

Universidade Federal Fluminense

GUILHERME COSTA DE OLIVEIRA

Implementação e Melhoria no Desempenho de um
Algoritmo de Monte Carlo para Crescimento de Grão
Normal em C++

VOLTA REDONDA

2018

GUILHERME COSTA DE OLIVEIRA

Implementação e Melhoria no Desempenho de um
Algoritmo de Monte Carlo para Crescimento de Grão
Normal em C++

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia. Área de Concentração: Modelagem computacional de materiais.

Orientador:

Wesley Luiz da Silva Assis

Coorientador:

Paulo Rangel Rios
Tiago Araújo Neves

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

VOLTA REDONDA

2018

Ficha catalográfica automática - SDC/BEM

O48i Oliveira, Guilherme Costa de
Implementação e Melhoria no Desempenho de um Algoritmo de
Monte Carlo para Crescimento de Grão Normal em C++ /
Guilherme Costa de Oliveira ; Wesley Luiz da Silva Assis,
orientador ; Paulo Rangel Rios, coorientador. Volta Redonda,
2018.
69 f. : il.

Dissertação (mestrado)-Universidade Federal Fluminense,
Volta Redonda, 2018.

DOI: <http://dx.doi.org/10.22409/PPG-MCCT.2018.m.14844743767>

1. Crescimento de Grão. 2. Simulação Computacional. 3.
Método de Monte Carlo. 4. OpenMP. 5. Produção intelectual.
I. Título II. Assis, Wesley Luiz da Silva, orientador. III.
Rios, Paulo Rangel, coorientador. IV. Universidade Federal
Fluminense. Escola de Engenharia Industrial e Metalúrgica de
Volta Redonda.

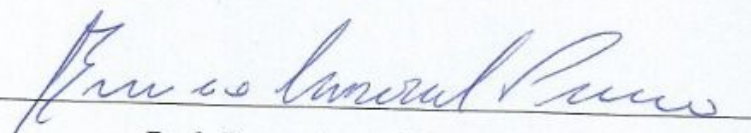
CDD -

Implementação e otimização de um Algoritmo de Monte Carlo para
Crescimento de Grão Normal em C++

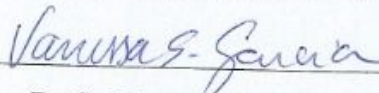
Guilherme Costa de Oliveira

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia. Área de Concentração: Modelagem computacional de materiais.

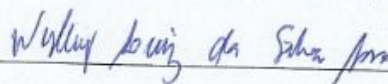
Aprovada por:



Prof. Bruno Amaral Pereira, D.Sc.



Prof^a. Vanessa da Silva Garcia, D.Sc.



Prof. Wesley Luiz da Silva Assis, D.Sc.

Volta Redonda, 10 de Setembro de 2018.

Para minha mãe e meu cachorro

Agradecimentos

Para Deus, pela saúde e pela ajuda que mais ninguém pode dar.

A minha mãe por tudo.

Ao meu irmão pelas caronas.

À Marcela pela compreensão e por estar ao meu lado o tempo todo.

À minha filha Marina pelo incentivo.

Ao meu amigo Jonathas por ter me acompanhado nesses anos de estudo.

A todos os demais que contribuíram para a realização deste trabalho.

Resumo

Neste trabalho foi desenvolvido um código para minimização da energia interfacial de um sistema, baseado no Método de Monte Carlo. O código foi utilizado para realizar simulações de crescimento normal de grãos de materiais cristalinos em três dimensões. Este fenômeno possui características evolutivas semelhantes às regras de transição propostas neste modelo computacional. O foco foi a melhoria deste código criado, com a paralelização deste e análise dos ganhos temporais, assim como da validade dos resultados. Foram analisadas a cinética de crescimento de grão e a auto similaridade que ocorre assintoticamente no crescimento de grão. Os resultados obtidos foram representados por meio de microestrutura em 3D e de gráficos que representam a evolução de grãos equiaxiais. Esses resultados estão de acordo com a literatura, com um comportamento semelhante ao do fenômeno real.

Abstract

In this work it was developed a code to minimize the interfacial energy of a system, based on the Monte Carlo Method. The code was used to perform simulations of normal grain growth of crystalline materials in thdimensional dimensions. This phenomenon has evolutionary characteristics similar to the transition rules proposed in this computational model. The focus was the improvement of this created code, with the parallelization of this and analysis of temporal gains, as well as the validity of the results. The kinetics of grain growth and the self similarity that occur asymptotically in grain growth were analyzed. The results obtained were represented by means of microstructure in 3D and graphs that represent the evolution of equiaxial grains. These results are in agreement with the literature, and they have a similar behavior to that of the real phenomenon.

Palavras-chave

1. Simulação Computacional
2. Métodos Numéricos Estocásticos
3. Paralelização
4. OpenMP
5. Modelo de Potts

Glossário

α	: Constante adimensional da velocidade de crescimento de grão
α_ν	: Coeficiente da velocidade de encolhimento da esfera
β	: Inversa do produto da constante de Boltzmann e a temperatura
γ	: Energia livre interfacial por unidade de área
Γ	: Configuração espacial de fase
κ_B	: Constante de Boltzmann
$\kappa_B T$: Temperatura de Simulação
ν	: Taxa de variação do tamanho de grão médio
ρ	: Raio de curvatura de contorno de grão
θ	: Ângulos entre os diedros de grãos
A	: Área do grão em duas dimensões
ANH	: Average N-Hedra
b	: Produto da energia livre interfacial por unidade de área e da mobilidade dos contornos
\vec{F}	: Força motriz atuando nas juntas do modelo Vertex
E_0	: Energia interfacial entre dois volumes unitários
f_{par}	: Fração paralelizável de um programa
H	: Hamiltoniana de um sistema
k	: Raiz quadrada da constante proporcional ao produto da energia livre interfacial por unidade de área e a mobilidade dos contornos de grão
K	: Constante proporcional ao produto da energia livre interfacial por unidade de área e a mobilidade dos contornos de grão
L	: Número de lados dos grãos
\bar{L}	: Número de lados médio dos grão médio
M	: Mobilidade dos contornos de grão
MCS	: Monte Carlo Step
MCU	: Monte Carlo Unit
n	: Expoente de crescimento de grão
p	: Juntas duplas e triplas do modelo Vertex
P	: Número de processadores

-
- q : *Vetor velocidade de um sistema*
- Q : *Número de orientações possíveis no método de Potts*
- r : *Vetor posição de um sistema*
- R : *Raio de Curvatura*
- R_0 : *Raio inicial da esfera*
- \bar{R} : *Tamanho de grão médio*
- \bar{R}_0 : *Tamanho de grão médio inicial*
- s : *Número de arestas de um grão em duas dimensões*
- S : *Razão do tempo de execução de um algoritmo com um processador e o tempo com vários processadores*
- t : *Tempo*
- T_r : *Temperatura física*
- V : *Volume do grão*

Sumário

1	Introdução	13
1.1	Justificativa	13
1.2	Objetivo Geral	15
1.3	Objetivos Específicos	15
2	Crescimento de Grão	16
3	Simulação do Crescimento de Grão	25
4	Método de Monte Carlo	29
5	Metodologia	35
5.1	Material Utilizado	35
5.2	Características do Algoritmo	35
5.3	Estrutura do Algoritmo	38
5.3.1	A classe “Simulações”	39
5.3.2	A classe “Malha”	39
5.3.3	A classe “Simulação”	40
5.3.3.1	Função Energia	42
5.3.3.2	Função Tamanho	42
5.3.3.3	Função Lados	42
5.3.3.4	Função Salve	42
5.4	Paralelização do Algoritmo	42

5.4.1	OpenMP	43
5.5	Verificação da Cinética Controlada pela Curvatura	44
6	Resultados e Discussão	47
6.1	Resultados da Simulação	47
6.2	Resultados da Otimização	58
7	Conclusões e Trabalhos Futuros	64
7.1	Conclusões	64
7.2	Trabalhos Futuros	64
	Referências	66

Capítulo 1

Introdução

1.1 Justificativa

Muitos materiais encontrados na natureza possuem uma microestrutura cristalina. Isso significa que seus átomos estão organizados de maneira periódica formando arranjos chamados de cristais ou grãos. Um cristal isolado é demonstrado na Figura 1.1.

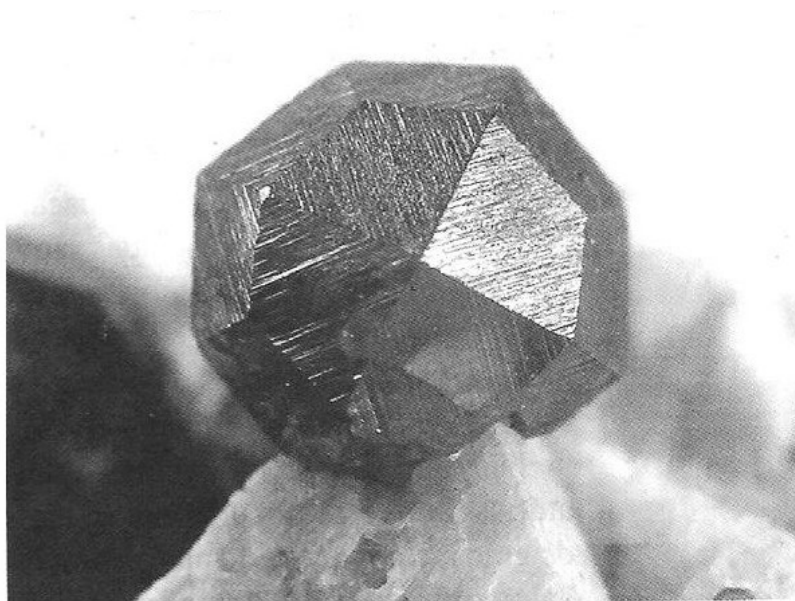


Figura 1.1: Fotografia de um monocristal [4]

Materiais cristalinos em geral são formados por diversos cristais e são chamados de materiais policristalinos. Em materiais policristalinos, os átomos que os compõem formam estruturas atômicas regulares que se repetem até encontrarem uma interface com outro grão de orientação diferente. Essa interface é o contorno de grão. A Figura 1.2 mostra a formação dessas interfaces durante a solidificação de um material policristalino.



Figura 1.2: Esquema demonstrando as etapas da solidificação de um material policristalino, com a nucleação (a) e crescimento dos cristais (b) até seu encontro e formação dos contornos de grão (c) e (d). [4]

Nos metais, como os aços, o tamanho de grão contribui para as propriedades do material, tais como a resistência à deformação, à fadiga e a fluência; propriedades elétricas e magnéticas [4], e o controle do tamanho que eles possuem é essencial para controlar as propriedades desses materiais.

Para esse controle ser possível, é preciso entender o fenômeno de crescimento de grão, que é detalhado no capítulo 2 deste trabalho. Uma das formas de conseguir isso é através da simulação computacional e alguns dos principais métodos de simulação computacional para crescimento de grão, que são o método do Autômato Celular, o modelo Vertex e o método de Monte Carlo, são apresentados no capítulo 3. Entre esses métodos, o método de Monte Carlo é o mais utilizado [53] e devido à sua versatilidade e facilidade de adaptação para diversas situações, de fácil aplicação tanto em duas como em três dimensões [46], foi o método escolhido para este trabalho. O Método de Monte Carlo é discutido no capítulo 4.

Métodos de Monte Carlo são métodos de simulação de eventos estocásticos que podem ser decompostos em processos isolados. No caso dos algoritmos de Monte Carlo utilizados para a simulação de crescimento de grão, a microestrutura dos grãos é discretizada e a redução da energia interfacial é a força motriz da evolução estrutural [20].

No capítulo 5 é apresentada a metodologia, com o hardware e software utilizado na simulação e detalhes do algoritmo. Um problema das simulações de crescimento de grãos de Monte Carlo é o alto consumo de tempo que essas simulações necessitam. Uma solução é a paralelização computacional da simulação. O método de paralelização escolhido também é apresentado no capítulo 5. No capítulo 6 os resultados são analisados e comparados com a literatura, junto aos testes da paralelização do código, com as conclusões sendo apresentadas no capítulo 7.

1.2 Objetivo Geral

Desenvolver um algoritmo de Monte Carlo para simular o crescimento de grão normal.

1.3 Objetivos Específicos

Obter resultados através da simulação semelhantes aos esperados pela literatura no fenômeno de crescimento de grão.

Monitorar a evolução da estrutura durante a simulação.

Otimizar o código do algoritmo de Monte Carlo para melhorar o desempenho computacional.

Comparar os resultados da simulação obtidos com resultados anteriores.

Otimizar a velocidade de processamento do algoritmo através da paralelização de funções.

Capítulo 2

Crescimento de Grão

O crescimento de grão é entendido como o aumento no tamanho de grão em um material monofásico ou do tamanho de grão de uma matriz em um material com partículas de segunda fase [15]. Ele é resultado da migração do contorno de grão que é um efeito da redução da energia de contorno de grão [53] que ocorre durante tratamentos térmicos apropriados [4]. Na prática distingue-se dois tipos de crescimento de grão, o crescimento de grãos normal e o crescimento anormal ou recristalização secundária. Durante o crescimento normal de grão (Figura 2.1), os tamanhos dos grãos individuais são relativamente uniformes e possuem uma distribuição unimodal [2].

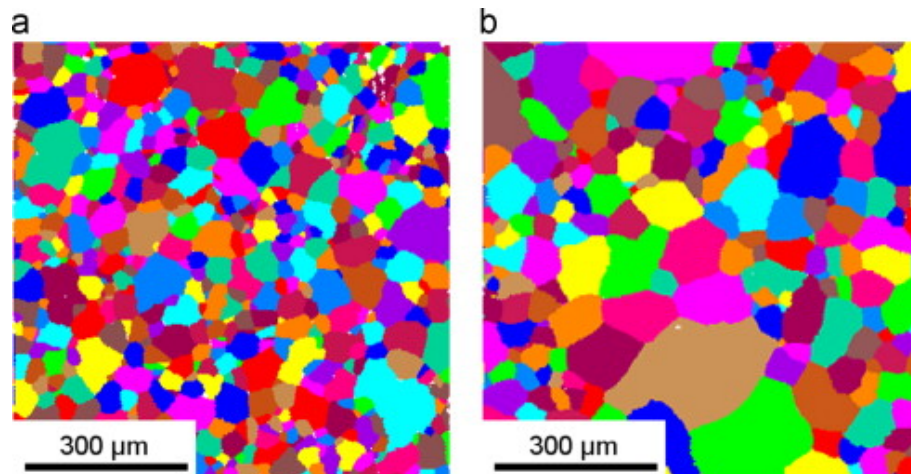


Figura 2.1: Crescimento de grão normal em uma superliga de níquel. Imagens obtidas por difração retrodifundida por elétrons para o tratamento térmico por 120 min à temperatura de 1160 °C (a) Microestrutura de referência, (b) Microestrutura após o tratamento térmico [41]

Já durante o crescimento anormal (Figura 2.2), a diferença entre os tamanhos de grão individuais aumenta devido ao crescimento rápido de alguns grãos, formando uma distribuição bimodal (Figura 2.3). Quando estes consumirem todos os grãos menores, os

grãos restantes podem atingir uma distribuição uniforme novamente [15].

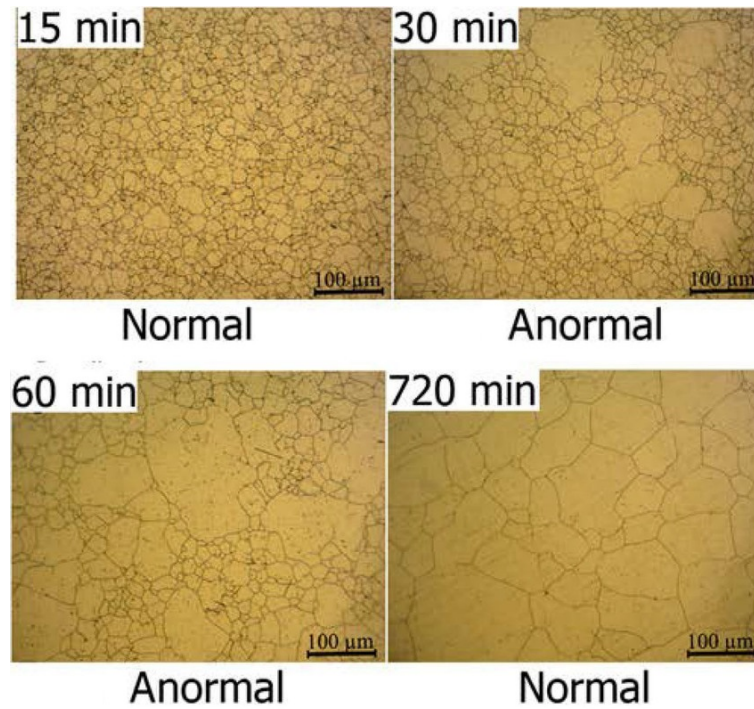


Figura 2.2: Recozimento de amostra mostrando o desenvolvimento do crescimento anormal até o seu fim [36].

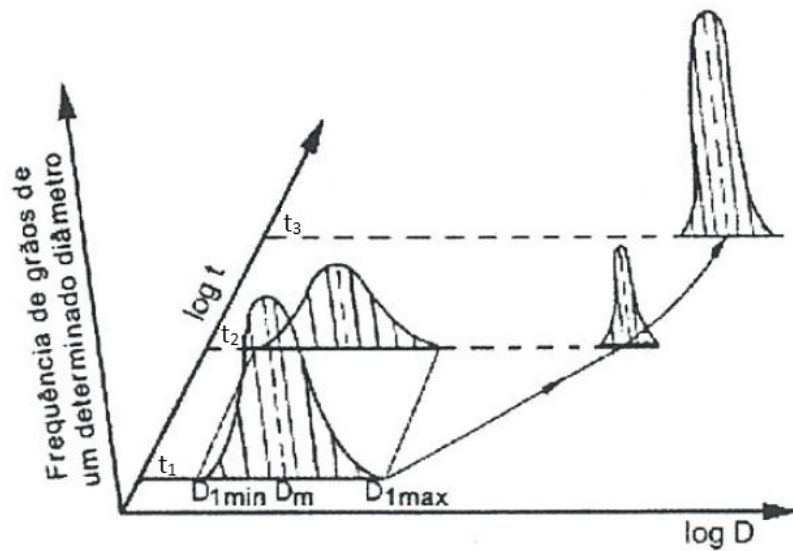


Figura 2.3: Distribuição do tamanho de grão durante a recristalização secundária [28].

A estrutura de um material policristalino é representada, em duas dimensões, como um conjunto de polígonos com arestas curvadas, de acordo com a Figura 2.1 e em três dimensões como um conjunto de poliedros com faces convexas ou côncavas. A ilustração

de um grão em três dimensões é mostrada na Figura 2.4 [33].

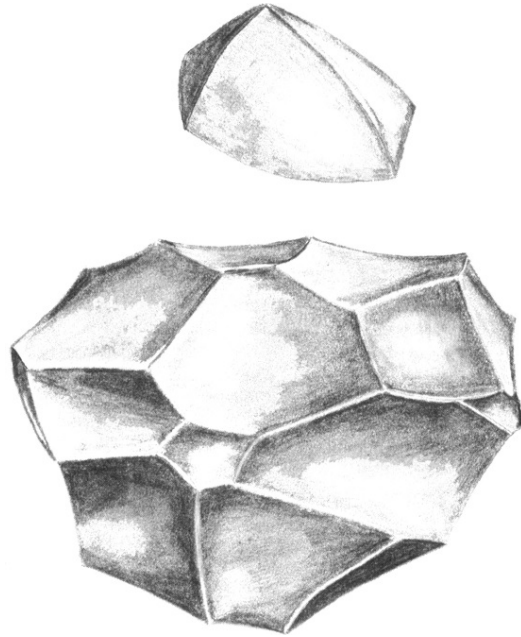


Figura 2.4: Dois exemplos de formatos de grãos. O superior com menor número de faces e faces convexas e o inferior com maior número de faces e faces côncavas. [33]

Se todos os contornos de grão em um metal policristalino possuísem a mesma energia de contorno de grão independentemente da orientação do grão, os contornos de grão possuiriam uma estrutura semelhante à estrutura formada por bolhas de sabão [30], onde a energia interfacial é equivalente à tensão superficial [33]. O equilíbrio metaestável dessas tensões superficiais em uma junta entre três grãos, representado na Figura 2.5 em duas dimensões, requer que os ângulos entre eles obedeam à equação 2.1 :

$$\frac{\gamma_{23}}{\sin \theta_1} = \frac{\gamma_{13}}{\sin \theta_2} = \frac{\gamma_{12}}{\sin \theta_3}, \quad (2.1)$$

onde θ são os ângulos entre os diedros e γ são as energias interfaciais por unidade de área.

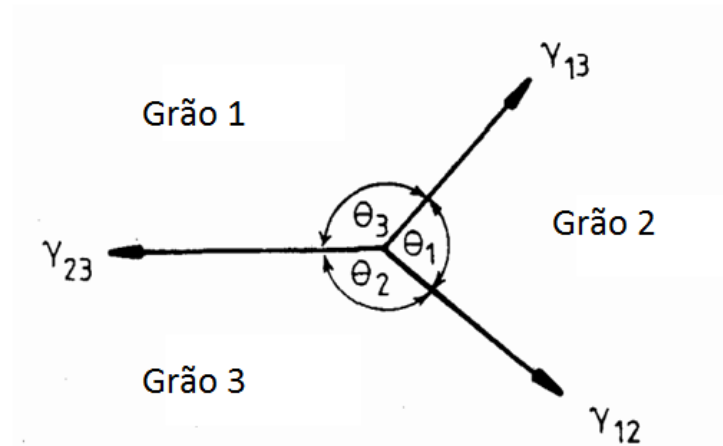


Figura 2.5: Equilíbrio de tensões em uma junta em duas dimensões. [30]

Para uma mesma fase, onde $\gamma_{12} = \gamma_{23} = \gamma_{13}$, $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = 120^\circ$ [11]. Também pode ser demonstrado que para um vértice de uma estrutura em três dimensões de uma mesma fase, nas arestas onde se encontram três grãos os ângulos são iguais a 120° e nos vértices onde se encontram quatro grãos os ângulos são de $109^\circ 28'$, representados na Figura 2.6 [33].

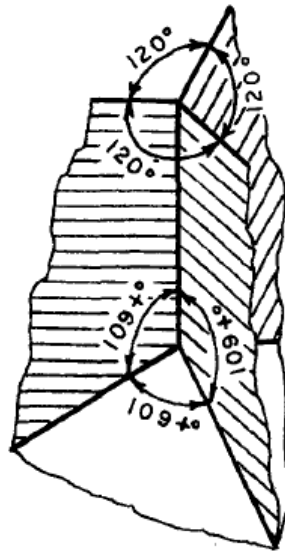


Figura 2.6: Equilíbrio de tensões em uma junta e em uma aresta em 3 dimensões. [33]

Para a estrutura de grãos estar em equilíbrio, é necessário além desta condição, que as tensões superficiais também devem ser balanceadas em todos os contornos de grão entre as juntas.[30]. As tensões superficiais atuando em uma superfície curva produzem uma pressão com direção normal à superfície do contorno de grão, seguindo a equação 2.2: [33]

$$P = \gamma \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right), \quad (2.2)$$

onde r_1 e r_2 são os raios de curvatura principais no ponto de aplicação da pressão.

Então a única forma das forças de tensão serem balanceadas é se o contorno é planar ($r = \infty$) ou se ele possui outras curvaturas com direções opostas. Como as estruturas de grãos são aleatórias, elas quase sempre possuem contornos com curvaturas voltadas para uma direção, o que as torna instáveis [30]. Os contornos de grão migrarão na direção dos seus centros de curvatura, conforme mostrado na Figura 2.7. As setas indicam a direção de crescimento.

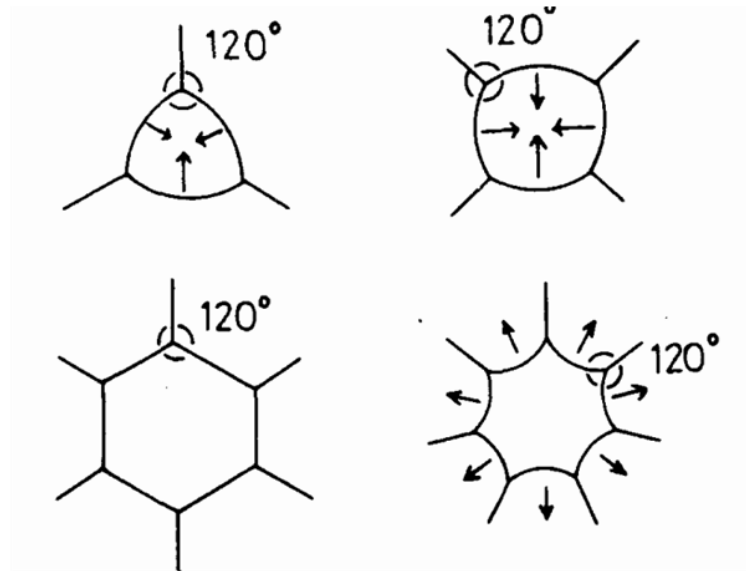


Figura 2.7: Configuração dos contornos de grão em estrutura bidimensional. [30]

Burke e Turnbull[3] sugeriram que a pressão descrita pela equação 2.2 desbalanceia o fluxo de átomos através do contorno de grão. Durante o crescimento de grão a velocidade do contorno de grão causada por essa pressão é descrita pela equação 2.3[27].

$$\nu = M\gamma\kappa \quad (2.3)$$

Onde ν é a velocidade de deslocamento do contorno de grão, M é a mobilidade dos contornos de grão e κ é a curvatura do contorno de grão. A mobilidade é dada em unidades de velocidade por força motriz [42]. Para uma esfera, $\nu = \frac{dR}{dt}$ no sentido do centro de curvatura e $\kappa = \frac{1}{R}$ e a equação toma a forma:

$$\frac{dR}{dt} = -\frac{M\gamma}{R}, \quad (2.4)$$

onde R é o raio de curvatura do contorno de grão.

Eles assumiram ainda que

$$\bar{R} \propto R \quad (2.5)$$

e

$$\frac{d\bar{R}}{dt} \propto \nu \quad (2.6)$$

Na expressão 2.5, pode-se observar que os autores [3] consideraram que o valor do raio médio dos grãos, denotado por \bar{R} é proporcional ao raio de curvatura R . Já na expressão 2.6, eles consideraram que a velocidade de variação de tamanho de grão $\frac{d\bar{R}}{dt}$ é proporcional à velocidade de deslocamento dos contornos de grão ν .

Onde \bar{R} , que é o raio médio dos grãos, é proporcional ao raio de curvatura. A partir da equação 2.3, 2.5 e 2.6, a velocidade de crescimento do tamanho médio de grão encontrada é:

$$\frac{d\bar{R}}{dt} = \frac{K}{2\bar{R}}, \quad (2.7)$$

Onde K é uma constante proporcional ao produto da energia livre interfacial por unidade de área e a mobilidade dos contornos de grão. Integrando, temos:

$$\bar{R}^2 - \bar{R}_0^2 = Kt \quad (2.8)$$

onde \bar{R}_0 é o tamanho de grão médio inicial. Para um grande valor de t onde $\bar{R} \gg \bar{R}_0$, a equação 2.8 pode ser escrita da forma como é mais usualmente encontrada na literatura:

$$\bar{R} = kt^n \quad (2.9)$$

onde $n = 0.5$ e $k = \sqrt{K}$.

O encolhimento e posterior desaparecimento de grãos de menor número de lados e crescimento de grãos com maior número de lados muda o número de lados de grãos vizinhos, conforme mostrado na Figura 2.8. O número de lados de cada grão cai para 5, porém para manter as condições de equilíbrio das juntas mencionado anteriormente, o vértice de 4 arestas se decompõe em 2 vértices de 3 arestas, e os grãos de 5 lados também começarão a encolher.

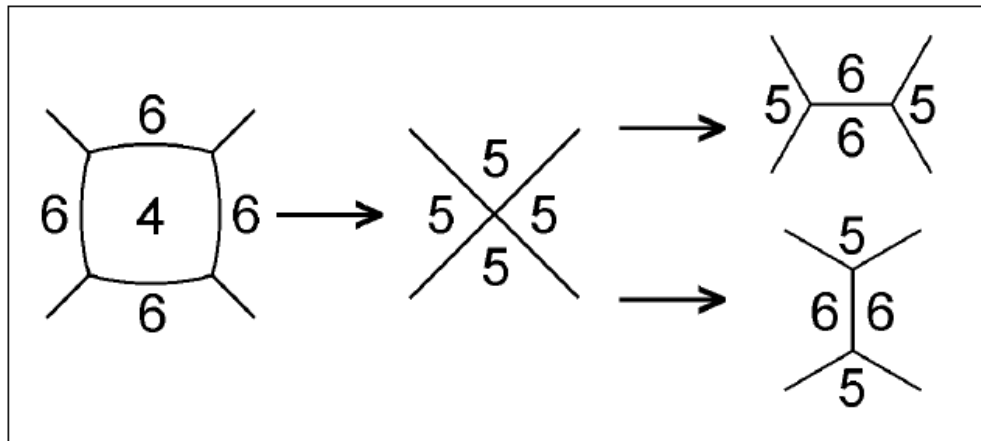


Figura 2.8: Possível esquema de desaparecimento de um grão de quatro lados. Os números indicam o número de lados dos grãos. [53]

A partir da área de um grão, Mullins, 1956 [27], encontrou uma fórmula para a taxa de variação de área dos grãos em duas dimensões, a partir do número de arestas do grão

$$\frac{dA}{dt} = \frac{b\pi}{3}(s - 6), \quad (2.10)$$

onde A é a área do grão, s é o número de arestas do grão e b é o produto da energia livre interfacial por unidade de área e da mobilidade do contorno de grão. Essa equação mostra que grãos com menos de 6 lados irão ter sua área reduzida, enquanto grãos com mais de 6 lados irão crescer.

Uma expressão análoga à equação (2.10) pôde ser encontrada em Rios e Glicksman [34] com o uso de ANHs. ANHs são poliedros simétricos com N faces que representam uma classe inteira de poliedros irregulares com este número de faces. Elas atuam como

modelos para analisar grãos de rede irregulares. A expressão encontrada para valores de $N > 3$ possui a forma:

$$\frac{1}{M\gamma} \frac{dV^{\frac{2}{3}}}{dt} = C + D\sqrt{N}, \quad (2.11)$$

Onde V é o volume do grão e C e D são constantes.

Zhang [51] chegou a uma relação na qual o tamanho relativo dos grãos é diretamente proporcional ao número de faces por grão em ferro puro. Tal proporção também foi encontrada por simulação computacional [10].

Hillert [15] chegou a uma equação que define que a distribuição de tamanho relativo de grãos atinge um estado constante assintoticamente, tanto para representações em duas quanto em três dimensões (Figura 2.9). A esse estado foi dado o nome de auto-similaridade. Devido à relação entre número de faces e tamanho relativo de grãos, é de se esperar que a distribuição de número de faces por grão também atinja esse estado auto-similar. Esse fenômeno foi confirmado em simulações [6, 53], porém a distribuição de Hillert não foi encontrada na prática [44, 48].

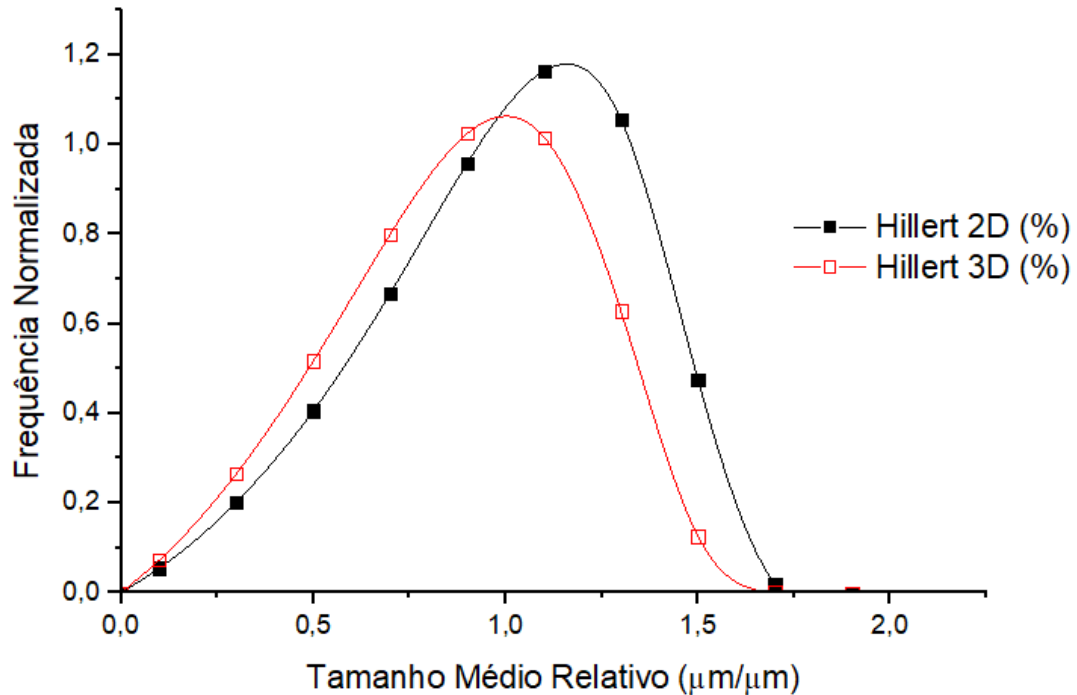


Figura 2.9: Distribuição de tamanhos de grão de Hillert

Com o decorrer do crescimento de grão, o número total de grãos diminui à medida que

grãos maiores consomem grãos menores. Como resultado, a sua área diminui e a energia de superfície total é reduzida. O resultado desse contínuo aumento de tamanho dos grãos maiores e decréscimo de tamanho dos grãos menores é o aumento do tamanho médio de grão do material [30]. O encolhimento e desaparecimento de um grão é representado na Figura 2.10.

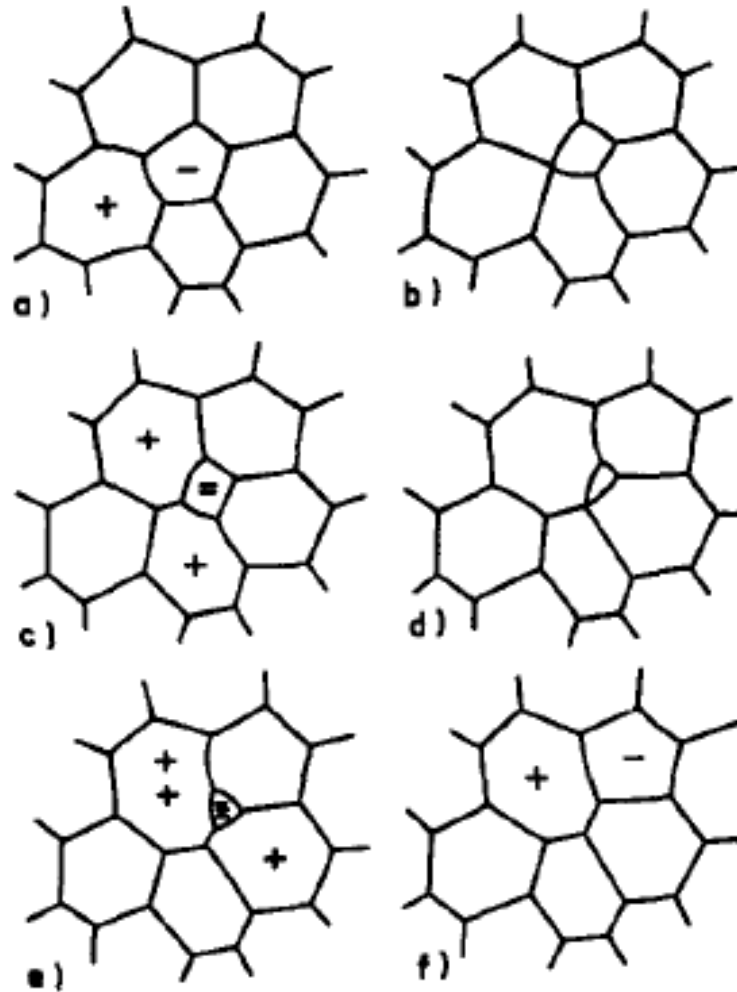


Figura 2.10: Encolhimento e posterior desaparecimento de um grão de 5 lados, com crescimento dos grãos vizinhos e variação dos seus números de lados[15]

Essa dinâmica pode ser representada por simulações computacionais, onde é possível ser estudado com mais detalhes como esse fenômeno ocorre e as variáveis que estão envolvidas nele.

Capítulo 3

Simulação do Crescimento de Grão

A simulação computacional é uma ferramenta essencial para entender o comportamento do fenômeno de crescimento de grãos. Para isso, diversos modelos são utilizados, tanto determinísticos quanto estocásticos. Dentre eles o Método de Monte Carlo [24], [53], o Autômato Celular [45], e o Vertex [26], [39].

O modelo Vertex é um modelo de simulação de crescimento de grão determinístico no qual os contornos de grão em duas dimensões são aproximados por linhas retas, e a força motriz para o crescimento do grão é o somatório das tensões de contorno de grão agindo na junta tripla dos contornos [39]. O crescimento de grão é representado pela migração da junta tripla p_i a uma velocidade $\vec{v}_{jt,i}$:

$$\vec{v}_{jt,i} = M_{jt,i} \vec{F}_{jt,i} \quad (3.1)$$

$$\vec{F}_{jt,i} = \sum_{j=1}^3 \gamma_{i,j} \frac{\vec{q}_{i,j}}{\|\vec{q}_{i,j}\|}, \quad (3.2)$$

Esse modelo foi modificado para o modelo multi-vertex, que permite que os contornos sejam aproximados por polígonos através da introdução de vértices virtuais, que são juntas duplas distribuídas no contorno de grão.[26, 39, 46]. O esquema do modelo multi-vertex é mostrado na Figura 3.1:

em que p_i são as juntas duplas e triplas, q_{ij} é o vetor que vai da junta p_i para o junta adjacente p_j e \vec{F}_{tp} é a força motriz atuando nas juntas p_i , que é proporcional à energia interfacial dos contornos de grão. Uma desvantagem deste método é que ele é em geral mais complexo, com dificuldade para expressar as transformações topológicas [19] e seu uso voltado principalmente a duas dimensões [46], porém ele apresenta como vantagem a

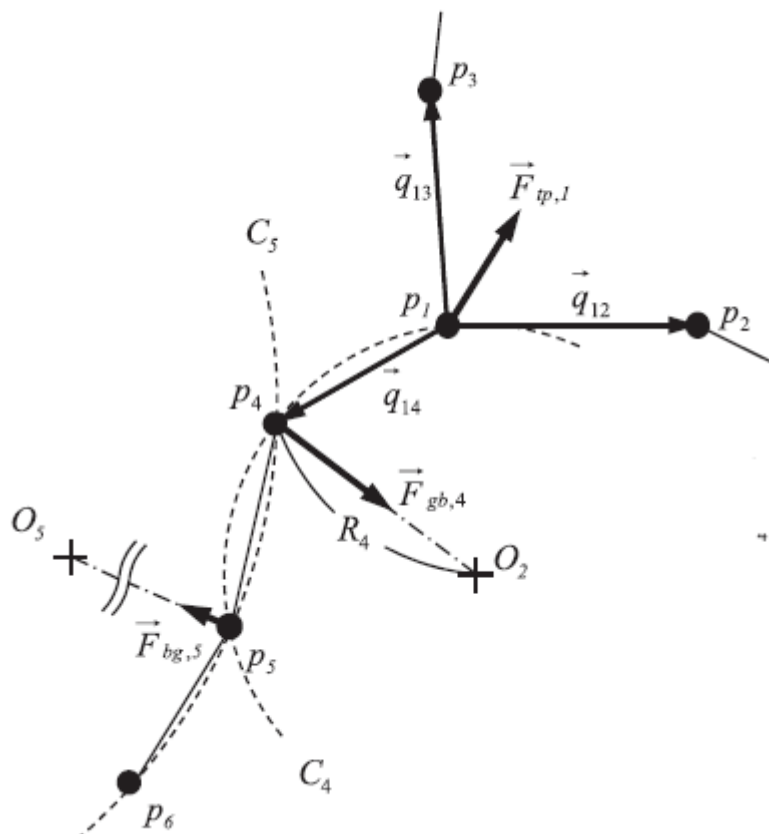


Figura 3.1: Crescimento de grão com o uso do Método Vertex. [39]

velocidade [46] e clareza das relações físicas [39].

O método do Autômato Celular é composto de algoritmos que descrevem a evolução discreta espacial e (ou) temporal de sistemas complexos aplicando regras de transição locais ou globais, probabilísticas ou determinísticas para os sítios de uma rede de células. Quando usado para simular o crescimento de grãos, a força motriz é a diferença de energia interfacial antes e depois do crescimento de grão. Um exemplo de crescimento de grão pelo uso de Autômato Celular é mostrado na Figura 3.2:

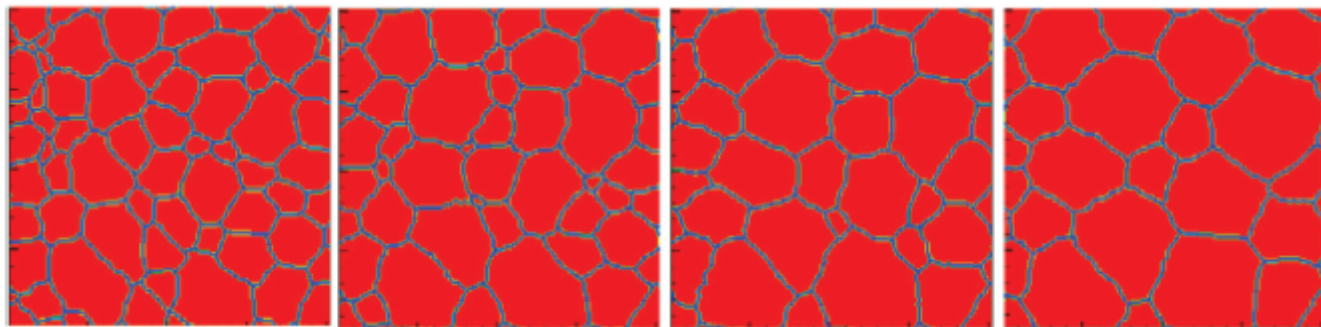


Figura 3.2: Crescimento de grão com o uso do Autômato Celular. [45]

As regras de transição colocam ênfase na mudança de energia livre do sistema. Se a energia livre de uma célula é maior do que a energia para ativar a migração dos contornos de grão, o estado da célula será alterado. [45].

Para definir a regra de transição dos Autômatos Celulares, deve-se levar em consideração: a geometria da célula, dimensão da malha, tipo de vizinhança e taxa de transição. Tais regras de transição são baseadas no estado atual da célula e de suas vizinhas e os estados são alterados ao mesmo tempo para todas as células.

Um exemplo simples seria a propagação de um pulso numa corda. Para uma célula da corda sofrer alteração no seu estado, ou seja, para um pulso ser propagado, é preciso que algum de seus vizinhos seja alterado (ou excitado) no tempo anterior. Define-se assim que, os vizinhos de cada célula como, as mais imediatamente a direita e a esquerda, então, se definem um conjunto de duas regras básicas de transição [22]:

- Se uma célula está excitada no tempo t , ela continuará excitada no tempo $t+1$.
- Se uma célula não está excitada no tempo t , ela ficará no tempo $t+1$ se pelo menos um vizinho seu está excitado no tempo t .

Na Figura 3.3 é mostrado um exemplo de como funciona a transição de estados das células:

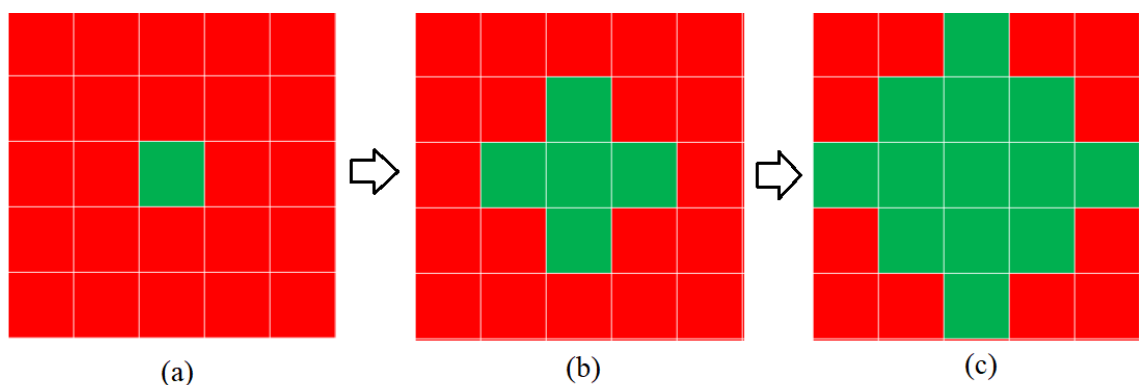


Figura 3.3: Representação da regra de transição do autômato celular em duas dimensões para quatro vizinhos mais próximos: (a) uma célula excitada no centro da Figura no tempo t , (b) quatro vizinhos excitados no tempo $t+1$, (c) vizinhos excitados no tempo $t+2$

Uma dificuldade encontrada nesse método é o fato de em geral ele negligenciar o efeito da curvatura do contorno de grão no seu crescimento[19] devido à dificuldade de se reduzir a dependência da energia de contorno de grão dos planos gerados pela rede de células discretizada (planos de contorno de grão anisotrópicos).

O método Monte Carlo é um dos principais métodos computacionais utilizadas no estudo do crescimento de grãos e fenômenos relacionados. Nele, um material é representado como um conjunto discreto de elementos de área ou volume dotados de orientações e dispostos em uma rede regular.

Para este método, um grão é definido como uma contígua coleção de elementos materiais com a mesma orientação, e a microestrutura é desenvolvida por regras de transição probabilísticas para propagar essa orientação de um determinado elemento para o vizinho [24]. As regras de transição dos Método de Monte Carlo previnem a formação dos planos anisotrópicos citados no método do Autômato Celular devido à introdução de uma temperatura utilizada como coeficiente de ajuste, embora ambos os métodos tenham encontrado dificuldades para demonstrar características preditivas [19].

É um modelo simples e flexível [53], podendo, devido a isso, ser aplicado em diferentes áreas como simulações de crescimento de grão normal [21, 55], crescimento de grão anormal[9, 47], ancoramento de Zener[23, 37] e o papel da anisotropia cristalina no crescimento de grão [1, 12].

Capítulo 4

Método de Monte Carlo

Em suas aplicações iniciais, o Método de Monte Carlo era uma forma de resolver integrais complexas [20].

Uma integral definida unidimensional

$$I = \int_a^b h(x)dx \quad (4.1)$$

pode ser aproximada por:

$$\tilde{I}_{MC} = (b - a) \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m h(x_j) \quad (4.2)$$

Onde a região $[a,b]$ é dividida em m subintervalos escolhidos aleatoriamente, como representado na Figura 4.1 e a integral pode ser aproximada pelo produto da média dos valores de $h(x)$ a partir de valores de x selecionados em uma distribuição uniforme no intervalo $[a,b]$.

Para um intervalo aleatório essa aproximação possui uma variância proporcional a $1/N$, logo o erro desse método converge a uma proporção de $1/\sqrt{m}$ [43]. Para um intervalo constante, usando o método dos trapézios, por exemplo, o erro é proporcional $1/m^2$, convergindo a uma taxa muito maior.

Porém, para a aproximação de integrais multidimensionais, onde aproximações com intervalos constantes possuem um erro proporcional a $1/m^{2/D}$ e D é o número de dimensões, as aproximações de Monte Carlo possuem vantagem por continuar com um erro proporcional a $1/\sqrt{m}$ [31].

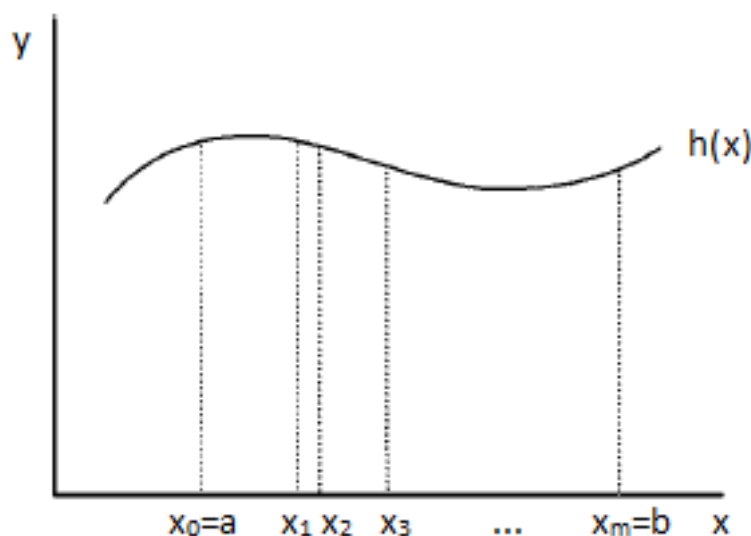


Figura 4.1: Integral numérica utilizando intervalos aleatórios. [31]

Uma integral k-dimensional pode ser aproximada por

$$\int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} \dots \int_{a_k}^{b_k} h(x_1, x_2, \dots, x_k) dx_1 dx_2 \dots dx_k \approx (a_1 - b_1)(a_2 - b_2) \dots (a_k - b_k) \frac{1}{s} \sum_{j=1}^s h(x_1, x_2, \dots, x_k) \quad (4.3)$$

Metrópolis et al.(1953) criaram uma forma de avaliar equações de estado para substâncias constituídas de moléculas individuais em interação[25]. Nele o estado de um sistema em equilíbrio termodinâmico pode ser definido por sua função de densidade de probabilidade $\rho(\Gamma)$ [20].

$$\rho(\Gamma) = \frac{e^{-\beta H(\Gamma)}}{\int_{\Gamma} e^{-\beta H(\Gamma)} d\Gamma} \quad (4.4)$$

Onde $\Gamma(t)$ é o vetor que caracteriza cada instante da evolução temporal de uma configuração espacial de fase

$$\Gamma(t) = \{r_1(t), r_2(t), \dots, r_N(t), q_1(t), q_2(t), \dots, q_N(t)\} \quad (4.5)$$

composto de N partículas, com os vetores de posição $r(t) = r_1(t), r_2(t), \dots, r_N(t)$ e os vetores de velocidade $p(t) = q_1(t), q_2(t), \dots, q_N(t)$. A Hamiltoniana do sistema $H(\Gamma)$ representa a soma da energia potencial e cinética que ele possui:

$$H(t) = E_{pot}(r_1(t), r_2(t), \dots, r_N(t)) + E_{cin}(q_1(t), q_2(t), \dots, q_N(t)) \quad (4.6)$$

e $\beta = 1/(\kappa_B T)$. O cálculo da integral $\int_{\Gamma} e^{(-\beta H(\Gamma_i))} d\Gamma$ de forma direta seria impossível para qualquer N de tamanho significativo. Na abordagem de Metrópolis (1953) para definir a probabilidade do sistema estar em determinado estado, ele começa com uma configuração Γ_i e energia $H(\Gamma_i)$, é feito um movimento teste do sistema para uma nova configuração Γ_j e a nova energia $H(\Gamma_j)$, é calculada. A decisão de se essa nova configuração é aceita ou não depende da razão entre as probabilidades delas, $\rho(\Gamma_i)/\rho(\Gamma_j) = e^{(-\beta\Delta H(\Gamma_{i \rightarrow j}))}$ [31].

Para uma mudança de estado com variação de energia δE , temos as possibilidades representadas na Figura 4.2 [20]:

Se $\Delta H(\Gamma_{i \rightarrow j}) \leq 0$ a mudança é aceita pois a probabilidade $e^{(-\beta\Delta H(\Gamma_{i \rightarrow j}))} \geq 1$

Se $\Delta H(\Gamma_{i \rightarrow j}) > 0$ a mudança é aceita com probabilidade $e^{(-\beta\Delta H(\Gamma_{i \rightarrow j}))}$

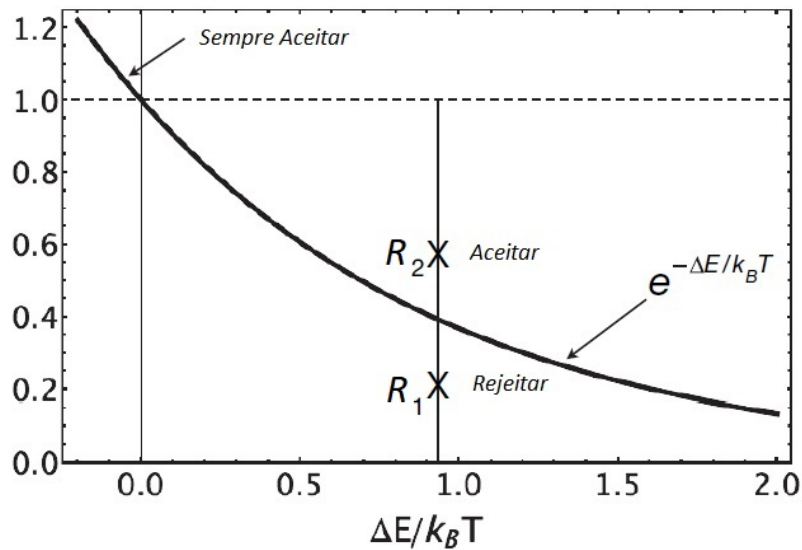


Figura 4.2: Gráfico representando o critério de aceitação/rejeição do algoritmo de Metrópolis com uma variação de energia ΔE . R_1 e R_2 são números aleatórios. [20]

Isso é feito a partir da amostragem de probabilidades relativas entre dois estados logo não é necessário obter $\int_{\Gamma} \exp(-\beta H(\Gamma_i)) d\Gamma$ para o cálculo de $\rho(\Gamma)$.

Potts (1952) sugeriu um modelo onde cada elemento de um sistema pode ter Q valores de identificação possíveis[29]. A Hamiltoniana desse sistema é dada por:

$$H = \frac{E_0}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{nn} (1 - \delta_{S_i S_j}) \quad (4.7)$$

em que E_0 é a energia interfacial entre dois volumes unitários e S é a orientação dos N volumes com nn vizinhos mais próximos cada. A função delta de Kronecker $\delta_{S_i S_j}$ retorna 1 para valores de orientações diferentes adjacentes e 0 para valores iguais.

A evolução dos estados desse modelo é dada por um método de Monte Carlo Metrópolis, um elemento do sistema é escolhido aleatoriamente e sua orientação é mudada para uma das $Q-1$ orientações possíveis. A mudança de energia é calculada e o procedimento de Metrópolis é realizado para verificar a probabilidade da mudança ser aceita ou não.

$$p = \begin{cases} e^{\left(\frac{-\Delta H}{\kappa_B T}\right)}, & \Delta H > 0 \\ 1, & \Delta H \leq 0 \end{cases} \quad (4.8)$$

Esse modelo foi utilizado por Srolovitz et. al [38] como forma de representar a complexidade topológica necessária para a simulação de crescimento de grão. Nela o valor de orientação indica a que grão esse estado pertence, para simular o crescimento de grão normal. Cada grão é representado por um conjunto de elementos unitários vizinhos ou MCU (Monte Carlo Unit) de mesma orientação, sendo essa orientação definida por uma variável numérica Figura 4.3). A unidade equivalente ao tempo nesse método é definida de acordo com o número de passos nos quais é realizada uma tentativa de mudança de valor de orientação. Essa unidade de tempo é chamada de Monte Carlo Step (MCS). Cada MCS é igual a N passos, onde N é o número de elementos unitários do sistema.

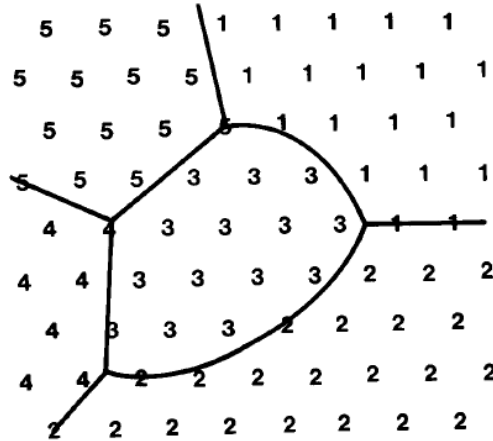


Figura 4.3: Grãos discretizados na simulação de Monte Carlo em duas dimensões [38]

Em muitas simulações iniciais o termo $\kappa_B T$ foi definido como zero [54]. Porém isso causa um problema devido ao comportamento do Método de Monte Carlo, onde a energia do sistema é diminuída pela minimização dos contornos de grão. Em função da malha na qual a simulação possui planos simétricos onde a energia interfacial é mínima, pode ocorrer o ancoramento por reticulado, que é o travamento de alguns contornos de grão e vértices [16]. Um exemplo é ilustrado na Figura 4.4, com a energia sendo calculada com os oito vizinhos mais próximos. Qualquer variação de orientação causaria um aumento de energia, logo seria rejeitada de acordo com a equação 4.8, onde p seria igual a zero.

2	2	2	2	2	0
2	2	2	2	0	0
2	2	2	0	0	0
1	1	1	0	0	0
1	1	1	1	0	0
1	1	1	1	1	0

Figura 4.4: Exemplo de vértice travado em uma malha cúbica a uma temperatura de simulação $\kappa_B T = 0$

Já em simulações onde $\kappa_B T > 0$, existe uma probabilidade $p > 0$ de que mudanças que ocasionam um aumento de energia localmente sejam permitidas. As flutuações obtidas com essa temperatura de simulação permitem que o contorno de grão se movimente para fora dessas direções anisotrópicas, reduzindo esse efeito de travamento.

Recentemente Zöllner [54] propôs um método para definir a temperatura de simulação ideal da regra de transição para o crescimento de grão normal, onde a simulação segue a equação da cinética de crescimento controlada pela curvatura das interfaces. Porém mais estudo sobre esse assunto é necessário para se chegar a um consenso.

Já temperatura física pode ser introduzida na simulação de duas formas [40]. A primeira é deixando a mobilidade M dos contornos de grão em função dessa temperatura [14, 17], onde a probabilidade de transição possui a forma da equação 4.9.

$$p = \begin{cases} M(T_r)e^{\left(\frac{-\Delta H}{\kappa_B T}\right)}, & \Delta H > 0 \\ M(T_r), & \Delta H \leq 0 \end{cases} \quad (4.9)$$

onde T_r é a temperatura real.

E a segunda é relacionando o MCS ao tempo e temperatura real [13, 32]. Nelas a equação 2.8 é ajustada através de parâmetros de forma a relacionar o MCS ao tempo real e a T_r e relacionar o tamanho do grão da simulação ao tamanho real.

Essas abordagens permitem a aplicação do Método de Monte Carlo levando em conta os efeitos da variação de temperatura e sua comparação com resultados experimentais.

Capítulo 5

Metodologia

5.1 Material Utilizado

Foram utilizados dois computadores do Núcleo de Modelamento Microestrutural da Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda para a realização da simulação de crescimento de grão, com configuração: 2 TB de HD memória RAM de 128 GB e dois processadores Intel® Xeon® com clock de 2.6 GHz.

Para o desenvolvimento do programa de simulação foi utilizado o software Visual Studio® Express 2012 nos computadores do Núcleo de Modelamento Microestrutural. As representações gráficas da microestrutura foram feitas utilizando o software Tecplot® 360 2010. Para o tratamento e geração de gráficos a partir dos dados obtidos na simulação, foi utilizado o Origin®2018 .

5.2 Características do Algoritmo

O programa foi usado para a simulação do crescimento de grão normal em 3 dimensões e uma estrutura cúbica com 26 vizinhos mais próximos de uma malha com número de volumes 300x300x300. A condição de contorno usada é a condição de contorno periódica, que permite que o material seja simulado de forma contínua onde o vizinho de um extremo é o extremo oposto, conforme representado na Figura 5.1

Os números aleatórios necessários para o algoritmo são gerados a partir de um gerador linear congruente, que gera uma sequência de números semi-aleatórios a partir de um número inicial, que é a semente da sequência. Esse gerador possui a forma $X_{i+1} = (aX_i + c) \bmod m$, com os parâmetros a , c e m definidos como 906185749, 1 e 2^{32} , respectivamente.

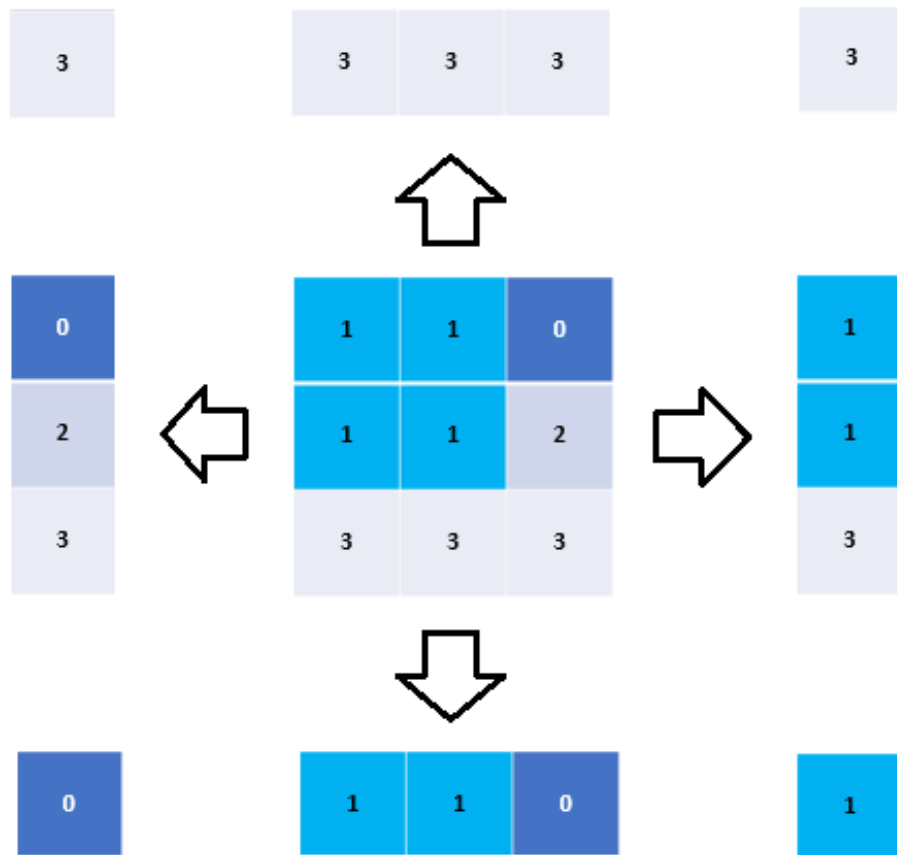


Figura 5.1: Representação da condição de contorno periódica para duas dimensões

Esse gerador demonstrou boas propriedades estatísticas [8] e capacidade de gerar números em tempo consideravelmente baixo.

Para aumento do desempenho, foram feitas algumas modificações do algoritmo original de Srolovitz [38], que são listadas a seguir.

A hamiltoniana do sistema é originalmente calculada entre todos os elementos N da estrutura para, de acordo com a equação 4.7, encontrar a energia em um determinado estado. Neste algoritmo é necessária a variação de energia entre esses estados, porém a variação ocorre apenas localmente a cada iteração. Portanto, para o cálculo da variação de energia do sistema, só é necessário o cálculo da variação de energia local, que é equivalente à variação de energia total.

Outra característica do algoritmo original é que a escolha das novas orientações é feita dentro de todas as possibilidades de orientações possíveis. Isso torna possível a nucleação de uma nova orientação dentro de um grão e muitas tentativas de troca rejeitadas. Uma

solução para esse problema é a escolha de novas orientações somente a partir das orientações vizinhas, o que pode ser explicado pela migração de contorno de grão e mudança de átomos entre grãos [53]. A Figura 5.2 mostra que para o elemento central 4 orientações novas são possíveis: 0, 1, 2 e 3.

1	1	0
1	1	2
3	3	3

Figura 5.2: Representação dos vizinhos de um elemento

Ao selecionar um volume para possível troca de orientação, é sorteado um vizinho. Se a orientação selecionada desse vizinho é igual à original, então a troca da orientação original para a do vizinho não causaria mudanças na estrutura sendo aceita ou não. Como alternativa para redução dos cálculos, nesse caso não são necessários os valores da hamiltoniana e da probabilidade de troca, sendo terminada a iteração. Na Figura 5.3 é apresentado um exemplo no qual um volume é selecionado, com orientação 3 e contorno em vermelho. Ele possui 3 possíveis orientações para troca, de valores 0, 1 e 3. O vizinho selecionado para fornecer a orientação possui orientação de valor também igual a 3 e contorno em verde. A iteração termina aí e passa para a próxima seleção de volume.

0	0	0	0	0	3
0	0	0	0	3	3
0	0	0	3	3	3
1	1	3	3	3	3
1	1	1	3	3	3
1	1	1	1	3	3

Figura 5.3: Exemplo de seleção de nova orientação igual à original

5.3 Estrutura do Algoritmo

O programa foi desenvolvido na linguagem C++, que é orientada a objetos. Esse fato facilita posteriores adaptações e adições de novas classes e funcionalidades ao programa, permitindo o reaproveitamento para novos projetos. As classes criadas são chamadas Simulações, Malha e Simulação, sendo que as principais funções desta última são as funções energia, lados, tamanho e salve. A classe Simulação pode conter uma ou mais objetos da classe Simulação independentes com diferentes atributos, para que uma análise estatística possa ser feita de maneira mais prática, simuladas na estrutura discretizada criada pela classe Malha.

A estrutura pode ser vista no diagrama de classes da Figura 5.4.

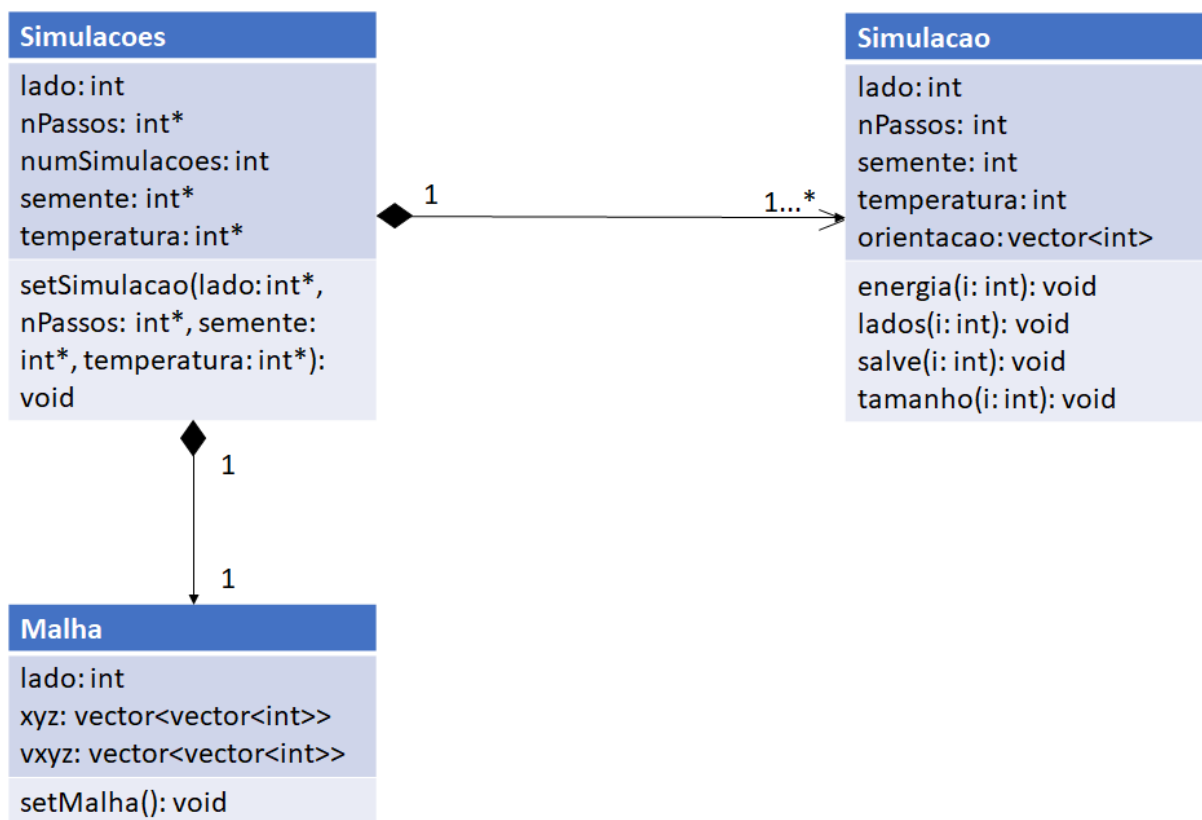


Figura 5.4: Diagrama de Classes do Algoritmo

5.3.1 A classe “Simulações”

A classe Simulações lê os dados de um arquivo de entrada de texto que contém as variáveis do programa, como o número de simulações diferentes que serão criadas, e para cada simulação o tamanho, temperatura, energia interfacial, o número de passos da simulação e semente para a sequência de números aleatórios. Lidos os valores das variáveis, ela cria a Malhas e os objetos da classe Simulação que serão usadas com os valores obtidos do arquivo de texto.

5.3.2 A classe “Malha”

A classe malha gera dois vetores, um que armazena a posição de cada elemento da malha cúbica e um que armazena os vizinhos de cada elemento. Esse vetor de vizinhos é útil para reduzir os gastos com cálculo da condição de contorno, necessários para verificar se um elemento está no extremo da malha ou não. Manter eles armazenados em um vetor permite que esses cálculos sejam realizados somente uma vez, e não a cada iteração do Método de Monte Carlo.

Um possível problema ocasionado é a quantidade de memória necessária para manter esses vetores, devido ao grande número de elementos de uma simulação tridimensional exige. Porém ter essa classe separada permite que os mesmos vetores sejam utilizados para todas as simulações realizadas simultaneamente, se mostrando útil para a paralelização das simulações.

5.3.3 A classe “Simulação”

Essa é a classe que representa a microestrutura simulada e onde ocorre a sua evolução.

Nela cada volume unitário possui um número de identificação que define a qual grão ele pertence. Esses números são armazenados em um vetor unidimensional , o que proporciona um melhor desempenho durante o processamento desses valores.

Após a armazenagem de todas as variáveis, cada volume unitário da malha recebe um número de identificação diferente para sua inicialização, e estes são misturados para facilitar a visualização pós-processamento utilizando algum software gráfico.

Então através das funções da classe será feita as iterações para evolução dos valores de identificação e sua análise (fluxograma da Figura 5.5).

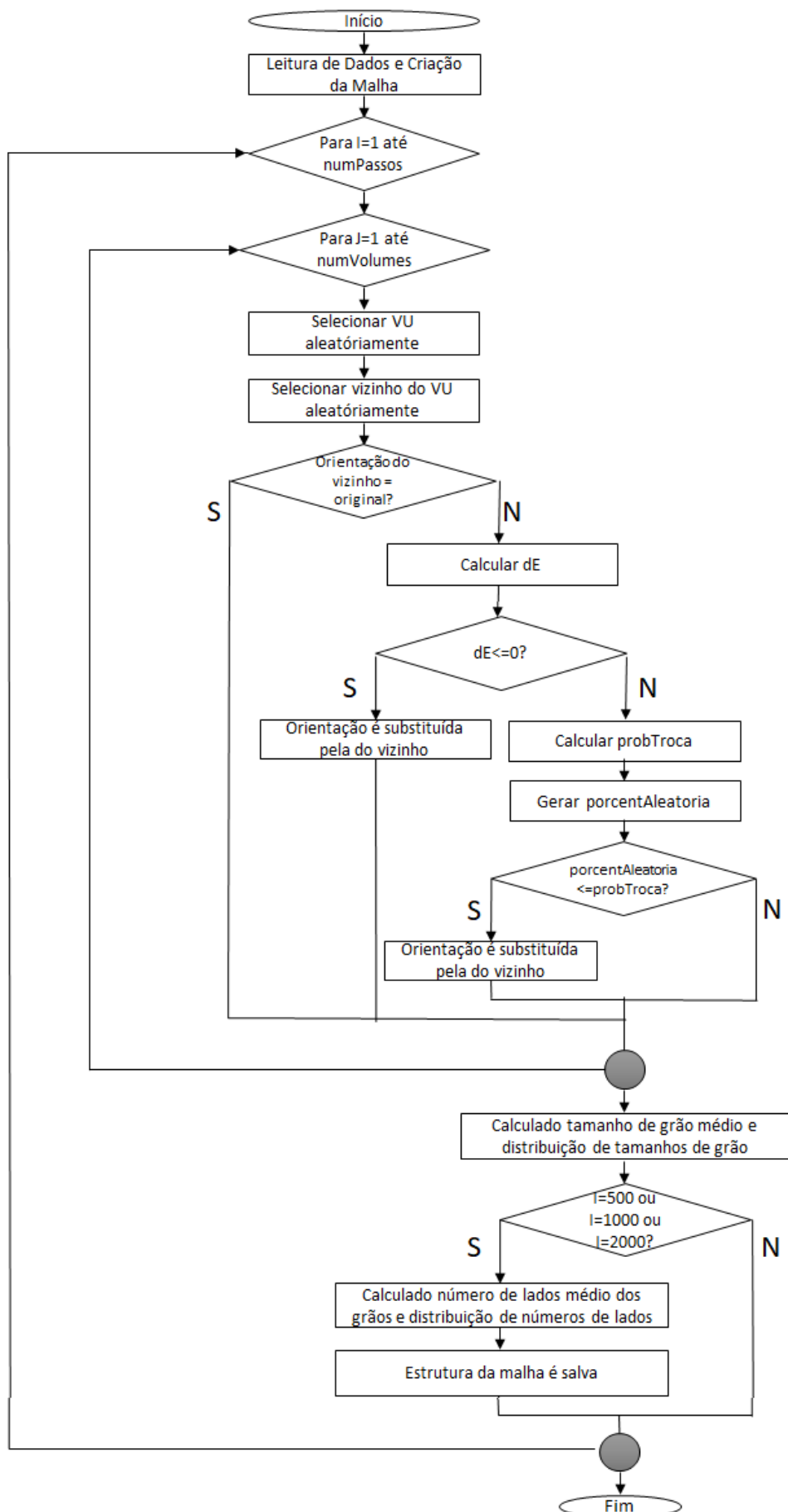


Figura 5.5: Fluxograma do Algoritmo

5.3.3.1 Função Energia

Essa função define a evolução termodinâmica da estrutura usando como base o método de Monte Carlo.

Ela varre a malha selecionando volumes aleatoriamente. É escolhido um vizinho do volume selecionado e calculada a variação de energia que a possível mudança para a orientação desse vizinho causaria. Se for positiva ela é aceita, senão pode ser aceita com uma probabilidade que depende dessa variação e de parâmetros da simulação, de acordo com a equação 4.8. Esse procedimento é repetido por um número de vezes igual ao número total de elementos da malha a cada vez que a função é chamada. Uma chamada da função é equivalente a um Monte Carlo Step.

Ela também calcula o valor de tamanho de grão médio da malha a cada iteração e salva em um arquivo de texto para posterior análise da evolução do grão médio em função do tempo.

5.3.3.2 Função Tamanho

Essa função gera a distribuição percentual do tamanho relativo dos grãos e a salva em um arquivo de texto.

5.3.3.3 Função Lados

Essa função gera a distribuição percentual dos lados dos grãos e o número médio de lados da malha em função do tempo, e os salva em arquivos de texto separados.

5.3.3.4 Função Salve

Essa função salva em um arquivo de texto a posição de cada volume unitário no espaço tridimensional e o seu número que indica a qual grão ele pertence. Ela é necessária para verificação do comportamento topológico dos grãos em função do tempo.

5.4 Paralelização do Algoritmo

Muitas simulações computacionais demandam alto custo dos recursos do computador, sendo que o tempo necessário para realizar uma simulação pode ser muito maior que o disponível em um estudo. Uma das formas de contornar esse problema é realizando a

paralelização do algoritmo, na qual a estrutura do algoritmo é dividida em partes que são executadas ao mesmo tempo, reduzindo o tempo total necessário para a simulação. Cada parte é executada por um processador diferente e o ganho de tempo é dado pela equação[7].

$$S = \frac{1}{(f_{par}/P) + (1 - f_{par})} \quad (5.1)$$

Onde S é a razão do tempo de execução do algoritmo com um processador e P processadores e f_{par} é a fração paralelizável do programa.

O Método de Monte Carlo em particular, por necessitar de um grande número de operações, pode se beneficiar muito dessa paralelização. Durante a realização deste trabalho foram realizadas simulações em paralelo, com a paralelização das funções lados usando a API OpenMP.

Para a medida do tempo de execução de cada função, foi usado a função *system_clock* da biblioteca *chrono* do C++. Essa função é um relógio em tempo real do sistema, convertido para milissegundos através da função *chrono::duration_cast*.

5.4.1 OpenMP

OpenMP é uma interface de programação de aplicativo de memória compartilhada (API) cujas características baseiam-se em esforços prévios para facilitar a programação paralela de memória compartilhada[7]. É composta de um conjunto de diretivas de compilador que descrevem o paralelismo no código-fonte, juntamente com uma biblioteca de suporte de sub-rotinas disponíveis para as aplicações[5].

Com a OpenMP, é possível a paralelização de um algoritmo com quase nenhuma modificação da sua estrutura. Ele foi utilizado na paralelização do algoritmo deste trabalho, com o uso de diferente número de núcleos. A OpenMP foi escolhido devido ao suporte dado pelo laboratório do Núcleo de Modelagem Microestrutural, que possui computadores com processadores de vários núcleo, o que permite o uso dessa API.

Neste algoritmo foi usada a diretiva *#pragma omp for*, que permite a paralelização de estruturas de iteração de número previamente definido, sendo executadas em paralelo.

5.5 Verificação da Cinética Controlada pela Curvatura

Para verificar se os resultados da simulação estavam de acordo com a cinética esperada por Burke e Turnbull [3], foi simulado o encolhimento de uma esfera de raio 30 MCU, representada na Figura 5.6, usando o algoritmo de crescimento de grão para diferentes temperaturas de simulação.

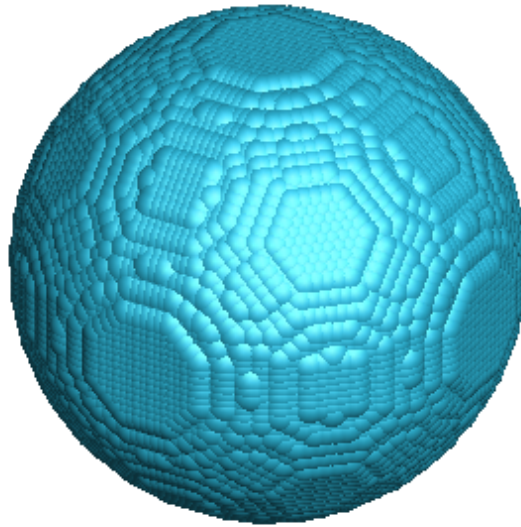


Figura 5.6: Esfera inicial utilizada para a simulação de raio 30 MCU

A representação gráfica do encolhimento para três temperaturas diferentes é mostrada na Figura 5.7, que mostra o encolhimento anisotrópico da esfera e que as flutuações no seu formato são maiores quanto maior é a temperatura de simulação, que causam variações na sua superfície.

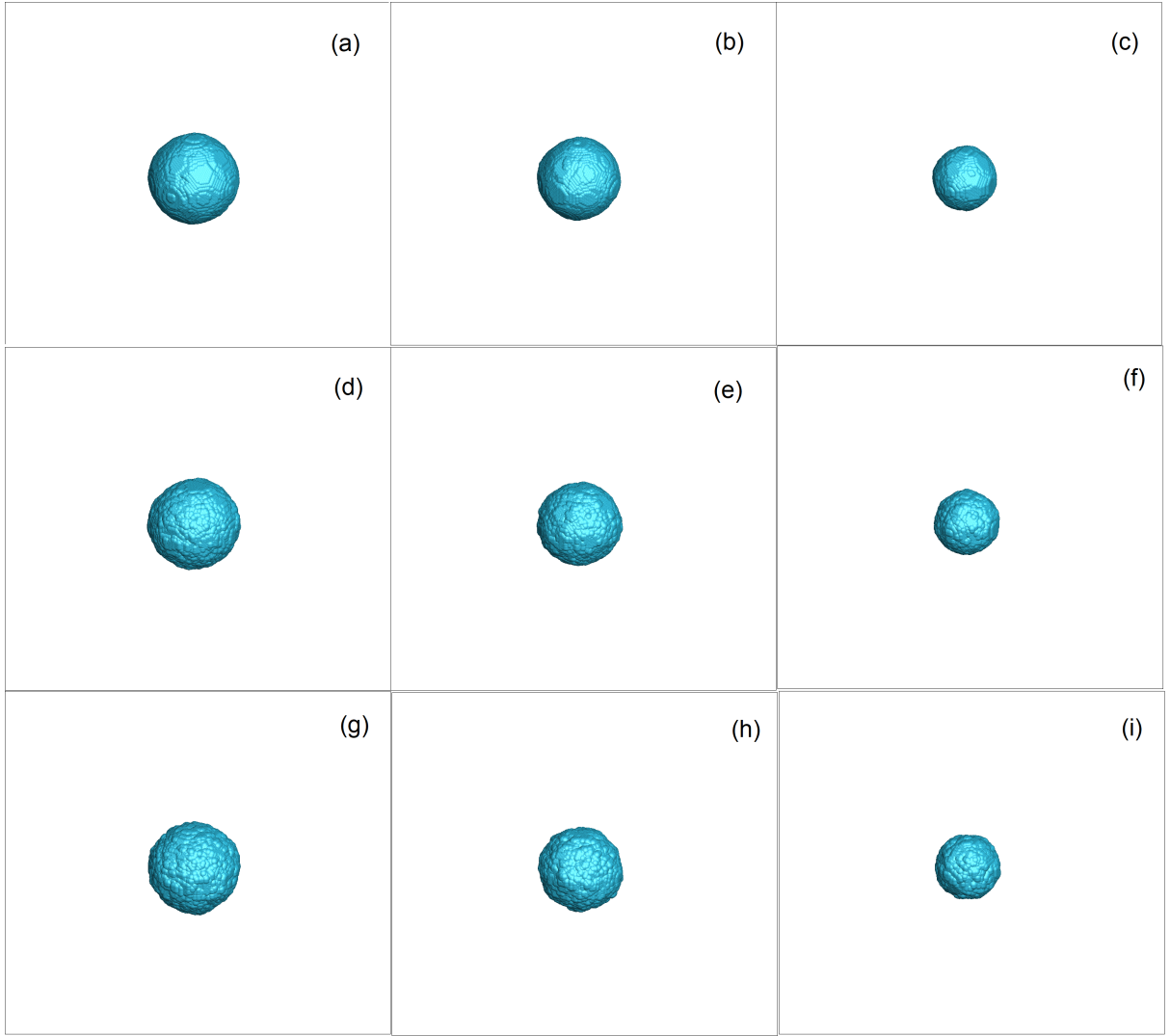


Figura 5.7: Encolhimento de três esferas em três diferentes momentos: (a) $\kappa_B T=0$ e $MCS=100$, (b) $\kappa_B T=0$ e $MCS=200$, (c) $\kappa_B T=0$ e $MCS=400$, (d) $\kappa_B T=5$ e $MCS=100$, (e) $\kappa_B T=5$ e $MCS=200$, (f) $\kappa_B T=5$ e $MCS=400$, (g) $\kappa_B T=10$ e $MCS=100$, (h) $\kappa_B T=10$ e $MCS=200$, (i) $\kappa_B T=10$ e $MCS=400$

A partir dessas simulações foram obtidos os volumes das esferas em função do tempo. A equação para encolhimento das esferas esperada 5.2 foi dada por Raabe [17], onde a cinética de encolhimento é inversamente proporcional à curvatura.

$$\frac{V^{2/3}}{V_0^{2/3}} = 1 - \alpha_\nu \frac{MCS}{V_0^{2/3}} \quad (5.2)$$

onde V é o volume da esfera, V_0 é o volume inicial e α_ν é uma constante.

A Figura 5.8 mostra que o gráfico de $(V/V_0)^{2/3}$ por $MCS/V_0^{2/3}$ possui comportamento linear conforme esperado pela equação 5.2, confirmando que a sua cinética é dada pela curvatura.

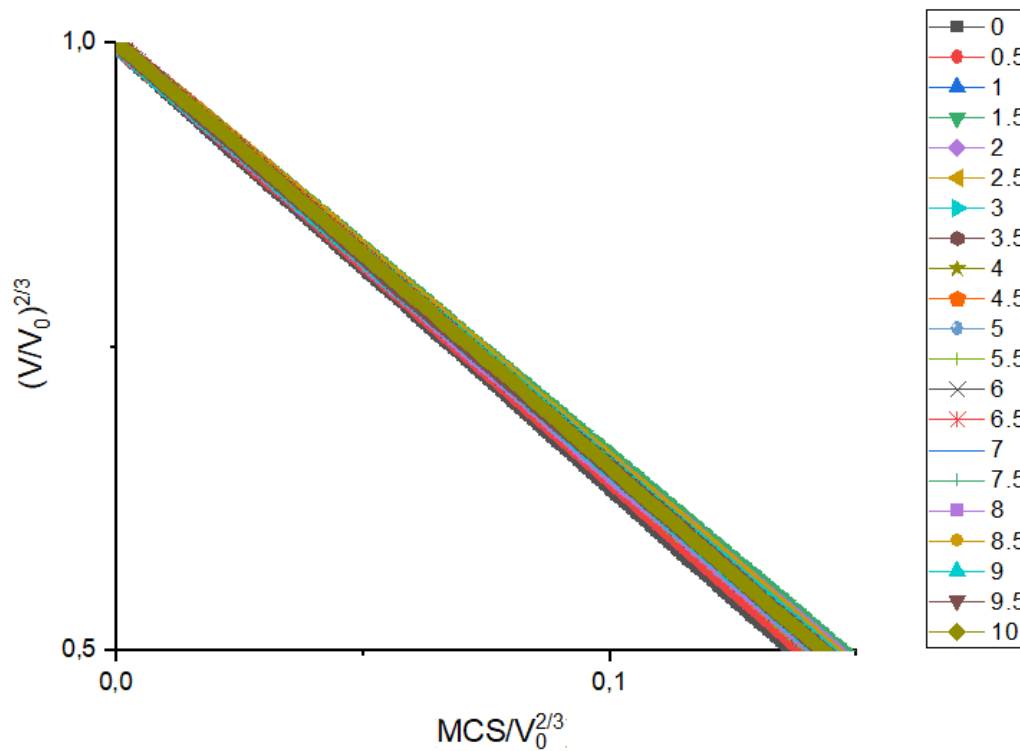


Figura 5.8: Encolhimento de esferas para diferentes temperaturas de simulação.

Capítulo 6

Resultados e Discussão

6.1 Resultados da Simulação

Foram feitas simulações com diferentes valores de $\kappa_B T$, a fim de avaliar a influência desse parâmetro nos resultados da simulação e a concordância desses resultados com a literatura. A Figura 6.1 mostra a representação gráfica da evolução da malha simulada para $\kappa_B T = 0$.

Uma tendência que pode ser vista é a formação de linhas retas na superfície. Isso é mostrado mais de perto nas Figuras 6.2. A Figura 6.3 é um exemplo do efeito causado pelo ancoramento por reticulado. O grão da Figura possui suas faces superior e direita planos e em direções simétricas, onde não há variação de posição de seus elementos pois isso acarretaria aumento de energia e esse movimento seria rejeitado. Evitar esse comportamento é uma justificativa para usar valores da temperatura de simulação maiores que zero.

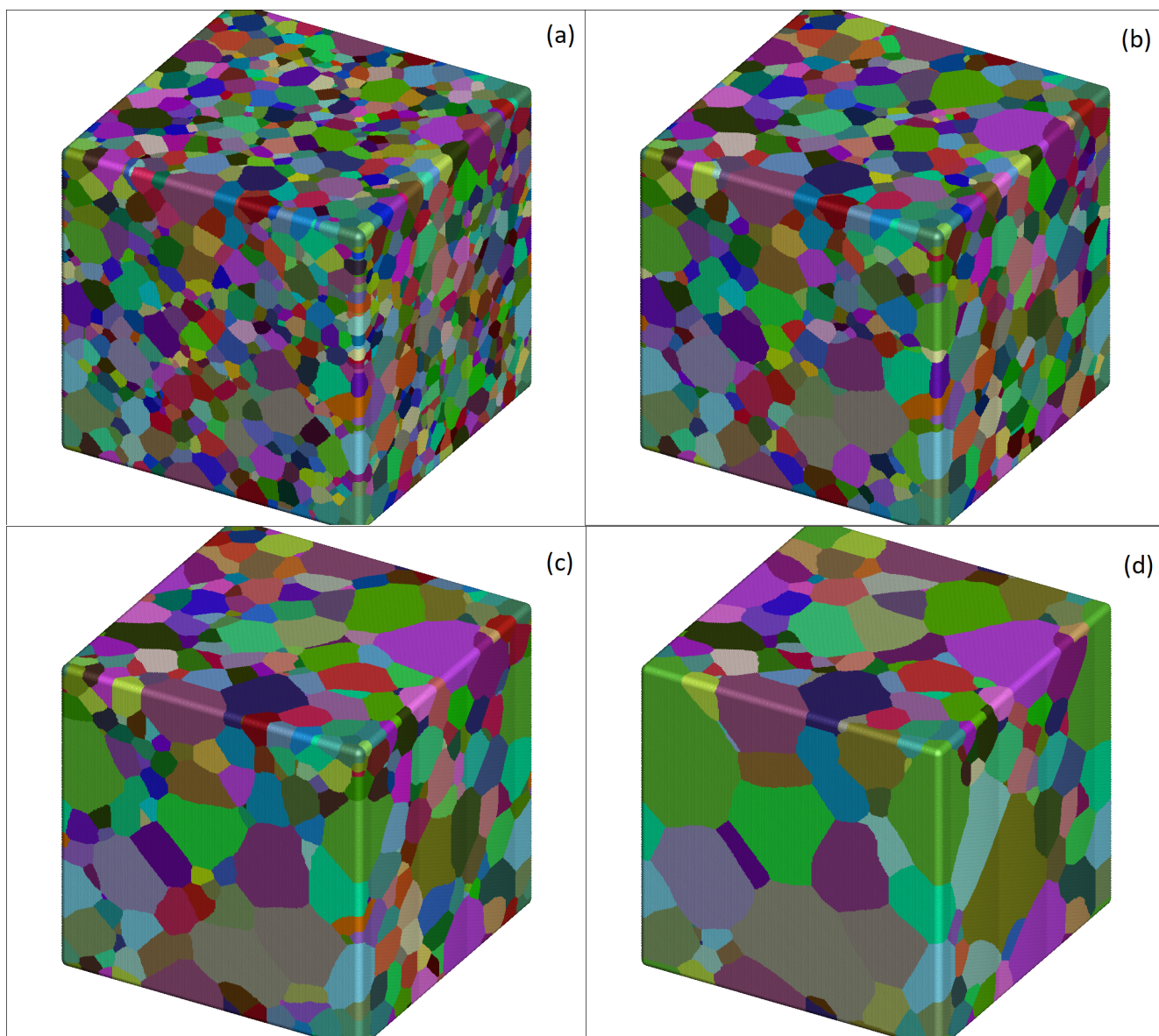
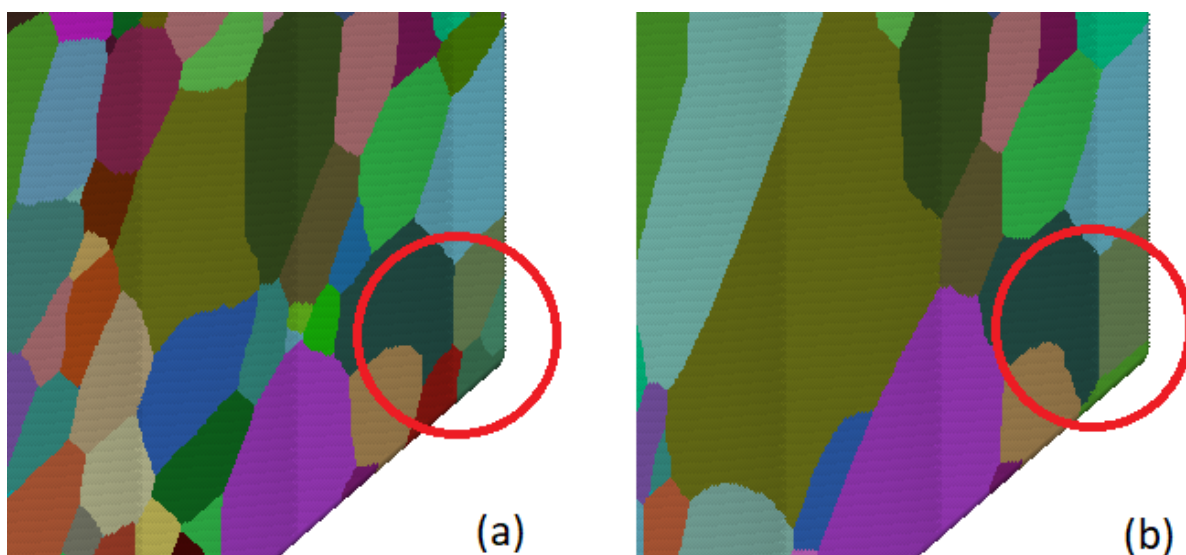


Figura 6.1: Representação gráfica da evolução da malha simulada para $\kappa_B T = 0$. (a) MCS 1000, (b) MCS 2000, (c) MCS 4000 e (d) MCS 8000



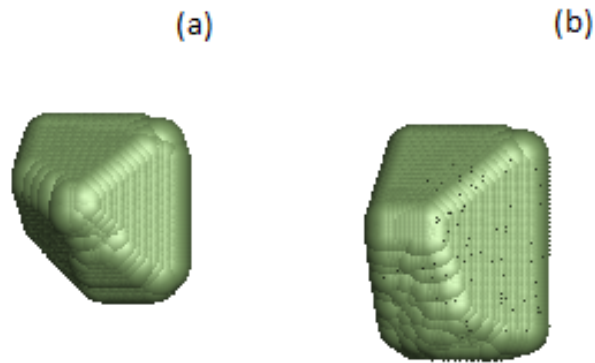


Figura 6.3: Exemplo de grão com faces travadas. (a) MCS 4000 (b) MCS 8000

Foram feitas também simulações com $\kappa_B T = 1, 6, 11$ e 16 . A representação gráfica da malha para $\kappa_B T = 6$ é mostrada na Figura 6.4. As linhas da superfície apresentam maior curvatura. Analisando uma amostra dos grãos no interior da malha (Figura 6.5), os grãos encontrados possuem faces curvadas e variam de volume uniformemente.

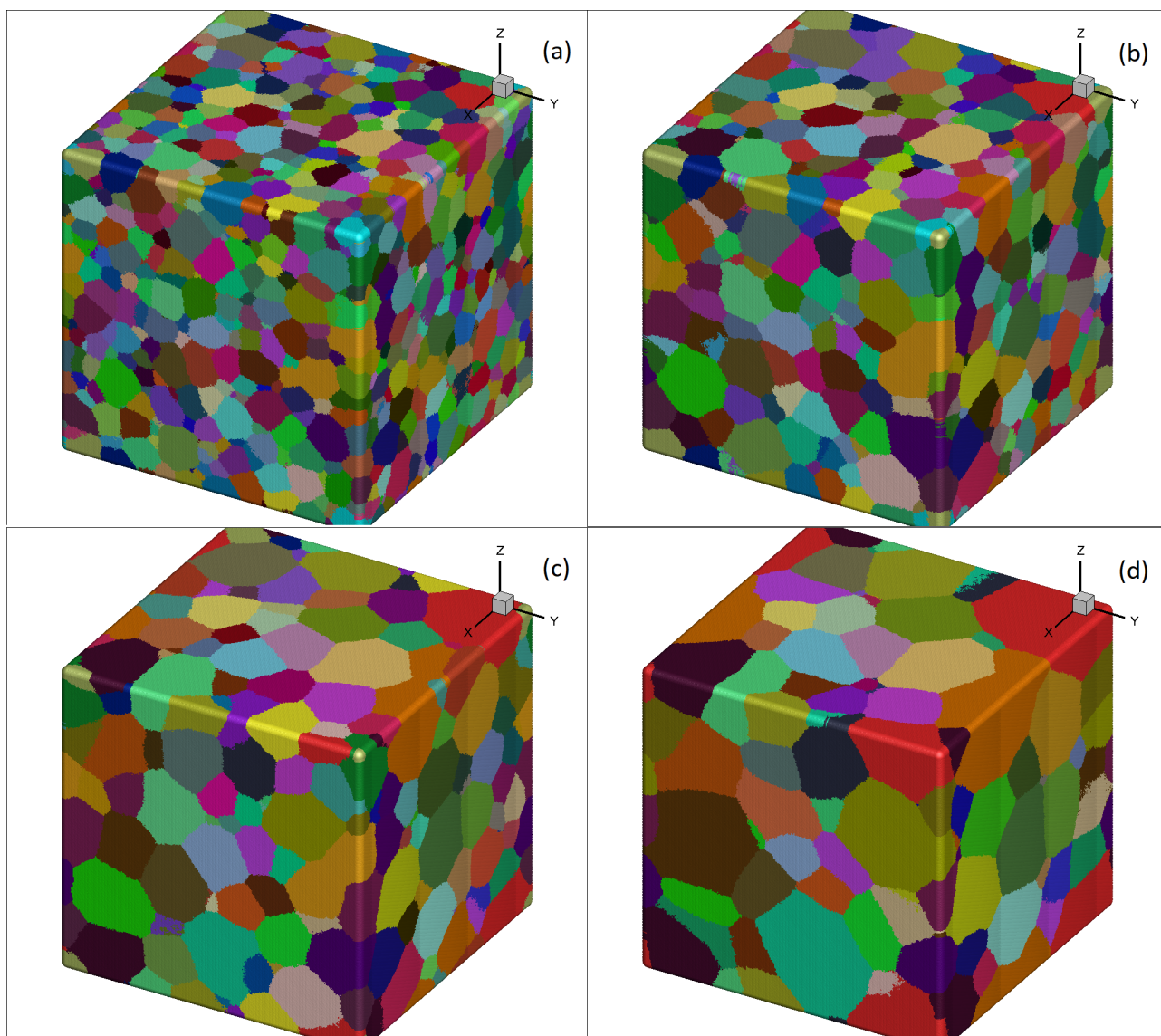


Figura 6.4: Representação gráfica da evolução da malha simulada para $\kappa_B T = 6$. (a) MCS 1000, (b) MCS 2000, (c) MCS 4000 e (d) MCS 8000

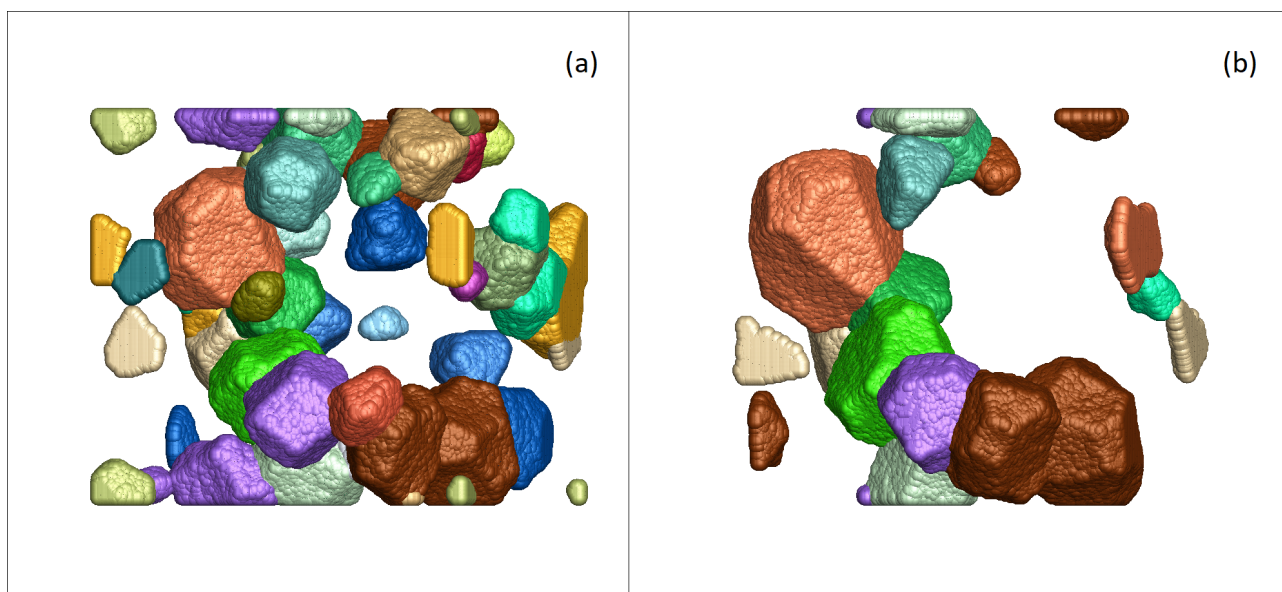


Figura 6.5: Evolução de grãos isolados em uma simulação com $\kappa_B T = 6$. (a) MCS 4000 e (b) MCS 8000

A evolução do tamanho médio obtida para as temperaturas de simulação foi plotada no gráfico 6.6. A equação 2.6, que define o modelo esperado para esse gráfico, pode ser linearizada com a aplicação de logaritmo nos dois lados da equação, obtendo-se a equação 6.1.

$$\ln(\bar{R}) = \ln(k) + n(\ln(t)) \quad (6.1)$$

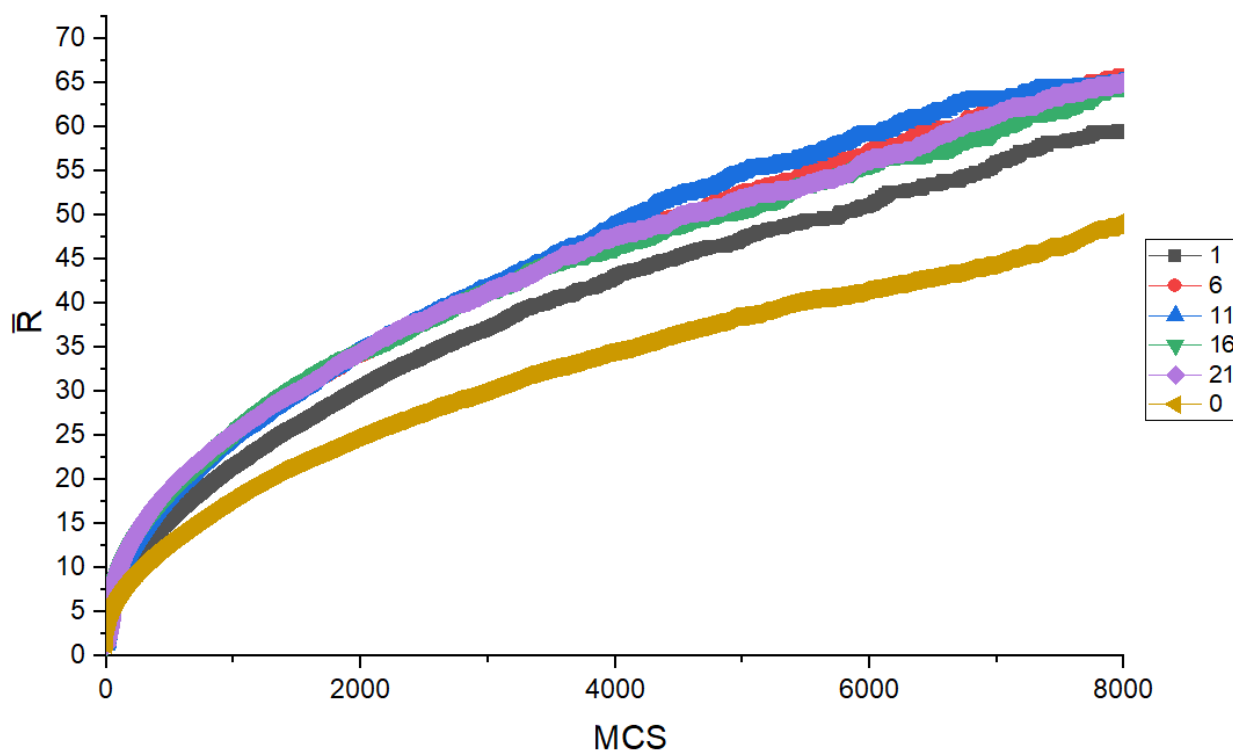


Figura 6.6: Evolução do tamanho de grão médio

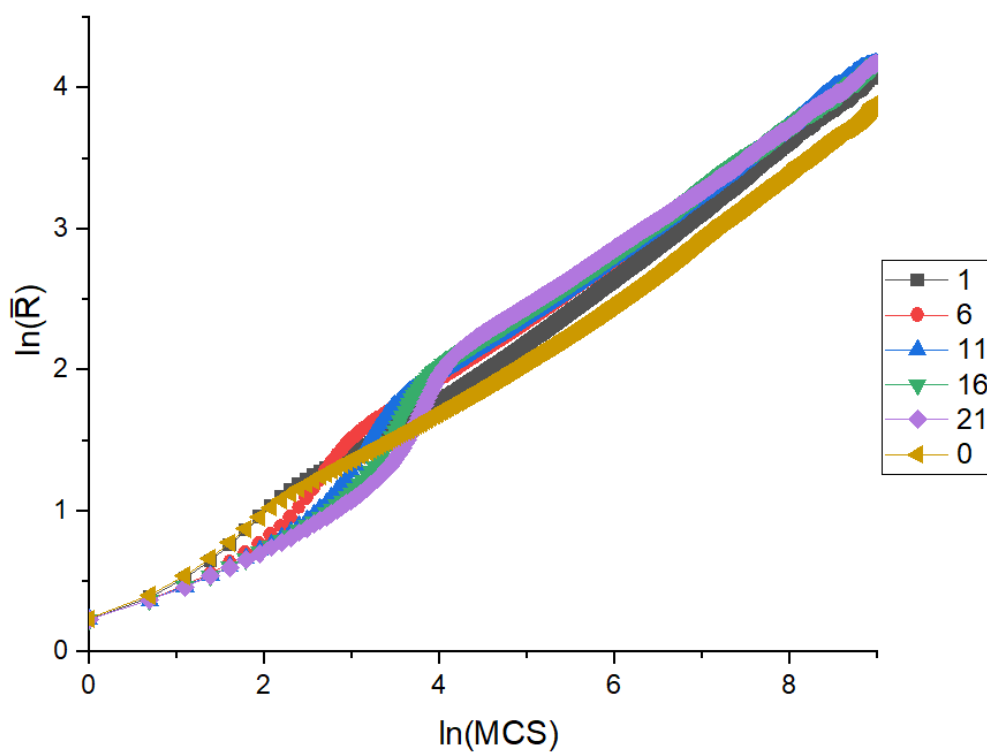


Figura 6.7: Evolução do tamanho de grão médio em escala logarítmica

Colocando os resultados demonstrados na Figura 6.6 em escala logarítmica é possível ver o comportamento linear do gráfico, de acordo com o esperado pela equação 6.1 conforme representado na Figura 6.7.

O valor do expoente n foi obtido usando regressão linear para encontrar o coeficiente angular das retas do gráfico anterior. Os valores encontrados estão representados na Figura 6.8.

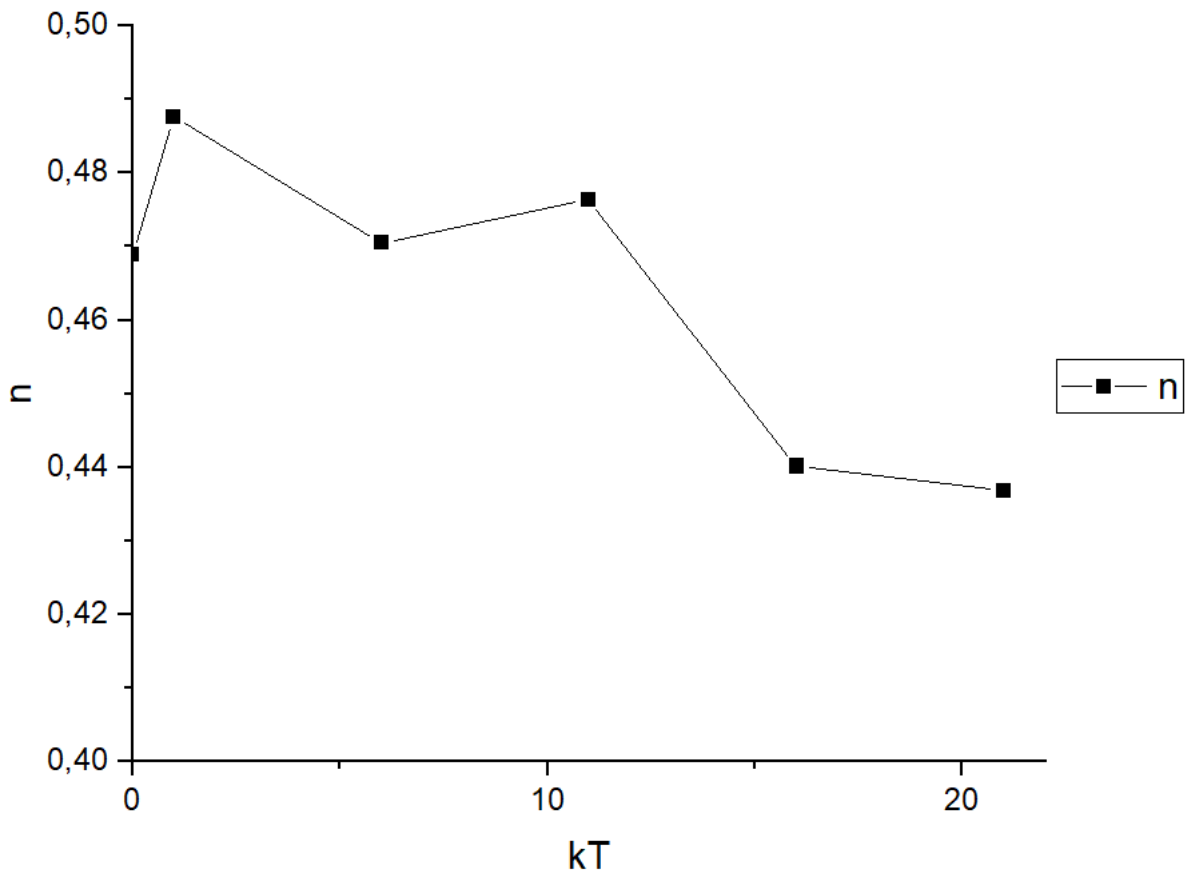


Figura 6.8: Valores de do expoente n

Conforme esperado, um valor para $\kappa_B T$ maior que zero deixa o comportamento do tamanho médio de grão mais próximo do teórico, devido ao efeito de redução do ancoramento por reticulado. Os valores encontrados estão próximos do valor 0.5 esperado da equação 2.6 e de acordo com resultados computacionais anteriores [18], [49] e [50] e experimental [52]. Além disso, é possível ver que para valores maiores de temperatura o valor do expoente n começa a se afastar do esperado, indicando haver uma faixa de temperatura dentro da qual é possível obter melhores resultados.

O resultado do número médio de lados dos grãos no tempo obtido com as simulações está mostrado na Figura 6.9. Os valores para $\kappa_B T$ maior que zero estão próximos do valor encontrado em experimentos: $13,77 \pm 0,13$ [52] e $13,7$ [35]. Também são compatíveis com valores anteriores computacionais, entre 13 e 14 [44], [53] e teórico de $13,39$ [34].

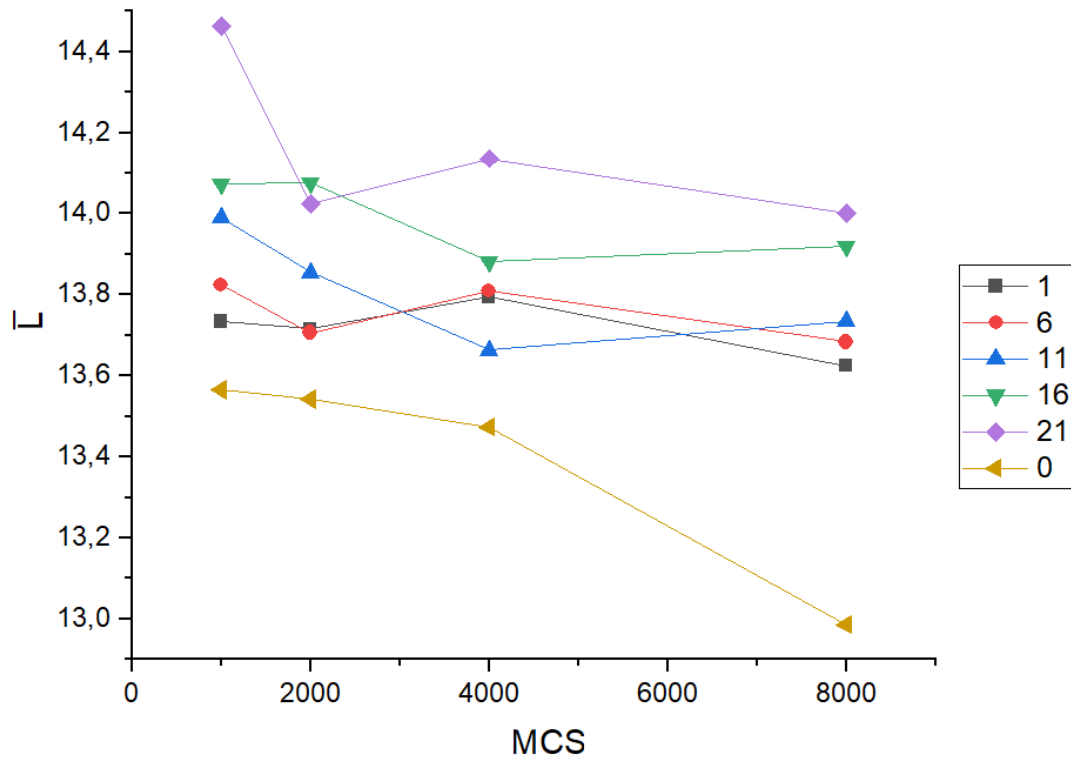


Figura 6.9: Número médio de lados dos grãos da simulação

Os resultados obtidos da distribuição de tamanho de grão, mostrados nos gráficos 6.10, demonstram o fenômeno de auto-similaridade esperado, com maiores variações da distribuição para maiores temperaturas de simulação. A distribuição obtida para $\kappa_B T = 6$ foi comparada com três resultados da literatura, na Figura 6.11:

- 1) O resultado experimental de uma amostra de uma liga de titânio Beta [35];
- 2) O resultado computacional de uma simulação de Monte Carlo realizada por Wang et al. [44] e
- 3) A distribuição teórica de Hillert para três dimensões [15].

Os resultados obtidos demonstram concordância com estas distribuições.

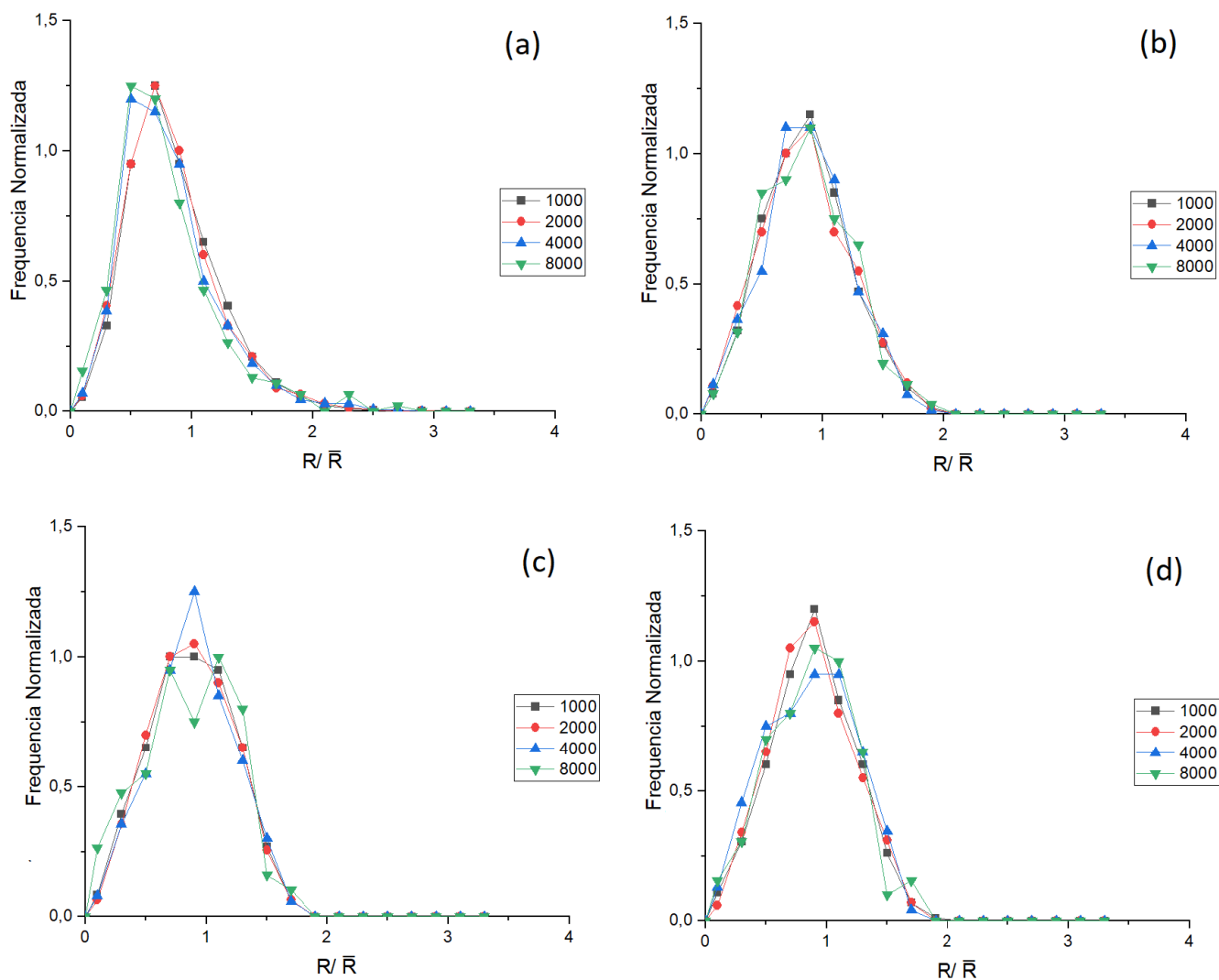


Figura 6.10: Distribuição do Tamanho de Grão Relativo para diferentes MCS. (a) $\kappa_B T = 0$, (b) $\kappa_B T = 1$, (c) $\kappa_B T = 6$, (d) $\kappa_B T = 11$

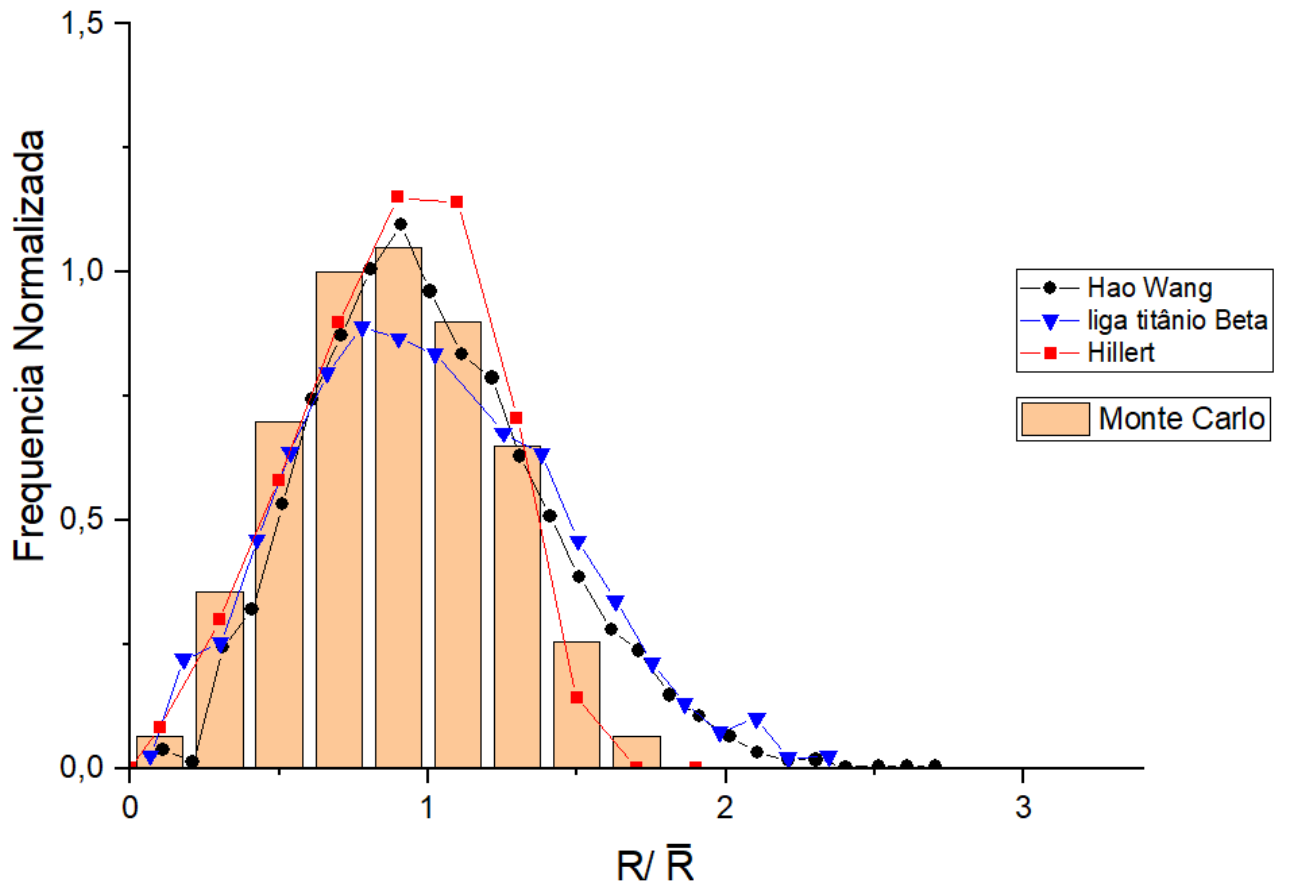


Figura 6.11: Comparação entre diferentes distribuições de tamanho de grão relativo, sendo eles o resultado experimental de uma amostra de uma liga de titânio Beta [35], de uma simulação de Monte Carlo de outro autor [44] e a distribuição de Hillert 3d [15].

A distribuição do número de lados por grão (Figura 6.12) encontrada também apresentou comportamento auto-similar, com grande concordância com os resultados da literatura [35, 10] (Figura 6.13)

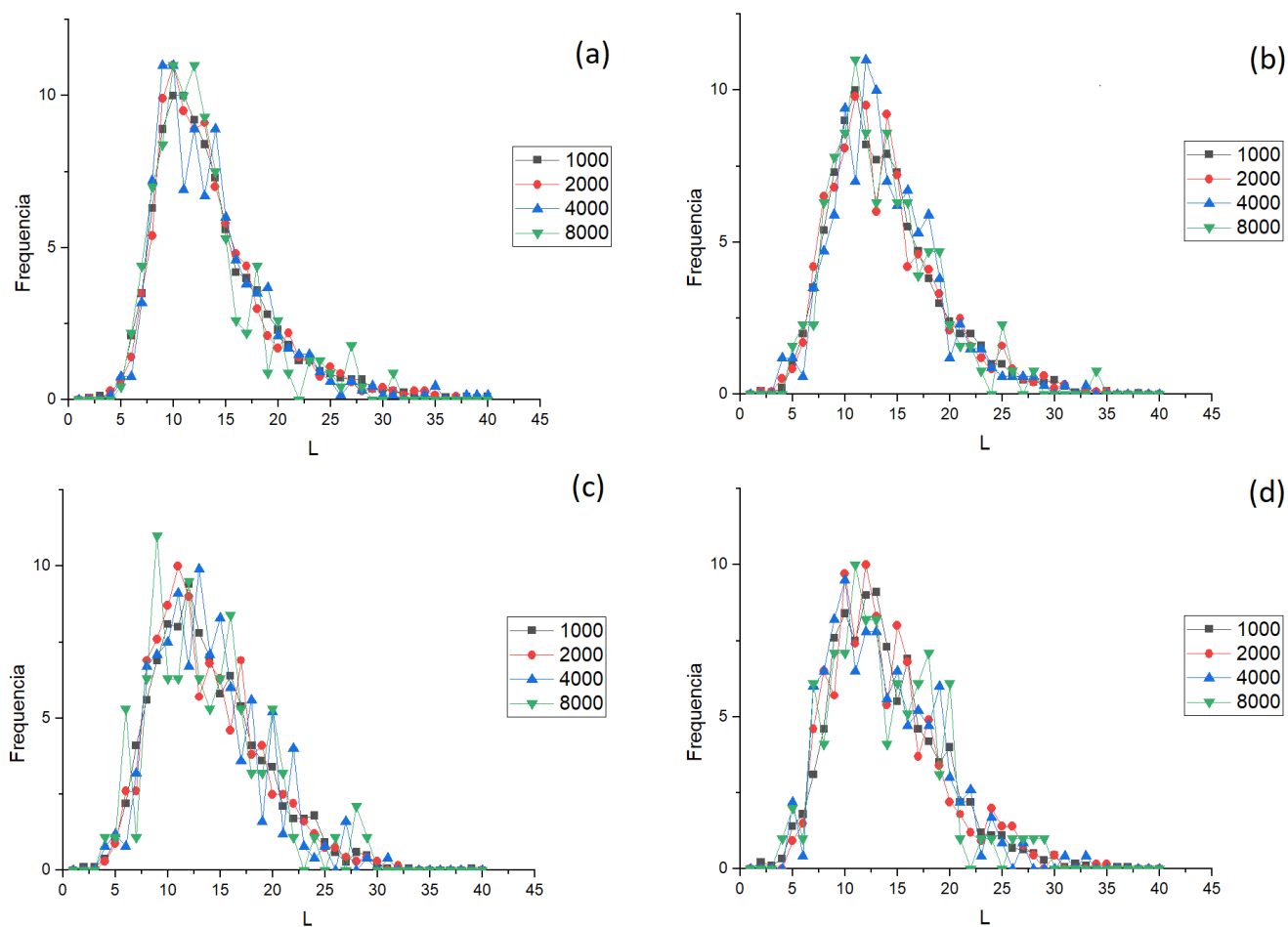


Figura 6.12: Distribuição do número de lados para diferentes MCS. (a) $\kappa_B T = 0$, (b) $\kappa_B T = 1$, (c) $\kappa_B T = 6$, (d) $\kappa_B T = 11$

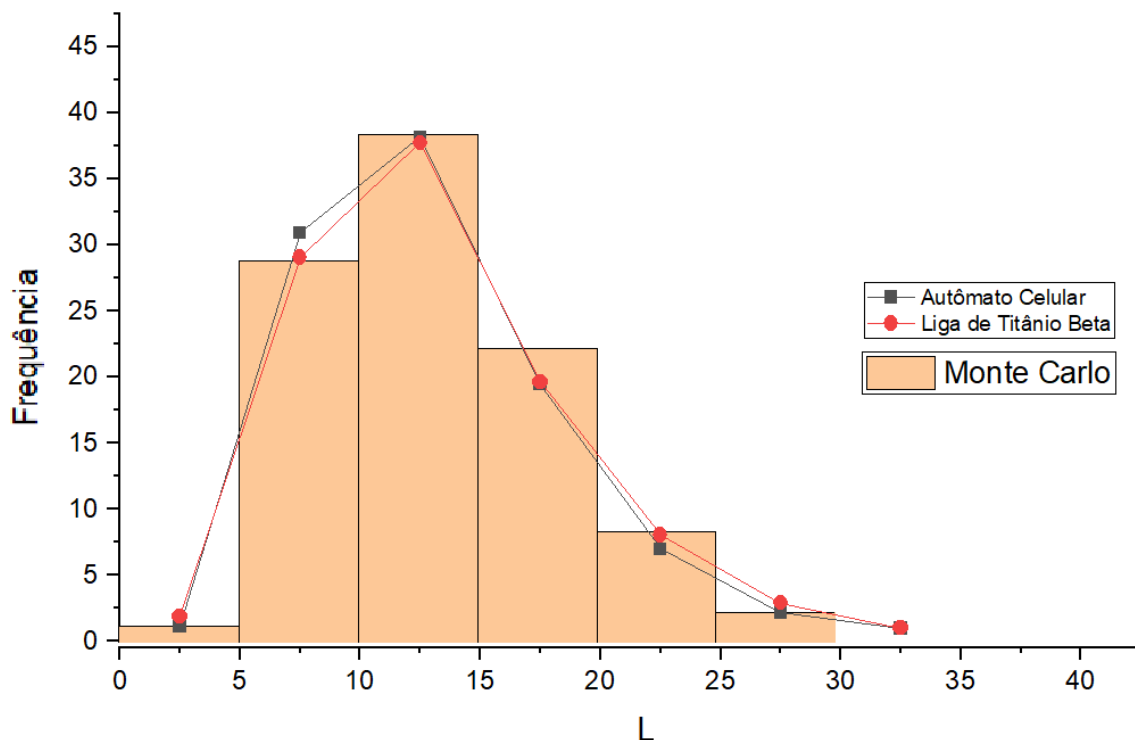


Figura 6.13: Comparação entre diferentes distribuições de número lados, sendo eles o resultado experimental de uma amostra de uma liga de titânio Beta [35] e o de uma simulação computacional realizada com o método do autômato celular [10].

6.2 Resultados da Otimização

Foram paralelizadas duas funções do algoritmo, as funções Lados e Tamanho. As funções Energia e Salve ficaram de fora do escopo do trabalho devido à sua dificuldade de paralelização sem a introdução de erros devido à estrutura sequencial que elas apresentam.

A função energia apresenta uma duração proporcional ao número de grãos total, logo ela sofre um decréscimo no decorrer da execução do programa (Figura 6.14). A causa dessa proporcionalidade é que o programa foi modificado para apenas calcular a variação de energia com a mudança e a sua respectiva probabilidade se a nova orientação é diferente da inicial nos testes de mudança de orientação. Se elas são iguais não há necessidade de cálculos adicionais e uma nova iteração é realizada. Com o aumento do tamanho dos grãos, a chance de que seja selecionado um elemento que possui um vizinho com orientação diferente decresce. A duração total para essa função foi de 25879 milisegundos durante a

execução do programa para 5000 MCS.

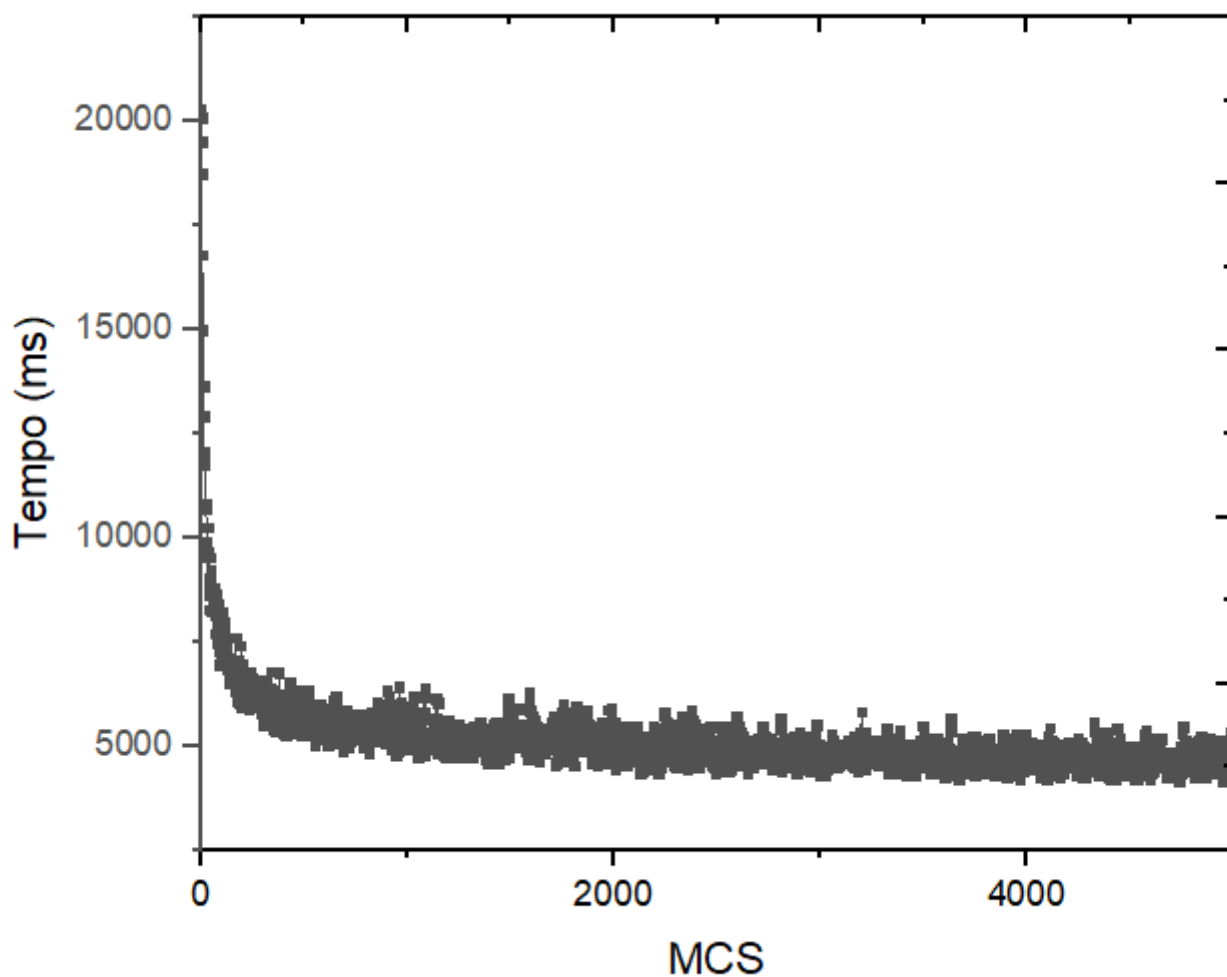


Figura 6.14: Duração da Função Energia

Analisando o tempo computacional de simulação da função tamanho é possível ver que ela sofreu um acréscimo em função do aumento do número de processadores. Esse acréscimo foi causado pelo baixo tempo necessário para a execução da função em relação ao esforço computacional para realizar a paralelização. O tempo total para a simulação convencional com 5000 MCS foi de 160 segundos.

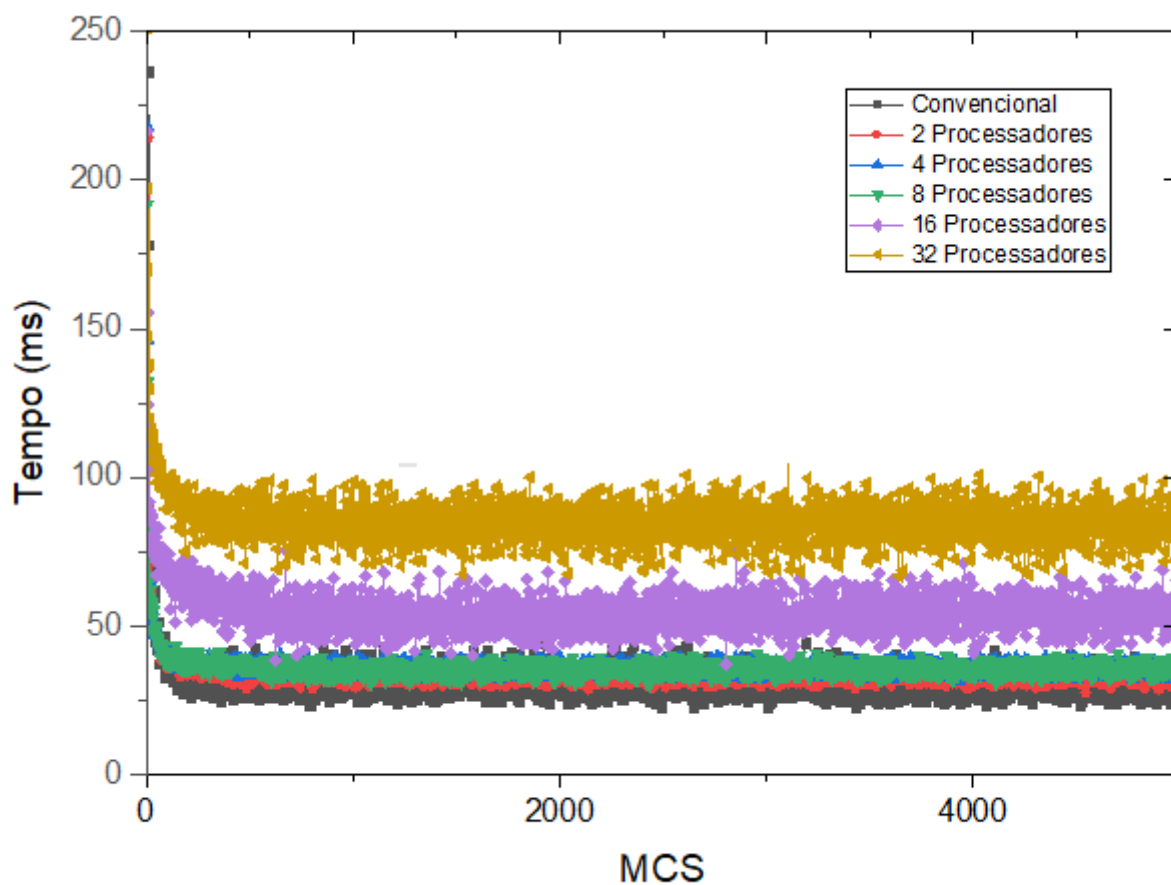


Figura 6.15: Duração da Função Tamanho

Já a função lado foi altamente paralelizável, com 0,95 de fração paralelizável, e apresentou ganhos expressivos de desempenho, como mostrado na Figura 6.16. A redução de tempo foi de 92% para 32 processadores.

A duração do tempo de execução em função do número de processadores segue a função 5.1, como pode ser visto na Figura 6.17.

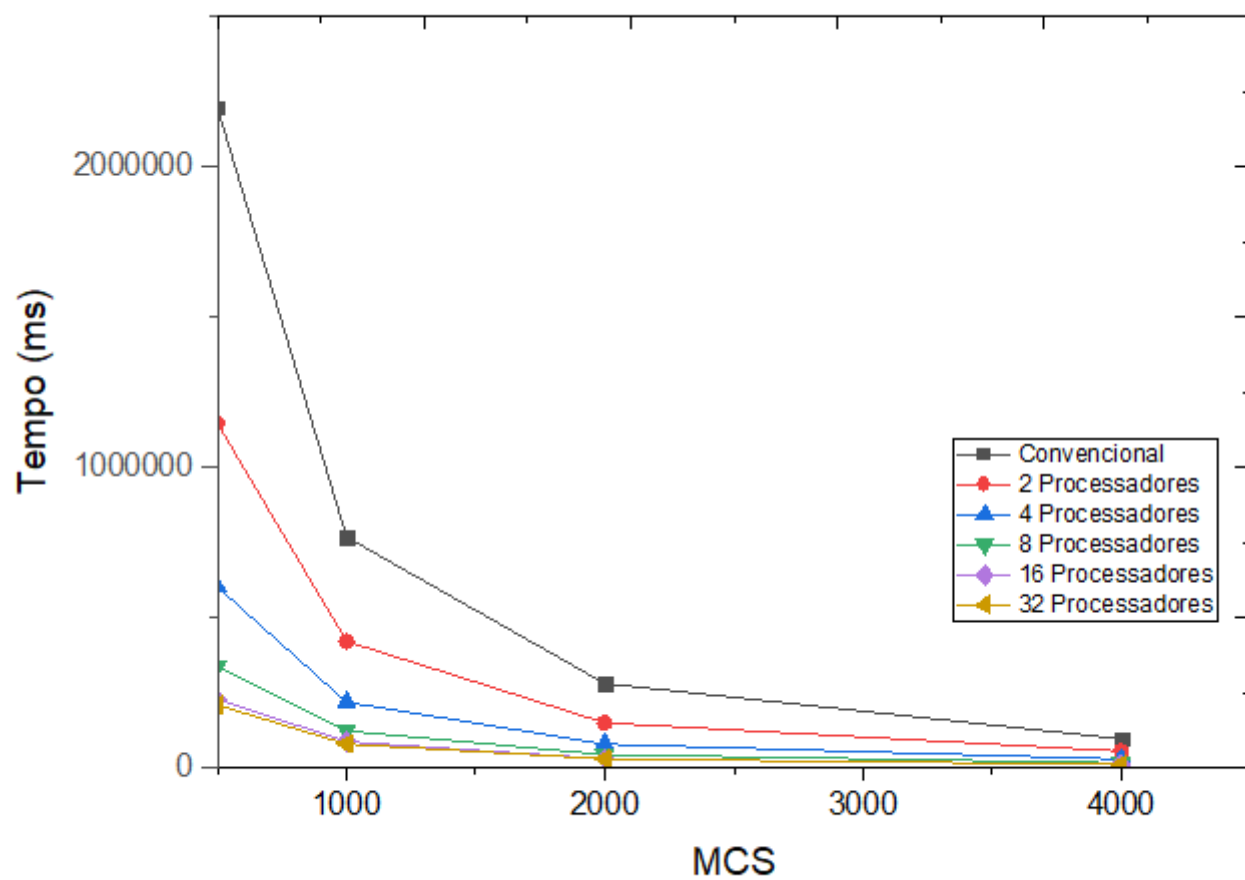


Figura 6.16: Duração da Função Lado

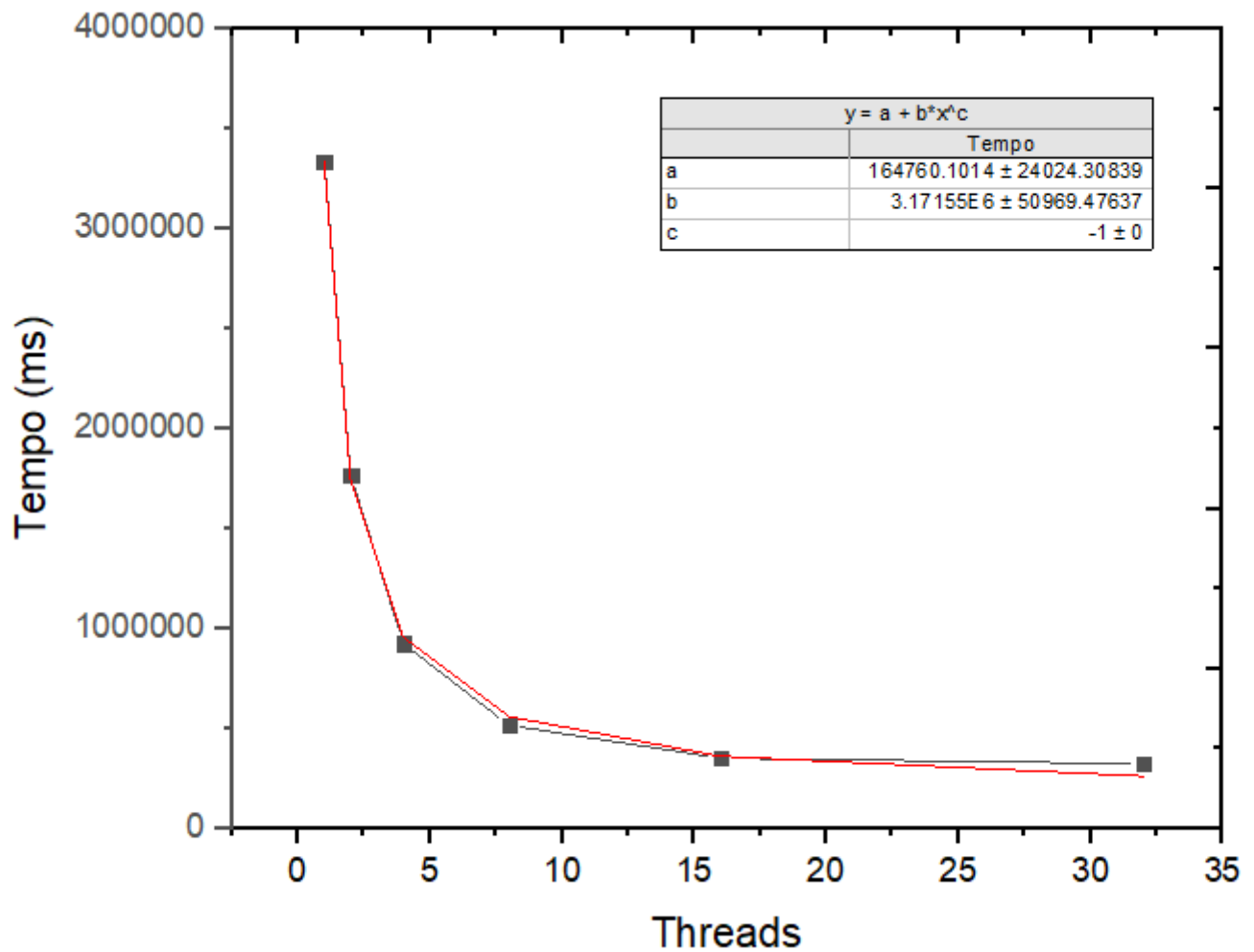


Figura 6.17: Tempo total de duração da função lado

A função `salve` apresenta uma duração de tempo aproximadamente constante, sendo que foram salvas amostras nos tempos de 500, 1000, 2000 e 4000 MCS. A duração total desta função foi de 550 segundos.

O tempo total de duração do algoritmo, originalmente 3362899 milissegundos, pode então ser reduzido em 3072439 milissegundos, ou 91% do tempo original, com a paralelização de suas funções.

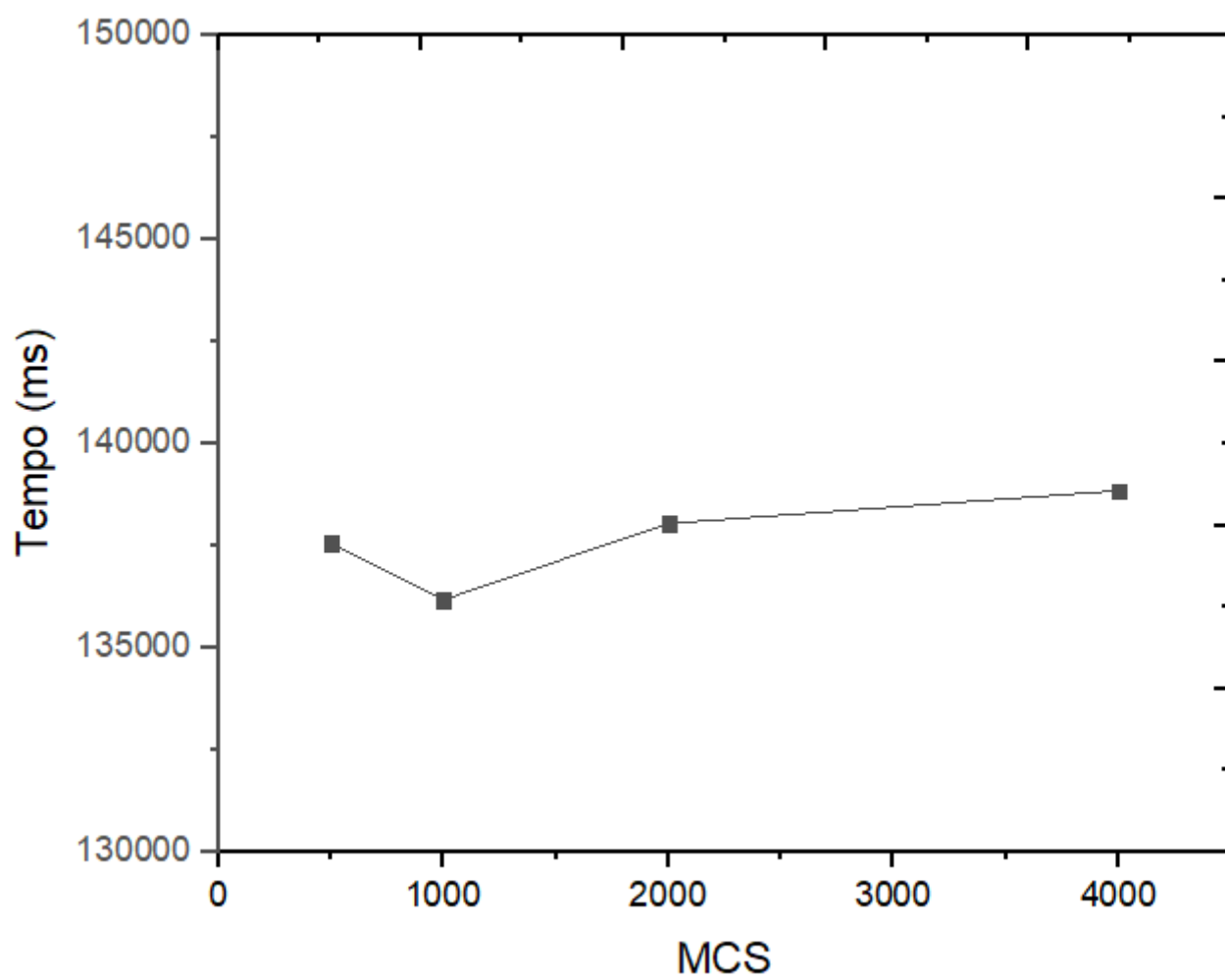


Figura 6.18: Duração da Função Salve

Capítulo 7

Conclusões e Trabalhos Futuros

7.1 Conclusões

Neste trabalho, foi realizada uma simulação de crescimento de grão normal através do método de Monte Carlo, baseado no algoritmo originalmente proposto por Srolovitz et al. [38].

A cinética de crescimento de grãos controlada pela curvatura, esperada pelo modelo de Burke e Turnbull [3] foi verificada, assim como o expoente da equação 2.9, o número médio de lados e as distribuições de tamanho de grão relativo e de lados esperadas por resultados anteriores da literatura. Foram verificados os efeitos da variação da temperatura de simulação, que para valores maiores que zero evita o efeito de ancoramento por reticulado, que faz os resultados divergirem do esperado fisicamente.

Após isso o código foi melhorado e foi demonstrado que é possível a redução do tempo de processamento, o que permite o estudo do crescimento de grão em um menor tempo necessário, e ainda manter resultados coerentes.

7.2 Trabalhos Futuros

Uma sugestão para trabalhos futuros seria a paralelização da função que define a evolução microestrutural, que neste trabalho é a função energia, e da função que salva a microestrutura, que neste trabalho é a função *save*, o que permitiria resultados em um tempo computacional ainda menor.

Uma melhoria ainda seria a adição da temperatura real T_r no cálculo da mobilidade da equação 4.9, para simulações de crescimento de grão levando em conta gradientes de

temperatura, assim como a introdução de valores de orientações e energia anisotrópicos, para simulação de crescimento de grão anisotrópico e crescimento de grão anormal.

Referências

- [1] ALLEN, J., CORNWELL, C., DEVINE, B., WELCH, C. Simulations of anisotropic grain growth in single phase materials using q-state monte carlo. *Computational Materials Science* 71 (2013), 25–32.
- [2] BEHERA, S. K. Kinetics of grain growth in la doped ultrapure al₂o₃. *Journal of Alloys and Compounds*, 683 (2016), 444–449.
- [3] BURKE, J., TURNBULL, D. Recrystallization and grain growth. *Progress in metal physics* 3 (1952), 220–292.
- [4] CALLISTER, W. D. J. *Ciência e Engenharia dos Materiais: Uma Introdução*, 7 ed. LTC, 2002.
- [5] CHANDRA, R., DAGUM, L., KOHR, D., MAYDAN, D., McDONALD, J., MENON, R. *Parallel Programming in OpenMP*, 1 ed. Academic Press, 2001.
- [6] CHAO WANG, G. L. On the stability of grain structure with initial weibull grain size distribution. *Materials Letters* 4424–4428, 57 (2003), 37–42.
- [7] CHAPMAN, B., JOST, G., VAN DER PAS, R. *Using OpenMP: Portable Shared Memory Parallel Programming*, 1 ed. The MIT Press, 2008.
- [8] DAGPUNAR, J. S. *Simulation and Monte Carlo: With applications in finance and MCMC*. John Wiley Sons, 2007.
- [9] DECOST, B. L., HOLM, E. A. Phenomenology of abnormal grain growth in systems with nonuniform grain boundary mobility. *Metallurgical and Materials Transactions A* 48, 6 (2017), 2771–2780.
- [10] DING, H., HE, Y., LIU, L., DING, W. Cellular automata simulation of grain growth in three dimensions based on the lowest-energy principle. *Journal of Crystal Growth* 293, 2 (2006), 489–497.
- [11] FELTHAM, P. Grain growth in metals, with special reference to high-purity nickel. *J. Inst. Metals* 86 (1957).
- [12] FJELDBERG, E., MARTHINSEN, K. A 3d monte carlo study of the effect of grain boundary anisotropy and particles on the size distribution of grains after recrystallisation and grain growth. *Computational Materials Science* 48, 2 (2010), 267–281.
- [13] GAO, J., THOMPSON, R. Real time-temperature models for monte carlo simulations of normal grain growth. *Acta materialia* 44, 11 (1996), 4565–4570.

- [14] GODFREY, A., MARTIN, J. Some monte carlo studies of grain growth in a temperature gradient. *Philosophical Magazine A* 72, 3 (1995), 737–749.
- [15] HILLERT, M. On the theory of normal and abnormal grain growth. *Acta Metallurgica* 13 (1965), 227–238.
- [16] HOLM, E. A., GLAZIER, J. A., SROLOVITZ, D. J., GRETT, G. S. Effects of lattice anisotropy and temperature on domain growth in the two-dimensional potts model. *Physical Review A* 43, 6 (1991), 2662.
- [17] JANSSENS, K. G. F., RAABE, D., KOZESCHNIK, E., MIODOWNIK, M. A., NESHLER, B. *Computational materials engineering: an introduction to microstructure evolution*. Academic Press, 2010.
- [18] KIMA, Y., HWANG, S., KIMA, M., KWUNB, S., CHAEC, S. Three-dimensional monte-carlo simulation of grain growth using triangular lattice. *Materials Science and Engineering A* 408 (2005), 110–120.
- [19] LÉPINOUX, J., WEYGAND, D., VERDIER, M. Modeling grain growth and related phenomena with vertex dynamics. *Comptes Rendus Physique* 11, 3-4 (2010), 265–273.
- [20] LESAR, R. *Introduction to Computational Materials Science: Fundamentals to Applications*, 1 ed. Materials Research Society, 2013.
- [21] LIU, Y., GUAN, X., SHEN, X., MA, X., WANG, L. On the monte carlo simulation of normal grain growth. *Acta Metallurgica Sinica (English Letters)* 21, 4 (2008), 282–288.
- [22] LUIZ DA SILVA ASSIS, W. Investigação do efeito da nucleação, da velocidade de crescimento e da distribuição da energia armazenada na recristalização pelo método do autômato celular em três dimensões. Dissertação de Mestrado, Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda, Volta Redonda, Rio de Janeiro, Brasil, 2006.
- [23] MAAZI, N. Modeling of the neighborhood topological effect on grain growth in presence of particles pinning. *Materials Science and Engineering: A* 528, 15 (2011), 4994–5001.
- [24] MASON, J., LIND, J., LI, S., REEDA, B., KUMAR, M. Kinetics and anisotropy of the monte carlo model of grain growth. *Acta Materialia* 82 (2015), 155–166.
- [25] METROPOLIS, N., ROSENBLUTH, A. W., ROSENBLUTH, M. N., TELLER, A. H. Equation of state calculations by fast computing machines. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS* 21, 6 (1953), 1087–1092.
- [26] MORA, L. B. 2d vertex modeling for the simulation of grain growth and related phenomena. *Mathematics and Computers in Simulation* 80, 80 (2010), 1411–1427.
- [27] MULLINS, W. W. Two-dimensional motion of idealized grain boundaries. *Journal of Applied Physics* 27, 80 (1956), 900–904.
- [28] PADILHA, A., SICILIANO, F. *Encruamento, recristalização, crescimento de grão e textura*. ABM, 2005.

- [29] POOTS, R. B. Some generalized order-disorder transformations. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 48, 1 (1952), 106–109.
- [30] PORTER, D. A., EASTERLING, K. E. *Phase Transformations in Metals and Alloys*, 2 ed. Chapman Hall, 1992.
- [31] RAABE, D. *Computational materials science: The simulation of materials microstructures and properties*, 1 ed. Wiley-VCH, 1998.
- [32] RADHAKRISHNAN, B., ZACHARIA, T. Monte carlo simulation of grain boundary pinning in the weld heat-affected zone. *metallurgical and Materials Transactions A* 26, 8 (1995), 2123–2130.
- [33] RHINES, F. N., CRAIG, K. R., DEHOFF, R. T. Mechanism of steady-state grain growth in aluminum. *Metallurgical Transactions* 5, 2 (1974), 413–425.
- [34] RIOS, P. R., GLICKSMAN, M. Modeling polycrystals with regular polyhedra. *Materials Research* 9, 2 (2006), 231–236.
- [35] ROWENHORST, D., LEWIS, A., SPANOS, G. Three-dimensional analysis of grain topology and interface curvature in a β -titanium alloy. *Acta Materialia* 58, 16 (2010), 5511–5519.
- [36] SHIRDEL, M., MIRZADEH, H., PARSA, M. Abnormal grain growth in aisi 304l stainless steel.
- [37] SOUCAIL, M., MESSINA, R., COSNUAU, A., KUBIN, L. Monte carlo simulation of zener pinning in two dimensions. *Materials Science and Engineering: A* 271, 1-2 (1999), 1–7.
- [38] SROLOVITZ, D., ANDERSON, M., GRETT, G., SAHNI, P. Grain growth in two dimensions. *Scripta Metallurgica* 17, 2 (1983), 241–246.
- [39] TAMAKI, T., MURAKAMI, K., USHIODA, K. Proposal of two-dimensional local curvature multi-vertex model for grain growth simulation. *ISIJ* 56 (2016), 1847–1856.
- [40] TAN, Y., MANIATTY, A., ZHENG, C., WEN, J. Monte carlo grain growth modeling with local temperature gradients. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 25, 6 (2017), 065003.
- [41] THIBAUT, K., LOCQ, D., CARON, P., BOIVIN, D., RENOLLET, Y., BRÉCHET, Y. Influence of microstructure on local intra-and intergranular deformations during creep of a nickel-based superalloy at 700 deg c. *Materials Science and Engineering: A* 588 (2013), 14–21.
- [42] UPMANYU, M., HASSOLD, G. N., KAZARYAN, A., HOLM, E. A., WANG, Y., PATTON, B., SROLOVITZ, D. J. Boundary mobility and energy anisotropy effects on microstructural evolution during grain growth. *Interface Science* 10, 2-3 (2002), 201–216.
- [43] VEACH, E. *Robust monte carlo methods for light transport simulation*. No. 1610. Stanford University PhD thesis, 1997.

- [44] WANG, H., LIU, G.-Q., QIN, X.-G. Grain size distribution and topology in 3d grain growth simulation with large-scale monte carlo method. *International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials* 16, 1 (2009), 37–42.
- [45] WANG, M., YIN, Y., ZHOU, J., NAN, H., WANG, T., LI, W. Cellular automata simulation for high temperature austenite grain growth based on thermal activation theory and curvature-driven mechanism. *Can. J. Phys.* 94 (2016), 1847–1856.
- [46] WEYGAND, D., BRÉCHET, Y., LÉPINOUX, J. A vertex dynamics simulation of grain growth in two dimensions. *Philosophical Magazine B* 78, 4 (1998), 329–352.
- [47] WILLIAMSON, A., DELPLANQUE, J.-P. Investigation of dynamic abnormal grain growth using the monte carlo potts method. *Computational Materials Science* 124 (2016), 114–129.
- [48] YADAV, V., MOELANS, N. Investigation on the existence of a ‘hillert regime’ in normal grain growth. *Scripta Materialia* 142 (2018), 148–152.
- [49] YU, Q., ESCHE, S. K. Three-dimensional grain growth modeling with a monte carlo algorithm. *Materials Letter* 57 (2003), 4622–4626.
- [50] YU, Q., NOSONOVSKY, M., ESCHE, S. K. On the accuracy of monte carlo potts models for grain growth. *Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering* 8 (2008), 227–243.
- [51] ZHANG, C., ENOMOTO, M., SUZUKI, A., ISHIMARU, T. Characterization of three-dimensional grain structure in polycrystalline iron by serial sectioning. *Metallurgical and Materials Transactions A* 35, 7 (2004), 1927–1933.
- [52] ZHANG, J., ZHANG, Y., LUDWIG, W., ROWENHORST, D., VOORHEES, P. W., POULSEN, H. F. Three-dimensional grain growth in pure iron. part i. statistics on the grain level. *Acta Materialia* (2018).
- [53] ZÖLLNER, D. Monte carlo potts model simulation and statistical mean-field theory of normal grain growth. Dissertação de Mestrado, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Alemanha, 2006.
- [54] ZÖLLNER, D. A new point of view to determine the simulation temperature for the potts model simulation of grain growth. *Computational Materials Science* 86 (2014), 99–107.
- [55] ZÖLLNER, D., STREITENBERGER, P. Three-dimensional normal grain growth: Monte carlo potts model simulation and analytical mean field theory. *Scripta materialia* 54, 9 (2006), 1697–1702.