

Simulación de Crecimiento de Grano por el Método de Monte Carlo en 3D Aplicado a Muestras de hielo del West Antarctic Ice Sheets (WAIS) Project.

Monte Carlo Simulation of Grain Growth in 3D applied to samples of West Antarctic Ice Sheets (WAIS) Project.

C.L. Di Prinzio¹, O.B. Nasello

CONICET (Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología
FAMAF (Facultad de Matemática Astronomía y Física. Universidad Nacional de Córdoba)
Medina Allende s/n. Ciudad Universitaria (5000)

Recibido: 08/10/14; aceptado: 28/10/15

En este trabajo se presentan simulaciones en 3D de crecimiento de grano en muestras policristalinas con partículas usando el método Monte Carlo. Los resultados obtenidos son aplicados a las muestras de hielo polar obtenidas del 'WAIS Project' y demuestran una influencia no despreciable de las burbujas sobre el tamaño medio de los granos para hielos obtenidos a profundidades entre 100 metros y 500 metros.

Palabras clave: hielo polar, crecimiento de grano, burbujas, MONTE CARLO

In this paper, 3D simulations of grain growth are presented in polycrystalline samples with particles using the Monte Carlo method. The results are applied to samples obtained from polar ice 'WAIS Project' and demonstrate a significant influence of the bubbles on the average grain size for depths between 100 meters and 500 meters.

Keywords: polar ice grain growth, bubbles, MONTE CARLO

I. INTRODUCCIÓN

La nieve que se acumula en los polos se va compactando por acción del peso, los poros se van cerrando transformándose en burbujas de aire donde quedan atrapadas las impurezas atmosféricas, partículas de los volcanes, etc [1-2]. En los primeros 100 metros de profundidad la nieve está parcialmente compactada y los poros no se han cerrado totalmente, a esta zona se la denomina "firm"[3-4]. Después de los 100 metros, los poros se han cerrado completamente y el hielo presenta cristales con diferentes orientaciones y tamaños. Entre los 100 y 500 metros, el radio medio de los cristales (R) aumenta con la profundidad. Generalmente se asocia esta variación con una ley cuadrática compatible con un proceso de crecimiento de grano. Es decir:

$$R^2 - R_o^2 = k(t - t_o) \quad (1)$$

con k la constante de crecimiento y t el tiempo. Sin embargo en muchos casos es posible observar que los datos experimentales no siguen exactamente esta ley en todo el rango de profundidades. Por ejemplo en muestras policristalinas una concentración baja de impurezas disminuyen el exponente, porque frena el crecimiento de grano (CG).

Después de los 500 metros la presión del hielo es suficientemente alta como para que otros tipos de fenómenos como poligonización y/o recristalización aparezcan [5-10]. La poligonización es un fenómeno en

donde un grano se divide en granos con orientaciones cristalinas cercanas mientras que la recristalización es un proceso donde aparecen nuevos granos con desorientaciones no cercanas entre si.

En trabajos previos [3,4,11,12] diversos autores han estudiado teóricamente el comportamiento del hielo polar en la zona posterior al "firm" y se ha concluido que las burbujas y partículas no influyen significativamente en el proceso de crecimiento de grano. Sin embargo si se compara los valores de k obtenidos a partir de experiencias de crecimiento de grano en hielo puro [13] con lo que se obtienen en los glaciares [3,4,11,12] se observa que **estos** son dos órdenes de magnitud más bajos.

En trabajos previos [13-15], se estudió la migración de bordes de grano (BG) en hielo puro a diferentes temperaturas, obteniéndose valores de k los cuales **fueron relacionados** con $M\gamma$ donde M es la movilidad y γ la energía de los BG. Se encontró además [15] que la migración de los BG se ve afectada por la superficie de la muestra, dando como resultado un movimiento espasmódico. Es decir, el BG migra durante un corto periodo de tiempo y luego se estanca por efecto de la cuña formada entre el BG y la superficie. El valor de $M\gamma$ al librarse de la cuña (etapa 1) es más grande que el valor de $M\gamma$ durante el periodo de movimiento frenado (etapa 2) anterior al estancamiento. En el apéndice se presentan los valores de $M\gamma$ extrapolados para las etapas 1 y 2 a diferentes temperaturas.

¹ e-mail: carlosdiprinzio@gmail.com

Nasello y col [16-17] notaron que el BG pasa más tiempo estancado o moviéndose con efecto de frenado cuando las presiones son del orden de los 10MPa que representan casi 1000 metros de profundidad. Además, encontraron [17] que el coeficiente de difusión superficial en hielo aumenta con la presión. Estos resultados nos indican que la cuña formada entre el BG y la superficie se desarrolla más rápido cuando la presión es mayor. En consecuencia, la velocidad de migración de los BG disminuye al aumentar la presión por efecto del aumento en el desarrollo de la cuña superficial. Cuando un borde de grano interacciona con una burbuja de aire, en la interface se puede formar una cuña al igual que en la superficie del hielo y afectar el movimiento del BG en una manera similar, como puede observarse en la figura 1.

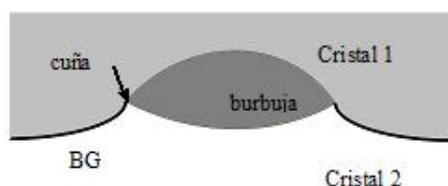


Figura 1: Esquema de interacción entre el BG y la burbuja.

El CG puro ha sido simulado por diversos autores observándose que la constante k está relacionada con el valor de $M\gamma$ por un factor menor que 1 el cual depende del modelo utilizado. Además, el crecimiento de grano con partículas inmóviles también ha sido ampliamente estudiado, encontrándose en general que las partículas frenan el movimiento pero detectándose diferencias en la relación entre el tamaño y fracción de las partículas y el tamaño límite de grano alcanzado [18]

En un trabajo previo [18] se estudió el CG con partículas inmóviles en 2 y 3D por medio del algoritmo de Monte Carlo. Se comprobó que los granos de una muestra llegan a un tamaño límite y ese valor se relaciona con la fracción volumétrica de partículas y con el tamaño o radio equivalente de las mismas siguiendo la ley propuesta por Zener [19].

En el presente trabajo se utiliza este programa de crecimiento de grano con partículas inmóviles en 3D para estudiar el efecto de las burbujas sobre el crecimiento de grano observado en las muestras de hielo polar obtenidas del WAIS Project y encontrar la relación existente entre los valores de k obtenidos de los glaciares y los medidos experimentalmente.

II. MÉTODO

II 1. Muestras de hielo polar

Las muestras de hielo analizadas corresponden a una perforación hecha en la Antártida lat.: 79.467 °S. y long.: 112.085 °W, profundidad entre los 100m y 500m y temperatura constante de -31°C. La datación determinó que la edad de los hielos analizados está entre 400 y 2000 años.

Las muestras presentan una concentración volumétrica de impurezas aproximadamente constante de 300 partículas/cm³ y con un radio medio de 7 μm. Sin embargo existen ciertas profundidades donde la

concentración puede ser dos órdenes de magnitud más alta. Las burbujas por su parte tienen una densidad de 447 burbujas/cm³ con un radio medio de 0,18 mm.

Si calculamos las fracciones volumétricas (relación entre volúmenes de hielo y partículas) tenemos que para las burbujas es de aproximadamente 1% y para las partículas es de 4x10⁻⁵ %. Con esta concentración de partículas el efecto de frenado es despreciable [18], por lo cual sólo estudiaremos el efecto de las burbujas.

II 2 Simulación de Monte Carlo:

Se utilizó el programa de crecimiento de grano en 3D descrito en [18], en muestras de 200X200X·200 pixeles con y sin partículas.

II 2.1 Calibración de los parámetros simulados

Para poder comparar los valores simulados con los experimentales se debe asociar ambos procesos. Es decir se debe encontrar una equivalencia entre el tamaño de los granos en pixels y en alguna unidad de longitud, los pasos de Monte Carlo MCS con el tiempo y la movilidad de los BG.

Teóricamente se deduce que para minimizar la energía superficial creada por un borde de grano esférico, el cuadrado del radio R del BG disminuye linealmente con el tiempo mediante $R^2 = -4M\gamma t + R_0^2$, donde $M\gamma$ es el producto de la movilidad M y la energía γ de los BG. Esta ley también se obtiene en las simulaciones, pero en este caso el radio de la esfera R sigue la ley $R^2 = -ap + R_0^2$ donde p son los pasos de Monte Carlo (MCS) y la pendiente se mide en pixels²/MCS

Para comparar los datos simulados con los experimentales se simuló la evolución del tamaño de una esfera de radio inicial $R_0=50$ pixel. De dicha simulación se obtuvo

$$a = 0,2 \text{ pixel}^2 / \text{MCS} \quad (2)$$

Por lo cual, si las pendientes obtenidas por la simulación y la teórica deben ser iguales, de (2) resulta que:

$$1 \text{ pixel}^2 / \text{MCS} = 20M\gamma \quad (3)$$

II 2-2. Simulación de crecimiento de grano con burbujas inmóviles:

Se simuló un policristal de 200x200x200 pixel³, con una densidad de burbujas igual a las obtenidas experimentalmente en las muestras de WAIS (1%). Las burbujas fueron representadas por cubos de 3pixel de lado, dando un volumen de 27pixel³, resultando el radio de la esfera de volumen equivalente igual a 1,86 pixel.

Se realizaron 120.000 MCS partiendo de un grano de radio inicial de 1pixel. En cada paso se registró el tamaño medio de los granos de la muestra. En la figura 2 se presenta la muestra 3D usada en la simulación a los 1000 MCS. Las burbujas son representadas por puntos negros.

Para relacionar los datos simulados con los experimentales realizamos una calibración de las muestras. Como sabemos que las burbujas en el hielo analizado tienen un radio de 0,18mm y en la simulación

tienen 1,86 pixels entonces podemos establecer la relación pixel a mm aproximadamente como:

$$1 \text{ pixel} = 0,1 \text{ mm} \quad (4)$$

De la relación (3) tenemos que si $M\gamma$ se mide en mm^2 por año la relación entre un MCS y el año será:

$$1 \text{ MCS} = 5 \times 10^{-5} / M\gamma \cdot \text{años} \quad (5)$$

Esta relación nos da cuantos años corresponden a 1 MCS si se conoce $M\gamma$ o conocida la relación entre p y t nos permite conocer el valor de $M\gamma$

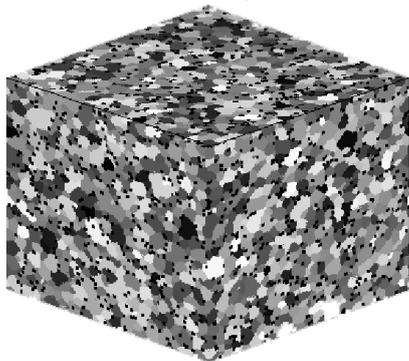


Figura 2: Muestra 3D obtenida en la simulación de Monte Carlo luego de 1000 MCS.

III Resultados y Discusión:

En la figura 3 se presentan los datos experimentales del cuadrado del radio medio de los cristales de las muestras de hielo polar hasta 5000 años en función del tiempo. La relación entre la profundidad y el tiempo fue obtenida de una comunicación personal con la Dra. Joan Fitzpatrick. En la figura 3 se incluyen también los datos de la simulación de muestras policristalinas dopadas con 1% de burbujas. Para poder incluir los datos de la simulación en este gráfico debimos convertir las escalas de pixel^2 a mm^2 y MCS a año. El tamaño de los granos de la simulación se convirtió a mm usando ec. (4) y para obtener $M\gamma$ se realizó una correspondencia entre los datos simulados y experimentales. Para ello se desplazó la escala de tiempo de simulación de forma tal que el tamaño medio de los granos en $p=0$ coincida con el de los glaciares es decir sea de 1,7 mm. A partir de aquí se varió $M\gamma$ de forma tal que las curvas simuladas y experimentales coincidieran, esto nos dio que el mejor valor de $M\gamma$ que ajusta a los datos experimentales, es $M\gamma = 0,0095 \text{ mm}^2/\text{año} = 3 \cdot 10^{-10} \text{ mm}^2/\text{s}$.

Este valor de $M\gamma$ hallado se corresponde con la extrapolación de la curva de ajuste de los valores de $M\gamma$ obtenidos a partir de los datos experimentales de la etapa 2 para temperaturas de $\sim 30^\circ\text{C}$ (ver apéndice). Es decir que el valor hallado concuerda con el valor de $M\gamma$ intrínseco correspondiente a un borde de grano frenado por efecto superficial.

Si pensáramos por un instante que los datos experimentales, para profundidades bajas, obtenidos desde las muestras de hielo de WAIS están gobernados por un crecimiento de grano normal siguiendo ec.(1), encontramos que el valor de k es:

$$k = 0,0022 \cdot \text{mm}^2 / \text{año} \quad (6)$$

Además, si simulamos un policristal puro de $200 \times 200 \times 200 \text{ pixel}^3$, sin burbujas a fin de determinar el valor de k simulado encontramos $k = 0,034 \text{ pixel}^2/\text{MCS}$. Por lo tanto, utilizando la ecuación (2) vemos que el valor de k dado por la simulación en un crecimiento de grano normal está relacionado con $M\gamma$ por:

$$k = 0,68 M\gamma \quad (7)$$

Combinando ec-(6) y (7), resulta un valor de $M\gamma = 0,0032 \text{ mm}^2/\text{año} = 1,0 \times 10^{-10} \text{ mm}^2/\text{s}$. Este valor de $M\gamma$ es un valor extrínseco ya que es obtenido en una parte ya avanzada del crecimiento de grano donde el movimiento de los bordes de grano está frenado por las burbujas. El valor extrínseco lo hemos sacado de una porción de la curva de R^2 vs t correspondiente a un proceso de crecimiento de grano con burbujas, la relación parece lineal, por analizar un tiempo pequeño comparado con el tiempo necesario para que el crecimiento de grano se detenga. Está pendiente depende del tamaño inicial de los granos, de la temperatura, de la concentración de burbujas y su tamaño y del intervalo de tiempo tomado para hacer el ajuste. Comparando los valores extrínsecos e intrínsecos, vemos que el valor extrínseco es 3 veces menor. Esta diferencia, no es muy grande pero en algunos otros casos podría llegar a ser de algunos órdenes de magnitud.

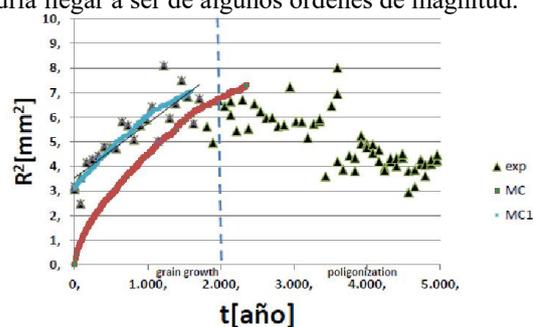


Figura 3: Valores de R^2 vs t de las muestras de hielo polar del WAIS Project (exp), de la simulación de Monte Carlo adaptados a los datos experimentales (MC) y los mismos datos con R^2 inicial = 3 mm^2 (MC1).

Los mecanismos de interacción entre las burbujas y los BG en muestras de hielo polar fueron compilados y desarrollados con mucha profundidad por Alley y col [3-4]. Sus conclusiones al igual que la de otros autores [19] es que las burbujas tienen un efecto muy débil sobre el crecimiento de grano y ese efecto puede ser menor al 10%. Según hemos visto nosotros la diferencia entre el valor extrínseco e intrínseco de $M\gamma$ es en realidad, dentro de los errores experimentales, menor al 30% lo cual podría estar en coincidencia con Alley y col.[3-4]. Sin embargo el valor de $M\gamma$ (extrínseco e intrínseco) obtenido en estas muestras no se correlaciona con datos de $M\gamma$ para hielo puro libre de burbujas obtenidos experimentalmente. Los valores de $M\gamma$ extrínseco e intrínseco obtenidos son 2 órdenes de magnitud más bajos que los valores de $M\gamma$ a $T \sim 30^\circ\text{C}$ obtenidos en muestras de hielo puro sin burbujas por Nasello y col. [15] (ver apéndice). Estos resultados se pueden interpretar de la siguiente manera: se puede pensar que los BG interactúan con la burbuja como lo muestra la figura 1[18-19]; dentro de la burbuja existe una cuña

similar a la que se forma entre el BG y la superficie en las muestras estudiadas por Nasello y col [15-16]; cuando el BG se mueve, el mismo debe arrastrar la cuña al igual que lo hacen los BG en la etapa 2 [15-16].

Así el proceso de migración de los BG está siendo afectado desde el comienzo por las burbujas siendo en consecuencia los valores obtenidos en los hielos polares comparables a los obtenidos en muestras de hielo bajo efectos de la superficie (etapa 2). Esto permite explicar porque los datos de hielos polares arrojan siempre valores $M\gamma$ muy inferiores a los valores de $M\gamma$ encontrados en migración de BG en hielo puro.

IV Conclusiones:

En este trabajo se presentaron datos de tamaño de grano en hielo polar extraído de WAIS Project. Los mismos fueron comparados con una simulación de crecimiento de grano con burbujas usando el algoritmo de Monte Carlo.

Los resultados encontrados demuestran:

1) Los valores de R^2 vs t correspondientes a los hielos polares entre 400 y 2000 años pueden ser representados satisfactoriamente por una curva de crecimiento de grano simulada con una densidad de burbujas del 1% y con un valor de $M\gamma = 0,0095 \text{ mm}^2/\text{año} = 3 \cdot 10^{-10} \text{ mm}^2/\text{s}$.

2) El valor de $M\gamma$ hallado se corresponde satisfactoriamente con la extrapolación de los valores de $M\gamma$ obtenidos a partir de los datos experimentales de la etapa 2 obtenidos por Nasello et al [15] a temperaturas del orden de -30°C (ver apéndice). Es decir que el valor hallado concuerda con el valor de $M\gamma$ correspondiente a un borde de grano frenado por un cuña superficial

3) Los datos experimentales obtenidos a baja profundidad, desde las muestras de hielo de WAIS, pueden ajustarse por una ecuación de tipo (1) y pensar que están gobernados por un crecimiento de grano normal sin ser afectado por las burbujas, encontrando un valor $M\gamma = 0,0032 \text{ mm}^2/\text{año} = 1,0 \cdot 10^{-10} \text{ mm}^2/\text{s}$. Estos valores de $M\gamma$ son valores extrínsecos y los mismos no pueden ser comparados con datos intrínsecos de $M\gamma$ obtenidos en muestras de laboratorio. Eso se debe a que la pendiente de un gráfico R^2 vs t , la cual nos brinda el valor de $M\gamma$ extrínseco depende en general del tamaño de grano inicial, de la concentración de burbuja y de su tamaño.

Apéndice;

TABLA 1: Valores de $M\gamma$ a diferentes temperaturas extrapolados de las curvas de ajuste obtenidas por Nasello y col [15] para las etapas 1 y 2, respectivamente sin y con efecto de frenado de la cuña superficial.

	Etapa 1	Etapa 2
T[°C]	$M\gamma[\text{mm}^2/\text{s}]$	$M\gamma[\text{mm}^2/\text{s}]$
0	317×10^{-8}	1070×10^{-10}
-10	62×10^{-8}	156×10^{-10}

-20	10×10^{-8}	19×10^{-10}
-30	$1,5 \times 10^{-8}$	2×10^{-10}
-35	1×10^{-8}	$1,2 \times 10^{-10}$

Referencias:

- Alley, R.B., Fitzpatrick, J. J. *Glaciol.* **45**, 147-153 (1999.)
- Alley, R.B., Woods, G. J. *Glaciol.* **42**, 255-259 (1996)
- Alley, R.B., Perepezco, J., Bentley, C. J. *Glaciol.* **32**, 425-433 (1986a.)
- Alley, R.B., Perepezco, J., Bentley, C. J. *Glaciol.* **32**, 415-424 (1986b)
- Azuma, N., Higashi, A. *Ann. Glaciol.* **6**, 130-134 (1985)
- De La Chapelle, S., Castelnau, O., Lipenkov, V., Duval, P., *J. Geophys. Res.* **103**, 5091-5105 (1998)
- Di Prinzio, C.L., Wilen, L., Alley, R., Fitzpatrick, J., Spencer, M.J. *Glaciol.* **51**, 281-290 (2005)
- Durand, G., Graner, F., Weiss, J. *Europhys. Lett.* **67**, 1038-1044 (2004)
- Durand, G., Persson, A., Samyn, D., Svensson, A. *Earth Planet. Sci. Lett.* **265**, 666-671. (2008)
- Duval, P., *Ann. Glaciol.* **6**, 79-82 (1985).
- Gow, A.J. *Glaciol.* **8**, 241-252 (1969)
- Gow, A., Meese, D., Alley, R., Fitzpatrick, J., Anandakrishnan, S., Woods, G., Elder, B.J. *Geophys. Res.* **102**, 26559-26575 (1997)
- Arena L, Nasello O. B, Levi L. *Journal of Physical Chemistry B*, **101**, 6109-6112. (1997)
- Nasello O. B, Arena L, Di Prinzio C.L, *Material Science Forum*, 94-96, 779-784 (1991)
- Nasello O. B, Di Prinzio C.L, Guzman P.G. *Acta Materialia* **53** 4863-4869 (2005)
- Guzman P.G, Di Prinzio C.L y Nasello O. B, **13**, 148-152. (2001)
- Nasello O. B, Di Prinzio C.L, **605** 1103-1105 (2011)
- Di Prinzio C.L, Druetta E., Nasello O. B. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **21** 025007 (2013)
- Durand G., Weiss J., Lipenkov, V. Barnola, J. M. Krinner, G. Parrenin, F. Delmonte, B Ritz, C. Duval, P. Röthlisberger R. Bigler M., J.G. *Research: Earth Surface* **111**, 1-18 (2006)

Agradecimientos: Este trabajo se realizó gracias al apoyo económico del PID CONICET y la SECYT-UNC y a la colaboración técnica del Sr. José Barcelona.