



## Desarrollo de un software para la simulación microestructural en aleaciones

Regina Lopez Rosales<sup>1</sup>, Víctor Manuel López Hirata<sup>1</sup>, Darío Alberto Sigala García<sup>1</sup> y Ulises David Maldonado Mosqueda<sup>1</sup>

<sup>1</sup> ESIQIE-IPN. reginalopez641@gmail.com

En el diseño computacional de materiales, el modelado de campo de fases juega un rol importante que provee información de la evolución microestructural de un material. Específicamente hablando de aleaciones metálicas, se pueden rastrear la microestructura durante el procesamiento como en la solidificación, transformaciones de fase de estado sólido, fenómenos de crecimiento de grano e incluso la velocidad de engrosamiento de precipitados en superaleaciones.

Los modelos de campo de fases se basan en la solución de las ecuaciones diferenciales parciales de evolución temporal de Cahn-Hilliard o Allen-Cahn. Resolver estas ecuaciones es un desafío para la ciencia de materiales computacional. Afortunadamente existen diversos métodos para resolver ecuaciones diferenciales parciales como el método de diferencias finitas o el método de elemento finito. La selección de cualquiera de estos métodos recae en un conjunto de propiedades deseadas como la facilidad de programación o la rapidez de cálculo.

El objetivo de este trabajo es desarrollar un software de código libre y un manual de operación con propósitos académicos y de investigación básica para simular la evolución microestructural por el método de campo de fases en solidificación, transformaciones de fase de estado sólido como descomposición espinodal y el engrosamiento de grano en aleaciones empleando las ecuaciones diferenciales parciales de Cahn-Hilliard y Allen-Cahn.

El software desarrollado, aglomera la metodología para la solución de estas ecuaciones diferenciales parciales de Cahn-Hilliard y Allen-Cahn para la simulación microestructural en aleaciones empleando el método de diferencias finitas y elemento finito en una interfaz gráfica. La interfaz es desarrollada en lenguaje de programación Python 3.6 apoyado de las librerías NumPy, SciPy, Tkinter y Matplot. El programa actualmente cuenta con un módulo de simulación de descomposición espinodal y de crecimiento de granos con su correspondiente de operación.

La simulación microestructural es presentada gráficamente en una animación generada con la librería Matplot de Python. En este trabajo se pretende que el software y el manual puedan ser utilizados como recursos académicos y de investigación en el campo de las transformaciones de fase y la ciencia de materiales computacional.

Como resultado de las simulaciones de descomposición espinodal, se puede estudiar el fenómeno de migración de límites, combinación y separación de precipitados. En adición se puede observar la maduración de Ostwald donde precipitados pequeños se disuelven y son absorbidos por precipitados más grandes.

En cuanto a la modelación de crecimiento de granos, se puede observar el efecto de diferentes curvaturas de grano, donde granos más grandes con seis o más límites tienden a crecer y granos con menos de seis límites tienden a desaparecer.