

ASPECTOS DE IMPLEMENTACIÓN INFORMÁTICA PARA EL MODELADO COMPUTACIONAL DE LA EVOLUCIÓN MICROESTRUCTURAL DE MATERIALES

Alejandro Cosimo^{a,b} y Alberto Cardona^a

^a*Centro de Investigación de Métodos Computacionales (CIMEC), Universidad Nacional del Litoral-CONICET, Predio CONICET ruta 168, S3000GLN Santa Fe, Argentina*

^b*Becario de la Autoridad Regulatoria Nuclear*

Palabras Clave: Evolución Microestructural; Modelación Microestructural; Modelado Computacional de Materiales

Resumen.

La descripción de la evolución microestructural es de importancia fundamental en procesos donde la energía térmica es la fuerza impulsora. Esto en parte es debido a que el estado térmico induce diferentes configuraciones microestructurales que afectan fuertemente a la respuesta del material. Generalmente, la implementación de un modelo particular para predecir evolución microestructural está asociada a la restricción de poder ser aplicado a un número reducido de materiales. Cuando un material difiere de aquél implementado, se debe programar un nuevo modelo trabajando a bajo nivel en el código. El objetivo principal de este trabajo es el diseño de una herramienta computacional suficientemente flexible para representar un amplio rango de materiales, reduciendo de esta manera la necesidad de re-escribir código. El diseño orientado a objetos es elegido como paradigma para el desarrollo de la solución. Se presenta un ejemplo de aplicación para la aleación de titanio Ti6Al4V.

1. INTRODUCCIÓN

En procesos donde la energía térmica es la fuerza impulsora de cambios microestructurales y de la deformación del cuerpo, es esencial modelar las variaciones de las propiedades de los materiales en términos de la temperatura y de la historia térmica. Un buen ejemplo de este tipo de procesos son los tratamientos térmicos. Sin embargo, son los procesos de soldadura los más complejos de describir desde el punto de vista microestructural, debido a que se caracterizan por historias térmicas arbitrarias de enfriamiento/calentamiento. Más aún, en este tipo de problemas la descripción microestructural es importante debido a los cambios rápidos de temperatura que inducen diferentes configuraciones a nivel microestructural. De acuerdo a [Oddy et al. \(1989\)](#) para determinar correctamente las tensiones residuales de soldadura, los efectos de los cambios microestructurales sobre las propiedades materiales deben ser tenidos en cuenta.

Actualmente, se pueden encontrar diferentes modelos para describir la evolución microestructural de materiales. Pueden clasificarse en dos grandes grupos tomando como característica fundamental la escala de longitud en la que son formulados ([Xiao et al., 2012](#)). Los más baratos desde el punto de vista computacional son los modelos macro-escala. En estos modelos la microestructura se describe en términos de variables internas que representan información estadística sobre el proceso, como lo son la fracción de fase y el tamaño de grano. Por otro lado, se encuentran enfoques más modernos, aunque computacionalmente más caros, que formulan los modelos en la escala de las características microestructurales. Este tipo de modelos son referidos como modelos meso-escala. En este trabajo se adoptan modelos macro-escala para modelar la evolución microestructural, debido a que son los más económicos desde el punto de vista de la complejidad computacional ([Lindgren, 2007](#)).

Generalmente, la implementación de un modelo microestructural en particular tiene asociada la restricción de que puede ser aplicado a un número reducido de materiales. Cuando un material difiere mucho de aquel modelo implementado, uno nuevo debe ser codificado. Por ejemplo, modelos que describen el comportamiento microestructural de aleaciones de titanio, como lo es la aleación Ti6Al4V, son implementados de tal manera que sólo aquel material puede ser considerado. Otro ejemplo es el modelo de Kirkaldy ([Kirkaldy y Venugopalan, 1984](#)) que sólo describe el comportamiento microestructural de aceros de baja aleación. El objetivo de este trabajo es diseñar e implementar un marco computacional que sea capaz de representar el comportamiento microestructural de un amplio rango de materiales, sin requerir re-escribir código o, al menos, reducir esta tarea.

A fin de recabar los requerimientos del marco computacional a implementar, se analiza el comportamiento microestructural de la aleación de titanio Ti6Al4V y de la aleación de acero AISI 1060. Primero se introducen brevemente las generalidades que caracterizan el comportamiento microestructural del acero AISI 1060 para condiciones de enfriamiento, en donde se supone que cada transformación tiene lugar en un rango de temperatura característico y sin superponerse ([Lee et al., 2009](#)). Luego, se propone y se estudia en detalle un modelo que describe la evolución microestructural de la aleación Ti6Al4V. Este modelo debe poder ser aplicado a historias térmicas arbitrarias, características de procesos de soldadura.

En el caso de la aleación de titanio, la etapa de calentamiento se caracteriza por la formación de la fase β y la disolución de las otras fases, identificadas como variantes de la fase α . Algunos autores ([Babu et al., 2005](#)) suponen que en problemas de soldadura esta etapa puede ser descrita por medio del diagrama de equilibrio. A pesar de esto, modelos de disolución más complejos se pueden encontrar en ([Kelly, 2004](#)) y ([Murgau et al., 2012](#)). Para la etapa de enfriamiento, el proceso es generalmente descrito como un proceso de enfriamiento continuo, donde la fa-

se β descompone en variantes de la fase α . En este tipo de modelos, generalmente se supone que cada transformación tiene lugar en rangos de temperatura característicos de una manera secuencial sin superponerse (Rios y Villa, 2011; Jones y Bhadeshia, 1997). Sin embargo, en este trabajo se presentan variantes que permiten modelar transformaciones simultáneas.

Las transformaciones microestructurales pueden ser clasificadas en transformaciones difusivas y no difusivas. Por ejemplo, la formación de ferrita y perlita en aceros pueden ser considerados procesos controlados por difusión, mientras que la formación de martensita es considerado un proceso no difusivo. También se encuentran transformaciones mixtas, como lo es la formación de bainita, sin embargo, se pueden encontrar trabajos (Lee et al., 2009) en donde se modela esta transformación como una transformación difusiva.

El modelo de Kirkaldy es un modelo ampliamente utilizado (Lindgren, 2007; Oddy et al., 1996; Kim, 2012) para describir transformaciones difusivas en aceros de baja aleación. Como menciona Watt et al. (1988) este modelo es interesante, ya que, una vez implementado, un amplio rango de aceros de baja aleación pueden ser representados sólo especificando su composición química. Un enfoque diferente se adopta en este trabajo, ya que la restricción a aceros de baja aleación limita el alcance del presente estudio. Alternativamente, las transformaciones difusivas se describen por medio del modelo de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) (Johnson y Mehl, 1939; Avrami, 1941; Kolmogorov, 1937), mientras que las transformaciones instantáneas o no difusivas, como lo es la formación de martensita, se modelan por medio de la ecuación de Koistinen-Marburger (Koistinen y Marburger, 1959).

Este trabajo se estructura de la siguiente manera. En la Sección 2 se introducen brevemente los modelos que se utilizan para describir la cinética de las transformaciones. En la Sección 3, la descripción computacional de la cinética de las transformaciones microestructurales se estudia en detalle introduciendo la noción de diagramas de flujo. En la Sección 4 se discute la implementación de un marco computacional para modelar la evolución microestructural de materiales. Luego, en la Sección 5, el marco computacional propuesto se utiliza para reproducir la experiencia realizada por Babu et al. (2005). Finalmente, las conclusiones se presentan en la Sección 6.

2. MODELADO DE TRANSFORMACIONES

En esta sección se introducen brevemente los materiales a ser estudiados y los modelos que se utilizan en la descripción de los diferentes procesos involucrados en la evolución microestructural de materiales.

2.1. Materiales a ser modelados

Los materiales a ser analizados son las aleaciones Ti6Al4V y AISI 1060. La aleación Ti6Al4V es una aleación que se caracteriza por tener dos fases, α y β , y que contiene 6,1 % de aluminio y 4 % de vanadio por peso (Crespo, 2011). Cuando se enfría desde la fase sólida β , la fase sólida α comienza a formarse debajo de la temperatura β -transus, T_β , considerada igual a $T_\beta = 1273\text{K}$. A medida que la temperatura baja, se conforman diferentes morfologías de α . Las morfologías que involucran transformaciones difusivas son: α borde de grano, α_g , y α Widmanstätten, α_w . La formación de martensita, α' , y α masiva, α_m , están asociadas a transformaciones no difusivas características de un enfriamiento rápido: $\dot{T} < -410\text{Ks}^{-1}$ para α' , y $-410\text{Ks}^{-1} \leq \dot{T} < -20\text{Ks}^{-1}$ para α_m .

En el presente trabajo, las morfologías de α asociadas a transformaciones difusivas que serán modeladas son α borde de grano y α Widmanstätten. En el caso de transformaciones no difusi-

vas, se modelan martensita y α masiva como una sola estructura microestructural denotada por α' . Se considerarán historias térmicas arbitrarias para este material.

En lo que sigue se describe el comportamiento microestructural del acero AISI 1060 para una historia térmica de enfriamiento, en donde se supone que cada transformación tiene lugar en un rango de temperatura característico y sin superponerse (Lee et al., 2009). De esta descripción se espera llamar la atención sobre las características compartidas por el modelado microestructural del titanio. La aleación AISI 1060 es un acero con 0,61% de carbono. Durante una etapa de enfriamiento la fase austenita γ descompone en tres estructuras diferentes por medio de un proceso difusivo. En el rango de temperatura $Ae_1 < T \leq Ae_3$ γ descompone en α -ferrita; lo hace en perlita cuando $B_s < T \leq Ae_1$; y descompone en bainita cuando $M_s < T \leq B_s$. Debajo de la temperatura M_s , se forma martensita como un producto de una transformación no difusiva. En lo anterior, Ae_3 denota la temperatura en la cual α -ferrita puede comenzar a precipitar, Ae_1 denota la temperatura eutectoide en la cual la perlita empieza a formarse, B_s denota la temperatura de comienzo de la transformación bainítica y M_s denota la temperatura de comienzo de martensita. Como puede observarse, desde un punto de vista general, esta aleación de acero se caracteriza por estar sometida a transformaciones difusivas y no-difusivas en rangos de temperaturas característicos, como así también lo está la aleación de titanio Ti6Al4V.

2.2. Transformaciones difusivas: modelo JMAK

Un modelo ampliamente utilizado para describir transformaciones difusivas isotérmicas e isocinéticas es el modelo de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK), que está dado por la siguiente expresión

$$y_i = Y_i(1 - e^{-b_i t^{m_i}}), \quad (1)$$

donde y_i son las fracciones de las fases α_i que presenta el material, Y_i es la máxima fracción transformada de la fase α_i considerada igual a la fracción de equilibrio de la fase en cuestión, y m_i y b_i son parámetros cinéticos que dependen de la temperatura. La expresión diferencial de este modelo está dada por

$$\dot{y}_i = m_i b_i \frac{1}{m_i} (Y_i - y_i) \left(\frac{Y_i - y_i}{Y_i} \right)^{\frac{m_i-1}{m_i}} \quad (2)$$

$$y_i(t_0) = 0. \quad (3)$$

Es conocido que este modelo describe bien la cinética de transformaciones isotérmicas, pudiéndose extender a procesos no-isotérmicos adoptando la hipótesis de que el mismo se puede describir por medio de un conjunto de pasos isotérmicos aplicando la regla de la aditividad (Scheil, 1935; Cahn, 1956). La ecuación anterior se puede integrar haciendo uso directo de la regla de la aditividad por medio del método del tiempo ficticio (Hildenwall y Ericsson, 1977), donde el tiempo de incubación no-isotérmico se estima a partir de datos isotérmicos. Así, denotando por $\tau_s(T_n)$ al tiempo de incubación isotérmico, se tiene que el tiempo de incubación no-isotérmico se completará cuando la suma

$$S = \sum_{i=1}^n \frac{\Delta t_i}{\tau_s(T_i)} \quad (4)$$

toma el valor de la unidad. En este caso Δt_i es el incremento utilizado en la discretización temporal y T_i la temperatura. Luego, la fracción de la fase y_i en el tiempo actual t_n está dada por

$$y_{i,n} = Y_{i,n} (1 - e^{-b_{i,n}(\Delta t_n + \tau_n^*)^{m_{i,n}}}), \quad (5)$$

donde el tiempo ficticio τ_n^* toma la siguiente expresión

$$\tau_n^* = \ln \left(\frac{Y_{i,n}}{Y_{i,n} - y_{i,n-1}} \right)^{\frac{1}{m_{i,n}}} b_{i,n}^{\frac{-1}{m_{i,n}}}. \quad (6)$$

Los parámetros cinéticos se estiman de los datos de diagramas TTT de la aleación modelada.

En este trabajo el modelo JMAK se modifica para incorporar el comportamiento inerte de ciertas fases durante el transcurso de la transformación difusiva modelada. Un ejemplo de esta transformación es la transformación $\beta \rightarrow \alpha_w + \alpha_g$, en donde la fase α' es inerte. En este caso la ecuación (5) se re-escibe como

$$y_{i,n} = X_{i,n} (1 - e^{-b_{i,n}(\Delta t_n + \tau_n^*)^{m_{i,n}}}), \quad (7)$$

donde se ha introducido el término $X_{i,n} = Y_{i,n} - y_{p,n-1}$ siendo p la fase inerte.

2.2.1. Modelado de precipitación simultánea de fases

En la formulación anterior no se considera la posibilidad de que ocurran transformaciones simultáneas, limitación que muchas veces resulta muy restrictiva. Por ejemplo, en el caso de la aleación Ti6Al4V es de interés poder describir simultáneamente la descomposición de la fase β en las morfologías α_w y α_g . De acuerdo con Murgau et al. (2012), este fenómeno se puede describir simultáneamente teniendo en cuenta que

$$y_{\alpha,n} = y_{\alpha_w,n} + y_{\alpha_g,n}. \quad (8)$$

Luego de trabajar con dicha expresión y con los modelos JMAK correspondientes, se llega al siguiente modelo: primero se evalúa $y_{\alpha_g,n}$ por medio de

$$y_{\alpha_g,n} = X_{\alpha,n} (1 - e^{-b_{\alpha_g,n}(\Delta t_n + \tau_n^*)^{m_{\alpha_g,n}}}) - y_{\alpha_w,n-1}, \quad (9)$$

con

$$\tau_n^* = \ln \left(\frac{X_{\alpha,n}}{X_{\alpha,n} - (y_{\alpha_g,n-1} + y_{\alpha_w,n-1})} \right)^{\frac{1}{m_{\alpha_g,n}}} b_{\alpha_g,n}^{\frac{-1}{m_{\alpha_g,n}}}, \quad (10)$$

para luego calcular $y_{\alpha_w,n}$ como

$$y_{\alpha_w,n} = X_{\alpha,n} (1 - e^{-b_{\alpha_w,n}(\Delta t_n + \tau_n^*)^{m_{\alpha_w,n}}}) - y_{\alpha_g,n-1}, \quad (11)$$

con

$$\tau_n^* = \ln \left(\frac{X_{\alpha,n}}{X_{\alpha,n} - (y_{\alpha_g,n-1} + y_{\alpha_w,n-1})} \right)^{\frac{1}{m_{\alpha_w,n}}} b_{\alpha_w,n}^{\frac{-1}{m_{\alpha_w,n}}}. \quad (12)$$

Adicionalmente, en este trabajo se estudió otro caso de precipitación simultánea de fases. En el caso de la aleación de titanio Ti6Al4V se observa experimentalmente (Gil Mur et al., 1996) que durante etapas de calentamiento, si hay martensita presente, α' descompone en $\beta + \alpha_w$ difusivamente. Adoptando la hipótesis de que es posible despreciar la variación de la fase α_g durante este proceso, y de que es posible modelar la evolución de la fracción de martensita por medio de

$$y_{\alpha',n} = e^{-b_{\alpha',n}(\Delta t_n + \tau_n^*)^{m_{\alpha',n}}} \doteq e^{f(\alpha')}, \quad (13)$$

se llegan a las siguientes ecuaciones para la reacción $\alpha' \rightarrow (\beta + \alpha_w)$

$$y_{\beta,n} = \frac{1 - Y_{\alpha,n}}{1 - y_{\alpha_g,n-1}} (y_{\alpha',n-1} - e^{f(\alpha')}) + y_{\beta,n-1}, \quad (14)$$

$$y_{\alpha_w,n} = \frac{Y_{\alpha,n} - y_{\alpha_g,n-1}}{1 - y_{\alpha_g,n-1}} (y_{\alpha',n-1} - e^{f(\alpha')}) + y_{\alpha_w,n-1}, \quad (15)$$

$$y_{\alpha_g,n} = y_{\alpha_g,n-1}, \quad (16)$$

$$y_{\alpha',n} = e^{f(\alpha')}, \quad (17)$$

en donde adicionalmente se consideró que en cada paso de tiempo la cantidad de martensita disuelta $\Delta y_{\alpha',n}$ se distribuye proporcionalmente en la fases α_w y β . Notar que [Murgau et al. \(2012\)](#) modelan $\alpha' \rightarrow (\beta + \alpha_w)$ introduciendo una fracción de equilibrio esperada de martensita, un dato adicional difícil de conseguir.

2.3. Transformaciones difusivas: modelo de Kelly

En el caso de la aleación de titanio Ti6Al4V, [Kelly \(2004\)](#) describió la disolución de $\alpha_w + \alpha_g$ en β como una transformación difusiva donde el crecimiento de β se supone gobernado por una ley parabólica. Así, el crecimiento de β se describe por

$$y_{\beta,n} = Y_{\beta,n} f_{p,n} (\Delta t + \tau_n^*)^{0,5}, \quad (18)$$

donde el tiempo ficticio τ_n^* está dado por

$$\tau_n^* = \left(\frac{y_{\beta,n-1}}{Y_{\beta,n} f_{p,n}} \right)^2, \quad (19)$$

y la función $f_{p,n}$ en el caso de la aleación de titanio Ti6Al4V tiene la expresión

$$f_{p,n} \equiv f_p(T_n) = 2,20 \times 10^{-31} T_n^{9,88821}. \quad (20)$$

2.4. Transformaciones no difusivas

La formación de martensita se caracteriza por ser una transformación no difusiva, con temperaturas críticas de inicio M_s y de fin M_f . La cinética de la formación de martensita es generalmente descrita por medio de la ecuación de Koistinen-Marburger (KM) ([Koistinen y Marburger, 1959](#)) que está dada por

$$y_{m,n} = y_0^{M_s} (1 - e^{r(T_n - M_s)}), \quad (21)$$

donde $y_0^{M_s}$ es la fracción de la fase matriz retenida en el tiempo correspondiente a M_s , y el parámetro r es una constante específica del material modelado.

Hay casos de enfriamiento rápido que se caracterizan por la formación incompleta de martensita, dejando abierta la posibilidad de que ocurran transformaciones de carácter difusivo. Para modelar este comportamiento, [Murgau et al. \(2012\)](#) proponen modificar el modelo KM con la siguiente expresión

$$y_{m,n} = (y_0^{M_s} - Y_{\alpha_p,n}) (1 - e^{r(T_n - M_s)}), \quad (22)$$

donde α_p es la fase matriz.

2.5. Modelos de disolución instantánea y diagramas de equilibrio

En problemas de soldadura se encuentra frecuentemente la utilización de modelos de disolución instantánea para describir el comportamiento de la martensita durante la etapa de calentamiento. Esto es, cuando se alcanza la temperatura de disolución, T_{dm} , la martensita presente se disuelve instantáneamente contribuyendo a las otras fases. Por ejemplo, en el caso de la aleación Ti6Al4V se supone que esta contribución tiene la siguiente forma

$$y_{\alpha_w,n} = y_{\alpha',n-1}(Y_{\alpha,n} - y_{\alpha_g,n-1}) + y_{\alpha_w,n-1}, \quad (23)$$

$$y_{\beta,n} = y_{\alpha',n-1}Y_{\beta,n} + y_{\beta,n-1}. \quad (24)$$

Durante la etapa de calentamiento si no hay martensita, generalmente (Babu et al., 2005; Lindgren, 2007; Goldak y Akhlaghi, 2005) se asume que la transformación sigue el diagrama de equilibrio. En este trabajo, en el caso del material Ti6Al4V, la etapa de calentamiento se describe por medio de modelos más complejos.

2.6. Lógica para describir historias térmicas arbitrarias

Generalmente, los modelos microestructurales son diseñados para predecir la descomposición o formación de una fase matriz característica, β en el caso del titanio y γ en el caso de aceros. Los modelos de descomposición son estrictamente aplicados a procesos de enfriamiento, y los modelos de formación son aplicados a procesos de calentamiento. En el caso de historias térmicas arbitrarias la decisión de qué modelo aplicar se toma en base al diagrama de equilibrio. Así, como se observa en la Figura 1, para el caso de la aleación de titanio Ti6Al4V cuando no se alcanza el equilibrio se supone que β descompone si $y_{\alpha_w,n-1} < Y_{\alpha,n} - y_{\alpha_g,n-1} - y_{\alpha',n-1}$, y vice versa en el otro caso. También se puede observar en la Figura 1 que se considera la posibilidad de que transformaciones sólido/líquido tomen lugar. Es por esto que inicialmente se pregunta si la temperatura actual está por debajo de T_β , temperatura debajo de la cual las transformaciones sólido/sólido tienen lugar.

En el caso de problemas con historias térmicas arbitrarias que se caracterizan por inducir múltiples ciclos de descomposición/formación de la fase matriz, la transición de un modelo de descomposición a uno de formación, y vice versa, introduce el requerimiento de reinicializar ciertas variables de estado. Ejemplos de estas variables de estado son los tiempos de incubación calculados por los modelos JMAK, y la fracción de la fase matriz retenida en el momento en que la transformación martensítica modelada por un modelo KM comienza.

En el caso de la aleación de titanio Ti6Al4V, la reinicialización de estas variables de estado se controla por medio del diagrama de flujo que se muestra en la Figura 2. Toda la algoritmia para resolver la evolución microestructural comienza en el procedimiento **Start**, teniendo lugar inicialmente decisiones que tienen como propósito la reinicialización de las variables de estado que se especifiquen. Estas variables se reinicializarán siempre que las temperaturas críticas que caracterizan a las transformaciones se traspasen.

Para explicar el funcionamiento de la idea propuesta, considérese el caso de un modelo JMAK que modela la transformación difusiva $\beta \rightarrow \alpha$, cuyo tiempo de incubación se identifica por medio de la llave (identificador) **KeyJMAK18** (detalles de este componente se dan en la Figura 4 y la sección 3.1.1). Si dicha transformación tiene lugar, la decisión 1 seguirá la rama **Y** reinicializándose el tiempo de incubación. La reinicialización no volverá a suceder hasta que el procedimiento decisión detecte que se cambia de la rama **Y** a la rama **N**. De manera similar se administran las demás reinicializaciones.

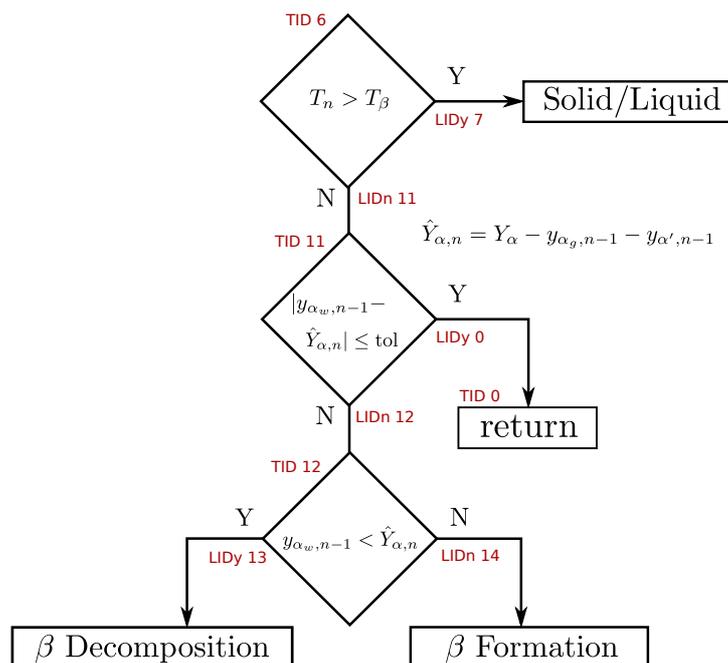


Figura 1: Lógica propuesta para describir historias térmicas arbitrarias (Ti6Al4V).

3. DESCRIPCIÓN COMPUTACIONAL DE LA CINÉTICA DE LAS TRANSFORMACIONES MICROESTRUCTURALES

Unos de los objetivos de este trabajo es el desarrollo de un marco computacional que sea lo bastante general para permitir representar la cinética de las transformaciones microestructurales de un amplio rango de materiales, reduciendo así la necesidad de re-escribir código a la hora de describir cambios de fase en otras aleaciones.

En ciencias de la computación está muy extendido el uso de diagramas de flujo para especificar un algoritmo o conjunto de pasos para resolver un problema (Bohl y Rynn, 2007). Es por esto que, por ejemplo, el algoritmo que se sigue para calcular la evolución microestructural de un material pueda ser especificado en términos de un diagrama de flujo. En este trabajo, se propone extender el uso de diagramas de flujo para definir el comportamiento material a nivel microestructural. Esto es, se propone definir el comportamiento material por medio de un conjunto de propiedades materiales, el tipo de repuesta térmica (isótropa, ortotrópica, etc.), el tipo de respuesta mecánica (elástica, elasto-plástica, etc.) y un diagrama de flujo para especificar la cinética de las transformaciones microestructurales. De esta manera, cada componente del diagrama de flujo se codifica sólo una vez, eventualmente reutilizados cuando se define un nuevo material.

Para la confección de diagramas de flujo se utilizan dos tipos de cajas o representaciones gráficas: decisiones, denotadas por medio de diamantes, y procedimientos, denotados por medio de cajas rectangulares. Generalmente, cada procedimiento estará describiendo una transformación, o parte de una transformación. Cuando se dibujen los diagramas de flujo se utilizarán las inscripciones LID y TID. Su propósito es identificar los componentes (una explicación detallada de ellos se dará cuando se describa la implementación informática).

En esta sección, el material Ti6Al4V será analizado desde el punto de vista de diagramas de flujo.

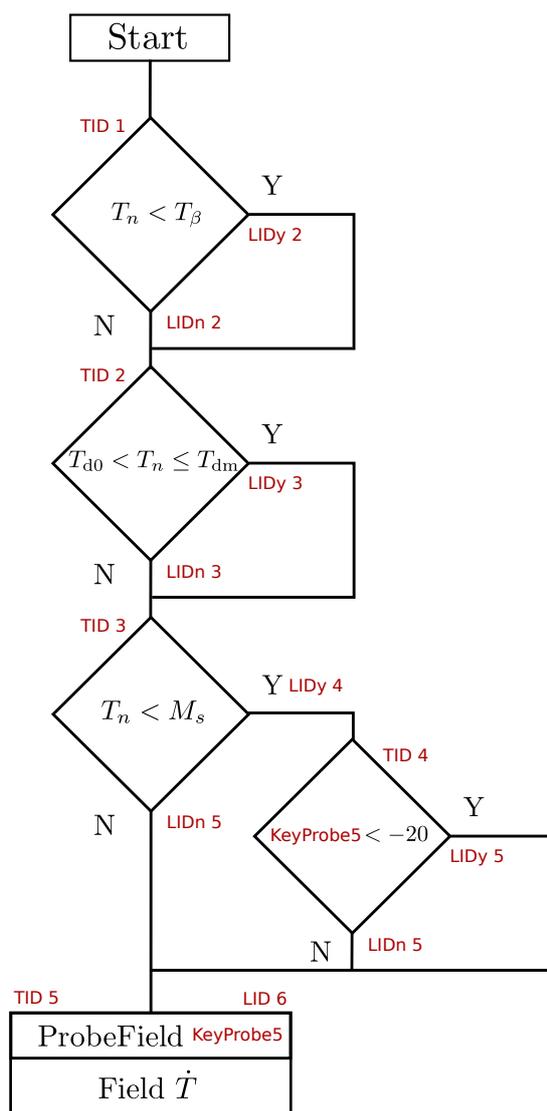


Figura 2: Diagrama de flujo para la reinicialización de variables de estado.

3.1. Aleación de titanio Ti6Al4V

En esta sección se proponen modelos para la descomposición y formación de la fase β del material, adicionalmente considerando la fase líquida. Los datos materiales que se presentan fueron extraídos de los trabajos de Kelly (2004), Murgau et al. (2012) y Anca et al. (2011).

En la Figura 3 se observa la lógica para tratar el cambio de fase sólido-líquido. Para temperaturas mayores que T_β , sólo β y líquido pueden existir. Es por esto que, primero, el procedimiento InstantaneousDissolution, TID 7, es utilizado para hacer cero todas las fracciones de las fases excepto de la fase líquida. Luego, la fracción de la fase líquida, f_l , se calcula de acuerdo con el diagrama de equilibrio, TID 8, que tiene la siguiente expresión

$$f_l(T) = \begin{cases} 1 & \text{si } T > T_{liq} \\ \frac{T - T_{sol}}{T_{liq} - T_{sol}} & \text{si } T_{sol} \leq T \leq T_{liq} , \\ 0 & \text{si } T < T_{sol} \end{cases} \quad (25)$$

donde $T_{sol} = 1877\text{K}$ y $T_{liq} = 1933\text{K}$ son las temperaturas de solidus y liquidus, respectiva-

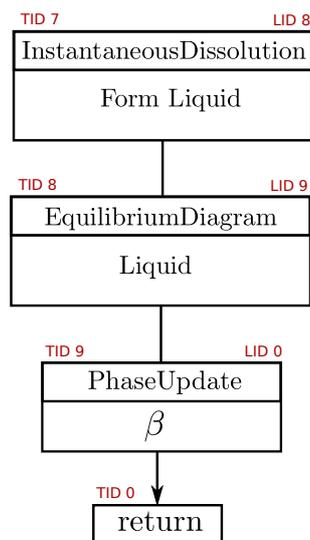


Figura 3: Diagrama de flujo para el manejo de cambios de fase sólido-líquido.

mente. Luego, la cantidad de la fase β se calcula en el procedimiento PhaseUpdate, TID 9, de acuerdo con $y_\beta = 1 - f_l$.

3.1.1. Descomposición de β

El diagrama de flujo que caracteriza la descomposición de β se muestra en la Figura 4. En dicha figura se podrán encontrar los procedimientos y las decisiones a las que se haga referencia a continuación, salvo en los casos en donde se mencione explícitamente otra figura.

Durante las transformaciones de estado sólido la fase líquida no está presente, es por esto que por medio de un procedimiento InstantaneousDissolution, TID 13, la fase líquida se hace cero. La formación de las fases α_g y α_w se describe de acuerdo a la cinética de las transformaciones difusivas utilizando modelos JMAK, donde la formación simultánea de fases puede tomar lugar. El diagrama TTT y los parámetros cinéticos pueden observarse en las Figuras 5a y 6. El diagrama de equilibrio se muestra en la Figura 5b. Se considera que las fases α_w y α_g comienzan a formarse en el rango de temperatura $M_s < T \leq T_\beta$ sólo si $y_{\alpha_w, n-1} + y_{\alpha_g, n-1} + y_{\alpha', n-1} < Y_{\alpha, n}$ (decisiones TID 15 y 17). Se adoptaron T_β y M_s igual a 1273K y 848K, respectivamente.

Durante la etapa de enfriamiento, la formación de martensita se modela de acuerdo con el modelo KM, tomando r igual a 0,005. Esta transformación se considera que comienza en la temperatura crítica M_s . Transformaciones martensíticas totales se han observado (Ahmed y Rack, 1998) para velocidades de temperatura mayores a 410Ks^{-1} , pero para velocidades de temperatura en el rango $-410\text{Ks}^{-1} < \dot{T} \leq -20\text{Ks}^{-1}$ debe ser considerada la posibilidad de que transformaciones difusivas ocurran. Para poder describir el primer caso, se utiliza el modelo KM dado por la ecuación (21) (procedimiento KM, TID 24). Para el segundo caso, se utiliza el modelo KM modificado dado por la ecuación (22) (procedimiento KM, TID 25). La variación de la temperatura o la velocidad de enfriamiento se calcula en el rango de temperatura $M_s < T \leq T_\beta$ (Kelly, 2004), y se implementa en el diagrama de flujo por medio del procedimiento ProbeField, TID 16. Este procedimiento calcula y guarda el campo especificado, en este caso \dot{T} , en una variable identificada por una llave o Key , en este caso **KeyProbe16** (más detalle se dan en la implementación informática). **KeyProbe16** es utilizado por las decisiones TID 21 y TID 23, para decidir si se formará martensita. Finalmente, la cantidad retenida de β se calcula por medio del procedimiento PhaseUpdate, TID 20.

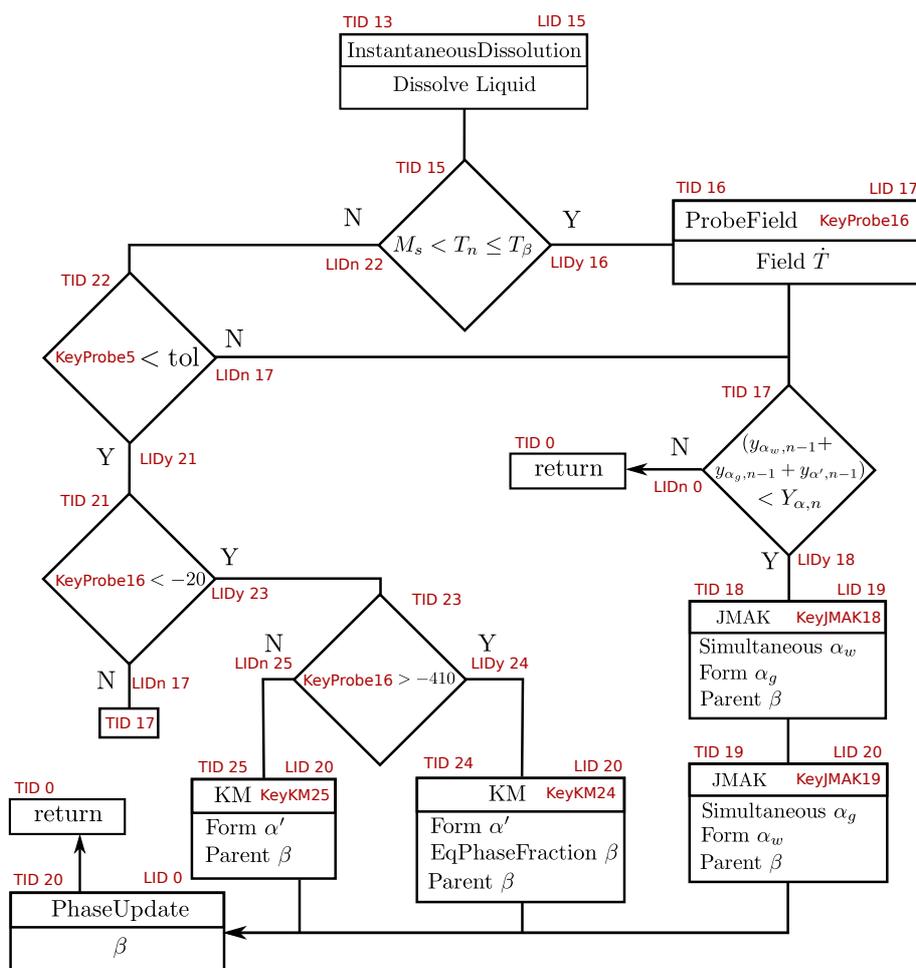


Figura 4: Diagrama de flujo para la descripción del material Ti6Al4V para la descomposición de β .

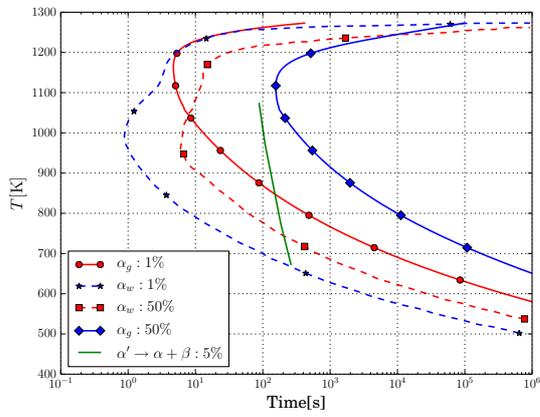
La decisión identificada por TID 22 verifica que la velocidad de enfriamiento se mantenga por debajo de un umbral denotado por tol (en este caso tomado igual a $-1Ks^{-1}$). Si la velocidad de enfriamiento no se mantiene por debajo de este umbral se contempla la posibilidad de que transformaciones difusivas tengan lugar. La velocidad involucrada en la decisión TID 22, se mide en el ProbeField TID 5 y se guarda en la llave **KeyProbe5** (ver Figura 2).

Las variables de estado de los modelos JMAK TIDs 18 y 19, llaves **KeyJMAK18** y **KeyJMAK19**, son reinicializadas por las decisiones TIDs 1 y 4 (Figura 2). Las variables de estado de los modelos KM TIDs 24 y 25, llaves **KeyKM24** y **KeyKM25**, son reinicializadas por la decisión TID 3 (Figura 2).

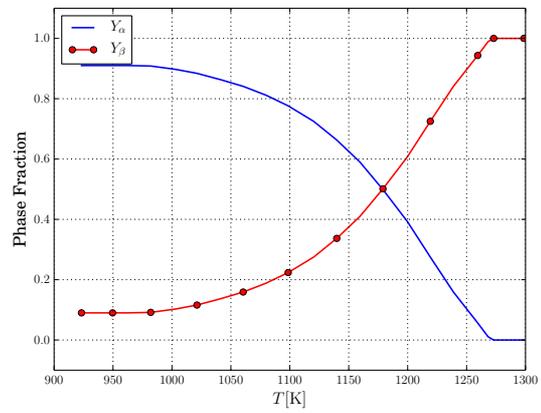
3.1.2. Formación de β

El diagrama de flujo para la formación de β se observa en la Figura 7. En dicha figura se podrán encontrar los procedimientos y las decisiones a las que se haga referencia a continuación, salvo en los casos en donde se mencione explícitamente otra figura.

Si α' está presente (decisión TID 14) y si $T_{d0} < T_n < T_{dm}$ (decisiones TIDs 30 y 32), se observa que la martensita comienza a disolverse en $\alpha_w + \beta$ por medio de un mecanismo difusivo. Para modelar la disolución $\alpha' \rightarrow \alpha_w + \beta$ se utiliza el modelo JMAK dado por las ecuaciones



(a) Diagrama TTT para aleación de titanio Ti6Al4V.



(b) Diagrama de equilibrio. Fases α y β .

Figura 5: Datos para la aleación de titanio Ti6Al4V.

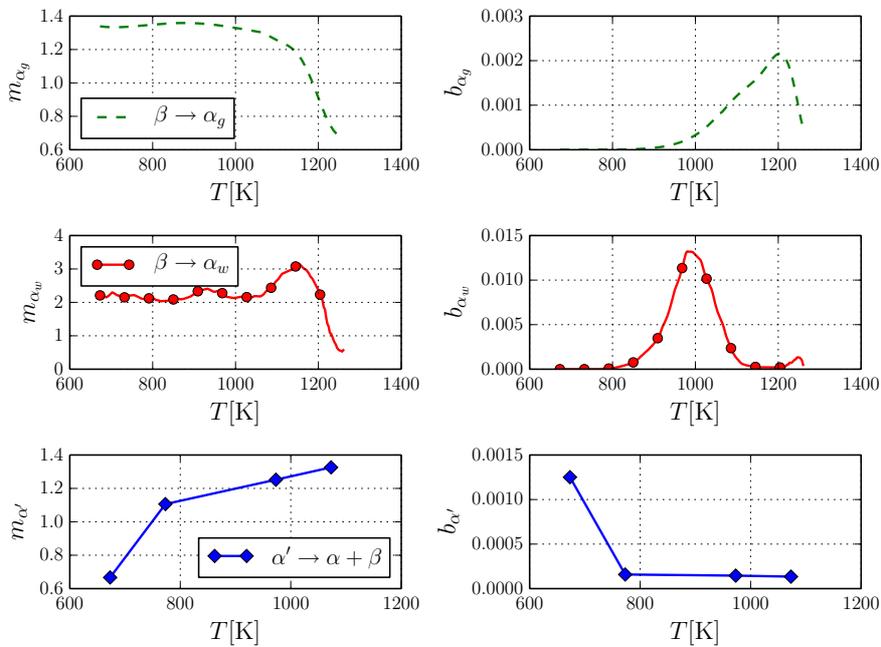


Figura 6: Parámetros JMAK para la aleación de titanio Ti6Al4V.

(14-17), debido a que la formación simultánea de fases debe ser considerada (procedimiento JMAK TID 33). Los parámetros cinéticos JMAK de esta transformación fueron tomados de Gil Mur et al. (1996) y se especifican en la Figura 6. La función que describe el tiempo de incubación para el caso isotérmico se muestra en la Figura 5a. Las temperaturas críticas T_{dm} y T_{d0} se toman igual a 1073 K y 600 K, respectivamente.

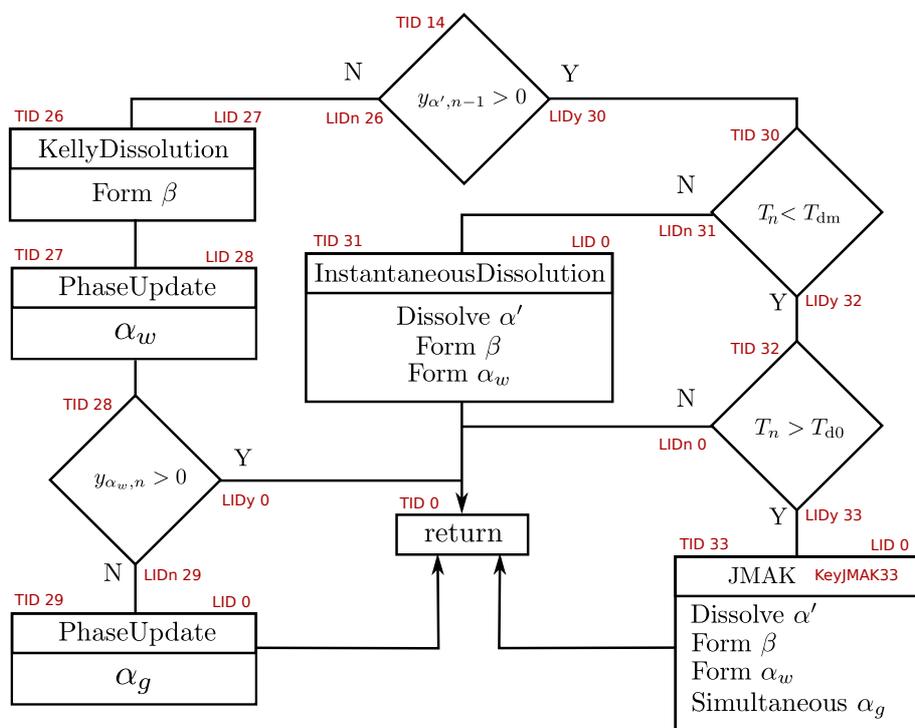


Figura 7: Diagrama de flujo para la descripción de la formación de la fase β de la aleación de titanio Ti6Al4V.

La temperatura crítica T_{dm} se toma como temperatura de disolución para la martensita, lo cual significa que luego de sobrepasar esta temperatura, α' se disuelve completamente, i.e. $y_{\alpha'} = 0$, y las fracciones de las fases α_w y β se calculan de acuerdo con las ecuaciones (23) y (24), respectivamente. En el diagrama de flujo esto se refleja por medio del procedimiento InstantaneousDissolution, TID 31.

Si la fracción de la fase α' es cero, α_w y α_g forman β . El modelo de Kelly, dado por la ecuación (18), se utiliza para describir la reacción $\alpha_w + \alpha_g \rightarrow \beta$ (procedimiento KellyDissolution, TID 26). Se supone que la fase α_w se disuelve primero (procedimiento PhaseUpdate, TID 27), y una vez que su valor es cero (decisión TID 28), α_g comienza a disolver (procedimiento PhaseUpdate, TID 29).

Las variables de estado del modelo JMAK TID 33, llave **KeyJMAK33**, son reiniciadas por la decisión TID 3 (Figura 2).

4. IMPLEMENTACIÓN INFORMÁTICA

En esta sección se discute el diseño de un software que sea capaz de representar el comportamiento microestructural de un amplio rango de materiales. De las descripciones realizadas para los materiales AISI 1060 y Ti6Al4V (en mayor detalle para el material Ti6Al4V), un conjunto de características comunes pueden ser extraídas y utilizadas como requerimientos que serán tenidos en cuenta en el diseño de la solución informática.

Especificar la cinética de las transformaciones microestructurales por medio de diagramas de flujo fue concebido como idea fundamental. De los diagramas de flujo que se muestran en las Figuras 3, 4 y 7, se puede observar que decisiones y procedimientos son necesarios para modelar el comportamiento de los materiales. Sea F un campo escalar, luego distintos tipos de decisiones son necesarias, a saber

- Decisiones delimitadas por ambos lados, esto es el campo F está delimitado por los valores F_0 y F_1 de la forma $F_0 < F \leq F_1$.
- Decisiones delimitadas por la izquierda, esto es $F_0 < F$.
- Decisiones delimitadas por la derecha, esto es $F < F_1$.
- Decisiones delimitadas por la derecha con una tolerancia, esto es $|F - F_1| < \text{tol}$.
- Decisiones testeando igualdad, esto es $F == F_1$.

En este trabajo el diseño que se propone es pensado haciendo uso de una filosofía Orientada a Objetos (OO). En este contexto, los campos involucrados, como así también las variables internas, son identificados por medio de una instancia de la clase Key (una llave). En los diagramas de flujo que se observan en las Figuras 4 y 7, se puede ver que los modelos JMAK y KM están asociados a una llave o Key. En el caso de los modelos JMAK estas llaves identifican las variables internas que denotan los tiempos de incubación no-isotérmicos. En el caso de los modelos KM, las llaves son utilizadas para identificar $y_0^{M_s}$ (ver ecuación (21)).

Los procedimientos necesarios para construir los diagramas de flujo están dados por

- Procedimiento JMAK: se utiliza para describir transformaciones difusivas.
- Procedimiento InstantaneousDissolution: se utiliza para describir la disolución instantánea y completa de una fase o conjunto de fases.
- Procedimiento EquilibriumDiagram: se utiliza para describir la evolución microestructural de acuerdo con el diagrama de equilibrio.
- Procedimiento Koistinen-Marburger: se utiliza para describir transformaciones no-difusivas, como lo es la formación de martensita.
- Procedimiento PhaseUpdate: se utiliza para actualizar la fracción y_k de una fase α_k haciendo uso de la ley $y_k = 1 - \sum_{i \in I \setminus y_k}^{n_h} y_i$, donde n_h es el número de fases e I es el conjunto de índices que identifica a cada una de las fases modeladas.
- Procedimiento KellyDissolution: es utilizado para describir transformaciones difusivas adoptando una ley parabólica para el crecimiento de la fase siendo analizada.
- Procedimiento ProbeField: se utiliza para muestrear un campo que es especificado como dato, siendo almacenado en la variable identificada por Key.
- Procedimiento Return: es utilizado para denotar el fin del paso actual.

El objetivo es codificar tan sólo una vez estos procedimientos y decisiones. Luego, distintos comportamientos materiales pueden ser modelados por medio del ensamblado de los distintos componentes del diagrama de flujo. Para esto, los distintos procedimientos deben ser especificados y configurados con los parámetros fenomenológicos correspondientes al material que se está analizando. Por ejemplo, cuando se utiliza un procedimiento JMAK al menos las fracciones de equilibrio, y los parámetros b_i y m_i deben ser especificados. Con el fin de relacionar cada uno de los componentes del diagrama de flujo, cada componente es identificado por medio de un identificador único (ID) denotado en las figuras por **TID**. Los lazos o links entre los diferentes componentes se especifican por medio de Link IDs y son denotados por **LIDs**.

A continuación se presenta un ejemplo para tener una idea de cómo se especifica en la práctica uno de los procedimientos que conforma el diagrama de flujo que describe la cinética de las transformaciones microestructurales. Se debe mencionar que el marco computacional propuesto se implementó en el software de multi-física Oofelie (Cardona et al., 1994) que dispone de un intérprete de instrucciones. A modo de ejemplo en el Código 1 se puede observar un conjunto de instrucciones que declaran un procedimiento JMAK y lo configuran con los datos característicos del material en cuestión. En la línea 1 se define el diagrama de flujo `flowchart`. Luego, en la línea 2 se define el procedimiento JMAK que es configurado en las líneas subsiguientes, especificando entre otras cosas su identificador TID (línea 3) y el enlace del siguiente componente en el diagrama de flujo LID (línea 4). Por último, en la línea 14 se agrega el componente `jmak2` al diagrama de flujo `flowchart`.

Código 1 Ejemplo: especificación de un procedimiento JMAK

```

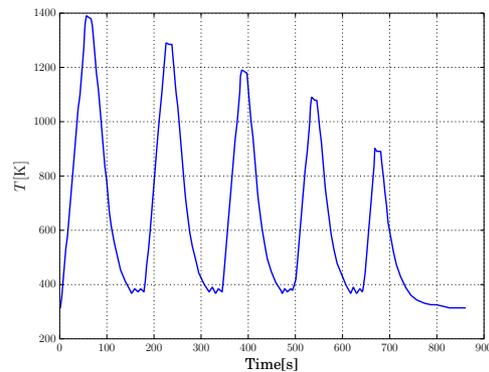
1 FlowChart flowchart;
2 JMAK jmak2;
3 jmak2.TID(2);
4 jmak2.LID0(70);
5 jmak2.setJMAKmi(miB2Agbf);
6 jmak2.setJMAKbi(biB2Agbf);
7 jmak2.setIncubationTime(tAgbf);
8 jmak2.setEquilibriumPhaseFraction(yeqAf);
9 jmak2.setPhaseToPredict(phaseAlphaGB);
10
11 ...
12 ...
13
14 flowchart.addFlowChartComp(jmak2);

```

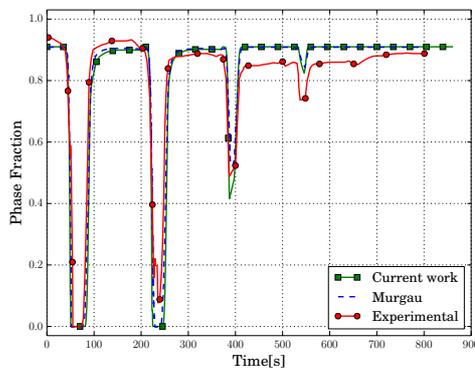
5. EJEMPLO DE APLICACIÓN Y VALIDACIÓN

En esta sección se reproduce numéricamente el experimento realizado por Babu et al. (2005), para validar el marco computacional implementado y el modelo desarrollado para la aleación de titanio Ti6Al4V. La historia térmica que caracteriza a este experimento se detalla en la Figura 8a. En la Figura 8b se puede observar la comparación entre los resultados obtenidos con el modelo presentado en este trabajo, los obtenidos con el modelo de Charles Murgau et al. y los resultados experimentales. Como se puede apreciar, los resultados obtenidos muestran una buena concordancia con los obtenidos por Murgau et al. (2012) y con las mediciones experimentales. Por completitud, en la Figura 8c se muestran las fracciones calculadas para cada una

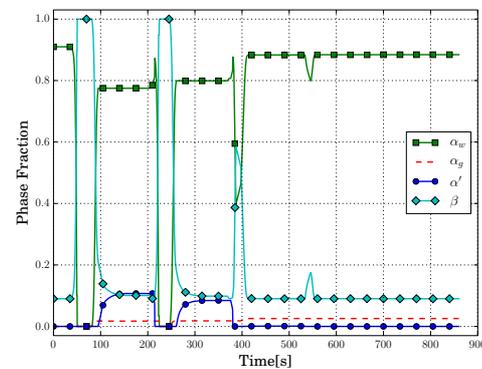
de las morfologías de α .



(a) Historia térmica.



(b) Resultados obtenidos con el modelo propuesto en este trabajo y con el modelo de Murgau et al. (2012). Se compara con mediciones experimentales.



(c) Resultados obtenidos con el modelo propuesto. Fracciones de cada fase.

Figura 8: Historia térmica, resultados obtenidos y mediciones experimentales.

6. CONCLUSIONES

La modelización de transformaciones microestructurales difusivas y no difusivas de los materiales Ti6Al4V y AISI 1060 fueron estudiadas con modelos formulados en la macro-escala. En este contexto, el material AISI 1060 fue brevemente analizado, mientras que la aleación de titanio Ti6Al4V se estudió en detalle. En el caso de la aleación de titanio se propuso un modelo microestructural capaz de ser aplicado a procesos caracterizados por historias térmicas arbitrarias, que a pesar de diferir de los modelos existentes en pequeños detalles, permite analizar en profundidad la cinética de las transformaciones microestructurales de la aleación de titanio Ti6Al4V por medio de considerar diagramas de flujo.

El uso de diagramas de flujo se adoptó como herramienta fundamental para definir la cinética de las transformaciones microestructurales. Luego, se discutió brevemente la implementación de un marco computacional para la modelación microestructural. Para validar esta implementación y el modelo que se desarrolló para la aleación de titanio Ti6Al4V, se reprodujo numéricamente la experiencia realizada por Babu et al. (2005). De los resultados obtenidos se concluyó la validez del marco computacional y del modelo.

Se tiene como trabajo futuro estudiar modelos microestructurales formulados en la meso-escala. También, gran parte del trabajo estará dirigido a obtener formulaciones meso-escala que sean tratables desde el punto de vista del costo computacional.

REFERENCIAS

- Ahmed T. y Rack H. Phase transformations during cooling in $\alpha+\beta$ titanium alloys. *Materials Science and Engineering: A*, 243(1-2):206–211, 1998. ISSN 0921-5093. doi:[http://dx.doi.org/10.1016/S0921-5093\(97\)00802-2](http://dx.doi.org/10.1016/S0921-5093(97)00802-2).
- Anca A., Fachinotti V., Escobar-Palafox G., y Cardona A. Computational modelling of shaped metal deposition. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 85(1):84–106, 2011.
- Avrami M. Granulation, phase change, and microstructure kinetics of phase change. iii. *The Journal of Chemical Physics*, 9(2):177–184, 1941.
- Babu S., Kelly S., Specht E., Palmer T., y Elmer J. Measurement of phase transformation kinetics during repeated thermal cycling of Ti-6Al-4V using time-resolved X-ray diffraction. volumen 2, páginas 503–508. 2005. Cited By (since 1996)2.
- Bohl M. y Rynn M. *Tools for Structured and Object-Oriented Design*. Pearson Prentice Hall, 2007. ISBN 9780131194458.
- Cahn J.W. Transformation kinetics during continuous cooling. *Acta Metallurgica*, 4(6):572–575, 1956.
- Cardona A., Klapka I., y Geradin M. Design of a new finite element programming environment. *Engineering Computations*, 11:365–381, 1994.
- Crespo A. Modelling of heat transfer and phase transformations in the rapid manufacturing of titanium components. En A. Amimul, editor, *Convection and Conduction Heat Transfer*. InTech, 2011. ISBN 978-953-307-582-2.
- Gil Mur F., Rodriguez D., y Planell J. Influence of tempering temperature and time on the α' -Ti-6Al-4V martensite. *Journal of alloys and compounds*, 234(2):287–289, 1996.
- Goldak J. y Akhlaghi M. *Computational Welding Mechanics*. Springer, 2005.
- Hildenwall B. y Ericsson T. Prediction of residual stresses in case-hardening steels. *Hardening Concepts with Applications to Steel*, páginas 579–606, 1977.
- Johnson W.A. y Mehl R.F. Reaction kinetics in processes of nucleation and growth. *Trans. Am. Inst. Min. Metall. Eng.*, 135:416–442, 1939.
- Jones S. y Bhadeshia H. Kinetics of the simultaneous decomposition of austenite into several transformation products. *Acta Materialia*, 45(7):2911 – 2920, 1997. ISSN 1359-6454. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S1359-6454\(96\)00392-8](http://dx.doi.org/10.1016/S1359-6454(96)00392-8).
- Kelly S.M. *Thermal and Microstructure Modeling of Metal Deposition Processes with Application to Ti-6Al-4V*. Phd thesis, Faculty of the Virginia Polytechnic Institute and State University, 2004.
- Kim D. *Prediction of Microstructure Evolution of Heat-Affected Zone in Gas Metal Arc Welding of Steels*. Phd thesis, Faculty of the Graduate School of The University of Texas at Austin, 2012.
- Kirkaldy J. y Venugopalan D. Phase transformations in ferrous alloys. páginas 125–148. 1984.
- Koistinen D. y Marburger R. A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels. *Acta Metallurgica*, 7(1):59–60, 1959.
- Kolmogorov A. On the Statistical Theory of Metal Crystallization. *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Math*, 1:335–360, 1937. Computes density of fairly general Johnson-Mehl crystals and the

- probability that a point is not in a crystal yet.
- Lee M.G., Kim S.J., Han H.N., y Jeong W.C. Implicit finite element formulations for multi-phase transformation in high carbon steel. *International Journal of Plasticity*, 25(9):1726 – 1758, 2009. ISSN 0749-6419. doi:<http://dx.doi.org/10.1016/j.ijplas.2008.11.010>. Exploring New Horizons of Metal Forming Research.
- Lindgren L.E. *Computational Welding Mechanics: thermomechanical and microstructural simulations*. CRC Press, 2007.
- Murgau C., Pederson R., y Lindgren L. A model for ti6al4v microstructure evolution for arbitrary temperature changes. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 20(5), 2012. Cited By (since 1996)0.
- Oddy A., Goldak J., y McDill J. Transformation effects in the 3D finite element analysis of welds. *Proc. of the 2nd International Conf. on trends in Welding research, Gatlinburg Tennessee USA*, 1989.
- Oddy A., McDill J., y Karlsson L. Microstructural predictions including arbitrary thermal histories, reaustenization and carbon segregation effects. *Canadian Metallurgical Quarterly*, 35(3):275 – 283, 1996. ISSN 0008-4433.
- Rios P.R. y Villa E. Simultaneous and sequential transformations. *Acta Materialia*, 59(4):1632 – 1643, 2011. ISSN 1359-6454. doi:<http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2010.11.030>.
- Scheil E. Anlaufzeit der austenitumwandlung. *Archiv für Eisenhüttenwesen*, 8:565, 1935.
- Watt D., Coon L., Bibby M., Goldak J., y Henwood C. An algorithm for modelling microstructural development in weld heat-affected zones (part a) reaction kinetics. *Acta Metallurgica*, 36(11):3029 – 3035, 1988. ISSN 0001-6160. doi:10.1016/0001-6160(88)90185-X.
- Xiao N., Chen Y., Li D., y Li Y. Progress in mesoscopic modeling of microstructure evolution in steels. *Science China Technological Sciences*, 55(2):341–356, 2012. ISSN 1674-7321. doi:10.1007/s11431-011-4699-z.