

# PROGRAMACIÓN DE ALGORITMOS COMPUTACIONALES PARA LA SIMULACIÓN DE ESTRUCTURAS DE GRANO

## PROGRAMMING COMPUTER ALGORITHMS FOR SIMULATING GRAIN STRUCTURES

**Adán Ramírez-López<sup>1,2</sup>, David Muñoz-Negrón<sup>1</sup>, Alejandro Cruz-Ramírez<sup>3</sup>,  
Ángel de J. Morales-Ramírez<sup>3</sup>**

(1) Instituto Tecnológico Autónomo de México (ITAM), Departamento de Ingeniería Industrial, Av. Río Hondo num. 1, Col. Progreso, Tizapan, México-D.F., CP. 01080

(2) Universidad Autónoma Metropolitana (UAM-Azc.), Departamento de Materiales. Edif. "P", Av. San Pablo # 180, Col. Reynosa, México-D.F., CP. 02200

(3) Instituto Politécnico Nacional (I.P.N.-ESIQIE), Laboratorio de Análisis Metalúrgicos Edif. "6" y Edif. "Z", Unidad Profesional Adolfo López Mateos (Zacatenco), México-D.F., CP 07738  
(e-mail: adaramil@yahoo.com.mx)

*Recibido: 11/10/2011 - Evaluado: 07/11/2011 - Aceptado: 09/12/2011*

### RESUMEN

El presente trabajo ilustra la descripción de rutinas computacionales basadas en diferentes modelos para la simulación de estructuras de grano. Métodos de Monte Carlo y de generación de números aleatorios son utilizados en conjunto a modelos geométricos y de autómatas celulares para generar diferentes morfologías en los granos y desplegarlas gráficamente en las pantallas de las computadoras. Además la influencia de los factores matemáticos y de los procesos computacionales empleados sobre la estructura de grano obtenida es descrita en detalle. Aunque los modelos geométricos son los mas simples y crean estructuras de grano similares a la realidad, tienen limitaciones debidas a la sencillez de su programación; mientras que los modelos de autómatas celulares y acoplados pueden ser empleados para generar estructuras más complejas y tomando como base reglas de generación y evolución.

### ABSTRACT

The present work shows the description of the computational routines based on simulation models. Monte Carlo methods and random number generation routines are used with geometrical models and cellular automata to create metallic grains with particular morphologies and be displayed on the screen. Moreover, the influence of the mathematical factors and the computational procedures employed over the final grain structure is explained in detail. Although geometrical models are the simplest, and reproduce some of the grain features, these also have son limits due to simplicity on programming; whereas cellular automata and coupled models can be employed to create more sophisticated grain structures based on specific rules for evolution.

Palabras clave: estructuras de grano; algoritmos computacionales; autómatas celulares; métodos numéricos  
Keywords: grain structure; computational algorithms; cellular automata; numerical methods

## INTRODUCCIÓN

En ciencia de materiales la simulación computacional de la morfología de las estructuras de grano es un tema de primordial importancia ya que influyen directamente en las propiedades de los materiales metálicos. Sin embargo debido a la complejidad geométrica y en el estudio de los procesos para la formación de estas estructuras, es necesario el desarrollo de técnicas de representación computacional que han sido desarrolladas para trabajar en forma simultánea con métodos numéricos convencionales y poder obtener una mejor aproximación. La teoría del caos basada en métodos de Monte Carlo y la generación de números aleatorios son técnicas que pueden ser anidadas en procesos computacionales y empleadas para la simulación de la morfología de las estructuras de grano (McFadden & Browne, 2006; Ramírez *et al.*, 2006; Ramírez *et al.*, 2009; Shin & Hong, 2002; Yoshioka *et al.*, 2004; Zhang *et al.*, 2003; Zhu & Hong, 2001; Flemings, 1974; Mishra & DebRoy, 2004; Liu *et al.*, 2006; Suwa *et al.*, 2006). Debido a las características heterogéneas y caóticas de los granos metálicos es necesario involucrar procesos estocásticos que permitan generar estructuras particulares que no se podrían obtener por métodos numéricos convencionales.

Algunos autores (McFadden & Browne, 2006; Shin & Hong, 2002; Yoshioka *et al.*, 2004; Zhang *et al.*, 2003), han desarrollado rutinas computacionales para la representación de las estructuras de grano. Estos pueden ser clasificados en función al tipo de estructura a generar en modelos bidimensionales ó tridimensionales. Frecuentemente los modelos bidimensionales son los más empleados por los metalurgistas ya que muchas de las validaciones de los modelos desarrollados se realizan por comparación visual con fotografías de muestras obtenidas mediante microscopía óptica ó electrónica.

En el presente trabajo se describen los algoritmos desarrollados con el objeto de identificar la utilidad y las limitaciones que tienen cada uno de ellos en la simulación de las estructuras de grano en materiales metálicos. Además, se mencionan las ventajas y desventajas de cada uno de los modelos empleados.

## MODELOS GEOMÉTRICOS

Los modelos geométricos fueron los primeros en ser empleados para la simulación de estructuras de grano (McFadden & Browne, 2006; Shin & Hong, 2002; Yoshioka *et al.*, 2004; Zhang *et al.*, 2003). El diagrama de flujo de la Figura 1 muestra el proceso básico de generación para la simulación. Inicialmente el usuario define las dimensiones de la muestra y el número de vértices que se desea colocar en esta. Posteriormente un par de ciclos de trabajo son empleados para generar números aleatorios. Para lo cual se emplea la instrucción random. Aquí los únicos valores empleados como límites son las dimensiones de la muestra. Posteriormente se realizarán tantas generaciones hasta alcanzar el número de puntos definidos inicialmente; y las condiciones mostradas son las encargadas de verificar la no repetitividad de los puntos. Cada uno de estos puntos será un vértice dentro de la muestra y será almacenado en forma ordenada.

Posteriormente se les asigna un número de identificación el cual es tomado en función a su posición y el usuario declara el número de coordinación correspondiente. El número de coordinación es el número de vecinos con los cuales será unido cada nodo pivote los cuales serán considerados como vértices. Posteriormente se localizan los puntos más cercanos a cada punto en análisis y se almacenan hasta ser iguales al número de coordinación. Este procedimiento se repite para cada uno de los nodos definidos. Posteriormente conforme el análisis continúa y los nodos vecinales son analizados se emplea un ciclo anidado para verificar si existe alguna asignación vecinal anterior. Esto se hace con el objeto de evitar la repetición de las asignaciones y verificar que todos los puntos tengan el número de coordinación definido por el usuario, evitando además comparaciones innecesarias.

En la Figura 2 se puede apreciar una muestra de una estructura de grano generada empleando el algoritmo computacional para modelos geométricos. El despliegue de esta se realiza ubicando en la pantalla de computadora las posiciones de los nodos empleados como vértices. Y uniendo a estos con los vecinos mediante líneas rectas. La

información de la estructura de grano puede ser almacenada en arreglos computacionales requiriendo muy poco espacio; sin embargo proporcionan una buena aproximación en la definición de las interfaces.

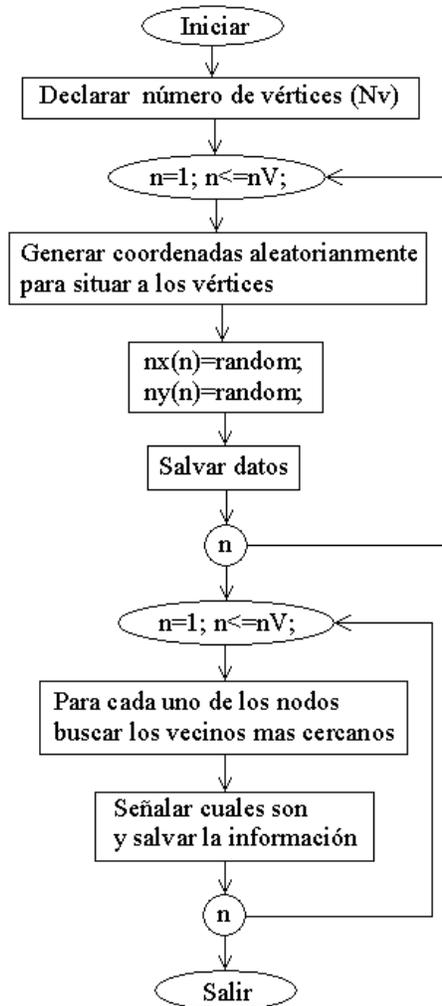


Fig. 1: Algoritmo computacional para generación de estructuras de grano por medio de modelos geométricos

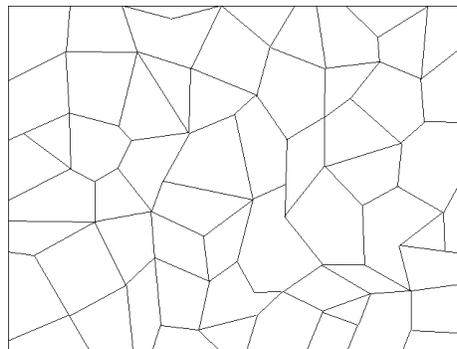


Fig. 2: Muestra simulada de una estructura de granos utilizando modelos geométricos.

El ordenamiento computacional se hace al asignar un valor de identificación a cada vértice. Y las localidades subsecuentes del arreglo computacional guardan el número de vecinos y los números de identificación de cada uno de ellos. Esta información es la única requerida para poder reconstruir la estructura de grano computacionalmente.

El criterio más empleado para seleccionar a los vecinos con los cuales se unirán los nodos pivote con frecuencia es su proximidad a estos.

Este tipo de modelos tienen las siguientes ventajas:

- La generación de las estructuras de granos es bastante rápida y eficiente.
- El salvado de la información de las estructuras de grano no requiere grandes espacios en memoria ni la declaración de arreglos computacionales complejos.
- Este tipo de modelos permite la simulación de granos con diferentes morfologías (granos columnares y/o equiaxiales).
- Es aplicable para generar muestras bidimensionales o tridimensionales.
- Los modelos geométricos se emplean comúnmente para simular estructuras de grano y comparar su similitud con muestras reales y sus algoritmos pueden ser modificados; además incluyen rutinas de métodos de Monte Carlo y caminante aleatorio.

Los modelos geométricos sin embargo tienen las siguientes desventajas.

- Las interfaces entre granos (límites ó bordes de grano) son únicamente rectilíneas; y los granos son de morfología poligonal ó poliédrica.
- Los algoritmos computacionales son complejos y requieren el desarrollo de rutinas lógicas ordenadas para una apropiada generación.

Finalmente se pueden aplicar variaciones al procedimiento original con el objeto de obtener muestras más complejas; por ejemplo se pueden asignar números de coordinación variables a los vértices. O bien se pueden crear zonas con mayor densidad de vértices asignando probabilidades preferenciales a zonas específicas. Esto genera muestras con distribuciones de diferentes tamaños de grano.

## **MODELOS CON AUTÓMATAS CELULARES**

Los autómatas celulares son empleados para representar computacionalmente el estado de un sistema parten de un análisis de celdas ó células para representar un material discretizado (Zhang *et al.*, 2003; Zhu & Hong, 2001; Flemings, 1974; Mishra & DebRoy, 2004). Los autómatas celulares también pueden ser actualizados para representar la evolución dicho sistema por lo que pueden ser la representación de las soluciones parciales respecto al tiempo.

Las estructuras de granos generadas computacionalmente mediante el uso de los modelos basados en autómatas celulares parten del principio de que un autómata celular se emplea para representar la evolución de un sistema en análisis. Por lo tanto estos pueden emplearse para representar los procesos físicos mediante los cuales se forman los granos en este caso la nucleación y el crecimiento. Aunque estos procesos se llevan a cabo en la realidad en función a las condiciones de enfriamiento. Sin embargo, muchos autores frecuentemente hacen simulaciones basadas únicamente en generaciones aleatorias (Zhang *et al.*, 2003; Zhu & Hong, 2001; Flemings, 1974; Mishra & DebRoy, 2004); involucrando así los procesos estocásticos y obteniendo muestras con morfologías de grano diversas.

El procedimiento para crear una muestra de estructura de granos mediante el empleo de Los modelos basados en autómatas celulares es ilustrado en la Figura 3. Aquí el usuario define el número de puntos que serán tomados como núcleos de formación para los granos. Posteriormente el usuario define las dimensiones de la muestra a generar.

Un par de ciclos computacionales son utilizados para crear las coordenadas y ubicar los puntos de nucleación. Este proceso se repetirá hasta alcanzar el número de puntos que el usuario definió inicialmente.

Posteriormente se simula el proceso de crecimiento. El cual consiste en el llenado de pixeles circunvecinos a los núcleos con el color distintivo que fue asignado al núcleo solidificado. Esto permite la identificación de granos por medio de un análisis comparativo. El resultado es una estructura de granos más compleja que la que se puede obtener mediante el empleo de modelos geométricos; ya que las interfases y los vértices se forman dinámicamente.

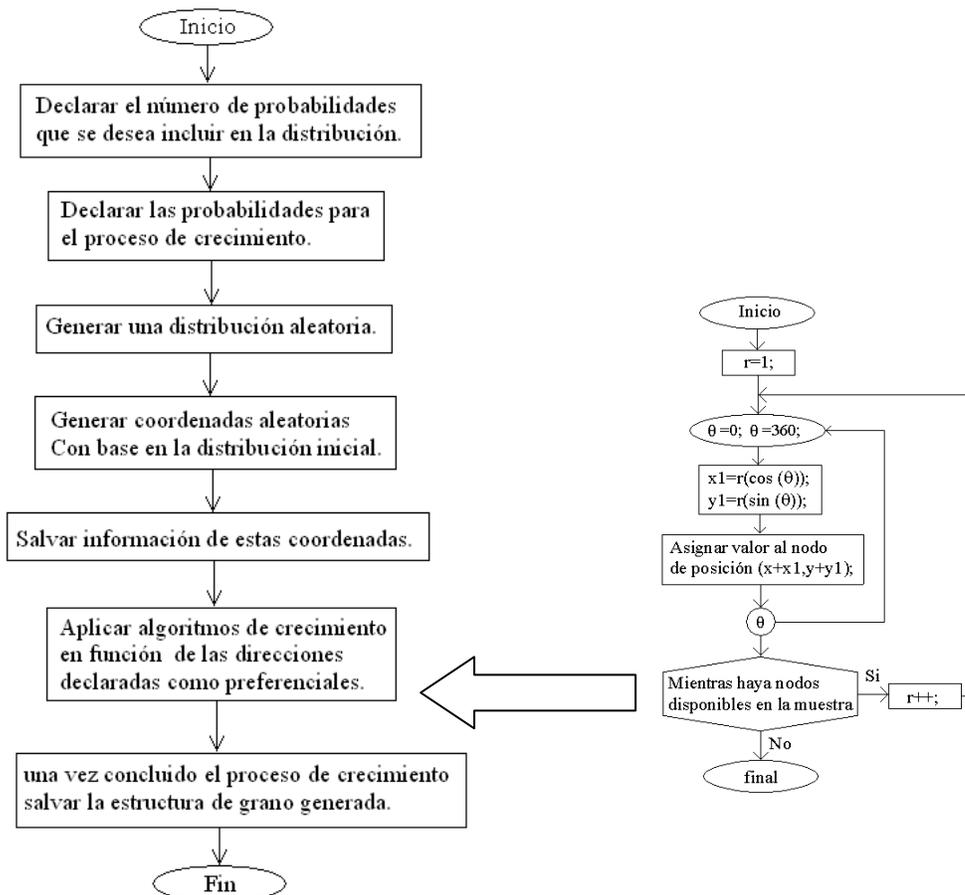


Fig. 3: Algoritmo computacional para la generación de estructuras de grano mediante autómatas celulares.

En las muestras de estructuras de grano formadas con los modelos con autómatas celulares las interfaces y los vértices se forman como parte del proceso evolutivo de la solidificación del metal. Es decir se forman cuando el proceso de crecimiento se ve interrumpido debido a que los frentes de crecimiento de 2 ó más núcleos chocan y bloquean el crecimiento de los opositores.

La Figura 4 muestra un ejemplo de una estructura granos que se va formando en función a su evolución. Aquí es posible apreciar la ubicación inicial de los nodos definidos como núcleos y su subsiguiente crecimiento. En este

caso es posible observar también que se considera un crecimiento isotrópico (poli-direccional) de los núcleos. Lo cual se logra al hacer parte del mismo grano pivote a los vecinos circundantes a cada paso de la simulación. Para lo cual se ejecutan los ciclos anidados incrementando los radios ( $r$ ) y los ángulos ( $\theta$ ) que forman los perímetros de los frentes de avance mediante los ciclos anidados que se muestran en el diagrama de flujo de la Figura 3.

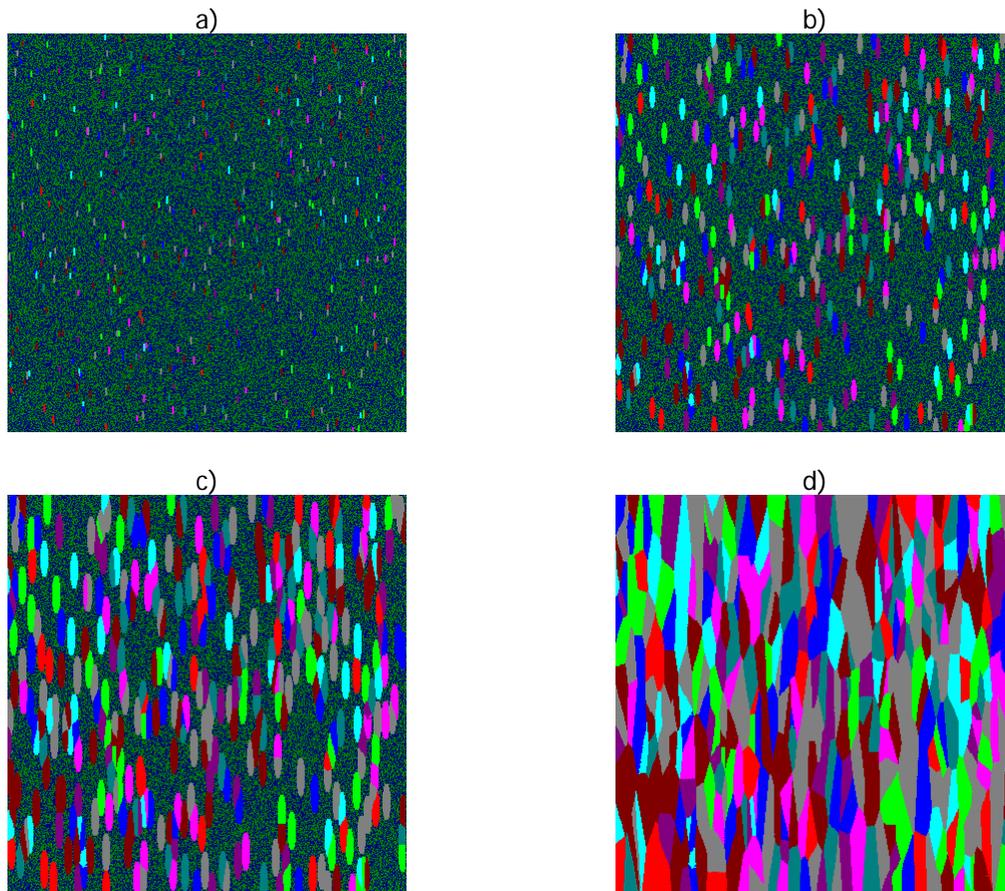


Fig. 4: Evolución de la simulación de una estructura de grano formada mediante el uso de modelos de autómatas celulares. a) Nucleación inicial de nodos. b) Sistema en evolución. c) comienza la formación de interfaces d) Estructura de grano obtenida.

Los modelos de autómatas celulares presentan las siguientes ventajas:

Pueden representar los procesos de formación original de las estructuras de granos.

De igual manera que los modelos geométricos en los modelos de autómatas celulares se pueden asignar probabilidades preferenciales para la ubicación de núcleos. Lo cual creara zonas con mayor y menor densidad de granos.

Los algoritmos computacionales para su generación aunque son complejos, los que se deben desarrollar para la interpretación de las muestras y caracterizarlas son mas simples en comparación con aquellos que se requieren para analizar los modelos geométricos.

Se pueden realizar adaptaciones a los algoritmos originales con el objeto de obtener morfologías más complejas. Como lo son la aplicación de múltiples rutinas de nucleación y variaciones en las velocidades de crecimiento. Lo cual da como resultado morfología de granos variables.

Algunas de las morfologías variables que se pueden obtener son las siguientes:

La generación de granos con interfaces rectilíneas pero también hiperbólicas.

La simulación de granos complejos derivados de procesos de coalescencia entre 2 ó más granos y cuya morfología ya no es poligonal ó poliédrica.

Sin embargo los modelos basados en autómatas celulares presentan la desventaja de requerir una gran cantidad de memoria de trabajo como de almacenamiento. Esto debido a que los valores de cada nodo (celda) deben ser salvados para una correcta interpretación. Un recurso típicamente empleado es utilizar variables de tipo entero para almacenar los valores; ya que su declaración ocupa menos espacio que las variables de punto flotante. Aún así el espacio requerido es considerablemente grande y debe ser declarado en los arreglos a emplear. El espacio en disco es considerablemente mayor debido a que se deben guardar los valores numéricos correspondientes a cada nodo (celda) del arreglo. Se emplean valores de tipo entero para esto ya que permiten una muy buena representación y requieren menor espacio además de poder ser interpretados fácilmente mediante el uso de algoritmos con ciclos anidados.

## MODELOS ACOPLADOS A CÁLCULOS TÉRMICOS

Los modelos que se encuentran acoplados a cálculos térmicos simulan los fenómenos de solidificación y de re-cristalización (Ramírez *et al.*, 2006; Ramírez *et al.*, 2009; Flemings, 1974; Mishra & DebRoy, 2004; Liu *et al.*, 2006; Suwa *et al.*, 2006); estos trabajan de la siguiente manera para generar una simulación de las estructuras de grano.

En el caso de simular la solidificación de un material metálico; inicialmente se realizan los cálculos de la extracción de calor (enfriamiento) mediante la discretización de los elementos a simular. Comúnmente se emplean mallados reticulares ó mallados isotrópicos ó anisotrópicos con base en la geometría a calcular. Posteriormente se resuelven la ecuaciones de transferencia de energía (ecuaciones de Fourier, Conducción, Stephan-Boltzman, convección natural ó forzada) en función a las condiciones del problema a resolver. Para lo cual se emplean métodos numéricos en secuencias de cálculo lógicamente programadas; empleándose métodos de diferencias finitas y elemento finito. Finalmente los resultados son salvados en archivos de trabajo según haya sido solicitado por los usuarios. Frecuentemente esto se hace tomando como referencia las temperaturas calculadas a cada paso de la simulación y almacenando los valores por medio de una comparación numérica.

La información de los tiempos de cambio de estado de líquido a sólido es utilizada para determinar las velocidades de solidificación y poder establecer parámetros para simular los fenómenos de nucleación y crecimiento. Esta información puede ser empleada para establecer reglas sobre los fenómenos que propician la formación de granos.

Una diferencia notable que tienen los modelos acoplados a cálculos térmicos con respecto a los modelos geométricos y a los de autómatas celulares simples. Radica en que permite generar diferentes morfologías de grano con pequeñas variaciones a los algoritmos ó bien establecerlas en función a las condiciones de la solidificación calculada. Es decir en este tipo de modelos, los procesos de nucleación y crecimiento tienen reglas que pueden utilizarse para establecer vínculos con procesos físicos reales.

En el caso de los fenómenos de re-cristalización se parte de una estructura original y se calcula la re-distribución de la energía añadida al sistema para también poder establecer las reglas que deberán regir al proceso de re-cristalización.

Este tipo de modelos tiene la ventaja de poder ser acoplado a cálculos basados en procesos determinísticos para generar una estructura de grano al ser resuelta de manera simultánea con un proceso estocástico.

Sin embargo muchas veces es difícil poder establecer con claridad las reglas de la simulación en función a simples cálculos numéricos previamente efectuados; por lo que se requiere de un entendimiento de los fenómenos físicos que ocurren.

La Figura 5 muestra una estructura de grano para una sección de acero de perfil cuadrado simulada a partir de un cálculo de solidificación previo. Aquí se puede apreciar que debido a que las velocidades de enfriamiento en las superficies laterales del cuadrado fueron muy altas se formó una estructura de granos muy finos como consecuencia de la creación de una gran cantidad de puntos de nucleación. Sin embargo conforme la velocidad de solidificación fue disminuyendo; la probabilidad de que los nodos previamente nucleados pudieran crecer para formar granos más grandes se incrementó formando granos de morfología columnar y con una dirección de crecimiento opuesta al flujo de calor.

Además en el centro se aprecia una morfología de tipo equiaxial con granos considerablemente más grandes debido a que aquí el metal permaneció mucho más tiempo en estado líquido y pastoso por lo que el flujo de calor fue extraído muy lentamente y se propició que los puntos nucleados no tuvieran direcciones preferenciales de crecimiento. Del mismo modo aquí se puede confirmar que prevaleció el fenómeno de crecimiento sobre el de nucleación debido a las mayores dimensiones de los granos.

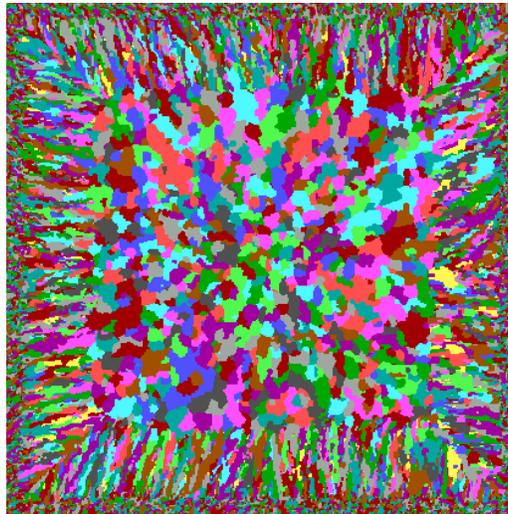


Fig. 5: Estructura de grano simulada en una palanquilla de acero utilizando un modelo acoplado a cálculos de solidificación.

Otra característica de los modelos acoplados a procesos térmicos y que los diferencia de los anteriormente mencionados es que en estos las direcciones de crecimiento se pueden asignar de manera preferencial en función a las cantidades de energía que son extraídas a cada paso de la simulación. Mientras que en los modelos basados simplemente en modelos estocásticos y de autómatas celulares, estas son establecidas por los usuarios y reproducidas aleatoriamente por las computadoras.

Debido a que se emplean autómatas celulares para representar computacionalmente a los granos de igual manera que otros modelos; las estructuras de grano formadas pueden ser caracterizadas empleando los mismos algoritmos.

## CONCLUSIONES

Después de realizar los algoritmos computacionales y ejecutarlos se probó que las simulaciones de estructuras de grano creadas con modelos geométricos son bastante aproximadas a aquellas que se encuentran en estructuras metálicas reales, sin embargo estos modelos no son relacionables con los procesos físicos de la formación de granos y solamente presentan interfases lineales.

Las estructuras de grano simuladas con modelos de autómatas celulares y con modelos acoplados a cálculos térmicos son capaces de generar estructuras de granos con morfologías más complejas y pueden ser relacionables con los procesos de formación y transformación de las estructuras de granos.

## AGRADECIMIENTOS

Instituto Tecnológico Autónomo de México (ITAM), Universidad Autónoma Metropolitana (UAM-Azc.), e Instituto Politécnico Nacional (I.P.N.-ESIQIE); así como al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) y a la sociedad Mexicana de Cultura.

## REFERENCIAS

1. Flemings, M.C. (1974). Solidification Processing. New York Ed., McGraw Hill 288 Book Co.
2. Liu, D.R., Guo, J.J., Wu, S.P., Su, Y.Q. & Fu, H.Z. (2006). Stochastic modeling of columnar-to-equiaxed transition in Ti-(45–48 at%) Al alloy ingots. *Materials Science and Engineering A*, 415, 184-194.
3. McFadden, S. & Browne, D.J. (2006). Meso-scale simulation of grain nucleation, growth and interaction in castings. *Scripta Materialia*, 55, 847–850.
4. Mishra, S. & DebRoy, T. (2004). Measurements and Monte Carlo simulation of grain growth in the heat-affected zone of Ti–6Al–4V welds. *Acta Mater.*, 52, 1183-1192.
5. Ramírez, A., Carrillo, F. & López, S. (2006). Stochastic simulation of grain growth during continuous casting, *MSE-A*, 421, 208-216.
6. Ramirez, A., Chavez, F., Demedices L., Cruz, A. & Macias M. (2009). Randomly Grain growth in metallic materials. *Chaos Solitons and Fractals*: 42 (2), 820-825.
7. Shin, Y.H. & Hong, C.P. (2002). Modeling of Dendritic Growth with Convection Using a Modified Cellular Automaton Model with a Diffuse Interface, *ISIJ Int.*, 42 (4), 359-367.
8. Suwa, Y., Saito, Y. & Onodera, H. (2006). Phase field simulation of grain growth in three dimensional system containing finely dispersed second-phase particles. *Scripta Materialia*, 55, 407-410.
9. Yoshioka, H., Tada, Y. & Hayashi, Y. (2004). Crystal growth and its morphology in the mushy zone. *Acta Mater.*, 52, 1515-1523.
10. Zhang, L., Zhang, C.B., Wang, Y.M., Wang, S.Q. & Ye, H.Q. (2003). A cellular automaton investigation of the transformation from austenite to ferrite during continuous cooling. *Acta Mater.*, 51, 5519-5527.
11. Zhu, M.F. & Hong, C.P. (2001). A Modified Cellular Automaton Model for the Simulation of Dendritic Growth in Solidification of Alloys. *ISIJ Int.*, 41 (5), 436-445.

