre os diedros e

γ são as energias específicas das interfaces.

No caso de uma liga monofásica e considerando uma estrutura bidimensional na qual as energias de interface são iguais e isotrópicas (independente do caráter e da orientação das mesmas), o ângulo de equilíbrio é 120º. No caso espacial, o problema é bem mais complexo. Várias tentativas foram feitas de conseguir-se um sólido que preenchesse perfeitamente o espaço. Um desses proposto por Kelvin, é o tetracaidecaedro, onde os ângulos de equilíbrio têm aproximadamente 109º.

O formato mais estável das faces também é fundamental. De um lado, um átomo deslocado de sua posição de equilíbrio no reticulado, por faltar um certo número de vizinhos mais próximos, tende a mudar o número de coordenação de modo a encontrar uma configuração mais estável. Por outro lado, há no material uma tendência de minimização de superfície por unidade de volume. O processo continua até que se forme uma configuração estável sem tendência para migração, o que corresponde a

tornar o raio de curvatura infinito (ou a interface reta).

O ângulo entre os contornos e a sua curvatura são os dois princípios geométricos que governam o crescimento de grão, baseados nas premissas termodinâmicas anteriormente citadas. A consequência importante é que os grãos com acentuada curvatura (os menores e com número de lados inferior a seis) tendem a ser consumidos pelos maiores (e com mais de 6 lados). Podemos dizer, portanto, que os maiores crescem às custas dos menores.

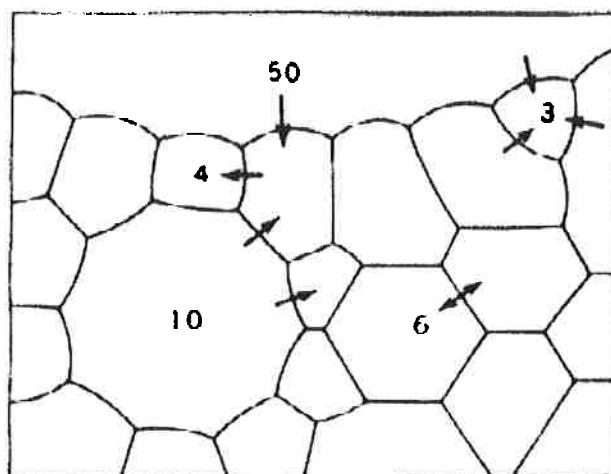


Figura 1 – Os grãos com mais lados (normalmente os maiores) e sua direção de migração. Os menores, com menos de seis lados, diminuem; os hexagonais ficam estáveis. [SHEWMON]

Burke [BURKE] demonstrou que o potencial termodinâmico para o crescimento de grão é a redução da energia associada com o decréscimo na área do contorno de grão, e propôs que a taxa de migração dos contornos é inversamente proporcional ao raio médio de curvatura dos mesmos.

Smith apud Dutra [DUTRA] também confirma essa tese, através da análise das seguintes relações:

$$\Delta P = \frac{2\gamma}{r} \quad (3-4)$$

$$V = M\Delta P \quad (3-5)$$

onde D P: diferença de energia livre por unidade de volume, você tem que explicar o que é delta p – efeito gibbs-thompson, discutir o que é mobilidade e como ela varia , por exemplo, no caso dos contornos de grão especiais _ Kronberg Wilson.

g : energia livre de superfície do contorno,

r : raio de curvatura da região esférica,

M: mobilidade do contorno de grão (definido como a variação da velocidade de migração com o potencial termodinâmico) e

V: velocidade de migração.

Logo, combinando as duas equações, percebemos que V é proporcional à energia livre de superfície e inversamente proporcional ao raio, fato esse cuja importância discutiremos mais adiante.

Lei de crescimento de grão

A lei que rege o crescimento normal de grão é comumente definida pela relação:

$$\bar{R} = kt^n \quad (3-6)$$

onde \bar{R} é o diâmetro de grão, t é o tempo e k uma constante que varia exponencialmente com a temperatura. O valor máximo (raramente verificado experimentalmente) de n é 0,5.

Essa equação é resultado de uma série de considerações teóricas e matemáticas que examinaremos agora.

Como vimos, é a tensão superficial das interfaces que controla o crescimento de grão, que também pode ser expressa por:

$$\Delta F = \sigma V \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right) \quad (3-7)$$

onde ΔF : potencial termodinâmico para o crescimento de grão,

V : volume atômico,

σ : tensão superficial,

r_1 e r_2 : raios de curvatura dos dois grãos vizinhos.

$$\left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right) = 2 \left(\frac{1}{r_1} \right) \quad \Delta F \propto \frac{1}{r_1}$$

Se $r_1 = -r_2$ (ou seja, não há vazios no contorno), $\left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right) = 2 \left(\frac{1}{r_1} \right)$ e, portanto, ($\Delta F \propto \frac{1}{r_1}$), (relação semelhante à da inversa proporcionalidade entre velocidade e raio que já citamos).

Além disso, velocidade de migração dos contornos de grão, em condições isotérmicas, é dada pela relação:

$$G = K' \sigma \frac{V}{r} \quad (3-8)$$

$$K' = K'_0 \exp\left(-\frac{Q_G}{RT}\right)$$

onde s é a energia de superfície e

onde T é a temperatura absoluta, R a constante universal e Q_G é a energia de ativação do material a uma dada temperatura.

Algumas simplificações são propostas por Burke:

- A energia de superfície s é independente do tamanho de grão;
- A eficácia das inclusões para ancorar o crescimento é independente da temperatura e do tamanho de grão;
- $r \propto D$ (onde D é o diâmetro médio de grão);
- $\frac{dD}{dt} \propto G$

Dessa forma, a equação fica reduzida a:

$$\frac{dD}{dt} = \frac{K \sigma V}{D} \quad (3-9)$$

que integrada dos dois lados, resulta em

$$D^2 - D_0^2 = K \sigma V t \quad (3-10)$$

onde D_0 é o diâmetro inicial de grão. Normalmente, esse valor é muito pequeno se

comparado a D2, o que resulta que

$$D = \sqrt{K \sigma V t} = (K \sigma V t)^{\frac{1}{2}} \quad (3-11)$$

De fato, dados experimentais comprovam que $D \propto t^{\frac{1}{2}}$, o que valida as considerações realizadas na demonstração. Usualmente utiliza-se a equação mais genérica anteriormente citada:

$$D = k t^n, \text{ onde } n \text{ assume o valor teórico de } 0,5.$$

Essas considerações introdutórias fazem parte do arcabouço básico da metalurgia física. Entretanto, quando se faz necessário um estudo mais detalhado do crescimento de grão numa liga, precisamos recorrer a um ferramental mais sofisticado. Afinal, a lei temporal acima expressa apenas um crescimento médio. Ela não permite prever, por exemplo, as diferentes velocidades de crescimento das várias classes de tamanhos presentes na microestrutura. De fato, se verifica que há outras considerações importantes a respeito do crescimento de grão que são dificilmente identificáveis sem a simulação computacional. Segundo Anderson et al. [SROLOVITZ1]:

"Apesar de geralmente observarmos que grãos grandes crescem e pequenos diminuem, exemplos onde o contrário ocorre podem ser encontrados. Além disso, num grande número de casos, as trajetórias de grãos específicos no gráfico do diâmetro de grão versus tempo se cruzam. Isso sugere que o conhecimento do tamanho de grão instantâneo absoluto ou normalizado não é suficiente para prever a evolução, ou mesmo a direção da evolução, de grãos específicos."

"A evolução dos grãos num gráfico normalizado de tamanho de grão versus tempo mostra-se independente do tamanho de grão para $R \ll \bar{R}$. O movimento desses contornos de grão não é dirigido e se observa que eles crescem e diminuem aleatoriamente. Grãos onde $R \ll \bar{R}$ visivelmente diminuem e desaparecem. Esses resultados indicam a validade da descrição de comportamento aleatório para grãos grandes e da cinética controlada pela curvatura para grãos pequenos."

Essas considerações evidenciam a utilidade da simulação para compreender e quantificar diversos parâmetros auxiliares do crescimento grão. Um exemplo disso é a constatação de que o comportamento dos grãos depende de seu tamanho relativo: a curvatura é um fator muito mais importante para analisar o desaparecimento dos grãos menores do que para determinar a direção de crescimento dos maiores.

Tratamento analíticos

Leis de crescimento

Os conceitos básicos relacionados ao crescimento de grão foram discutidos na seção anterior. Entretanto, recentes desenvolvimentos na área da análise matemática do crescimento de grão têm trazido luz à discussão do problema, especialmente para a explicação das distribuições de tamanhos encontradas em experimentos reais.

Não é novidade afirmar que o crescimento de grão em materiais monofásicos é causado pela tendência dos contornos de migrar em direção ao seu centro de curvatura. Sutoki [ANAGG], em 1928, demonstrou esse processo por uma série de micrografias que, superpostas, mostravam claramente a direção de migração.

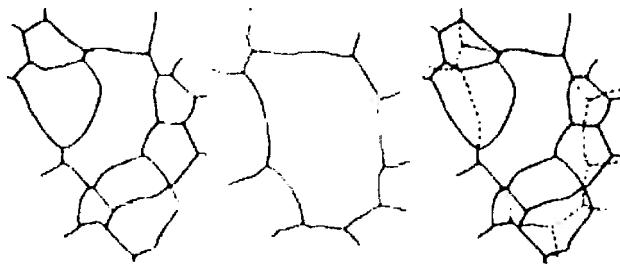


Figura 2: Micrografias esquemáticas superpostas mostram a direção de crescimento dos contornos, em direção ao centro de curvatura [ANAGG]

Como comentado anteriormente, em 1948 Beck et al. confirmaram que o potencial termodinâmico do processo de crescimento estava associada ao conteúdo energético das superfícies, que era diretamente proporcional à energia de superfície s e inversamente proporcional ao raio médio R_m . A taxa de variação dessa variável no

tempo, segundo Beck, seria proporcional a $\frac{\sigma}{R^*}$. Integrando a expressão, obtemos a lei parabólica do crescimento de grão:

(3-12)

A estimativa do parâmetro k não é, entretanto, tarefa simples. É necessário relacionar a curvatura dos vários contornos de grãos presentes na amostra com o tamanho médio de grão. Uma das primeiras tentativas foi feita por Smith [ANAGG], que propôs que a curvatura de um contorno de grão típico poderia ser estimado como sendo quatro vezes o raio médio dos grãos. Ele também observou que um arranjo regular de grãos de mesmo tamanho poderia resultar num arranjo de contornos com curvatura líquida zero. A conclusão, portanto, foi que a determinação do parâmetro k só seria possível com o conhecimento prévio do histograma da distribuição de tamanhos de grão.

Outra proposição interessante foi feita por Feltham, após uma exaustiva análise experimental de distribuições de tamanho de grão. Segundo ele, o tamanho máximo de grão corresponde a 2,5 vezes o tamanho médio, o que o levou à equação que prevê o crescimento de grãos de tamanho R :

$$\frac{dR^2}{dt} = k \ln \left(\frac{R}{R_{cr}} \right) \quad (3-13)$$

onde R_{cr} é o raio crítico: grãos com raio maior crescem, caso contrário diminuem.

Hillert, mais recentemente, analisou os principais métodos analíticos de tratamento de crescimento de grão. O primeiro deles já foi discutido na seção anterior de forma simplificada, mas o tratamento de Hillert introduz mais complexidade ao equacionamento. Seu ponto de partida é que, fundamentalmente, a força que movimenta um contorno de grão vem de sua curvatura e pode ser expressa como uma diferença de pressão entre dois grãos.

$$\Delta P = \sigma \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \quad (3-14)$$

onde r_1 e r_2 são os raios de curvatura. A taxa de migração, portanto, pode ser obtida adicionando-se um fator M de mobilidade:

$$v = M \Delta P = M \sigma \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \quad (3-15)$$

O aumento do tamanho de um grão de raio R_i pode ser obtido se determinássemos a curvatura ao longo de todo o seu perímetro e calculássemos a média. Teríamos, portanto,

$$\frac{dR_i}{dt} = M\sigma g \left(\frac{1}{\rho_1} + \frac{1}{\rho_2} \right)_{média} \quad (3-16)$$

onde o fator g depende do formato mas habitualmente assume o valor unitário. Apesar de grãos de mesmo tamanho poderem apresentar curvaturas locais diferentes, Hillert sugeriu que haveria um valor médio de curvatura que expressaria bem a tendência de crescimento dos grãos de um determinado raio R . A expressão, portanto, fica:

$$g \left(\frac{1}{\rho_1} + \frac{1}{\rho_2} \right)_{média} = \alpha \left(\frac{1}{R_{cr}} - \frac{1}{R} \right) \quad (3-17)$$

o que resulta em

$$\frac{dR}{dt} = \alpha M \sigma \left(\frac{1}{R_{cr}} - \frac{1}{R} \right) = \frac{\alpha M \sigma}{R} \left(\frac{R}{R_{cr}} - 1 \right) \quad (3-18)$$

onde o fator α é uma constante que vale aproximadamente 0,5 para sistemas bidimensionais e 1,0 para tridimensionais. R_{cr} está relacionado com o tamanho médio

de grão do material em questão. A somatória de $\frac{dR}{dt}$ para todos os grãos deve ser zero num sistema tridimensional, já que o volume deve se manter constante. Essa condição pode ser expressa da seguinte forma:

$$R_{cr} = \frac{\bar{R}^2}{\bar{R}} = \bar{R} \quad (3-19)$$

$$u = \frac{R}{R_{cr}}$$

Através de uma transformação de variável, com

$$\frac{dR^2}{dt} = 2\alpha M \sigma (u - 1) \quad (3-20)$$

$$\frac{du^2}{d \ln R_{cr}^2} = \frac{2\alpha M \sigma (u - 1)}{dR_{cr}^2/dt} - u^2 \quad (3-21)$$

finalmente, se utilizarmos como medida de tempo o valor

$$\tau = \ln R_{cr}^2 \quad (3-22)$$

e se assumirmos que a estrutura de grãos evoluirá até uma configuração quasi-estacionária, podemos determiná-la já que os parâmetros da

$$\frac{dR^2}{dt} = 2\alpha M \sigma (u - 1) \quad (3-20)$$

deverão se manter constantes. Nessa situação, o valor de $\frac{dR^2}{dt}$ será também constante e portanto chegamos à lei parabólica para o crescimento de grão:

$$R_{cr}^2 - R_0^2 = kt \quad (3-23)$$

Essa lei pode ser obtida sob duas condições. A primeira é que a equação

$$v = M \Delta P = M \sigma \left(\frac{1}{\rho_1} + \frac{1}{\rho_2} \right) \quad (3-15)$$

é realmente válida, ou seja, que a taxa de migração é proporcional à diferença de pressão entre dois grãos e a um valor de mobilidade M. A segunda é que a curvatura líquida média para grãos de tamanho R é inversamente proporcional a R e que a constante de proporcionalidade é função do tamanho relativo. A implicação disso é que a distribuição de tamanhos de grão permanece inalterada, ou seja, temos uma distribuição quasi-estacionária, fato esse bastante detalhado em [ANAGG].

O expoente da lei de crescimento do grão

A obtenção do expoente da lei de crescimento de grão para casos reais não é tarefa simples. Na verdade, para considerar o efeito de impurezas ou partículas de segunda fase seria necessário reavaliar as premissas físicas iniciais e introduzir novas variáveis na equação que calcula a pressão interfacial entre os grãos. Outra forma seria pela introdução de um expoente na equação:

$$v = M \Delta P = M \sigma \left(\frac{1}{\rho_1} + \frac{1}{\rho_2} \right) \quad (3-15)$$

$$v = M^i \Delta P^i \quad (3-24)$$

Hu (recentemente falecido) e Rath, apud Hillert, propuseram essa alteração e mostraram que o expoente de crescimento de grão seria igual a m+1. Outra dificuldade para o uso da equação

$$v = M \Delta P = M \sigma \left(\frac{1}{\rho_1} + \frac{1}{\rho_2} \right) \quad (3-15)$$

é que o valor da mobilidade M é na verdade um valor médio que pode não representar o sistema real, já que dois grãos podem ter infinitas diferenças de orientação entre si, o que alterará a mobilidade da interface.

Uma outra tentativa para elucidar o problema foi feita por Fortes [FORTES]. Ele considerou duas forças que impulsoram as interfaces. A primeira é consequência da energia superficial de três contornos que não se neutralizam, já que a mobilidade dos átomos nas vizinhanças dos pontos triplos é limitado. A segunda vem da energia proveniente da curvatura das linhas junto aos pontos triplos. O argumento de Fortes foi que o crescimento de grão por um fator I faria decrescer a força nas superfícies curvas pelo inverso de lambda, mas as forças nas linhas junto aos pontos triplos continuaria aproximadamente igual porque os ângulos seriam mantidos. A consequência é que o efeito da curvatura junto aos pontos triplos seria predominante em grãos grandes e que, dessa forma, o expoente de crescimento cairia de 2 para 1. Apesar de conceitualmente interessante, a proposição de Fortes jamais foi verificada experimentalmente. Um fato interessante é que, muitos anos depois, ela seria confirmada pelo modelo proposto por Srolovitz [SROLOVITZ1].

Louat e a aleatoriedade

Louat [LOUAT] introduziu um conceito totalmente diferente. Segundo ele, o crescimento de grão era resultado de movimentos randômicos de contornos de grão e negligenciou o efeito da energia de superfície. Sua explicação era que, ocasionalmente, esse movimento aleatório faria com que um grão desaparecesse. O grão evidentemente não seria "recriado", e o resultado geral seria uma diminuição do número de grãos e um aumento no tamanho médio dos remanescentes. O equacionamento proposto por Louat tem um formalismo semelhante ao dado por Fick para o equacionamento da difusão:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = D \frac{\partial^2 F}{\partial R^2} \quad (3-25)$$

onde $F(R,t)$ é a distribuição de tamanhos de grão e D é uma constante análoga à de difusão. A curva de distribuição de tamanhos e a lei parabólica obtida por Louat foram bastante satisfatórias. Vários autores, entretanto, questionam o embasamento físico para essas considerações. Se os movimento dos contornos fossem apenas devido ao movimento Browniano, o crescimento seria extremamente lento.

O que alguns autores fizeram, e que veremos mais adiante no modelo computacional, foi adicionar um fator de aleatoriedade ao equacionamento clássico. Hunderi, Ryum [HUNDERI] e Pande [PANDE] fizeram essa tentativa. Enquanto os primeiros simplesmente adicionaram um termo a mais à equação da continuidade, dentro do modelo de crescimento por energia superficial, o último propôs que

$$\frac{dR}{dt} = f(R,T) + T(t) \quad (-26)$$

onde $T(t)$ é um termo de "ruído" que descreve rearranjos aleatórios que ocorrem na estrutura de grãos, sobretudo devido ao desaparecimento destes. A abordagem de Pande foi criticada por vários autores, como Hunderi e Thorvaldsen apud Hillert. Segundo eles a adição do efeito aleatório não melhorava o ajuste aos dados experimentais, o que foi mais tarde reconhecido pelo próprio autor.

Outro a criticar a abordagem de Pande foi Mullins [MULLINS], numa análise bastante detalhada da equações de crescimento de grão. Sua conclusão foi que os efeitos aleatórios seriam desprezíveis ou simplesmente nulos. Nas suas próprias palavras:

"We conclude that Brownian fluctuations do not justify the diffusion term, except possibly on the scale of a few nanometers".

A análise de Mullins se baseou no cálculo da relação w/d , onde d é o diâmetro médio de grão e w é a raiz quadrada do deslocamento devido às flutuações Brownianas no contorno de grão durante um tempo t , suficiente para o contorno deslocar-se uma distância d sob a influência da força de curvatura. Na verdade, o que ele calculou foi a razão entre as influências da flutuação browniana e da curvatura. Para um valor de $d=10-8m$, $T=1000^{\circ}C$ e g (energia do contorno) = $0,3 \text{ J/m}^2$, Mullins chegou na razão $w/d \approx 0,02$, o que mostra que o efeito da flutuações Brownianas só é sensível para grãos de alguns nanômetros.

Vale lembrar que esses comentários não referem-se à abordagem estocástica do método de simulação computacional, mas ao tratamento analítico e ao equacionamento do crescimento de grão. Embora a verificação da validade do modelo de simulação passe necessariamente pela comparação com o tratamento analítico, todos os autores aqui citados concordam com a validade do modelo. Uma análise e comparação mais detalhada será feita no capítulo

Partículas de segunda fase

O crescimento de grão, entretanto, quase nunca se dá sem algum tipo de limitação. Como diz Dutra [DUTRA],

"As quatro formas conhecidas de inibição do crescimento normal de grãos são devidas a átomos de soluto, espessura da amostra, orientação preferencial pronunciada e partículas de segunda fase".

A partículas de segunda fase são especialmente interessantes ao modelamento computacional porque introduzem um elemento novo: diferentes energias de interface.

Quando uma partícula de segunda fase está em contato com o contorno de grão, é

necessária a criação de uma determinada área para que a migração do mesmo não seja interrompida. Isso, evidentemente, envolve a ultrapassagem de um potencial termodinâmico, ou seja, consumo de energia.

Segundo Rios, apud Dutra, não há substituição da interface matriz-partícula quando o contorno de grão interage com uma partícula de segunda fase. Assim, uma área de interface adicional deve ser criada e "a energia requerida para que o contorno atravessasse a partícula é utilizada por completo para criar essa nova superfície."

Supondo um arranjo aleatório de partículas de segunda fase esféricas, ele mostrou que a área (energia) de restrição devida às partículas pode ser representada por:

$$dS_p = 4\pi R_k^2 S_v^p dR_k \quad (3-27)$$

onde

S_v^p : área a ser criada devido a presença de partículas,

S_v^p : superfície específica das partículas de segunda fase,

RR: raio do grão analisado.

Segundo Dutra,

"A partir de uma estrutura de grãos esféricos, Rios mostrou que a variação total na superfície específica por grão médio consiste na soma da variação da superfície específica dos grãos numa estrutura que exibe crescimento normal de grãos com a variação da superfície específica devido à presença das partículas de segunda fase."

Zener [6] propôs a seguinte relação:

$$R = \frac{4r}{3f} \quad (3-28)$$

onde R: raio limitante (curvatura),

r: raio da partícula de segunda fase

f: fração volumétrica das partículas de segunda fase.

O raio R do grão nem sempre é igual ao raio de curvatura do contorno (r), fato esse que levou Smith apud Dutra a propor uma pequena alteração. A relação de Zener-Smith, portanto, é:

$$D = \frac{4r}{3f} \quad (3-29)$$

onde D é o diâmetro médio (tamanho médio) de grão.

Textura

Estudos teóricos e experimentais mostraram que a lei parabólica de crescimento de grão é raramente conseguida em materiais reais. As forças devidas a precipitados ou átomos estranhos dissolvidos no contorno de grão sempre foram consideradas como as principais causas desse desvio. Recentemente foi demonstrado experimentalmente, em ligas CuZn, AlMn e AlMg [BRICKEN] e em simulações por computador [EICHEL] que variações de textura podem ocasionar grandes alterações na cinética de crescimento de grão.

Vogel e Klimanek [CADGG] realizaram um interessante trabalho de comparação de resultados experimentais em ligas CuZn25 com o resultado da simulações de Lücke [LUCKE]. A idéia era investigar a afirmação de que grandes variações de textura faziam com que o coeficiente de crescimento n passasse do valor teórico de 0,5. Através de uma análise detalhada do tamanho de grão (por microscopia ótica) e da textura (por EBSP), os resultados indicavam um rápido crescimento no início do recozimento ($n=0,71$). No estágio final, a partir de 10 minutos, a taxa de crescimento cai bastante, chegando a $n=0,12$. Vogel aferiu que, no início do processo, o componente de textura {236}<385> dominava a amostra, com uma fração volumétrica de 63%. Depois de 128

minutos, esse valor havia caído para 11%.

Tempo de recozimento	Componente {236}<385>		Componente {296}<211>	
	Tamanho (m m)	Fração (%)	Tamanho (m m)	Fração (%)
1 min	11,6 ± 1	63	12,1 ± 1	16
32 min	39,7 ± 3,1	32	59,9 ± 3,7	61
128 min	54,2 ± 4,9	11	70,2 ± 4,2	73

Tabela 1 – Evolução de textura e tamanho de grão no CuZn25 a 600°C [CADGG]

Comparando com os resultados da simulação, concluiu-se que a etapa inicial de crescimento rápido estava ligado a fortes modificações de textura. Na segunda etapa, mais lenta, nenhuma modificação importante de textura foi identificada.

História e conceito dos Métodos de Monte Carlo

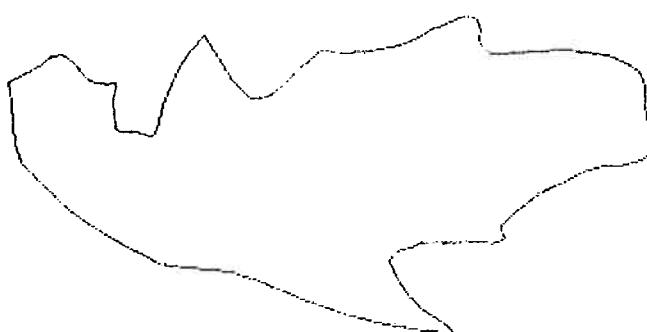
Projeto Manhattan

O nome do método de Monte Carlo vem da famosa cidade no principado de Mônaco, onde se encontram alguns dos mais famosos cassinos do mundo. Essa associação foi feita porque o método baseia-se no uso de números aleatórios, assim como a roleta dos cassinos de Monte Carlo.

O método existe desde o século XIX, mas sua primeira aplicação real surgiu na Segunda Guerra Mundial, quando a construção das armas nucleares exigiu complexas simulações sobre a difusão de neutrons. A partir daí vários pesquisadores passaram a estudar o método de Monte Carlo para aplicações mais "pacíficas", resolvendo diversos problemas da matemática e da física.

Cálculo de área, exemplo clássico

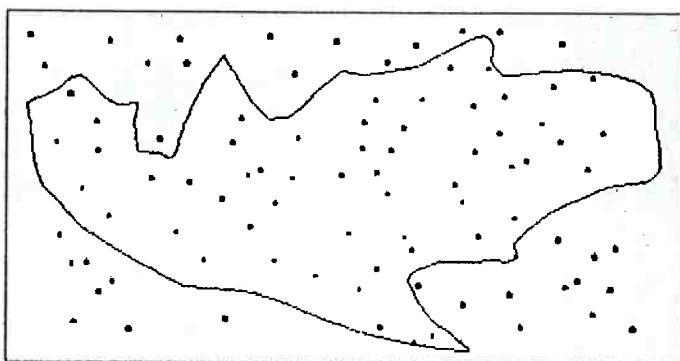
Mas... o que é o método de Monte Carlo? Vamos iniciar com um exemplo bastante simples: vamos imaginar que precisemos medir a área da figura abaixo:



A forma convencional de cálculo seria através da divisão da figura em várias porções geometricamente regulares e o cálculo de suas respectivas áreas. Esse método é bastante trabalhoso e, dependendo da figura, pode ser impraticável. Pelo Método de Monte Carlo, faríamos o seguinte:

- Encerrariammos a figura num retângulo de área conhecida.
- Espalharíammos 100 ou mais pontos aleatórios sobre a região.

- Contaríamos os pontos que caíram dentro e fora da figura e, através de uma simples "regra de três", teríamos a área com uma margem de erro controlável.



O método de Monte Carlo parece um "ovo de Colombo": depois de entender o seu conceito básico, nos perguntamos porque não havíamos pensado nisso antes...

Ao invés de partir de complicadas equações matemáticas para calcular um determinado fenômeno, ele faz uma infinidade de testes aleatórios e avalia quais estão "dentro" e "fora" das condições (ou da regra local) do problema.

O fato é que ele tem sido usado nos mais diversos campos do conhecimento, desde a simulação do comportamento de partículas subatômicas até a análise de risco nas bolsas de valores. Do conceito básico do método – a aleatoriedade – decorrem diversas conclusões teóricas: os métodos determinísticos (ou seja, que partem de equações pré-determinadas) são sempre aproximações mais "artificiais" do fenômeno real. Já os de Monte Carlo reproduzem – e aí está a sua maior beleza – a natureza aleatória da interação de átomos e moléculas, aproximando-se do fenômeno. Na natureza, as partículas evidentemente não têm "vontade própria". Seu comportamento, dentro de situações limitadas, pode ser descrito por leis probabilísticas, assim como na simulação de Monte Carlo.

Simulação de guerra

Mas... qual é a grande vantagem do método de Monte Carlo? É que ele permite resolver alguns problemas matemáticos muito complexos de forma muito simples e engenhosa. A solução analítica (ou seja, através de equações matemáticas) de alguns problemas pode ser extremamente trabalhosa ou simplesmente impossível. Pelo método de Monte Carlo, vários problemas sem solução podem ser resolvidos.

Imaginemos outro exemplo: uma guerra. Temos dois exércitos, cada um com um tamanho diferente, mas com soldados com as mesmas armas e o mesmo preparo. Seria possível prever o resultado da batalha? A solução convencional (analítica) para esse problema seria tentar montar uma espécie de equação:

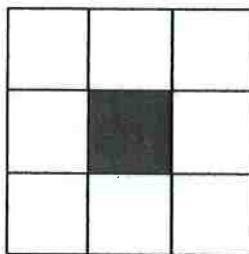
- Velocidade de avanço do exército = número de soldados x (qualidade das armas + preparo dos soldados)

Entretanto, esse tipo de solução é muito discutível: como avaliar a variável "qualidade das armas"? Será que o número de soldados influí linearmente no avanço do exército? Para determinar tudo isso, normalmente recorremos a várias experiências práticas. Avaliariam a história de várias guerras, testariam as hipóteses e verificariam se os resultados estão corretos.

Além de ser trabalhosa, essa solução está sujeita a muitas incertezas: será que consideramos todas as variáveis? Será que os efeitos observados têm as causas que imaginamos?

Mas como seria possível "simular" o resultados da guerra pelo método de Monte Carlo?

Uma solução seria dividir o campo de batalha em vários "micro-combates". O elemento considerado está em vermelho e a sua vizinhança mais próxima em cinza.



Cada soldado, nesse exemplo, pode estar cercado por até oito outros combatentes. Para cada micro-combate, avaliaríamos o seguinte: se o soldado está cercado por mais inimigos do que amigos, ele "perde" o micro-combate e é capturado pelo exército inimigo.



Da mesma forma, se num outro micro-combate há mais elementos do exército azul do que do vermelho, os azuis ganham uma posição. Como seria o esquema da simulação de Monte Carlo para essa "guerra" fictícia?

- Escolha aleatória de um soldado no local de combate.
- Primeiro cálculo: quantos vizinhos do mesmo exército tem o soldado (V_i)?
- Quantos vizinhos diferentes ele tem (V_d)?
- Se há mais vizinhos diferentes do que iguais ($V_d - V_i \leq 0$), o soldado é capturado e a posição passa para o outro exército.

Esse processo, repetido para todos os soldados, por milhares de vezes, só terá um resultado satisfatório se a regra básica (regra local) que definimos para a simulação esteja correta (ou seja, sempre quem tem mais soldados no "micro-combate" ganha).

Há um questionamento importante ao nosso "método": três soldados não podem ganhar de seis? Não há inúmeros casos, na história militar, de pequenos exércitos que vencem os grandes? Sim, evidentemente é possível que isso ocorra. Em termos mais rigorosos, há uma certa probabilidade de um grupo minoritário de soldados ganhar o "micro-combate". O Método de Monte Carlo permite que seja incluído esse elemento novo da simulação. Bastaria que rescrevêssemos o quarto item:

- Se há mais vizinhos diferentes do que iguais ($V_d - V_i \leq 0$), em 90% dos casos o soldado é capturado e a posição passa para o outro exército. Em 10% dos casos, o grupo minoritário vence o outro.

Poderíamos sofisticar ainda mais a simulação. Nossa exército pode ser dividido em dois grupos, uma tropa de elite e os soldados normais. Um integrante da tropa de elite tem o dobro de preparo de um soldado. Nossa quarto item ficaria, com essa modificação:

- Se há mais vizinhos diferentes do que iguais ($V_d - V_i \leq 0$), em 90% dos casos o soldado é capturado e a posição passa para o outro exército. Em 10% dos casos, o grupo minoritário vence o outro. Para o cálculo do número de vizinhos

diferentes ou iguais, caso algum deles esteja identificado como tropa de elite, conta como dois soldados normais.

Uma última sofisticação: suponhamos que um dos exércitos seja mais sensível ao calor, e que tenhamos uma variável auxiliar que nos dê a temperatura ambiente ao longo do dia, de acordo com o clima típico do local. Poderíamos cruzar as duas informações e teríamos um item dessa forma:

- Se há mais vizinhos diferentes do que iguais ($V_d - V_i <= 0$), em 90% dos casos o soldado é capturado e a posição passa para o outro exército. Em 10% dos casos, o grupo minoritário vence o outro. Para o cálculo do número de vizinhos diferentes ou iguais, caso algum deles esteja identificado como tropa de elite, conta como dois soldados normais. Caso a temperatura ambiente seja maior que 30°C, os soldados do exército azul passam a ter 20% a mais de chance de perder um "micro-combate".

As possibilidades de sofisticação são infinitas, e os resultados ficam cada vez mais precisos.

A simulação de crescimento de grão pelo Método de Monte Carlo, tema desse trabalho, é simples de entender à luz do exemplo anterior: a "guerra" aqui não é de soldados, mas de átomos. Os grãos, nessa analogia, equivalem aos exércitos.

Essa e outras analogias não são simplesmente "coincidências" ou curiosidades. O crescimento de grão baseia-se num princípio natural de evolução de estruturas onde há minimização de área interfacial por unidade de volume, que encontramos também em organismos biológicos e divisões ecológicas.

O método de Monte Carlo descreve com uma boa fidelidade impressionante o crescimento de grão, mas vai além: seu princípio é probabilístico, e o comportamento dos átomos também é.

Monte Carlo e os grãos

História: Strolovitz e o primeiro algoritmo

Tradicionalmente o estudo do crescimento de grão tem sido feito pela análise e comparação quantitativa de micrografias, muitas vezes com o auxílio de computadores e softwares de análise de imagem. Mais recentemente, entretanto, com o desenvolvimento do poder de processamento dos computadores, surgiu uma nova possibilidade: estender o uso da computação para simular o crescimento de grão.

Strolovitz et al. [SROLOVITZ1] propuseram a metodologia clássica de modelamento e simulação de crescimento de grão por computador, utilizando o método de Monte Carlo. Tal metodologia foi aprimorada por vários autores, como veremos no decorrer do trabalho, e atingiu um nível de sofisticação bastante alto.

O uso do método de Monte Carlo se mostra particularmente interessante para a simulação de um processo que envolve interações atômicas, já que se trata de um fenômeno físico habitualmente estudado com o auxílio da estatística. Com uma conceituação igualmente estatística, o método apresenta uma compatibilidade expressiva com o fenômeno.

Foi em 1983, com a publicação de "Grain Growth in Two Dimensions" [SROLOVITZ0], na Scripta Metallurgica, que o método de Monte Carlo passou a integrar as ferramentas para o estudo do crescimento de grão. Esse primeiro estudo atingiu um valor para o

expoente de crescimento de $n = \frac{3}{8}$. Logo depois, em 1984, os mesmos autores publicaram dois estudos muito mais aprofundados sobre o assunto ([SROLOVITZ1], [SROLOVITZ2]). Com enorme riqueza de detalhes, aspectos teóricos e experimentais foram discutidos. Dentre as contribuições do trabalho, vale citar:

- valor muito bom para o coeficiente de crescimento de grão (em torno de 0,43);
- estudo sobre o número de orientações máxima para a simulação;
- estudo da distribuição de tamanhos de grão da simulação e comparação com dados experimentais;
- discussão sobre os tipos de matrizes possíveis para a simulação de Monte Carlo.

Radhakrishnan, Saito, Mehnert e Penelle

Depois desses papers históricos, foi Radhakrishnan e Zacharia que deram o outro grande passo, com uma mudança conceitual no algoritmo que aproximou o coeficiente n do valor teórico de 0,50.

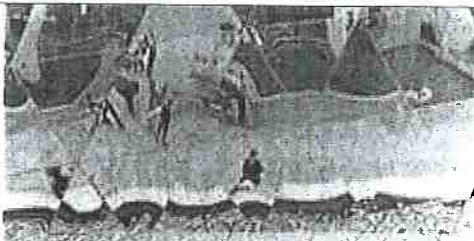
Mehnert contribuiu para a pesquisa de sistemas tridimensionais e com textura, além de um interessante trabalho sobre a conversão da escala de tempo da simulação.

O Japão é outro centro de desenvolvimento importante, principalmente na figura do Prof. Y. Saito, da Kawasaki Steel Corporation. Sua contribuição importante foi o estabelecimento de uma correlação entre os resultados do experimento e valores de crescimento de grão obtidos em amostras reais.

A Universidade d'Orsay, na França, é outro centro importante. Apesar de denominarem o método de "autômato celular", o conceito é o mesmo proposto pelo Prof. Zacharia e utilizado no mundo todo. Os professores Baudin e Penelle são os principais pesquisadores nesse tema, contribuindo para a pesquisa de crescimento de grão em aços-silício.

Sandia National Laboratories

Na visita que realizamos ao Sandia National Laboratories, em Albuquerque (NM), estivemos em contato com a nova fronteira da simulação de crescimento de grão. Com recursos computacionais expressivos (um dos maiores computadores paralelos do mundo está instalado lá, com 9.000 processadores Pentium Pro em paralelo), os pesquisadores do Sandia ocupam-se atualmente em modelar o crescimento de grão e a movimentação de poros no combustível nuclear de grandes mísseis balísticos (Elisabeth Holm), além de calcular a fração ideal de partículas inibidoras de crescimento de grão em uma liga (Mark Miamodo). Outra linha de pesquisa do laboratório é a previsão da microestrutura de juntas soldadas (Richard Fye) ([RFYE2], [MARK]).



Proector e Proctor!

Modelar o prever o comportamento de um

Journal of Health Politics, Policy and Law, Vol. 33, No. 3, June 2008
DOI 10.1215/03616878-33-3 © 2008 by The University of Chicago

1969-70
Yearly
Report

A idéia básica do uso do método de Monte Carlo para simular o crescimento de grão é tão simples quanto fascinante: ele se baseia quase inteiramente na termodinâmica das interações atômicas.

O primeiro passo é representar a amostra como uma matriz bi ou tridimensional. Nela, cada elemento de volume é representado por um valor numérico inteiro que indica a sua hipotética orientação cristalográfica. Porções contíguas da matriz com um mesmo valor constituem os grãos.

O primeiro ponto importante do modelo proposto por Srolovitz é a necessidade de discretização da amostra: precisamos, de alguma forma, dividi-la em uma série de pequenos elementos que possam ser manipulados pelo algoritmo. Outros métodos, que partem de modelos bastante diversos, tratam a amostra como contínua, sem a necessidade de discretização [3DVERT]. Entretanto, como o próprio nome diz, o método dos autômatos celulares necessita a discretização em "células": em outras palavras, a divisão do material em um número suficiente de elementos de volume para que o modelo reproduza adequadamente o fenômeno real. Se dispuséssemos de um computador com um poder de processamento altíssimo, poderíamos alcançar o nível atômico. Cada átomo da amostra seria mapeado na memória do computador e teríamos uma discretização "perfeita". Como isso não é possível para um número razoavelmente grande de átomos, a solução é criar pequenos elementos de volume.

Uma primeira forma de discretização é a divisão quadrada ou cúbica da matriz. Cada elemento terá, portanto, um conjunto de coordenadas (x,y) ou (x,y,z).

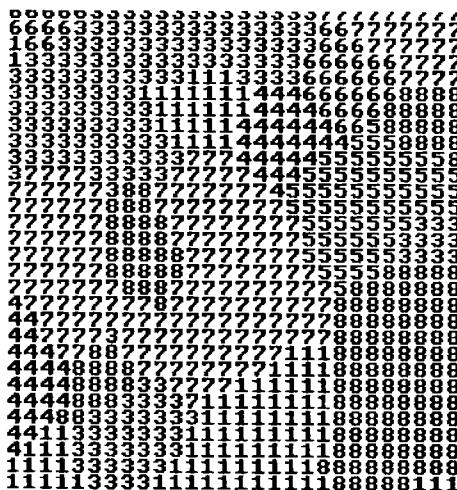


Figura 1 - Matriz bidimensional quadrada

O "contorno de grão", portanto, é uma superfície imaginária que separa volumes com orientações diferentes.

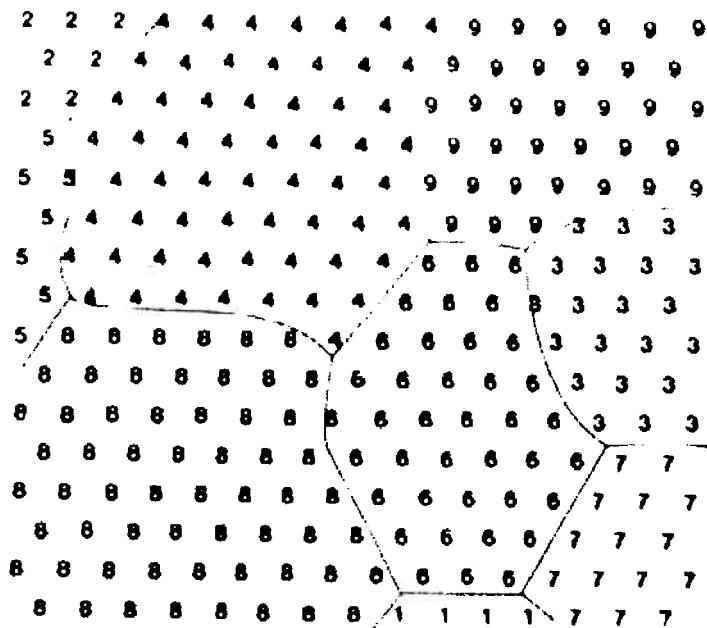


Figura 2 – Matriz triangular com os contornos de grão imaginários

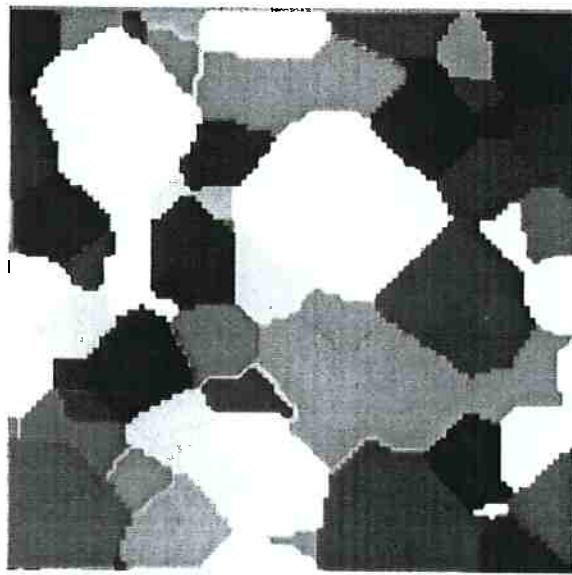


Figura 3 – A matriz numérica visualizada graficamente

Escolhida e preparada a matriz, devemos passar à simulação propriamente dita. Ela pode ser descrita em quatro etapas:

- cálculo da energia livre de cada "átomo" (G_i), com sua orientação cristalográfica atual (Q_i);
- atribuição aleatória de uma nova orientação ao "átomo";
- cálculo da nova energia livre do "átomo" (G_f) com a nova orientação (Q_f);
- comparação dos dois valores de energia livre ($G_f - G_i$). A orientação (Q_i ou Q_f) que minimiza a energia prevalece.

Essas quatro etapas são repetidas milhões de vezes em posições aleatórias do retículo cristalino. Temos como resultado geral uma simulação microscópica do abaixamento da energia livre do sistema, que é, na verdade, o que impulsiona o crescimento dos grãos.

No exemplo abaixo, podemos notar claramente a correlação entre a descrição geométrica do fenômeno e o algoritmo. Temos dois "recortes" de uma matriz quadrada, um feito antes da tentativa de reorientação e outro, depois. No primeiro, notamos que o contorno hipotético entre os dois grãos tem uma curvatura bastante acentuada. No segundo "recorte", entretanto, vemos que o contorno se torna reto, ou seja, há abaixamento da energia associada à curvatura dos contornos. A diferença de energia livre entre os dois estados indica que o segundo é mais favorável, sendo então mantido.

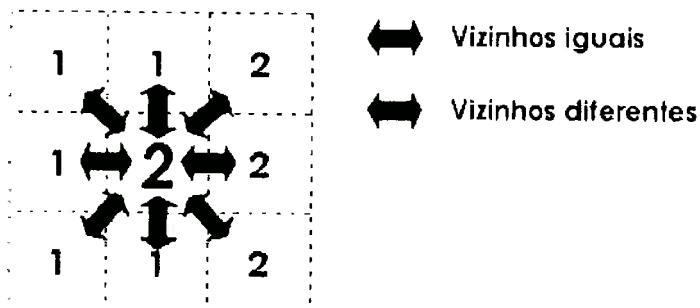


Figura 4 – Exemplo do cálculo de energia livre do elemento central da matriz ($Q_i = 2$). As vizinhanças diferentes são representadas por uma flecha preta, e as iguais, por uma branca. Nesse caso, o $G_i = 5$ (há cinco vizinhos de orientação diferente).

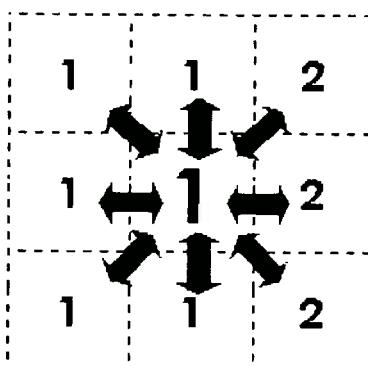


Figura 5 – Com uma tentativa de reorientação para $Q_f=1$, a energia livre cai para $G_f=3$. A diferença ($G_f - G_i$) é negativa (-2) e portanto a reorientação é energeticamente favorável.

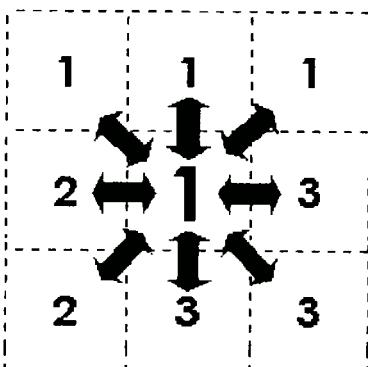


Figura 7 – Exemplo da estabilidade de um ponto triplo onde os ângulos entre os grãos são aproximadamente 120° . Uma reorientação para $Q=3$ resulta no

mesmo valor de energia livre ($G=5$). Já uma reorientação para $Q=2$ resulta numa configuração com maior energia livre ($G=6$), portanto não favorável energeticamente. Salvo flutuações estatísticas, essa configuração é estável.

É interessante notar que o princípio da simulação é apenas a termodinâmica do arranjo atômico: não se utiliza qualquer outra inferência teórica ou experimental, ou seja, não partimos de leis matemáticas de crescimento ou valores experimentais. Esses valores e leis serão, na verdade, o resultado das simulações e poderão ser comparados com valores experimentais.

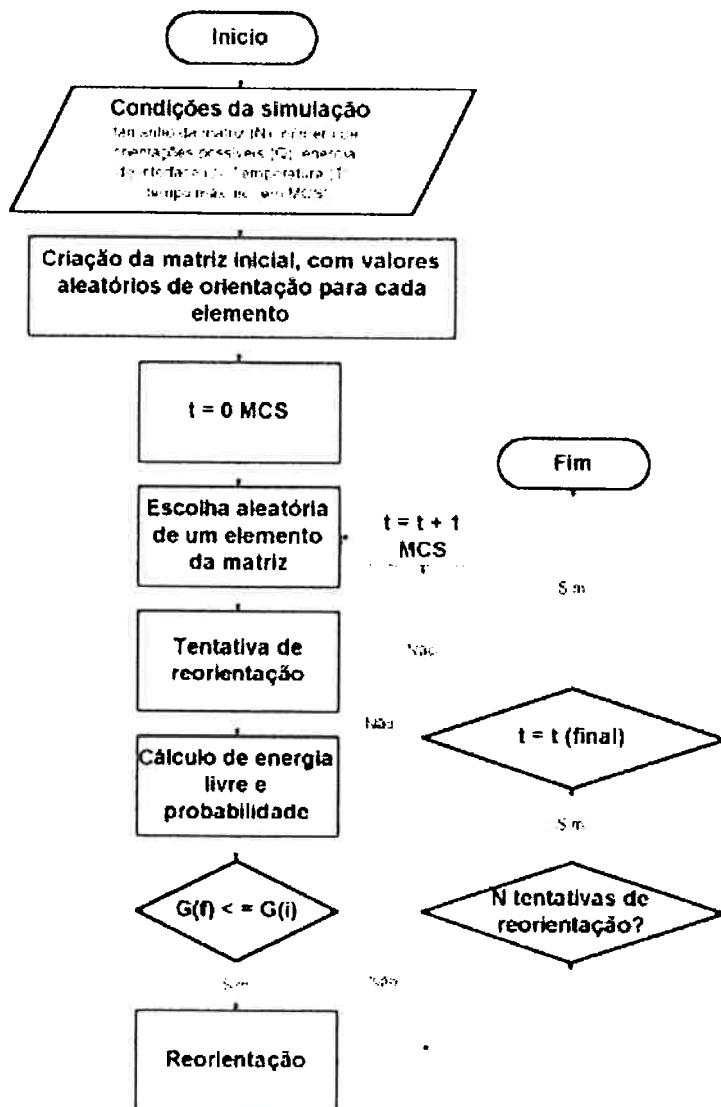


Figura 8 – Algoritmo básico [SAITO] - [Clique aqui para executar uma demonstração do programa de simulação](#)

O Hamiltoniano que descreve a interação entre os vizinhos mais próximos, a qual representa a energia do contorno de grão é:

$$H = -J \sum_{nn} |\delta_{ss} - 1| \quad (4-1)$$

onde s_i é uma das Q orientações possíveis no elemento i da matriz e $\delta_{\alpha\beta}$ é o delta de Kronecker, que vale 1 quando as suas parcelas são iguais e 0 quando são diferentes.

O resultado é que vizinhos diferentes contribuem em J para a energia do sistema e 0

caso sejam iguais.

A transição de probabilidade W é dada por:

$$W = \begin{cases} \exp(-\Delta G / k_b T) \Rightarrow \Delta G > 0 \\ 1 \Rightarrow \Delta G \leq 0 \end{cases} \quad (4-2)$$

onde ΔG é a alteração de energia ocasionada pela mudança de orientação, k_b é a constante de Boltzman e T a temperatura.

A velocidade do segmento do contorno que se move é, então:

$$v_i = C[1 - \exp(-\Delta G_i / k_b T)] \quad (4-3)$$

onde C é a mobilidade do contorno. É interessante notar a semelhança dessa equação com as que discutimos no item 1.3.

Apesar do método descrito ser aparentemente bastante coerente com o fenômeno físico, alguns autores perceberam que alguns problemas ocorriam: a nucleação aleatória de um grão no interior de outro e valores de n abaixo de 0,5. Como dois fenômenos sugeriam distorções no modelo computacional, Radhakrishnan e Zacharia [RADHA] propuseram um novo algoritmo que, além de eliminar tais distorções, acelera a execução computacional.

Neste novo algoritmo, a nova orientação a ser "testada" em cada posição da matriz não será mais escolhida entre todas as possíveis ($Q-1$), mas somente entre aquelas que estão ao redor do elemento. Dessa forma, se um elemento da matriz tem ao seu redor grãos com orientação 3, 6, 13 e 25, a sua nova orientação hipotética será escolhida entre esses quatro valores. Radhakrishnan realizou um interessante estudo analítico do problema. Definindo a constante de mobilidade

$$C = \frac{N_L}{Q-1} \quad (4-4)$$

onde N_L é o número de orientações diferentes daquela do elemento considerado e Q o número total de orientações. Numa matriz quadrada bidimensional N_L varia de 1 a 8. No início da simulação ele oscila entre 7 e 8, já que cada elemento da matriz está cercado de elementos diferentes. Com o avanço da simulação, esse valor cai para 1 ou 2, dependendo se o elemento está no contorno de grão ou em um ponto triplo. O número de pontos triplos tende a cair mais ainda, e o valor de N_L tende a 1.

No caso de uma simulação com $Q = 128$, teríamos no início da simulação:

$$C = \frac{8}{128-1} = 0,063 \quad (4-5)$$

e, no final,

$$C = \frac{1}{128-1} = 0,0079 \quad (4-6)$$

No novo algoritmo proposto o valor local de Q é 8. Os valores de C ficariam, respectivamente 1,14 e 0,14, o que expressa uma mobilidade maior e com menor variação ao longo da simulação.

Mehnert [TSCAL] também discutiu a questão da escala de tempo, chegando a um equacionamento semelhante.

Além disso, eles propuseram um novo critério para se definir o número máximo de orientações cristalográficas na simulação. Normalmente, valores de Q entre 30 e 64 eram utilizados. O coalescimento artificial dos grãos, segundo os mesmos autores, poderia ser outra razão para a distância entre os resultados das simulações e a descrição teórica do fenômeno. A proposta foi de adotar um valor máximo de Q igual ao número de sítios da matriz, o que minimizaria o problema. Assim, numa matriz de 200 x 200 (40.000 sítios) se utilizaria o valor máximo de $Q=40.000$.

A inclusão da influência da textura, no modelamento de Monte Carlo, segue o mesmo princípio já exposto no presente trabalho: trabalhar com o modelo físico antes de considerar o equacionamento e as simplificações matemáticas.

A existência de textura faz com que nem todas as características dos contornos sejam idênticas, assim como sua mobilidade.

O modelo proposto por Mehnert, e já utilizado por outros autores, é o da construção de uma matriz *simétrica* de energia dos contornos. Supondo uma liga com somente duas componentes de textura:

	A	B
A	0,2	1,0
B	1,0	0,2

No caso de três componentes de textura:

	A	B	C
A	0,2	1,0	0,6
B	1,0	0,2	0,3
C	0,6	0,3	0,2

A interpretação das tabelas é simples: o contorno A/A tem mobilidade cinco vezes menor do que o contorno A/B, por exemplo. Da mesma forma, o contorno A/C tem mobilidade duas vezes maior do que o B/C.

Dada a natureza da simulação, essas diferentes mobilidades devem ser interpretadas como probabilidades de migração dos contornos. Assim, o sucesso de uma reorientação (ou o sucesso de um micromovimento de migração) será determinado pela probabilidade genérica (do método convencional) multiplicada pela "mobilidade" de cada tipo de contorno.

Considerando o caso em que há somente duas componentes de textura, quando as tentativas de reorientação envolverem os contornos A/A E B/B, a probabilidade de confirmação será cinco vezes menor se comparadas às situações envolvendo o tipo A/B e B/A. Isso equivale dizer que é muito menos provável um grão de A crescer sobre outro do mesmo componente do que um grão de B crescer às custas de um de A (e vice-versa). Esse conceito reproduz a idéia de que contornos com grandes diferenças entre as orientações cristalográficas têm mobilidade maior.

A matriz de mobilidade deve ser fornecida ao programa, seja através de dados empíricos ou estimativas teóricas. A realização computacional desse conceito é

detalhada a seguir.

São definidas "classes" de valores de Q que correspondem aos componentes de textura. Assim, numa simulação com Q=100, o componente A ocupará a faixa 0-50 e o B, 51-100. A fração volumétrica dos dois, nesse caso, é idêntica.

O valor do Hamiltoniano continua sendo

$$H = -J \sum_{nn} |\delta_{ss} - 1| \quad (4-7)$$

A transição de probabilidade W, que valia

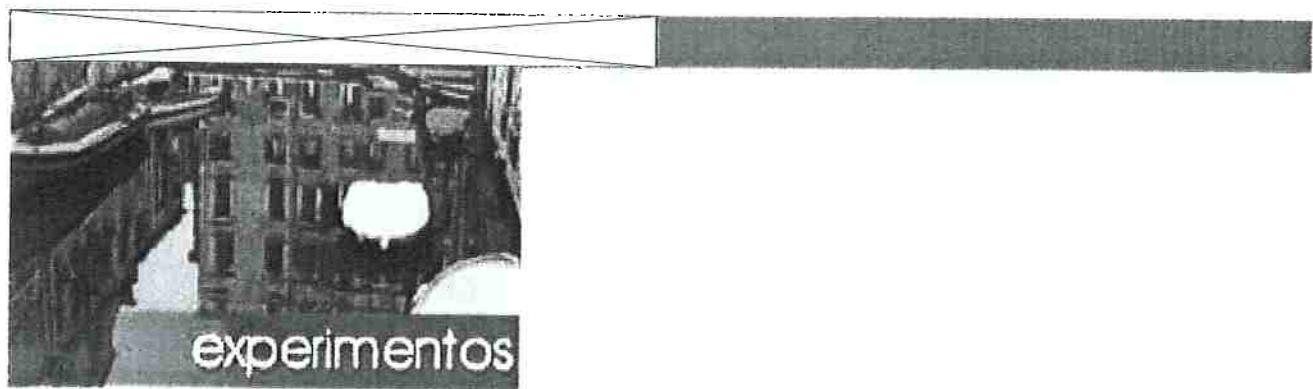
$$W = \begin{cases} \exp(-\Delta G/k_b T) \Rightarrow \Delta G > 0 \\ 1 \Rightarrow \Delta G \leq 0 \end{cases} \quad (4-8)$$

passa a valer

$$W = \begin{cases} P_{\alpha\beta} \exp(-\Delta G/k_b T) \Rightarrow \Delta G > 0 \\ P_{\beta\alpha} \Rightarrow \Delta G \leq 0 \end{cases} \quad (4-9)$$

onde $P_{\alpha\beta}$ são os elementos da matriz de mobilidade.

Utilizando esse algoritmo, Mehnert simulou estruturas de dois e três componentes numa matriz 500x500, com Q=100. Os valores do expoente n encontrados foram bastante próximos de 0,50 (0,47), e verificou-se que a fração de área ocupada pelos diferentes componentes tende a se inverter ao longo da simulação. Verificou-se também que, quanto maior a diferença de mobilidade, mais acentuada é a diferença final entre as frações dos dois componentes. Ambas as conclusões se encontram de acordo com as observações experimentais de Abbruzzese *apud* Mehnert, utilizando dados do Al-1%Mn (laminado a frio 95% e recozido a 620°C).



Experimentos (parte experimental)

Matrizes

Software e Hardware

O hardware usado para as simulações foi um Pentium II 233 Mhz com 64 MB de memória RAM.

O software de simulação sofreu várias implementações ao longo do trabalho. A primeira versão foi feita em Turbo Pascal 7.0, sendo depois convertida para ANSI C++. Elaboramos também o projeto de uma interface gráfica para o programa em Windows.

O software gera dois tipos de arquivo: o primeiro contém o tempo de simulação e o tamanho de grão, e o segundo contém "fotografias" das matrizes em intervalos regulares de tempo, escolhidos pelo usuário.

Para a visualização das matrizes, foi desenvolvido um sistema usando como plataforma o AVS, um pacote para visualização avançada. O sistema, desenvolvido por Sérgio Sami Saad no Laboratório de Sistemas Integráveis da Escola Politécnica da USP, sob a orientação do Prof. Dr. Marcelo Knorich Zuffo, possibilita o uso de matrizes 2D e 3D. No caso do primeiro tipo, podemos animar as diversas matrizes produzidas pelo programa em C++ e reconstruir graficamente a evolução do tamanho de grão.

No caso de matrizes tridimensionais, o software permite rotação e translação em todos os eixos, cortes em qualquer coordenada e visualização por isosuperfícies.

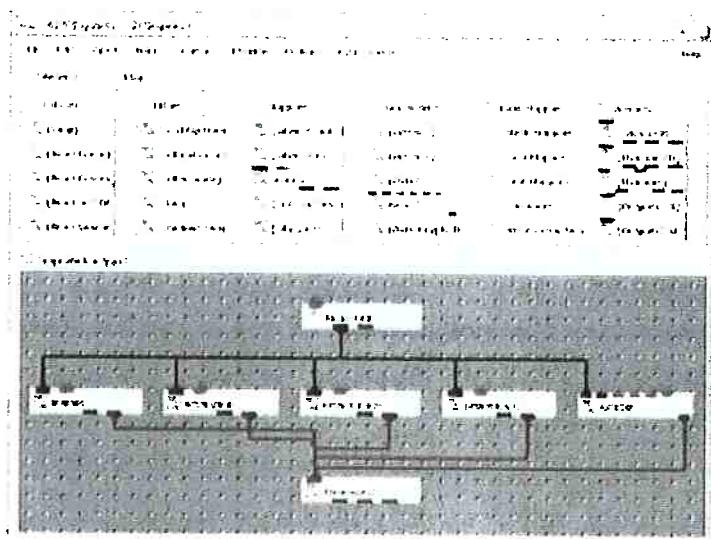


Figura 2 – O ambiente de desenvolvimento do AVS

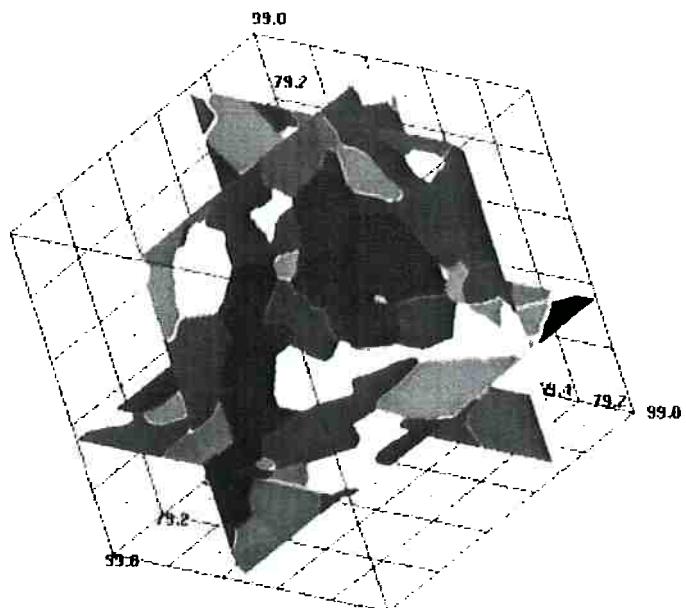


Figura 3 – Matriz 100 x 100 x 100, visualizada no AVS, com três cortes ortogonais.

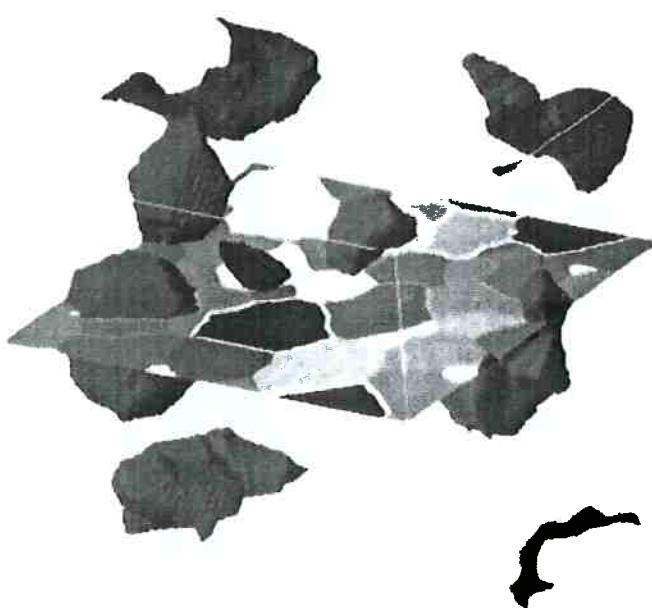


Figura 4 – A mesma matriz, agora visualizada por isosuperfícies. Apenas os grãos "azuis" aparecem.

Aprimoramento do modelo

Geradores de números aleatórios

A primeira preocupação quando se utiliza o Método de Monte Carlo é a confiabilidade do gerador de números aleatórios. Realizamos um extensivo estudo comparativo entre o Borland C++, MS-Excel 8.0 e Visual Basic 6.0 para averiguar a homogeneidade dos valores aleatórios gerados.

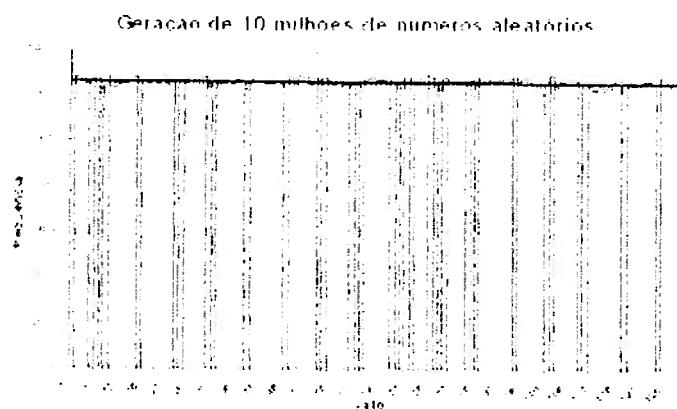


Gráfico 1 – Histograma de geração de números aleatórios no Visual Basic 6.0, comparável ao Visual C++ e ao MS-Excel 97 (8.0).

Os testes feitos com 10 milhões de números aleatórios no C++ e no Excel foram semelhantes ao do Visual Basic 6.0, com número aleatórios de 1 a 128. Os resultados mostraram que a média foi a mesma, a menos de variações na segunda casa decimal.

Tamanho da matriz e estabilização

No início das pesquisas com o algoritmo, nos preocupados de oito conjuntos de amos em definir qual seria o tamanho da matriz necessário para um resultado confiável e reproduzível. Normalmente valores como 2002 foram utilizados para simulações 2D e 503 ou 1003 para simulações 3D (Error! Reference source not found., [MEHNERT3], [MEHNERT2], Error! Reference source not found., [BAUDIN]). O tamanho evidentemente tem um forte impacto no tempo de computação necessário, já que um aumento de 1002 para 2002 multiplica por 4 o número de elementos da matriz.

Para realizar a análise, projetamos um experimento com tamanhos crescentes de matrizes, onde analisamos o tempo de simulação necessário para que cada uma atingisse a estabilidade. Esse estado ocorre quando a matriz toda é um monocrystal ou quando temos dois ou três grãos com interfaces praticamente retas.

Dessa forma foi possível estabelecer uma lei temporal empírica de estabilização da matriz. Essa equação é especialmente interessante para o projeto de experimentos: se em uma determinada simulação precisaremos de apenas 10.000 MCS para estudar um fenômeno qualquer, podemos calcular o tamanho mínimo da matriz que fornecerá resultados aceitáveis. O gráfico abaixo contém os d

simulações, para tamanhos de 10, 25, 50, 75, 100, 125, 150, 175 elementos de lado.

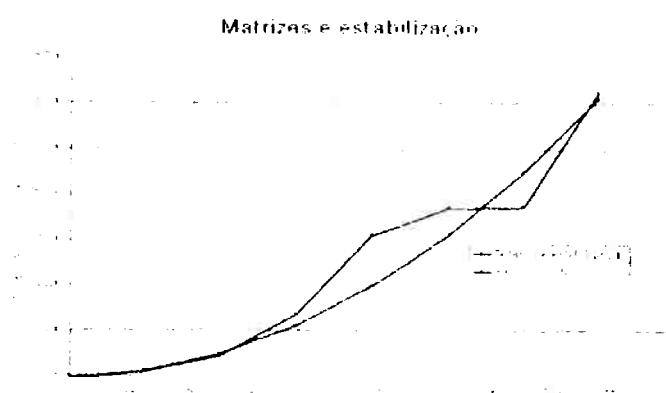


Figura 5 – Tamanhos de matrizes e tempo de estabilização, em Monte Carlo

Steps. Notamos que o tempo para estabilização da matriz é proporcional à área da mesma (que, na realidade, corresponde a atingir o estado monocristalino ou com muitos poucos grãos de contornos retos).

Um resultado interessante é a proporcionalidade do tempo para estabilização e a área da matriz. Isso corresponde, na verdade, à quantidade de material de uma amostra real. É de se esperar que numa simulação tridimensional o tempo de estabilização fosse proporcional ao volume da matriz.

A importância desse resultado é que, de posse desse dado, podemos projetar um experimento de modo a otimizar o tempo de processamento. De posse dos parâmetros do material e do tamanho de grão final do experimento, podemos utilizar o menor tamanho de matriz necessário.

Estudo dos algoritmos

A primeira implementação do software foi realizada em Turbo Pascal 7.0, da Borland Corporation. Essa plataforma de desenvolvimento, entretanto, apresentava várias limitações principalmente no gerenciamento de memória. Como as matrizes do algoritmo são bastante grandes, esse é um ponto crítico.

Quando precisamos construir matrizes maiores, a necessidade de migração para o C++ foi premente. Como as duas linguagens são estruturadas e apresentam várias características conceituais comuns, a migração foi suave. Para assegurar que ambos os programas apresentavam resultados equivalentes, realizamos uma comparação entre os dois.

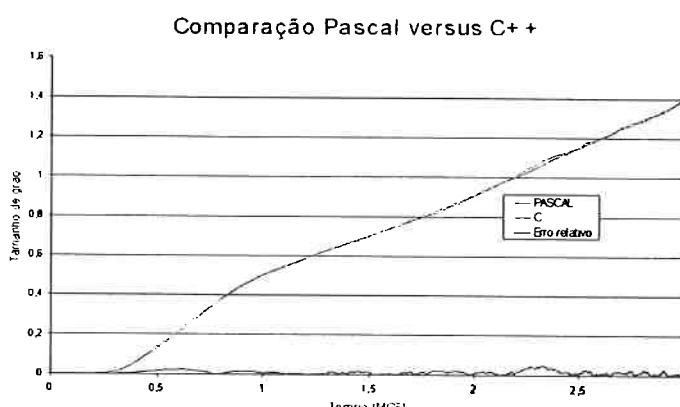


Figura 6 – Comparação dos programas executados em Pascal e em C++. Verifica-se que os resultados foram praticamente idênticos, com baixo e estável erro relativo.

Pelo gráfico verificamos que as duas curvas praticamente se superpõe. Esse resultado garante a validade do algoritmo e a confiabilidade do gerador de números aleatórios de ambos.

Estudo dos valores de Q

Diversos autores têm se preocupado em estudar o valor ideal de Q. As duas preocupações principais são evitar a coalescência artificial de grãos e conseguir um coeficiente de crescimento de grão compatível com o valor teórico. O número máximo de orientações Q é importante já que a probabilidade de acerto num sorteio, pelo algoritmo tradicional, é proporcional a Q-1 [MEHNERT3]. A cinética do processo pode ser alterar já que, para um número muito pequeno de orientações possíveis, a coalescência artificial de grãos acelera o crescimento aparente. Isso ocorre porque dois grãos de tamanho D repentinamente se unem (já que o valor da orientação de cada um deles, coincidentemente, é o mesmo) e formam um novo grão de tamanho 2D.

O valor de Q, portanto, deveria ser tão alto quanto possível, como propuseram Zacharia

et al. [RADHA]. Entretanto, um valor elevado de Q pode prejudicar a velocidade do programa de simulação, já que precisaremos usar tipos de variáveis compatíveis. Quanto menor o número de orientação, menos bytes cada elemento ocupará. A consequência é que a matriz ocupará menos espaço e os cálculos se aceleram.

Para investigar essa questão projetamos um experimento com vários valores de Q: 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512, 1024 e 30.000.

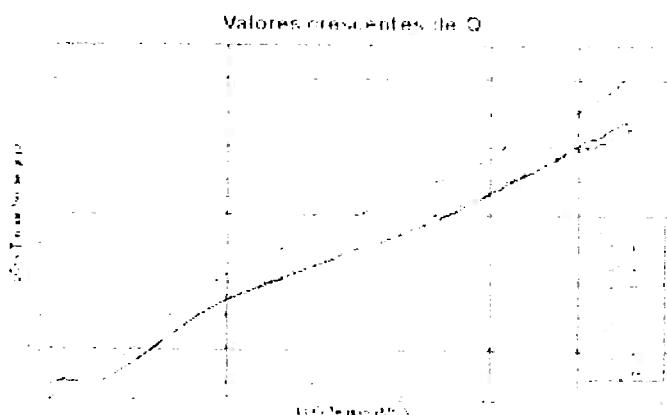


Figura 7 – Gráfico com valores crescentes de Q (o número máximo de orientações dos elementos da matriz), mostrando a alteração na cinética do crescimento de grão.

Para Q=8 observamos o efeito discutido anteriormente, da aceleração do processo: a curva é a que apresenta um valor de n mais elevado. Já em Q=16 esse efeito é menos notável e, já em Q=64, o gráfico mostra claramente que as curvas se superpõe. Por segurança, escolhemos para as simulações o valor de Q=128 como padrão (valor esse que se encontra dentro da faixa das variáveis do tipo byte, no C++ e no Turbo Pascal).

O Efeito da "Temperatura"

Outra variável importante do algoritmo de Srolovitz é a "temperatura". Antes de qualquer mal-entendido, é bom dizer que colocamos "temperatura" entre aspas porque esse valor não corresponde à temperatura física. Trata-se, na verdade, de um fator de ajuste do algoritmo [MARK]. Como discutido na interessante reunião com os pesquisadores do Sandia National Laboratories Mark Miamodo, E. Fan e Richard Fye, a temperatura física é tratada de outra forma, introduzida no algoritmo como modificador da mobilidade das interfaces e não no termo exponencial da transição de probabilidade. Esse termo regula as mudanças de orientação quando a configuração proposta não é energeticamente favorável. No material real o movimento browniano dos átomos faz com que transições com D G positivo também possam ocorrer, embora tenham pouca probabilidade de se manter. No algoritmo, esse mesmo conceito é reproduzido. Mesmo se a mudança aleatória de orientação aumentar a quantidade de interface do elemento considerado, ela poderá ser aceita com uma determinada probabilidade, já que

$$W = \begin{cases} \exp(-\Delta G / k_b T) & \Rightarrow \Delta G > 0 \\ 1 & \Rightarrow \Delta G \leq 0 \end{cases} \quad (4-1)$$

onde ΔG é a alteração de energia ocasionada pela mudança de orientação, k_b é a constante de Boltzman e T a temperatura.

Normalmente esse fator é eliminado pela maioria dos autores (que simplesmente adotam $T=0$, [MEHNERT3], Error! Reference source not found.) no caso de matrizes triangulares. No caso de matrizes quadradas, Srolovitz afirma que ele é necessário para corrigir o tipo de discretização Error! Reference source not found. da matriz quadrada. Para investigar esse fato, projetamos um experimento com quatro situações. Na primeira, uma mudança

não-favorável energeticamente nunca será mantida. Nas três outras, há uma probabilidade fixa de 0,1%, 1% e 10 % da mudança ser aceita pelo algoritmo.

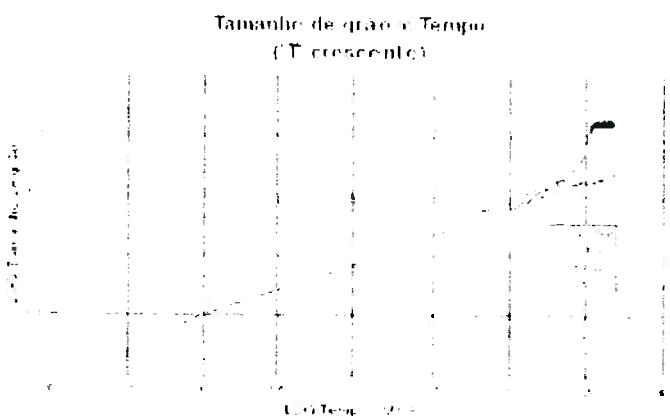


Gráfico 2 – Tamanho de grão x Tempo com valores crescentes de "T". Como exposto anteriormente, T não representa a temperatura física, e sim um coeficiente adicional que permite que situações de maior energia livre sejam mantidas.

Os resultados do gráfico indicaram que esse fator, mesmo na matriz quadrada, pode ser negligenciado. Até aproximadamente 10.000 MCS, as quatro simulações apresentaram o mesmo coeficiente angular. A simulação com 10% (curva azul clara), depois de aproximadamente 12.000 MCS, apresentou um crescimento momentâneo e depois retomou o mesmo coeficiente angular, mas com oscilação periódica em torno da reta média. Entretanto, nenhuma melhora no coeficiente angular das curvas foi conseguido.

Algoritmo convencional x novo

Uma mudança importante ocorrida na simulação de crescimento de grão pelo método de Monte Carlo foi o novo algoritmo proposto por Zacharia [RADHA]. Nesse algoritmo, a "nova" orientação é escolhida apenas entre aquelas dos vizinhos mais próximos, e não entre todas as possíveis ($Q-1$) como no algoritmo convencional de Srolovitz. Realizamos então uma série de experimentos para comparar os dois algoritmos.

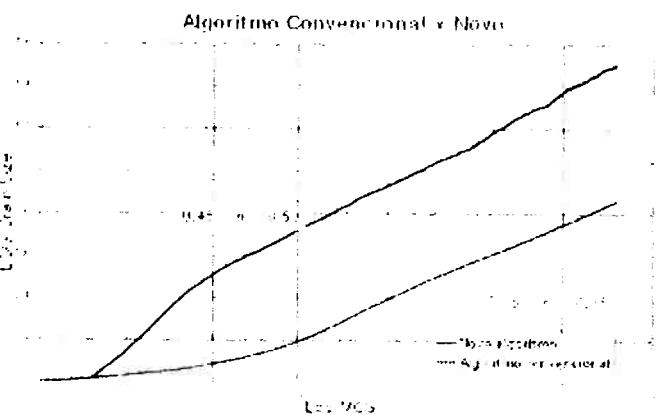


Figura 8 – Comparação entre o algoritmo convencional e o novo, numa matriz 200 x 200, com Q=128.

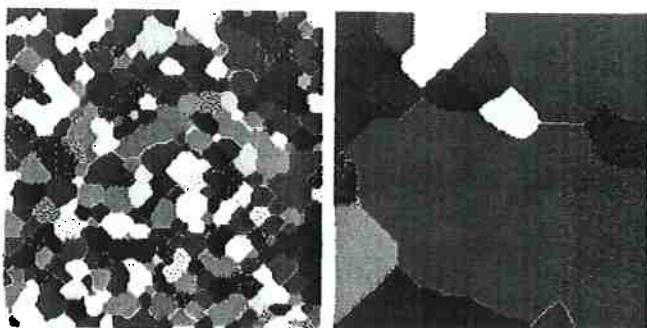


Figura 9 – Comparação das microestruturas obtidas pelo algoritmo clássico (esq.) e pelo algoritmo modificado de Zacharia (dir.), no mesmo instante de tempo. É clara a diferença do estágio de evolução da microestrutura, o que reflete-se no coeficiente angular da curva Log x Log.

Simulação final

Passamos então a realizar experimentos para determinar o expoente de crescimento de grãos propriamente dito, dentro das condições otimizadas anteriormente definidas. Vale lembrar que os estudos expostos nos itens anteriores foram de extrema utilidade para a calibração do modelo, o que se refletiu na qualidade dos resultados finais, que vemos no gráfico seguinte.

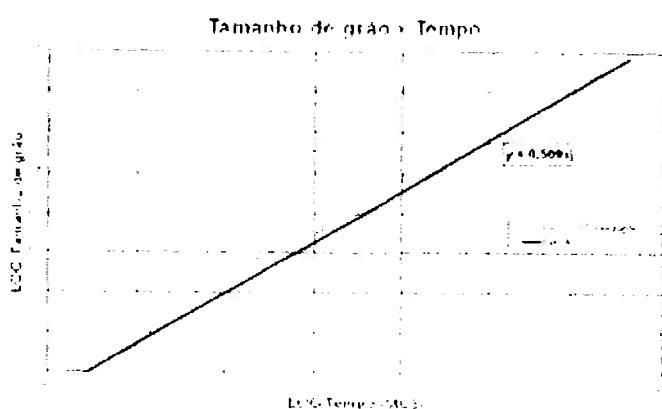


Gráfico 3 – Tamanho de grão em função do tempo de simulação, em MCS. A concordância com o valor teórico de $n = 0,50$ é expressiva.

Observamos que o expoente de crescimento obtido, $n=0,509$, está muitíssimo próximo do valor teórico de 0,50.

Uma análise mais detalhada desse resultado é feita a partir do próximo gráfico. Realizamos uma análise do expoente de crescimento de grão depois de cada passo da simulação.

Histograma dos coeficientes angulares locais

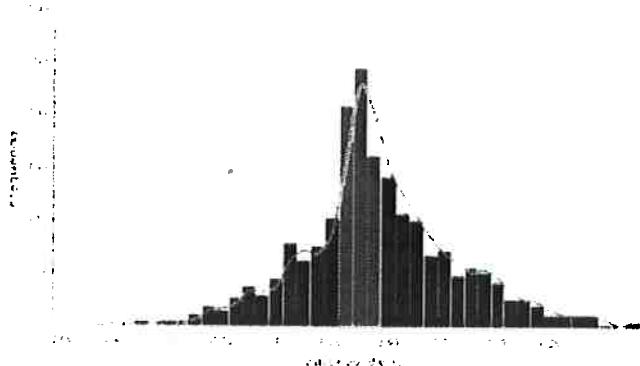


Gráfico 4 – Histograma dos coeficientes angulares locais da curva de crescimento, plotada em um gráfico log x log, a cada 10 MCS. O valor da mediana é de 0,48 e a média 0,52.

O resultado foi que, como observamos no histograma, a maior parte dos valores se concentra no intervalo de 0,38 a 0,59, com média 0,52. Isso mostra que, mesmo analisado passo a passo, o algoritmo apresenta um coeficiente de crescimento compatível com o valor global.

Comparação com resultados experimentais

O experimento "real"

O tratamento de crescimento de grão foi realizado em forno do tipo retorta. Foram feitos ensaios de 2, 4 e 16 horas sob uma temperatura de 8500C.

O material em questão, Fe-2,5%Si, com baixíssimo carbono (< 0,005), é bastante vulnerável à oxidação, principalmente em alta temperatura. Portanto, adotou-se conduzir o experimento no vácuo para assegurar que não ocorresse oxidação da amostra.

Além disso, houve precauções no momento de abertura do forno para que não ocorresse oxidação da chapa anterior ao seu resfriamento.

Preparo de amostras para microscopia

Primeiramente, as amostras foram preparadas em lixadeira circular com água com as seguintes lixas: 180, 220, 320, 400, 600, 1000. Em seguida foram polidas nas politrizes 6m , 3m , 1m .

Depois as amostras foram atacadas com reagente Nital (5%). No entanto, a observação das amostras revelou a presença de pites de corrosão ao longo de todas as amostras.

Assim, as amostras foram novamente lixadas e polidas, sendo adotado o procedimento de lixamento a seco e nas politrizes teve-se a precaução de exposição mínima das amostras para evitar qualquer tipo de oxidação.

O ataque químico não se revelou homogêneo ao longo da amostra. Alguns grãos se encontravam bastante revelados e outros tinham um ataque pouco pronunciado. Assim, para a estimativa de controle de grão exagerou-se no tempo de ataque a fim de assegurar ao máximo que nenhum contorno de grão ficasse oculto à observação durante a estimativa.

Num segundo momento, as amostras que foram utilizadas para a estimativa foram novamente polidas e atacadas, mas com cautela para não atacar excessivamente nenhuma região.

A caracterização e a compreensão das propriedades de um material denotam uma estreita correlação com a microestrutura do material. Sendo assim, é fundamental uma medida mais precisa possível do tamanho de grão.

As medidas de tamanho de grão podem ser determinadas através de diversas técnicas. Devido à irregularidade de formatos dos grãos, o conceito de diâmetro de grão é muito arbitrário. Um dos métodos constitui a medida por interceptos [UNDERWOOD].

Segundo Hilliard [HILLIARD], a estimativa de tamanho de grão pelo método do intercepto é feita com o auxílio de uma linha de comprimento padrão sobreposta à microestrutura. Assim, deve-se fazer uma contagem do número de contornos de grão que interceptam a linha.

A relação entre o número de intersecções por unidade de comprimento está diretamente relacionado com a área de contorno de grão por unidade de volume.

$$NL = SV / 2 (-2)$$

Onde NL é o número de interceptos por unidade de comprimento e SV a área de contorno de grão por unidade de volume.

Através da relação matemática acima é possível obter o tamanho de grão através da medida média do comprimento do intercepto:

$$L = LT / N \cdot M (-3)$$

onde L é a média do comprimento do intercepto, LT o comprimento da linha teste, N o número de intersecções sobre a linha teste e M a magnitude do aumento

A figura teste ideal proposta por Hilliard é um círculo, no caso do experimento foi utilizada uma linha teste do microscópico Neophot já calibrada.

Os campos escolhidos para as medidas devem ser feitos de modo aleatório. Como a amostragem de contagem é feita de modo probabilístico, deve-se fazer um tratamento estatístico dos dados (média, desvio padrão, erro). Não obstante, deve-se estabelecer nível de confiança de aproximadamente 95% para que o resultado tenha significado. [ABRAMS]

Resumidamente, o método consiste em fazer tantas medidas quantas forem necessárias até que o desvio padrão se torne constante, ou seja, que o desvio padrão calculado seja correspondente a heterogeneidade da própria microestrutura.

Determinação do tamanho de grão nas amostras

Para as amostras ensaiadas, a metodologia para determinação do contorno de grão foi feita de acordo com a norma ASTM E-112.

No que concerne o significado estatístico das medidas, a norma estabelece que devem ser feitas no mínimo um total de 500 contagens de interceptos numa amostra para que o seu desvio padrão seja mínimo.

Foi utilizada como linha teste, uma linha graduada de 0,8mm do microscópio Neophot. Estabeleceu-se a contagem de 20 campos escolhidos aleatoriamente. Para tanto, a escolha do aumento teve como critério o número mínimo 25 pontos dos contornos interceptando a linha teste.

Como já foi citado, o ataque químico da amostra foi feito de modo mais pronunciado para que não fosse ignorado nenhum contorno de grão e para garantir uma contagem confiável.

A tabela abaixo mostra a contagem, a média, o desvio padrão e o erro na determinação dos tamanhos de grãos das amostras. Notamos que o desvio padrão e o erro aumentam para tempos maiores, já que como observamos nas fotografias, não há uma distribuição

homogênea do tamanho de grão.

Tempo (h)	Média	Desvio padrão	Erro
0	53,0	11,0	4,9
2	112,7	14,7	6,6
4	127,5	20,1	9,0
16	141,6	26,0	11,6

Os quatro tratamentos térmicos realizados, nos apresentaram resultados interessantes.

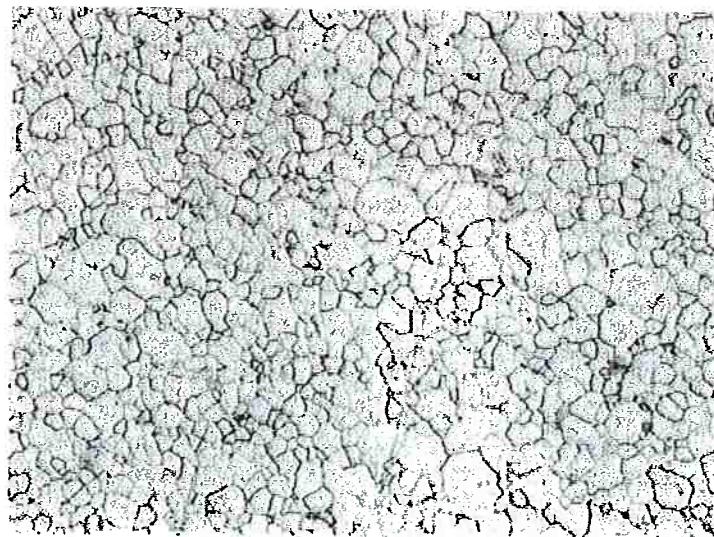


Figura 10 – Aumento 50X, sem tratamento

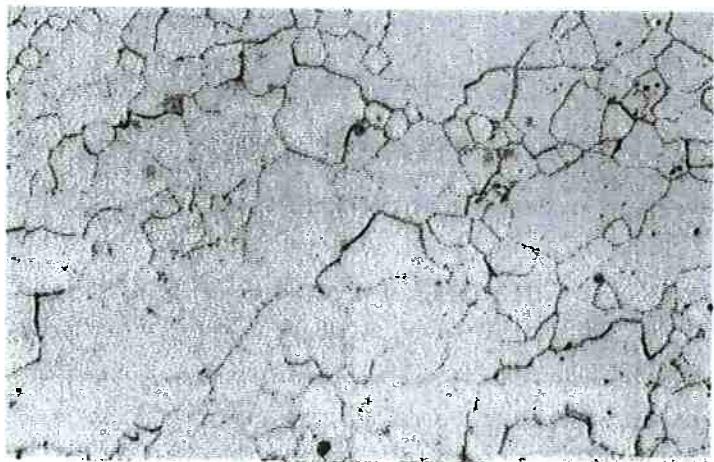


Figura 11 – Aumento 50x, tratamento de 2h



Figura 12 - Aumento de 50X, 4h de tratamento

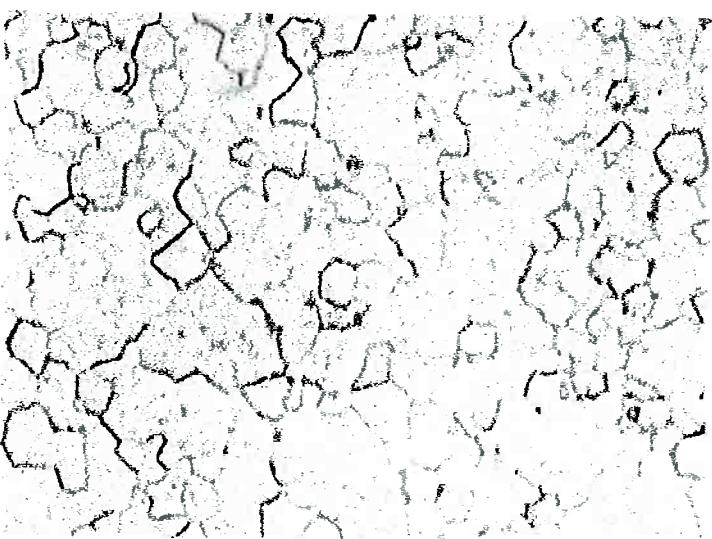


Figura 13 – Aumento de 50x, 16h de tratamento

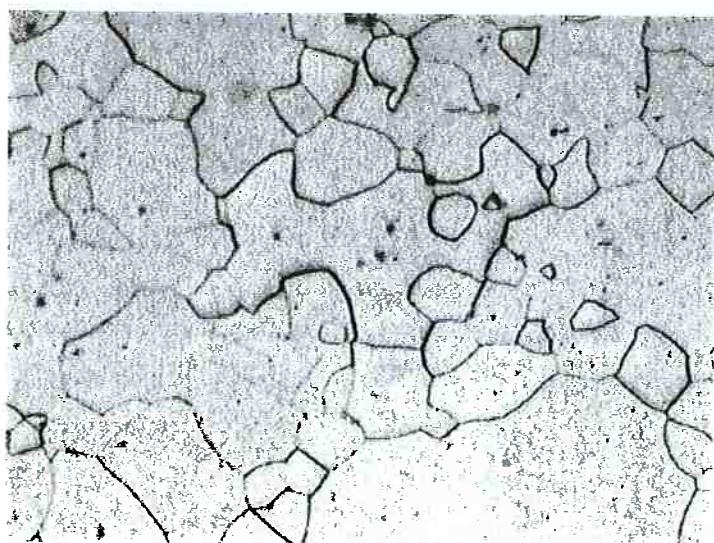


Figura 14 - Aumento de 100x, 16h de tratamento, notamos que a distribuição de tamanhos de grão é provavelmente bimodal

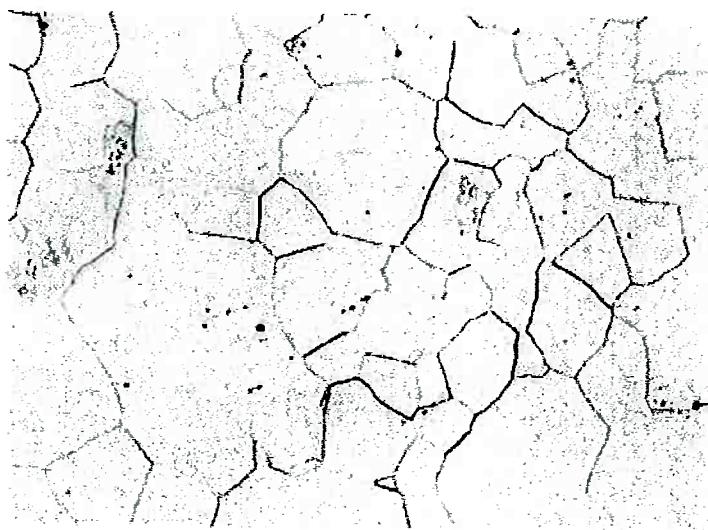


Figura 15 - Aumento de 100x, 2h de tratamento, notamos que a distribuição de tamanhos de grão é mais uniforme do que no exemplo anterior.

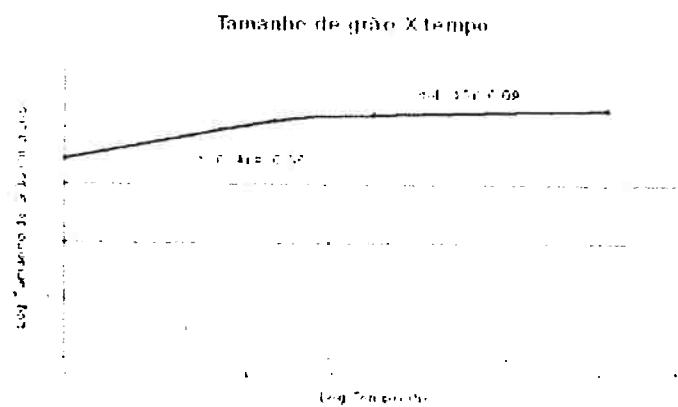


Gráfico 5 – Gráfico em escala logarítmica do tamanho de grão versus tempo, revelando um coeficiente de 0 a 4h de 0,56 e de 4 a 16h de 0,09.

Em primeiro lugar, o coeficiente de crescimento de grão, obtido linearmente a partir do gráfico $\log \times \log$, está dentro do esperado: de 0 a 4h, o valor é bastante próximo do fornecido pelo modelo e pela teoria. A medida que os grãos alcançam a ordem de grandeza da espessura da chapa (em torno de 100 m m), seu crescimento é inibido fortemente, e o coeficiente cai para 0,09.

A simulação de crescimento de grão pelo método de Monte Carlo é assunto relativamente novo. Dados fundamentais, tais como a mobilidade de interfaces, são ainda escassos. Num futuro próximo, quando dados detalhados acerca das propriedades dos contornos atingirem "massa crítica", a simulação por computador poderá ocupar um lugar ainda mais importante no cenário da análise microestrutural.



Conclusão

O modelo utilizado, pelos resultados das simulações, apresenta uma concordância expressiva com a descrição e o equacionamento teórico do crescimento de grão.

A investigação dos valores de Q, da "temperatura" e do tamanho da matriz nos permitiu construir uma "base" teórica para utilizar o método de Monte Carlo de forma consistente.

A correlação com a experiência realizada na liga Fe-Si demonstrou a correção e a boa calibração do modelo.

É possível utilizar a simulação como ferramenta auxiliar na pesquisa de crescimento de grão.



Au revoir (reflexão final)

Uma tentação freqüente nas ciências humanas é a "importação" de modelos de outras áreas para resolver problemas cuja solução se mostra difícil com as ferramentas habituais. A importância científica das ferramentas de modelamento computacional aplicada ao comportamento humano e social é enorme: elas poderiam nos ajudar a equacionar e entender melhor diversos fenômenos sociais. Seu uso poderia aliviar problemas que perseguem a humanidade há séculos: superpopulação, saúde pública, disseminação de epidemias etc.

Entretanto, daí a propagandear que é possível "modelar" o cérebro humano há uma grande distância. Esse modelamento poderá até ser possível no futuro, mas apenas dentro de situações bastante específicas e limitadas.

Mesmo se conseguíssemos representar cada um dos bilhões de neurônios do cérebro humano num supercomputador, e que alimentássemos o sistema com as regras químicas e

físicas através das quais eles se relacionam, não sabemos se o resultado seria uma réplica do cérebro humano. Nas palavras de David Fogel [FOGEL]:

"Um modelo é uma mentira. Eles sempre deixam algo de lado, senão seriam tão complicados como a realidade que queremos modelar."

Mas... não seria possível sofisticar tanto o modelo que ele se transformasse em... realidade? Como engenheiros, não temos sempre a tentação de aprimorar nossos resultados, diminuir sua imprecisão, melhorar sua confiabilidade? E esse processo não seria, a princípio, infinito, dependendo apenas da qualidade de nossos equipamentos de simulação e medição?

Ora, o Princípio da Incerteza de Heisenberg provou que a observação de um fenômeno qualquer interfere no mesmo. Haverá sempre uma incerteza mínima na determinação da localização e da velocidade de um elétron, dada a interação que inevitavelmente existe entre o fóton emitido e a própria partícula.

Uma das conclusões mais caras às ciências humanas é, de certa forma, análoga ao Princípio da Incerteza de Heisenberg. Max Weber, um dos fundadores da Sociologia Moderna, destruiu o mito da imparcialidade científica: um sociólogo não poderá descrever uma sociedade de forma completa e imparcial porque ele jamais poderá enxergá-la sem os "filtros" criados durante a sua própria história de vida. O observador não só estará sempre interagindo com o seu objeto de estudo como também perceberá a "realidade" sempre de forma subjetiva. Segundo Izidoro Blikstein, em "Kaspar Hauser ou a Fabricação da Realidade" [HAUSER], os "óculos sociais" determinam a visão de mundo de cada um, e a "realidade" como entidade única e incontestável simplesmente não existe.

Mas será que os engenheiros, físicos e químicos estariam também sujeitos à subjetividade? Nossa observação também estaria condicionada pelo nosso repertório? Já que um modelo, por mais "científico" que seja considerado, será sempre incompleto, ele sempre envolverá escolha, seleção. Ora, não há escolha que não seja em alguma medida mediada pelo repertório. Dirão os exatos que o engenheiro faz escolhas com base em dados objetivos e que, portanto, seriam decisões "absolutas". Entretanto, sabemos que uma experiência fornece uma quantidade infinita de dados. Quais são selecionados? Quais são desprezados? O que nos garante que estamos vendo o que efetivamente corresponde à "verdade"? Antes de Einstein, Bohr e Planck, quantos experimentos que hoje estão no campo da mecânica quântica e da relatividade não foram explicados com razoável aceitação pela Física clássica? Ora, como podemos explicar um fenômeno com as ferramentas teóricas erradas?

A resposta é que a denominação de "ciências exatas" se deve ao ferramental matemática, mas não é uma qualificação das respostas que podemos oferecer. Muitas vezes, nossas soluções não são tão "exatas" assim, apesar que quase sempre funcionarem.

Nosso modelo de crescimento de grão de fato se aproxima bastante do que as equações indicam. Mas não temos a pretensão que ele seja, afinal, realidade.

Os recentes avanços da Ciência, tais como a clonagem, a engenharia genética ou mesmo a inteligência artificial parecem estar sempre ameaçando os "segredos fundamentais" da natureza, que sempre acreditamos complexos demais para a nossa compreensão. Se eles serão desvendados, não sabemos ainda. Mas podemos torcer para que, por mais que a Ciência avance e que os computadores insistam em imitar cada vez melhor seus criadores, continuemos inexplicavelmente encantados ao olhar um amanhecer, imodeláveis diante da mulher que amamos, incontroláveis frente do desafio de viver, incorrigíveis, improváveis, inalcansáveis; assim humanos, *terrivelmente humanos*.



Bibliografia

Referência bibliográficas

- [IDONE] Idone Bringhenti. O Ensino na Escola Politécnica da USP, EPUSP (1993).
- [HU] Hsun Hu. Acta Metall. 204-206, xiii-xiv (1996).
- [BRANDT] R. Brandt, G. Abbruzzese, K. Lücke. Acta Metall. 204-206, 289-194 (1996).
- [BRANDT2] R. Brandt, G. Abbruzzese, K. Lücke. Acta Metall. 204-206, 295-302 (1996).
- [KLIMANEK] S. Vogel, P. Klimanek. Acta Metall. 204-206, 449-454 (1996).
- [LOUAT] N. P. Louat. Acta Metall. 22, 721 (1974).
- [PANDE] C. S. Pande. Acta Metall. 35, 2671 (1987).
- [MULLINS] W. W. Mullins. Acta Metall. no prelo, (1998).
- [EICHEL] Eichelkraut, H. G. Abbruzzese, K. Lücke. Acta Metall. 36, 55 (1988).
- [SROLOVITZ1] M. P. Anderson D. J. Srolovitz G. S. Grest. Acta Metall. 32, 783 (1984).
- [SROLOVITZ2] D. J. Srolovitz, M. P. Anderson, G. S. Grest. Acta Metall. 32, 793 (1984).
- [LUCKE] K. Lücke, R. Brandt, G. Abbruzzese. Materials Science Forum, 204-206, 19-32 (1996).
- [NOGAMI] A. Nogami, T. Matsumiya, Y. Fukuda. Materials Science Forum, 204-206, 303-308 (1996).
- [HILLERT] M. Hillert. Materials Science Forum, 204-206, 3-18 (1996).
- [OHNUMA] O. Ohnuma, H. Ohtani. Materials Science Forum, 204-206, 34 (1996).
- [TSUZUKI] Y. Tsuzuki, Y. Suzuki. Materials Science Forum, 204-206, 192 (1996).
- [FUCHIZAKI] K. Fuchizaki, K. Kawasaki. Materials Science Forum, 204-206, 233 (1996).
- [ENOMOTO] M. Enomoto, M. Kamiya. Materials Science Forum, 204-206, 71 (1996).
- [PENELLE1] R. Penelle, P. Paillard, T. Baudin. Materials Science Forum, 204-206, 121 (1996).
- [THOMPSON] C. V. Thompson, R. Carel. Materials Science Forum, 204-206, 83 (1996).
- [SROLOVITZ0] D. J. Srolovitz, M. P. Anderson, G. S. Grest. Scripta Metall. 17, 241 (1983).
- [BAUDIN] Y. Liu ,T. Baudin, P. Penelle. Scripta Metall. 34, 1679 (1996).
- [MEHNERT3] K. Mehnert, P. Klimanek. Scripta Metall. 35, 699 (1996).
- [BECK] P. A. Beck, J. C. Kremer. Trans. AIME, 175, 372 (1948).
- [FORTES] M. A. Fortes. Trans Tech Publ., 319-323 (1992).
- [ABRUZZESE] G. Abbruzzese, K. Lücke. Materials Science Forum, 204-206, 55 (1996).

- [YAMAZAKI] Y. Yamazaki, T. Watanabe. Materials Science Forum, 204-206, 257 (1996).
- [HUNDERI] O. Hunderi, N. Ryum. Materials Science Forum, 15, 1104 (1980).
- [FIONOVA] L. Fionova, Yu. Lisovski, T. Watanabe. Proc. ICOTOM, 445-460 (1996).
- [BRICKEN] W. Brickenkamp, K. Lücke. Proc. ICOTOM, 113-115, 697 (1993).
- [MEHNERT1] K. Mehnert, P. Klimanek. Computational Materials Science, 7, 103 (1996).
- [MEHNERT2] K. Mehnert, P. Klimanek . Computational Materials Science, no prelo (1998).
- [RADHA] B. Radhakrishnan, T. Zacharia. Metallurgical and Materials Trans 26A, 167 (1995).
- [VANDER] George Vander Coort. Grain size measurement. ASTM Committee.
- [MARK] Mark Miamodo, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM (comunicação pessoal) (1998).
- [RFYE2] R. Fye, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM (comunicação pessoal) (1998).
- [SHEWMON] P. Shewmon. Transformations in Metals, 316 (1969).
- [BURKE2] J. E. Burke, D. Turnbull. Progress in Metal Physics 3, 220 (1952).
- [MEHNERT3] K. Mehnert, P. Klimanek. Internet, site pessoal do autor (1996).
- [PILANA] Sabri Pilana . Internet, site pessoal do autor (1995).
- [SAITO] Y. Saito, M. Enomoto. ISIJ International 32, 267 (1992).
- [RFYE] R. Fye. Fast Monte Carlo Algorithm. Sandia News Internet, Sandia National Laboratories (1997).
- [DUTRA] J. C. Dutra. Tese de Mestrado. EPUSP (1994).
- [LAURENT] P-J. Laurent. FC Grenoble (1965).
- [BURKE] J. E. Burke. Trans. Am. Inst. Min. Engrs., 180, 73 (1949).
- [ABRAMS] H. Abrams. Metallography, 4, 59 (1971).
- [HILLIARD] J. Hilliard. Metal Progress 85, 99 (1964).
- [UNDERWOOD] E. Underwood. Metals Handbook 9 (9a.), 123.
- [FOGEL] D. Fogel. Comunicação pessoal (1998)
- [BLIKSTEIN] I. Blikstein. Kaspar Hauser ou a Fabricação da Realidade, Cultrix, 4^a (1997).
- Bibliografia de apoio
- J. Liberty, J. Hord. ANSI C++, SAMS Publishing (1996).
- J. Taylor. Dicionário Metalúrgico, ABM (1996).
- V. Paternostro. O Texto na TV. Brasiliense (1987).
- H. Farrer. Pascal Estruturado. Guanabara (1986).
- R. Sproul. Not a chance: the myth of chance in modern Science. Bakerbooks (1994).
- I. Peterson. The jungles of randomness: a mathematical safari. John Wiley (1998).