

APLICACIÓN ESPECÍFICA

Metalurgia

Los métodos computacionales son especialmente aptos para resolver los siguientes problemas:

- cambio del estado líquido al sólido;
- equilibrio entre fases sólidas; y
- reacciones entre sólidos.

Esto es así porque las simulaciones toman en cuenta al mismo tiempo las transformaciones físicas, las reacciones químicas y los gradientes de temperatura. De los cálculos surge una película de la evolución del sistema, es decir, información sobre la concentración de cada especie en cada punto (volumen finito) y en cada instante (intervalo de tiempo).

Las técnicas que empleamos son:

- Elementos Finitos (eventualmente, Diferencias Finitas);
- Dinámica Molecular (complementada con el Método de Monte Carlo para introducir efectos aleatorios); y
- Autómatas Celulares (también complementada con el Método de Monte Carlo).



Las simulaciones del comportamiento de los sistemas al nivel atómico –que hacemos empleando la técnica de Dinámica Molecular– parten de cálculos (mecánico-cuánticos) previos de los campos de fuerzas alrededor de los átomos. Esto permite tomar en cuenta las posibles asociaciones entre átomos de una misma clase y entre átomos distintos. Además, en las simulaciones se puede apreciar en detalle el efecto de la presencia de átomos extraños en una red cristalina, la formación de microcristales y el crecimiento de los granos. Los datos que obtenemos sirven para mejorar el procedimiento de obtención o la calidad de un producto, y para proponer sistemas de control automático de las variables temperatura y caudal.



Si bien la mayor parte de los estudios que hemos realizado trataban problemas propios de las industrias del hierro y el acero, las técnicas se pueden usar para resolver problemas de otras industrias metalúrgicas, como las del aluminio, el titanio, el oro y el cobre.