

APLICACIÓN DE MODELOS MEDIANTE SIMULACIÓN PARA LA COMPRENSIÓN DE PROPIEDADES DE MATERIALES EN LA EDUCACIÓN SUPERIOR

M.C. Gloria Edith Palacios Almón⁽¹⁾, M.C. Jorge Martínez Muñoz ⁽²⁾, Dra. Erika Osiris Avila Dávila⁽³⁾

RESUMEN

El presente trabajo se genera a partir del conocimiento de que la estructura interna de un material es una función crítica para determinar sus propiedades. Recientemente, se han desarrollado métodos para simular los cambios que un material puede experimentar en su estructura a escalas macro, micro y nanométricas. Uno de ellos, abordado en este trabajo, es el método de campo continuo (CFM), basado en las teorías clásicas de termodinámica y cinética. A través de tal método es posible describir los cambios morfológicos en materiales multicomponentes por medio de la solución de ecuaciones diferenciales parciales, modelo de Cahn y Hilliard, mediante diferencias finitas. De lo anterior, el creciente desarrollo de computadoras de alta velocidad y de extensa capacidad permite ahora implementar simulaciones por computadora para explorar rápidamente las características y la funcionalidad de cualquier modelo. Así se dilucida que las computadoras pueden resolver numéricamente ecuaciones matemáticas cuya solución llegó a ser inaccesible, abriéndose ahora un amplio campo de nuevas formas de educar a estudiantes de carreras ingenieriles para desarrollar en ellos competencias necesarias en su formación de comprensión de matemáticas, identificación de las variables que forman parte de un fenómeno para la creación de modelos, uso de tecnologías de computo, aplicación de software, etc. Así, mediante este trabajo, se llevó a cabo la aplicación del modelo matemático de Cahn y Hilliard mediante simulación para comprender los cambios en las propiedades de un material cuando éste, durante su vida útil, opera a relativamente elevadas temperaturas.

Palabras Clave: Simulación Numérica, Aplicación de Modelos, Educación

INTRODUCCIÓN

Actualmente con el avance y el fácil acceso a los computadores digitales de alta velocidad el modelado por computadora ofrece un importante papel para entender los fundamentos de los mecanismos que gobiernan los cambios en la estructura interna de materiales cuando durante su vida útil éstos se someten a temperaturas de operación elevadas por tiempos prolongados. De hecho, es posible simular y predecir las características de su morfología y su variación con el *tiempo* a escala micrométrica o nanométrica. De lo anterior, los regímenes de modelado son: Electrónicos, Atómicos, Microestructurales ó Continuos. [1]

Los modelos de todas las escalas de longitud involucran resolver un conjunto de ecuaciones diferenciales, algebraicas o integrales. En tal caso se dice que el modelo es determinístico, es decir, que actúa de forma predictiva como las ecuaciones para resolver el movimiento de átomos en un material, su difusión.

Los modelos de cualquier nivel se pueden basar en un proceso de muestro estático y no involucrar la resolución de una ecuación particular. Estos son conocidos como métodos estocásticos o probabilísticos.

Dado que éste es un trabajo de análisis de cambios en la estructura interna de un material metálico, es importante decir que el régimen microestructural no se resuelve solo para ecuaciones específicas. Si bien, para caracterizar la estructura interna de un material metálico el modelo se divide en celdas o cristales que contienen una característica de interés como una imperfección lineal, un grano, etc. Las interacciones entre cristales o celdas son específicas y para la estructura de la celda se consideran algunas interacciones dinámicas ó reglas, donde el espacio y el tiempo se discretizan y ciertas cantidades físicas como la densidad de defectos se toman como un conjunto de valores para cada celda o cristal. Estos valores se emplean al mismo tiempo

durante la simulación basada en un conjunto de reglas que suelen ser determinísticas. También es posible mediante reglas estocásticas, método Monte Carlo, simular los cambios estructurales internos de un metal, en celdas o cristales que contienen espines que caracterizan la orientación del grano en un policristal y tales celdas se mapean sobre una red fija. Las celdas interactúan con el vecino más cercano y los espines se colocan secuencialmente de acuerdo al algoritmo Monte Carlo. Este método se usa frecuentemente para simular el crecimiento de grano en dos y tres dimensiones incluyendo un

crecimiento anormal, el efecto de superficies y partículas de segunda fase. En ambos el tamaño del modelo suele ser de miles de celdas.

Éstos son solo algunos métodos para simular cambios internos en un sistema. En las Figuras 1 y 2 se mencionan algunas características de escalas espaciales y temporales así como los métodos de simulación computacionales aplicados para resolver problemas de ciencias de los materiales [1].

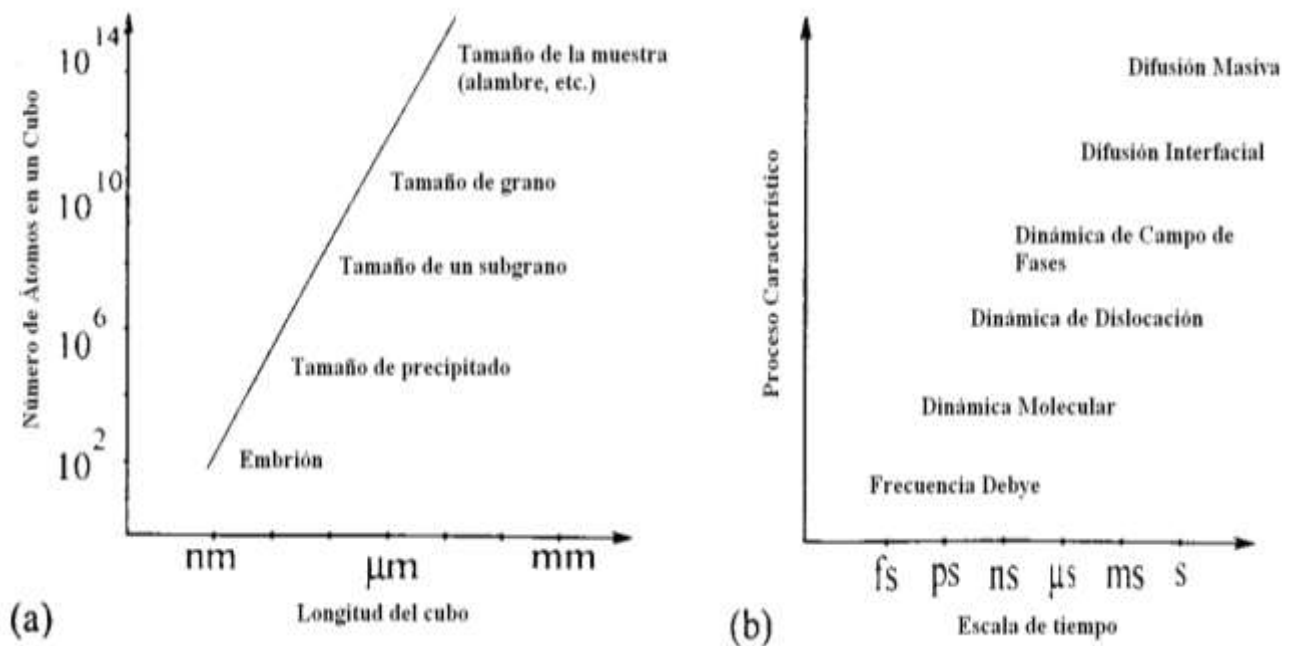


Figura 1. Características de las escalas espaciales y temporales; a) número de átomos en un cubo, b) Características temporales de la simulación de problemas típicos [1].

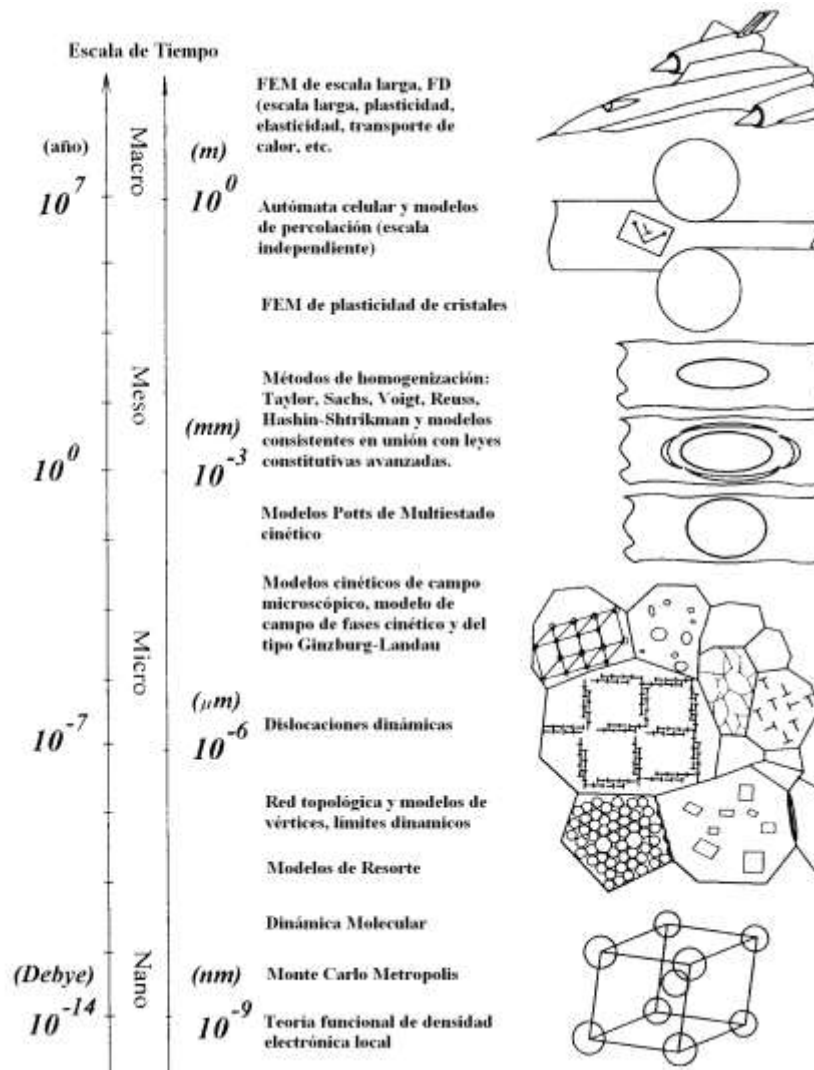


Figura 2. Escalas espacio y tiempo; y, métodos de simulación computacionales en ciencias de los materiales [1].

En este sentido, la selección de las variables adecuadas de estado y las ecuaciones de procesos dinámicos pueden seleccionarse euristicamente basándose en conceptos teóricos de inicio-ab o en observaciones fenomenológicas. Tal selección representa el paso más importante del modelado y refleja la ventaja física particular de aproximar con exactitud el problema y localizarlo. Por otra parte, el valor de las condiciones iniciales debe formularse de acuerdo al problema sujeto a estudio y de igual forma el modelo inicial debe estar matemáticamente bien definido.

Finalmente, la solución numérica puede entonces referirse como una simulación o experimentación numérica.

Situando ahora al fenómeno de cambios en la estructura interna de metales debidos a su operación a temperaturas elevadas, durante su vida útil, a escala nano y micrométrica, no se tiene linealidad ni organización propia [2-5]. Así, los métodos determinísticos y probabilísticos que involucran dicho problema se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Métodos en simulación de materiales empleados para una escala espacial a nivel micro y nanoscópico [1].

Escala (m)	Método de Simulación	Aplicaciones Típicas
10^{-10} - 10^0	Autómata Celular.	Recristalización, crecimiento de grano, fenómenos de transformaciones de fase, dinámica de fluidos, textura cristalográfica, plasticidad en el cristal.
10^{-7} - 10^{-2}	Modelos de resorte (spring).	Fractura mecánica.
10^{-7} - 10^{-2}	Modelos de vórtice, modelos de red, límites de grano dinámicos.	Engrosamiento de subgranos, recristalización, recristalización secundaria, nucleación, recubrimientos, crecimiento de grano y fatiga.
10^{-7} - 10^{-2}	Modelos componentes, topológicos y geométricos.	Recristalización, crecimiento de grano, recristalización secundaria, texturas cristalográficas, solidificación, topología del cristal.
10^{-9} - 10^{-4}	Dislocaciones dinámicas.	Plasticidad cristalina, recubrimientos, microestructura, patrón de dislocaciones, activación térmica.
10^{-9} - 10^{-5}	Modelos de campo de fases.	Difusión, movimiento interfacial, formación de precipitados y engrosamiento, fenómenos de engrosamiento de policristales y granos polifásicos, transformaciones de fase isoestructurales y no isoestructurales, superconductividad.
10^{-9} - 10^{-5}	Modelos Potts de cinética de multiestado.	Recristalización, crecimiento de grano, transformaciones de fase y texturas cristalográficas.

La información de la Tabla 1 muestra un factor importante que llevó ésta investigación al uso del método de campo de continuo (MCC) para derivar relaciones de cambios del patrón morfológico estructural de un metal con validación cuantitativa, y que, además provee los principios físicos y termodinámicos que gobiernan la naturaleza compleja de variaciones morfológicas a escala micro y nanométrica con el tiempo en que un material opera a elevadas temperaturas.

Con base en tales afirmaciones es válido decir que éste método es capaz de complementar la experimentación física e incluso de reemplazarla, en al menos ciertos casos, y que es importante, tal como éste caso de estudio, llevar a los salones de clase aquellos modelos y métodos que involucran procesos dinámicos que alteran el tiempo de vida útil de un material que claramente puedan ser entendidos y aplicados a través de la simulación por computadora entre los estudiantes de carreras ingenieriles

permitiendo que comprendan y asimilen su importancia práctica.

Finalmente, en orden de optimizar el poder predictivo de los modelos surgieron varios métodos numéricos que complementan el concepto de integración del modelado y simulación [6]. Tales métodos numéricos se definen esencialmente a través de valores iniciales más que de valores límite; por ejemplo, las ecuaciones que involucran derivadas en función del tiempo frecuentemente se refieren como técnicas de diferencias finitas. Los métodos de diferencias finitas aproximan las derivadas (tanto en función del tiempo como en función del espacio). Entre la variedad de métodos, este estudio utilizó el método FTCS (Forward Time Centered Space) [7], el cual es un método de segundo orden que calcula explícitamente a partir de cantidades conocidas y que consiste en promediar los valores de una función dada en un t_i y t_{i+1} . Un segundo grupo de métodos numéricos que resuelven ecuaciones diferenciales parciales son los métodos de elementos finitos diseñados para resolver

numéricamente problemas de valores iniciales y valores límite. Tienen en común la discretización espacial del área sujeta a análisis en un número dado de elementos finitos, la discretización temporal en problemas que dependen del tiempo y la aproximación de soluciones espaciales verdaderas en los elementos por funciones polinomiales. Ambos métodos representan técnicas de aproximación matemática, pero el último se usa frecuentemente para geometrías complejas. De lo anterior, el objetivo de este trabajo de investigación fue aplicar un modelo matemático mediante simulación para la comprensión de propiedades de materiales, en particular para simular los cambios en la estructura interna que experimenta un material metálico cuando durante su vida útil opera a relativamente elevadas temperaturas por tiempos prolongados, mediante el análisis de casos reales que contribuyan a mejorar la comprensión de estos temas en estudiantes de carreras ingenieriles y a desarrollar sus habilidades y competencias en la aplicación de matemáticas, modelado, programación y desarrollo de software, etc.

METODOLOGÍA DE APLICACIÓN DE UN MODELO MATEMÁTICO MEDIANTE SIMULACIÓN POR COMPUTADORA

El método de campo continuo describe el proceso dinámico de cambios morfológicos en la estructura interna de un material metálico multicomponente a escala micro o nanométrica. A partir de su simulación por computadora es posible obtener información detallada sobre el tamaño, forma y/o dominios y su arreglo espacial en un determinado tiempo. Éste método resuelve el modelo de Cahn y Hilliard [8], es decir, soluciona una ecuación diferencial parcial no lineal mediante diferencias finitas. Ésta ecuación es:

$$\frac{\partial c_i(x,t)}{\partial t} = M_i \nabla^2 \left(\frac{\partial f_o(c)}{\partial c_i} - K_i \nabla^2 c_i \right) \quad (1)$$

donde el término $\frac{\partial c_{i(x,t)}}{\partial t}$ representa la variable de campo de concentración del componente i en función de una distancia, x , y de un tiempo, t ; M_i representa la movilidad atómica del componente. La densidad total de energía libre

está dada por el término $\frac{\partial f_o(c)}{\partial c_i}$ que representa la fuerza motriz de la porción homogénea del sistema con una composición local c [9-10] sin

gradiente, y, K que representa el coeficiente de energía del gradiente interfacial, lo que indica el exceso de energía libre asociado con inhomogeneidades en la interface [1]. La energía libre de un sistema metálico real, f_o , se calcula en base al modelo de solución regular [10] según la ecuación (2).

$$f_o = f_i c_i + f_j c_j + c_i c_j \Omega_{ij} + R_g T (c_i \ln c_i + c_j \ln c_j) \quad (2)$$

donde R_g es la constante de los gases, T es la temperatura absoluta, f_i y f_j son las energías libres molares de un componente i y un componente j puros, respectivamente, y Ω_{ij} es el parámetro de interacción entre los componentes i y j .

Es importante señalar en esta parte la importancia de lograr que el estudiante entienda primero que para el desarrollo de un modelo que represente un fenómeno debe revisar minuciosamente los parámetros involucrados para que ese proceso se lleve a cabo, luego cómo interactúan o se relacionan entre sí y finalmente podría usar esta información para representar matemáticamente dicho fenómeno. Una vez establecido debe seleccionarse el método matemático más adecuado para su solución [Rabee] en base al conocimiento básico previo establecido en literatura especializada que indica el tipo de método que contribuye a la óptima solución del problema establecido. De esta manera es posible motivar y despertar el interés del estudiante por la ciencia básica [11] que actualmente atraviesa un periodo difícil para su comprensión en los diferentes niveles de educación.

Finalmente, es importante en este punto aclarar que el uso y aplicación de lenguajes de programación tiene un importante papel para lograr que los alumnos de educación superior se vuelvan emprendedores y logren desarrollar software ó, en su caso, mejorar aquel existente a partir de la aplicación de la ciencia básica y del estudio de fenómenos reales expresados matemáticamente.

De lo anterior, la ecuación (1) se resolvió de forma numérica por el método de diferencias finitas, utilizando una discretización de 101×101 nodos. Para la dimensión espacial, Δx , se asignó un valor de 1 nm para el análisis de cambios morfológicos en aleaciones hipotéticas binarias A-B. Finalmente, se estableció un

intervalo temporal, Δt , de 10 s, valores que satisfacen el criterio de estabilidad [7]. El lenguaje de programación utilizado fue FORTRAN, pero puede utilizarse cualquier otro con el que un estudiante se sienta familiarizado. Las variables de entrada fueron: la concentración, c , en porcentaje atómico, y, el tiempo, t , en segundos. Para el análisis del sistema real, se introdujo la temperatura, T , en K .

En particular, para el Análisis de un Sistema de Aleación Hipotético A-B la composición se varió de 0.1 y 0.9 con incrementos de 0.1 para cada componente siguiendo la condición descrita por la siguiente ecuación [13]:

$$c_i + c_j = 1.0 \quad (3)$$

Para facilitar los cálculos computacionales el valor de K_i permaneció constante, siendo este un valor arbitrario de 1.

durante su vida útil a lo largo del campo espacial x de la estructura interna del material.

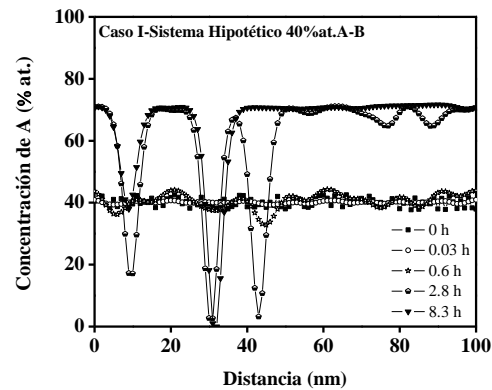
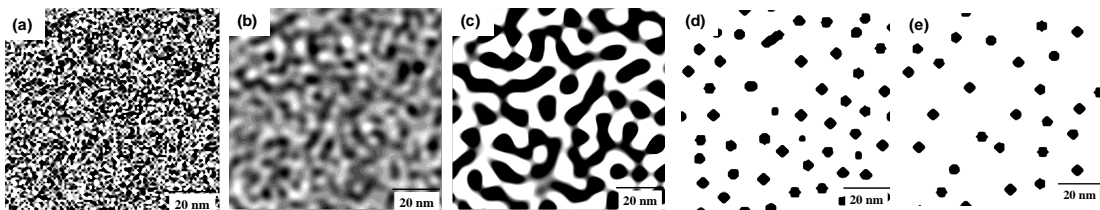


Figura 3. Perfiles de concentración simulados del sistema de aleación binario 40 %at.A-B cuando opera a temperaturas elevadas para diferentes tiempos.



RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN DE CAMBIOS MORFOLÓGICOS EN LA ESTRUCTURA INTERNA DE MATERIALES METÁLICOS

Como se mencionó con anterioridad durante su vida útil es posible que metales y aleaciones sean expuestos a elevadas temperaturas por tiempos prologados. Así, es posible simular los cambios en su estructura interna para un sistema de aleación hipotético A-B, cuyos resultados representan información cualitativa y cuantitativa de: perfiles de concentración, estructura interna a escala nanométrica, tamaño y distribución de fases, cinética del proceso de cambio en la estructura, etc. Esta valiosa información incluso puede relacionarse con las posibles propiedades que puede presentar el material. En la Figura 3 se muestra un perfil de concentración en el que es posible observar cómo cambia la concentración del componente A conforme este metal hipotético se somete a elevadas temperaturas y a diferentes tiempos

Figura 4. Cambios morfológicos simulados por el MCC del sistema de aleación binario 40 %at. A-B, (a) Estructura interna inicial en el material, y, cuando se sometió a elevadas temperaturas por tiempos de: (b) 0.03 h, (c) 0.6 h, (d) 2.8 h y (e) 8.3 h.

En la Figura 4 se muestran los cambios en la estructura interna de una aleación hipotética A-B. Las regiones blancas y negras representan dos fases diferentes ricas en A ó en B, respectivamente. Se observa claramente primero la presencia de una morfología interconectada y difusa y luego, después de que el material opera a elevadas temperaturas por tiempos prologados se observa la formación de una evidente fase circular sobre una matriz. Cabe mencionar que dentro de las consideraciones cualitativas para un efectivo endurecimiento por dispersión: una cantidad numerosa de la fase dispersa aumenta la resistencia y tenacidad del material y ésta fase dispersa con forma redonda aumenta la

resistencia y tenacidad del material, con respecto a una fase con bordes agudos.

CONCLUSIONES

Se aplicó un modelo matemático mediante simulación para la comprensión de propiedades de materiales, en particular para simular los cambios en la estructura interna que experimenta un sistema de aleación hipotético A-B cuando durante su vida útil opera a relativamente elevadas temperaturas por tiempos prolongados, mediante el método de campo continuo. Éste estudio puede contribuir a mejorar la comprensión de estos temas en estudiantes de carreras ingenieriles y a desarrollar sus habilidades y competencias en la aplicación de matemáticas, modelado, programación y desarrollo de software, etc. Los resultados muestran buena concordancia con la explicación en literatura de los cambios que presentaría una aleación metálica, y, se confirmó también que conociendo éstos cambios dinámicos en la estructura interna del material, desde escalas nanométricas inclusive, es posible predecir las propiedades que éste tendrá.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] D. Raabe, Computational Materials Science, The simulation of Materials Microstructures and Properties, Wiley-VCH, Weinheim, Federal Republic of Germany, 1998.
- [2] H. Haken. "Synergetics" Springer Series in Synergetics, Ser. Ed. H. Haken. Springer-Verlag. 1978.
- [3] A. G. Khachaturyan. "Theory of structural Transformations in Solids" John Wiley, New York. 1983.
- [4] L. P. Kubin. "Non-Linear Phenomena in Materials Science I" Volume 3-4 of Solid State Phenomena. Trans Tech Publication, CH-Aademansdorf. 1988.
- [5] G. Martin and L. P. Kubin. "Non-Linear Phenomena in Materials Science II" Volume 23-24 of Solid State Phenomena. Trans Tech Publication, CH-Aademansdorf. 1992.

[6] Gottstein "Arbeits- und Ergebnisbericht, Integrative Werkstoffmodellierung, SFB 370", Deutsche Forschungsgemeinschaft (Collaborative Research Center on Integrated Modeling of Materials). Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Institut für Metallkunde und Metallphysik. 1996.

[7] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery, Numerical Recipes in Fortran 77, The Art. Of Scientific Computing, Volume 1 of Fortran Numerical Recipes, Cambridge University Press, New York, NY USA, 1997.

[8] L.Q. Chen, Scripta Metall. Mater., Vol. 29, (1993) 683-688.

[9] Fathi Habashi, *Alloys Preparation, Properties, Applications*, Wiley-VCH, Alemania, 1998.

[10] G. Kostorz, *Phase Transformations in Materials*, Wiley-VCH, Alemania, 2001.

[11] John Ziman, Congreso Internacional: La Ciencia ante el público, Salamanca, Octubre de 2002, ISEGORÍA/28 (2003) pp. 5-17.