

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

"SIMULACION DE LA EVOLUCION MICROESTRUCTURAL EN EL ENSAYO JOMINY''

S S E Т QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE INGENIERO QUIMICO METALURGICO SEN P R E T A EDGAR LOPEZ MARTINEZ





MEXICO, D. F. EXAMENES PROFESIONALES FACULTAD CO. OUMICA

2005

m342183



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor. Jurado Asignado:

Presidente	Prof.	Bernardo Fabián Campillo Illanes			
Vocal	Prof.	José Bernardo Hernández Morales			
Secretario	Prof.	José Antonio Barrera Godinez			
1er. suplente	Prof.	Alberto Ingalls Cruz			
2°. suplente	Prof.	Arturo Alejandro Sánchez Santiago			

Sitio donde se desarrolló el tema: Laboratorios Pesados de Metalurgia, Edificio D,

Facultad de Química

Asesor del tema

Supervisor técnico

Dr. José Bernardo Hernández Morales

M. en C. Jorge Sergio Téllez Martínez

Edgar López Martínez

Sustentante

Mis padres José López y Concepción Martínez, mis hermanos Fernando y Julio Cesar, a esas fuerzas extrañas que no lograron su cometido y a la Universidad de México.

Agradecimientos:

Dr. José Bernardo Hernández

M. en C. Jorge Sergio Téllez

y al grandioso pueblo de México

A:

Sólo a causa de la mujer el hombre aprendió a comer del fruto del árbol de la ciencia del bien y del mal. ¿Qué había pasado? El viejo Dios se sintió preso de un miedo terrible. El hombre resultaba ser su mayor desacierto; con él se había creado a sí mismo un rival: la ciencia hace *semejante a Dios;* ¡los sacerdotes y los dioses están perdidos si el hombre se vuelve científico!

F. Nietzsche

Yo no soy esclavo de un Dios que no existe. No soy esclavo de un mundo que no da una basura.

M. Manson

CONTENIDO

Lista de Figuras	iii
Lista de Tablas	ix
Capitulo 1. Introducción	1
Capitulo 2. Antecedentes	3
2.1 Tratamientos térmicos	3
2.2 Templabilidad	5
2.3 Ensayo Jominy	7
2.4 Modelos matemáticos existentes	9
Capitulo 3. Procedimiento experimental	12
3.1 Probetas	13
3.2 Equipo	16
3.3 Medición de la respuesta térmica	17
3.4 Determinación de microestructura y dureza final	18
Capitulo 4. Resultados experimentales	20
4.1 Respuesta térmica	20
4.2 Microestructura y dureza	26
Capitulo 5. Estimación del flujo calórico en la base de la probeta	31
Capitulo 6. Simulación	39
6.1 Modelo matemático	39
6.2 Validación del coeficiente de transferencia de calor de la base de la probeta	49
6.3 Análisis de sensibilidad	54
6.4 Predicción	70

Capitulo 7. Conclusiones

Apéndice A	. Problema inverso de conducción de calor IHCP	82
Apéndice B	Propiedades termofísicas	88

Bibliografía

81

Lista de Figuras

Figura	Pagina
Figura 2.1: Probeta Jominy	8
Figura 2.2: Prueba Jominy	8
Figura 3.1: Posición de los barrenos a lo largo de la probeta Jominy 4_1045	14
Figura 3.2: Cubierta para minimizar las pérdidas de calor laterales	16
Figura 3.3: Dispositivo empleado para el ensayo Jominy	17
Figura 4.1: Respuesta térmica experimental de la probeta 1_304 (prueba	
estándar)	21
Figura 4.2: Respuesta térmica experimental de la probeta 1_304 (prueba con	
cubierta)	21
Figura 4.3: Respuesta térmica experimental de la probeta 2_304 (prueba con	
cubierta)	22
Figura 4.4: Respuesta térmica experimental de la probeta 4_1045	22
Figura 4.5: Respuesta térmica experimental de la probeta 5_4140	23
Figura 4.6: Comparación de las pruebas 2_304 y 3_304	24
Figura 4.7: Comparación de las pruebas 1_304 y 2_304	25
Figura 4.8: Comparación de las pruebas 5_4140 y 6_4140	26
Figura 4.9: Microestructura presente en la superficie de la probeta Jominy de	
acero 1045 (prueba 4 1045)	27

Figura 4.10: Microestructura presente a 2 mm de la superficie de la probeta	
Jominy de acero 1045 (prueba 4_1045)	27
Figura 4.11: Microesfructura presente a 10 mm de la superficie de la probeta	
Jominy de acero 1045 (prueba 4_1045)	28
Figura 4.12: Microestructura presente a 25 mm de la superficie de la probeta	
Jominy de acero 1045 (prueba 4_1045)	28
Figura 4.13: Microestructura presente a 50 mm de la superficie de la probeta	
Jominy de acero 1045 (prueba 4_1045)	28
Figura 4. 14: Microestructura presente en la superficie de la probeta Jominy	
de acero 4140 (prueba 5_4140)	29
Figura 4.15: Microestructura presente a 2 mm de la superficie de la probeta	
Jominy de acero 4140 (prueba 5_4140)	29
Figura 4.16: Microestructura presente a 10 mm de la superficie de la probeta	
Jominy de acero 4140 (prueba 5_4140)	29
Figura 4.17: Microestructura presente a 25 mm de la superficie de la probeta	
Jominy de acero 4140 (prueba 5_4140)	29
Figura 4.18: Microestructura presente a 50 mm de la superficie de la probeta	
Jominy de acero 4140 (prueba 5_4140)	30
Figura 5.1: Efecto del numero de pasos de tiempo futuro sobre la estimación	
del flujo de calor	32
Figura 5.2: Efecto de la distribución de nodos sobre la estimación del flujo	
de calor	33

Figura 5.3: Efecto del intervalo de tiempo de adquisición de datos en el flujo	
de calor	34
Figura 5.4: Flujo de calor para la prueba 3_304 (con cubierta)	35
Figura 5.5: Error entre la temperatura calculada por el IHCP y la experimental en la	
posición del termopar.	35
Figura 5.6: Flujo de calor para la prueba 1_304 (prueba estándar)	36
Figura 5.7: Flujo de calor de superficie de la prueba 6_4140 (prueba	
estándar)	36
Figura 5.8: Comparación de los flujos de calor estimados para las pruebas	
1_304, 3_304 y 6_4140	38
Figura 6.1: Sistema de referencia para la modelación matemática del ensayo	
Jominy	39
Figura 6.2: Diagrama TTT donde se muestra la determinación de tin y tf	43
Figura 6.3: Discretización de la probeta Jominy	46
Figura 6.4: Volumen de control donde se muestran las entradas y salidas de	
calor	47
Figura 6.5: Diagrama de flujo para resolver el problema de transferencia de	
calor y microestructural en la probeta Jominy	48
Figura 6.6: Respuesta térmica simulada y experimental de la prueba 3_304	51
Figura 6.7: Respuesta térmica simulada sin pérdidas de calor lateral y	
experimental de la prueba 1_304	52
Figura 6.8: Respuesta térmica simulada con pérdidas de calor lateral y	
experimental de la prueba 1 304	52

Figura 6.9: Respuesta térmica simulada sin generación de calor y	
experimental de la prueba 5_4140	53
Figura 6.10: Respuesta térmica simulada y experimental de la prueba 5_4140	53
Figura 6.11: Respuesta térmica del escenario medio	54
Figura 6.12: Comparación de la respuesta térmica simulada sin tomar en	
cuenta la generación de energía y del escenario medio	53
Figura 6.13: Comparación de la respuesta microestructural simulada sin	
tomar en cuenta la generación de energía y del escenario medio	
(perlita)	53
Figura 6.14: Comparación de la respuesta microestructural simulada sin	
tomar en cuenta la generación de energía y del escenario medio	
(martensita)	57
Figura 6.15: Respuesta térmica simulada para el caso en que la energía	
generada fue aumentada y disminuida en una fracción de 0.2	64
Figura 6.16: Respuesta microestructural simulada para el caso en que la	
energía generada fue aumentada y disminuida en una fracción de	
0.2 (perlita)	64
Figura 6.17: Respuesta microestructural simulada para el caso en que la	
energía generada fue aumentada y disminuida en una fracción de	
0.2 (martensita)	65
Figura 6.18: Comparación de la respuesta térmica simulada con Ms=423 y	
303 ⁰ C	65

vi

Figura 6.19: Comparación de la respuesta microestructural simulada con	
$Ms = 423 \text{ y } 303 ^{0}\text{C} \text{ (perlita)}$	66
Figura 6.20: Comparación de la respuesta microestructural simulada con	
$Ms=423 \text{ y } 303 ^{0}\text{C} \text{ (martensita)}$	66
Figura 6.21: Comparación de la respuesta térmica simulada con $n-1$ y $n+1$	67
Figura 6.22: Comparación de la respuesta microestructural simulada con n-1	
y $n+1$ (perlita)	67
Figura 6.23: Comparación de la respuesta microestructural simulada con n-1	
y $n+1$ (martensita)	68
Figura 6.24: Comparación de la respuesta térmica simulada con $b-1$ y $b+1$	68
Figura 6.25: Comparación de la respuesta microestructural simulada con b -1 y	
b+1 (perlita)	69
Figura 6.26: Comparación de la respuesta microestructural simulada con $b-1$	
y $b+1$ (martensita)	69
Figura 6.27: Diagrama TTT del acero 1045	70
Figura 6.28: Diagrama TTT del acero 4140	71
Figura 6.29: Diagrama CCT del acero 4140	72
Figura 6.30: Diagrama CCI del acero 1045	73
Figura 6.31: Respuesta térmica experimental y simulada de la probeta	
Jominy de acero AISI 1045 utilizando el coeficiente estimado	
con la prueba l 304	7

Figura 6.32: Respuesta microestructural simulada de la probeta Jominy de			
acero AISI 1045 utilizando el coeficiente estimado con la prueba			
1_304	77		
Figura 6.33: Curva de templabilidad para el acero 1045	78		
Figura 6.34: Respuesta térmica experimental y simulada de la probeta			
Jominy de acero AISI 4140 utilizando el coeficiente estimado			
con la prueba 1_304	78		
Figura 6.35: Respuesta térmica experimental y simulada de la probeta			
Jominy de acero AISI 4140 utilizando el coeficiente estimado			
con la prueba 6_4140	79		
Figura 6.36: Respuesta microestructural simulada de la probeta Jominy de			
acero AISI 4140 utilizando el coeficiente estimado con la prueba			
6_4140	79		
Figura 6.37: Banda de templabilidad para el acero 4140	80		

Lista de Tablas

Tabla	Pagina
Tabla 3.1. Composición química del acero AISI 304, AISI 1045 y AISI 4140	13
Tabla 3.2. Identificación de las probetas y posición de los barrenos	15
Tabla 3.3. Probetas utilizadas para cada prueba	18
Tabla 4.1: Durezas experimentales en 1a probetaJominy de acero 1045	
(prueba 4_1045)	30
Tabla 4.2: Durezas experimentales en la pobeta Jominy de acero 4140	
(prueba 5_4140)	30
Tabla 6.1: Predicción de microestructura y dureza en la superficie de la probeta	
Jominy de acero AISI 1045 como función de parámetros cinéticos y	
termodinámicos	58
Tabla 6.2: Predicción de microestructura y dureza en la posición de 2 mm de la	
probeta Jominy de acero AISI 1045 como función de parámetros	
cinéticos y termodinámicos	59
Tabla 6.3: Predicción de microestructura y dureza en la posición de 10 mm	
de la probeta Jominy de acero AISI 1045 como función de parámetro	S
cinéticos y termodinámicos	60

Tabla 6.4: Predicción de microestructura y dureza en la posición de 25 mm	
de la probeta Jominy de acero AISI 1045 como función de parámetros	
cinéticos y termodinámicos	61
Tabla 6.5: Predicción de microestructura y dureza en la posición de 50 mm	
de la probeta Jominy de acero AISI 1045 como función de parámetros	
cinéticos y termodinámicos	62
Tabla 6.6: Respuesta microestructural de la probeta Jominy de acero AISI 1045	74
Tabla 6.7: Respuesta microestructural de la probeta Jominy de acero AISI 4140	75
Tabla 6.8: Durezas en la probeta Jominy de acero AISI 1045	76
Tabla 6.9: Durezas en la probeta Jominy de acero AISI 4140	76
Tabla B.1: Propiedades termofísicas del acero AISI 4140	88
Tabla B.2: Propiedades termofísicas del acero AISI 304	88
Tabla B.3: Propiedades termofísicas del acero AISI 1045	88

Х

Capítulo 1

Introducción

El ensayo Jominy es una técnica de laboratorio que ha sido utilizada por largo tiempo para determinar la templabilidad de los aceros. Proporciona datos de dureza como función de la distancia desde la superficie en contacto con el medio de enfriamiento, pero no provee información acerca de la respuesta térmica o microestructural; además, sólo es válida para el acero y condiciones de austenización utilizadas.

El objetivo de esta tesis es predecir la respuesta térmica y microestructural, así como la dureza final de aceros sujetos al ensayo Jominy.

Para alcanzar este objetivo se requiere:

- Realizar experimentos para registrar la respuesta térmica en distintos puntos de la probeta Jominy.
- Resolver el problema inverso de conducción de calor (IHCP) para estimar el flujo de calor (condición a la frontera) de la superficie inferior de la probeta Jominy.
- Construir un modelo matemático del ensayo Jominy que resuelva el problema directo de conducción de calor (DHCP).
- Predecir, con el modelo, la microestructura resultante al templar cualquier acero mediante un ensayo Jominy
- Determinar, con el modelo, las condiciones de enfriamiento necesarias para obtener una microestructura deseada (en otro sistema).

1

En un principio fue utilizado el programa de computo, DEFORM3D-HT, para resolver el DHCP, pero proporcionaba información errónea, por lo que se decidió construir un modelo matemático del sistema en estudio.

La respuesta térmica es necesaria para estimar el coeficiente de transferencia de calor y para validar el modelo matemático.

El flujo de calor en la superficie en contacto con el chorro de agua de la probeta Jominy fue estimado resolviendo el problema inverso de conducción de calor (IHCP) con la técnica secuencial de especificación de la función (SFS) en una dimensión. El programa de computo que resuelve el IHCP fue verificado en un estudio anterior [1]. En particular, el trabajo experimental se diseñó para mejorar la estimación de esta condición de frontera.

Se utilizó acero AISI 304 (que no presenta transformación de fase) para estimar el coeficiente de transferencia de calor que será utilizado para simular el proceso de un acero que sí transforma (AISI 1045 y 4140), esto porque el coeficiente de transferencia de calor es independiente del acero que se utiliza (según la referencia [2]). Sin embargo, se encontró que para el acero AISI 4140 la predicción de la respuesta térmica se aproxima más a la respuesta experimental si se utiliza el coeficiente estimado con resultados del ensayo de este mismo acero.

2

Capítulo 2

Antecedentes

2.1 Tratamientos térmicos

Los tratamientos térmicos tienen por objeto mejorar las propiedades y características de los aceros [3-4]. Consisten en calentar y mantener las piezas o herramientas de acero a temperaturas adecuadas durante un cierto tiempo y enfriarlas luego en condiciones convenientes. De esta forma, se modifica la estructura microscópica de los aceros.

El tiempo y la temperatura son los factores principales y hay que fijarlos siempre de antemano, de acuerdo con la composición del acero, la forma y el tamaño de las piezas y las características que se desean obtener.

Los tratamientos térmicos más usados son: recocido, temple, normalizado y revenido. Recocido. Con este nombre se conocen varios tratamientos cuyo objetivo principal es disminuir la dureza del acero; otras veces también se desea, además, regenerar su estructura o eliminar tensiones internas. Consisten en calentamientos a temperaturas adecuadas, seguidos generalmente de enfriamientos lentos. Las diferentes clases de recocidos que se emplean en la industria se pueden clasificar en tres grupos: recocidos con austenización completa, recocidos subcríticos y recocidos con austenización incompleta.

Normalizado. Este tratamiento consiste en un calentamiento a temperatura ligeramente más elevada que la crítica superior, seguido de un enfriamiento en aire quieto. De esta forma, se deja el acero con una estructura y propiedades que arbitrariamente se consideran como

normales y características de su composición. Se suele utilizar para piezas que han sufrido trabajos en caliente, trabajos en frío, enfriamientos irregulares o sobrecalentamientos y también sirve para destruir los efectos de un tratamiento anterior defectuoso. Por medio del normalizado, se eliminan las tensiones internas y se uniformiza el tamaño de grano del acero.

Temple. El temple tiene por objetivo endurecer y aumentar la resistencia mecánica de los aceros. Para ello se calienta el acero a una temperatura ligeramente más elevada que la crítica superior y se enfría luego más o menos rápidamente (según la composición y el tamaño de la pieza) en un medio conveniente (agua, aceite, etc.).

Revenido. Es un tratamiento que se da a las piezas de acero que han sido previamente templadas. Con este tratamiento, que consiste en un calentamiento a una temperatura inferior a la crítica, se disminuye la dureza y resistencia de los aceros templados, se eliminan las tensiones creadas en el temple y se mejora la tenacidad, quedando además el acero con la dureza o resistencia deseada.

Tratamientos isotérmicos de los aceros. Recibe este nombre un grupo de tratamientos, en los que el enfriamiento de las piezas no se hace de una forma continua, sino que se interrumpe o modifica a diversas temperaturas durante ciertos intervalos en los que el material permanece a temperatura constante durante un tiempo, mismo que depende de la composición del acero, de la masa de las piezas y de los resultados que se quieren obtener.

2.2 Templabilidad

La templabilidad es la susceptibilidad al endurecimiento por enfriamiento rápido y depende de los elementos de aleación y del tamaño de grano del acero [5]. Los elementos que más favorecen la penetración de temple son el manganeso, el molibdeno y el cromo.

El comportamiento de los aceros en el temple es de gran importancia para decidir su utilización.

Se han desarrollado numerosos procedimientos para caracterizar la templabilidad de los aceros. Los más utilizados son: 1) el examen de la fractura de barras templadas, 2) el estudio de las curvas de dureza o de resistencia en el interior de barras templadas, 3) el ataque químico de las secciones transversales templadas, 4) la determinación de las zonas de 50% de martensita, y 5) el ensayo Jominy.

1. Examen de las fracturas

Consiste en preparar una serie de barretas cilíndricas, entalladas, de 19.05 mm de diámetro y 125 mm de longitud, que son templadas en agua a temperaturas de 790°, 815°, 850° y 875 °C. Después se rompen por choque y se examinan las fracturas.

Por la diferencia entre el grano de fractura, generalmente grueso en la zona central (sin templar), y fino el de la exterior (templado), se conoce fácilmente la profundidad de temple alcanzada en cada caso.

2. Curvas de dureza del temple de probetas redondas de diferentes diámetros

Consiste en determinar la dureza después del temple en el interior de redondos de acero.

Se comienza preparando por forja o laminación, una serie de barras de diversos diámetros, que después de un ligero torneado se dejan a medidas escalonadas, por ejemplo de 25, 50, 75, 100, 150 y 250 mm de diámetro. Luego se templan esos redondos y a continuación se cortan las barras y se determinan las durezas en la sección transversal desde la periferia al centro. Con los resultados obtenidos se pueden, finalmente, construir las curvas de dureza, llamadas generalmente curvas U que caracterizan a cada tipo de acero.

3. Ataque químico de las secciones templadas

Consiste en observar las secciones transversales de barras de aceros, rotas después del temple y atacadas posteriormente con ácido.

Se comienza entallando las barras, luego se templan y se rompen y se generan planos por rectificado sobre las secciones transversales. A continuación se atacan esas secciones con ácido nítrico al 5 % (Nital-5), observándose que las partes que han quedado sin templar se colorean, y quedan en cambio blancas y son muy poco atacadas las templadas.

4. Determinación de la zona con 50 % de martensita

Se suelen emplear cuatro métodos principales:

 El método metalográfico, que es el más utilizado para determinar con precisión las zonas con 50 % de martensita.

2. El método de fractura y ataque con ácido, que conviene para aceros en los que la transición de la zona dura a la zona blanda (50 a 55 Rockwell-C) es brusca.

6

 También se hace esa determinación midiendo una serie de durezas en una sección transversal del acero templado y observando luego dónde se obtiene una dureza determinada que corresponde al 50% de martensita.

4. Otro método para hacer esa determinación consiste en buscar el punto de inflexión de las curvas de dureza de las secciones transversales, que suele corresponder con bastante aproximación precisamente a la zona de 50% de martensita.

2.3 Ensayo Jominy

El ensayo Jominy [6] fue descrito por primera vez por sus creadores W. E. Jominy y A. L. Boegehold. Consiste en templar una probeta cilíndrica de 25.4 mm (1 in.) de diámetro y 101.6 mm (4 in.) de longitud (Figura 2.1), por medio de un chorro de agua que enfría solamente la base inferior (Figura 2.2). La temperatura del agua debe estar entre 20 y 25°C. La colocación de la probeta en el aparato de enfriamiento debe ser muy rápida para evitar que la temperatura del acero descienda demasiado antes de iniciarse el temple por la base, debiendo efectuarse esta operación en menos de cinco segundos. La prueba debe de durar por lo menos diez minutos. Terminando el enfriamiento se planean dos generatrices de la probeta situadas a 180°, rebajando 0.5 mm de profundidad aproximadamente, debiendo evitarse que en esta operación se caliente la probeta por arriba de 100°C. Luego se mide la dureza en la línea central de la superficie plana, en puntos situados a intervalos de 1/16 de pulgada, y se grafican los valores obtenidos.







1

Figura 2.2: Prueba Jominy.

2.4 Modelos matemáticos existentes

Los tratamientos de temple son una parte fundamental de los procesos de tratamiento térmico de los aceros. Para realizarlo el acero es llevado a la temperatura de austenización, manteniéndolo un tiempo hasta que transforme a fase austenita por completo, para ser inmediatamente expuesto a un medio de enfriamiento (agua, aceite o salmuera entre otros). Dependiendo de la evolución del campo de temperaturas dentro del acero, diferentes tipos de transformaciones de fase ocurren lo que resulta en una variedad de microestructuras, deformaciones, distribución de esfuerzos y durezas. Entonces uno se puede preguntar: ¿qué condiciones de enfriamiento se necesitan para obtener una microestructura, deformación, dureza y distribución de esfuerzos necesarios para alguna aplicación en particular? Para responder esto se necesita el desarrollo de modelos matemáticos eficientes que puedan ayudar a determinar los parámetros óptimos del proceso de temple. Pero todo esto serviría de poco o nada si no se cuenta con las condiciones de frontera de transferencia de calor debido a que estas determinaran el campo de temperaturas dentro del acero.

Numerosos modelos matemáticos han sido desarrollados para analizar los procesos térmicos. Hakberg y Högberg [2] desarrollaron un modelo para determinar temperatura y microestructura basados en diagramas TTT y expresiones de velocidad de nucleación durante un temple; lo aplicaron para predecir cambios de fase y templabilidad en la probeta Jominy. Las condiciones de frontera fueron determinadas por ecuaciones empíricas. Chaires R. [7] utilizó el ensayo Jominy para estimar el coeficiente de transferencia de calor convectivo mediante la medición de la respuesta térmica durante el enfriamiento de la probeta que, de acuerdo con sus resultados, debe obtenerse lo más cercano a la superficie que ésta sujeta a la transferencia de calor por convección forzada. Hömberg [8] realizo un estudio teórico (no estimó el coeficiente de transferencia de calor y no validó su modelo) con un algoritmo numérico para simular el ensayo Jominy y construir diagramas CCT. El cálculo de la transformación de fase está basado en la regla de aditividad para la transición de austenita-perlita y la ecuación de Johnson-Mehl. Chen *et al.* [9] estimaron la historia de

temperatura para posteriormente relacionar la rapidez de enfriamiento con las propiedades mecánicas. El propósito de su trabajo fue estimar la densidad de flujo de calor en la superficie templada de la probeta Jominy mediante el método de gradiente conjugado en 2D. Ellos encontraron que el análisis inverso con este método, es conveniente para la aplicación de un enfriamiento rápido como son los procesos de temple donde la distribución de temperaturas de superficie o densidad de flujo de calor pueden ser estimadas fácilmente. Hernández et al. [1] reportan valores calculados de la condición a la frontera de transferencia de calor en la probeta Jominy. Su procedimiento de calculo incluye la solución del problema inverso de conducción de calor aplicando el método de Beck. Los materiales que usaron fueron seleccionados para evitar los efectos de la recalescencia asociados con transformaciones de fase. Encontraron que las pérdidas de calor a través de la sección lateral de la probeta necesitan ser consideradas para una correcta predicción de la respuesta térmica. Le Mason et al. [10] utilizaron un paquete comercial para simular el ensayo Jominy. Usando su modelo encontraron que los ciclos térmicos calculados concuerdan aceptablemente con los medidos experimentalmente; sin embrago, los valores de dureza predichos son significativamente diferentes a los medidos. Considerando esta discrepancia realizaron un análisis de sensibilidad enfocado en los parámetros que afectan al perfil térmico, microestructural y de dureza. Su análisis confirmó que un modelado eficiente del desarrollo microestructural durante un tratamiento térmico implica el conocimiento preciso de los parámetros (coeficiente de transferencia de calor, emisividad y calor latente). Le Mason et al. [11] estimaron el coeficiente de transferencia de calor utilizando un método de regularización iterativo en 2D. Este coeficiente es considerado como una función del tiempo, del radio y de la temperatura de superficie. El

Capítulo 3

Procedimiento experimental

La respuesta microestructural en la probeta Jominy es una función de la respuesta térmica que se produce durante el ensayo. La construcción de un modelo matemático para simular este comportamiento requiere que sean estimadas las condiciones a la frontera de la ecuación de calor que gobierna al sistema; la verificación del modelo necesita de valores experimentales para realizar comparaciones con los resultados computacionales. Así, el trabajo experimental incluyó la medición de la respuesta térmica; la medición de durezas y la caracterización de la microestructura.

La probeta Jominy tiene una frontera aislada (el eje de simetría de la probeta) y tres donde existe transferencia de calor: 1) por la parte baja, que está en contacto con el chorro de agua y que es por donde se produce el máximo flujo de calor, 2) por la parte superior de la probeta y 3) en la superficie lateral de la probeta; las pérdidas de calor en éstas dos últimas superficies son por radiación y convección natural. Las fronteras de la parte superior y de la superficie lateral que están en contacto con el medio ambiente pueden ser estimadas por medio de correlaciones de convección natural existentes en la literatura y cálculos de radiación. La frontera de la parte baja de la probeta es la más crítica y no existen correlaciones para estimarla. El flujo de calor en esta superficie puede ser estimado con el programa de cómputo CONTA C, que resuelve el IHCP unidireccional para un cilindro sólido. Como el enfriamiento de la probeta Jominy es bidimensional (en la dirección axial y radial) se ha implementado una cubierta de acero al carbono en la superficie lateral y otra de lana mineral en la parte superior para tratar de eliminar las pérdidas de calor laterales; con esto se esperaba que el problema de transferencia de calor se volviera unidireccional y así poder aplicar correctamente CONTA. Como esto no se logro se tuvieron que tomar en cuenta las pérdidas de calor lateral.

3.1 Probetas

Se maquinaron probetas Jominy (25.4 mm de diámetro por 101.6 mm de altura) a partir de barras de acero de 1 1/8 pulgadas de diámetro. Los materiales fueron acero inoxidable austenitico AISI 304, acero al carbono AISI 1045 y acero al cromo molibdeno AISI 4140. Las composiciones de los aceros utilizados se muestran en la Tabla 3.1.

Tabla 3.1. Composición química de los aceros AISI 304 [12], AISI 1045 [13] y AISI 4140 [13].

	%С	%Mn	%P	%S	%Cu	%Cr	%Si	%Mo	
AISI 304	0.08	2	0.045	0.03	-	19	1	-	-
AISI 1045	0.44	0.81	0.035	0.037	0.12	0.14	0.28	0.04	
AISI 4140	0.40	0.85	0.02	0.02	0.00	1.05	0.20	0.30	

Las probetas se instrumentaron con termopares tipo K, con cubierta de inconel, de 1/16 de pulgada de diámetro. Para colocar los termopares se maquinaron cuatro barrenos a lo largo de cada probeta (Figura 3.1) a una profundidad de 12.70 mm (es decir, sobre el eje de la probeta) con un diámetro de 1/16 de pulgada. Las posiciones de los barrenos para cada probeta, así como la identificación de éstas se muestran en la Tabla 3.2. Los barrenos

están separados 90° entre sí, para disminuir el impacto sobre la continuidad física de la probeta.



Figura 3.1: Posición de los barrenos a lo largo de la probeta Jominy 4_1045 (todas las dimensiones están en mm).

Nombre de la probeta	Material	Posición de	Posición de	Posición de	Posición de
		barreno 1	barreno 2	barreno 3	barreno 4
		(mm)	(mm)	(mm)	(mm)
Probeta 1_304	AISI 304	2	15	25	50
Probeta 2_304	AISI 304	5	12	25	50
Probeta 4_1045	AISI 1045	2	10	25	50
Probeta 5_4140	AISI 4140	2	10	25	50
Probeta 6 _4140	AISI 4140	2	10	25	50

Tabla 3.2. Identificación de las probetas y posición de los barrenos.

Dispositivos extras. Para sostener a la probeta Jominy durante el calentamiento, austenizado y enfriamiento se utilizó una guía de acero inoxidable AISI 304, de 12.7 mm de diámetro y 120 mm de longitud. Con el fin de obtener un flujo de calor unidireccional algunas probetas fueron protegidas con un tubo (cubierta) de acero al carbono para minimizar las perdidas de calor lateral (Figura 3.2)



Figura 3.2: Cubierta para minimizar las pérdidas de calor laterales.

3.2 Equipo.

Horno. Se utilizó un horno de resistencia para el austenizado de las probetas Jominy. El horno es precalentado hasta unos 700 °C, entonces, la probeta es colocada dentro con la ayuda de un soporte que la hace quedar suspendida en una posición constante. El horno se abre lateralmente dejando a la probeta suspendida para que pueda bajar hasta el chorro de agua sin ninguna dificultad.

Dispositivo para el ensayo Jominy. El dispositivo Jominy consta de un tanque con una bomba que conserva la presión del agua para mantener al chorro constante que enfría a la probeta. El dispositivo se muestra en la Figura 3.3



Figura 3.3. Dispositivo empleado para el ensayo Jominy.

3.3 Medición de la respuesta térmica.

Se realizaron 6 pruebas Jominy con el arreglo de termopares mostrado en la Figura 3.1. Cada probeta fue introducida dentro del horno. Una vez que la probeta alcanzó la temperatura deseada se mantuvo a ésta por 15 minutos para homogeneizar la temperatura y/o austenizar; entonces el horno fue retirado y la probeta se bajó con la ayuda de la guía para ser enfriada por la parte baja con un chorro de agua. Mientras esto ocurría las respuestas térmicas en los puntos donde se encontraban los termopares, fueron adquiridas por un adquisidor de datos TempScan 1100 conectado a una computadora con el software *Chartview*. En otros experimentos se utilizó una tarjeta de adquisición de datos marca Keitley, modelo SmartLink y una computadora con el software *Netacq* versión 2.0. Cada probeta permaneció sobre el chorro de agua durante más de 10 minutos.

Las pruebas 1_304 y 2_304 se realizaron con la probeta 1_304. En la prueba 1_304 no se utilizó la cubierta para la probeta, mientras que en la prueba 2_304 sí se utilizo. La prueba 3_304 se realizó con la probeta 2_304 utilizando la cubierta. Las pruebas 4_1045, 5_4140 y 6_4140 se realizaron con las probetas 4_1045, 5_4140 y 6_4140 respectivamente (Tabla 3.3).

Probeta utilizada		Observaciones		
1_304	1_304	Prueba estándar		
2_304	1_304	Con cubierta lateral y superior		
3_304	2_304	Con cubierta lateral y superior		
4_1045	4_1045	Prueba estándar		
5_4140	5_4140	, Prueba estándar		
6_4140	6_4140	Prueba estándar		

Tabla 3.3. Probetas utilizadas para cada prueba.

3.4 Determinación de microestructura y dureza final.

Una vez finalizados los ensayos, las probetas 4_1045, 5_4140 y 6_4140 fueron seccionadas transversalmente (en la posición de los termopares, en el plano r- θ) para medir su dureza. La máquina que se utilizó fue un durómetro Macromet^H Hardness tester con identador de diamante aplicando una carga de 150 kg. En esas mismas posiciones se

realizaron preparaciones metalográficas (desbaste y pulido); para revelar la microestructura final se utilizo una solución de Nital 2. Se utilizó un microscopio óptico Olympus PMG3 conectado a una computadora con el software Image-Pro Plus para analizar y tomar fotografías de las microestructuras.

Capítulo 4

Resultados experimentales

4.1 Respuesta térmica

Las respuestas térmicas obtenidas durante la adquisición de datos para cada prueba presentaron interferencia (ruido) por lo que se tuvo que aplicar una técnica para eliminar los datos erróneos. Esta técnica consistió en calcular la primera derivada de la respuesta térmica y eliminar el dato anterior de temperatura y tiempo correspondiente a un valor positivo de la derivada. Este proceso se automatizó en un programa de cómputo auxiliar. El intervalo de tiempo con el que fueron adquiridos los datos fue de 0.1 segundos para las pruebas con las probetas fabricadas de acero AISI 304 y AISI 1045. Para las que fueron realizadas con probetas fabricadas de acero AISI 4140 la velocidad de adquisición fue variable debido a que se utilizó el segundo sistema de adquisición altas, la prueba 6_4140 fue corrida con un solo termopar.

Las Figuras 4.1 a 4.5 muestran las respuestas térmicas (ya filtradas) obtenidas en las pruebas (por facilidad en la visualización no se grafican todos los datos). La temperatura obtenida con el termopar más cercano a la superficie en contacto con el chorro es la que disminuye mas rápidamente (debido a que la eficiencia de extracción de calor en este punto es mayor que en las otras posiciones).



Figura 4.1: Respuesta térmica experimental de la probeta 1_304 de acero

AISI 304 (prueba estándar)



Figura 4.2: Respuesta térmica experimental de la probeta 1_304 de acero

AISI 304 (prueba con cubierta lateral y superior)



Figura 4.3: Respuesta térmica experimental de la probeta 2_304 de acero







AISI 1045 (prueba estándar)


Figura 4.5: Respuesta térmica experimental de la probeta 5_4140 de acero AISI 4140 (prueba estándar)

La respuesta térmica de la Figura 4.4 y 4.5 en la posición de 10 y 25 mm presentan un cambio en la pendiente aparentemente por un cambio de fase, como es esperado en una acero que transforma. A 10 mm en la Figura 4.4 posiblemente se trate de una transformación del termopar y no de la probeta debido a que la temperatura a la que se presenta es muy baja. En general hubo problemas con estos dos termopares como es visto en la Figura 4.5, en que se perdió una cantidad de datos.

En la Figura 4.6 se comparan las pruebas 2_304 y 3_304 en donde las probetas utilizadas tuvieron una cubierta lateral y superior (además de las mismas condiciones de enfriamiento). En esta figura se ve que existe reproducibilidad del experimento, debido a que la historia térmica para ambas probetas es la misma para posiciones iguales de los termopares.



Figura 4.6: Comparación de las pruebas 2_304 (símbolos abiertos) y 3_304

(símbolos cerrados)

Comparando la prueba 1_304 (prueba estándar) con la prueba 2_304 (prueba con cubierta lateral y superior) en la Figura 4.7, se aprecia que las pérdidas laterales de calor por convección y radiación de la probeta con cubierta disminuyen significativamente, esto se acentúa en posiciones mas alejadas de la superficie en contacto con el chorro de agua. La respuesta térmica en la posición de 2 mm para ambas pruebas es similar sin importar que la probeta tenga o no cubierta lateral, es decir, en este punto el flujo de calor es en una dimensión, en la dirección z; las pérdidas de calor en la posición radial son prácticamente nulas.



Figura 4.7: Comparación de las pruebas 1_304 (prueba estándar, símbolos abiertos) y 2_304 (prueba con cubierta lateral y superior, símbolos cerrados)

Comparando las pruebas 5_4140 y 6_4140 en la Figura 4.8 se comprueba que también existe reproducibilidad de la respuesta térmica para un acero que transforma.



Figura 4.8: Comparación de las pruebas 5_4140 (símbolos abiertos) y 6_4140 (símbolos cerrados). Prueba estándar.

4.2 Microestructura y dureza final

Las Figuras 4.9 a 4.13 muestran la respuesta microestructural de la probeta Jominy de acero 1045 en las posiciones de los termopares. En la superficie y a la distancia de 2 mm sólo se produce martensita con una alta dureza característica de ella (Tabal 4.1). A 10 mm se observa una pequeña porción de ferrita (color blanco) esto indica que durante el enfriamiento éste punto tocó la nariz del diagrama CCT donde la formación de esta fase es mínima. Para las distancias de 25 y 50 mm las fases formadas fueron ferrita y perlita gruesa

debido al enfriamiento lento en estos puntos con la subsiguiente disminución de la dureza (Tabla 4.1). La microestructura alcanzada en el acero 4140 en la superficie y a una distancia de 2 mm es de martensita. A distancias mayores de 2 mm debe de existir una mezcla de bainita y martensita (que no es posible distinguir) ya que las durezas que se observaron en estas posiciones (Tabla 4.2) no corresponden a martensita pura. Por la alta templabilidad del acero 4140 no se esperaba que se presentara perlita o ferrita como se a-precia en las figuras mencionadas.



Figura 4.9: Microestructura presente en la superficie de la probeta Jominy de acero 1045 (prueba 4 1045).



Figura 4.10: Microestructura presente a 2 mm de la superficie de la probeta Jominy de acero 1045 (prueba 4_1045).



Figura 4.11: Microestructura presente a 10 mm de la superficie de la probeta Jominy de acero 1045 (prueba 4_1045).



Figura 4.12: Microestructura presente a 25 mm de la superficie de la probeta Jominy de acero 1045 (prueba 4_1045).



Figura 4.13: Microestructura presente a 50 mm de la superficie de la probeta Jominy de acero 1045 (prueba 4_1045).



Figura 4.14: Microestructura presente en la superficie de la probeta Jominy de acero 4140

(prueba 5_4140).



Figura 4.15: Microestructura presente a 2 mm de la superficie de la probeta Jominy de acero 4140 (prueba 5_4140).



Figura 4.16: Microestructura presente a 10 mm de la superficie de la probeta Jominy de acero

4140 (prueba 5_4140).



Figura 4.17: Microestructura presente a

25 mm de la superficie de la probeta Jominy de acero 4140 (prueba 5_4140).



Figura 4.18: Microestructura presente a 50 mm de la superficie de la probeta Jominy de acero

4140 (prueba 5_414).

Tabla 4.1: Durezas experimentales en laprobeta Jominy de acero 1045 (prueba 4_1045)

Tabla 4.2: Durezas experimentales en la probeta Jominy de acero 4140 (prueba 5 4140)

Distancia	Dureza	Distancia	Dureza
(mm)	HRC	(<i>mm</i>)	HRC
0	61.6	0	58.1
2	50.8	2	56.3
10	30.8	10	54.3
25	22.7	25	40.9
50	22.1	50	32.5

Capítulo 5

Estimación del flujo calórico en la base de la

probeta

Con la respuesta térmica experimental obtenida en el ensayo Jominy se estima el flujo de calor en la base de la probeta (condición de frontera) resolviendo el problema inverso de conducción de calor (IHCP). Para una óptima estimación de este flujo se utilizaron los datos de la respuesta térmica más cercana a la base de la probeta. La condición de frontera fue determinada para las pruebas 1_304, 3_304 y 6_4140.

El programa de computo que resuelve el IHPC fue verificado en un estudio anterior [1]. Ellos utilizaron un coeficiente de transferencia de calor conocido para resolver el problema directo de transferencia de calor (DHCP), luego tomaron la respuesta térmica en un punto dado dentro de la probeta para obtener el coeficiente mediante el IHCP; éste coeficiente lo utilizaron para resolver nuevamente el problema directo, comparando estos resultados con los obtenidos anteriormente verificaron el programa.

Para estimar el flujo de calor se utilizaron valores interpolados (haciendo una interpolación lineal con el programa SigmaPlot) de 0.1, 0.2 y 0.4 s de la respuesta térmica de las Pruebas 1_304, 3_304 y 6_4140 en la posición del termopar de 2, 5 y 2 mm respectivamente; con estos datos se resolvió el problema inverso de conducción de calor (IHCP).

Los resultados de flujo de calor estimado en función de la temperatura de superficie estimada para diferentes valores de tiempo futuro, r, se muestran en la Figura 5.1.



Figura 5.1: Efecto del numero de pasos de tiempo futuros, r, sobre la estimación del flujo de calor de superficie. Δt =0.2, N1=5, N2=15. Prueba 3_304

(con cubierta lateral y superior).

Conforme el valor de r aumenta, la curva de flujo de calor se suaviza pero el error entre la temperatura calculada y experimental en la posición del termopar aumenta y el valor máximo de flujo de calor disminuye. Para r = 2, la solución es muy poco estable.

En la Figura 5.2, se muestra que el flujo de calor de superficie es afectado por la distribución de nodos en las dos regiones de la probeta. En la región N1 no es necesario una distribución de nodos mayor a cinco, en la región N2 el numero de nodos debe ser mayor (15 el mejor) para evitar que se genere un sesgo hacia a la izquierda en la curva.



Figura 5.2: Efecto de la distribución de nodos sobre la estimación del flujo de calor de superficie. Δt=0.2, r=4. Prueba 3_304 (con cubierta lateral y superior).

La estimación del flujo de calor de superficie se ve afectada por la velocidad de adquisición de datos como es visto en la Figura 5.3. Con un intervalo de tiempo de 0.1 segundos los resultados de flujo de calor oscilan demasiado, conforme se aumenta el intervalo esas oscilaciones disminuyen pero el error entre la temperatura calculada por el IHCP y la experimental en la posición del termopar aumenta (Figura 5.4).



Figura 5.3: Efecto del intervalo de tiempo de adquisición de datos en el flujo de calor de superficie. r=4, N1=5, N2=15. Prueba 3_304 (con cubierta lateral y superior).

La mejor estimación del flujo de calor de superficie para la prueba 3_304 se muestra en la Figura 5.5. En las Figuras 5.6 y 5.7 se muestra la mejor estimación del flujo de calor para las pruebas 1_304 y 6_4140 respectivamente.



Figura 5.4: Error entre la temperatura calculada por el IHCP y la experimental en la

posición del termopar.



Figura 5.5: Flujo de calor de superficie en la parte baja d ela probeta Jominy con r=4, N1=5, N2=15 y Δt =0.2. Prueba 3_304 (con cubierta lateral y superior.



Figura 5.6: Flujo de calor de superficie en la parte baja de la probeta Jominy con r=3,

N1=5, N2=15 y ∆t=0.2. Prueba 1_304 (prueba estándar).





N1=5, N2=15 y ∆t=0.2. Prueba 6_4140 (prueba estándar).

La pérdida de calor para los primeros 2 mm es unidireccional, es decir, el flujo de calor lateral en esta posición de la probeta es mínimo. Esto es visto en la Figura 5.8 donde son comparados los flujos de calor para las pruebas 1_304 y 3_304: la estimación de flujo de calor para la prueba estándar (1_304) y para la prueba con cubierta lateral y superior (3 304) son similares.

Cuando se resuelve el IHCP para un acero que no transforma utilizando la respuesta térmica medida con un termopar más alejado de la superficie templada, la curva de flujo de calor estimado suele presentar un sesgo hacia la izquierda, ademas de que es mucho mayor, esto debido a que el problema es resuelto en una dimensión siendo que mientras más alejado se encuentre de la superficie el problema se vuelve más bidimensional [1]. Aunque para el acero AISI 4140 el IHCP fue resuelto para una posición más cercana a la superficie este presenta una capa de óxido mayor que la de un acero inoxidable, provocando un aumneto en las pérdidas laterales de calor por radiación volviéndolo un problema bidimensional más cercano a la superficie, por ésta causa el valor estimado del flujo de calor es mayor para este acero, como en le caso cuando se utiliza la respuesta térmica en una posición más alejada de la superficie.





 $6_{4140} \text{ con N1=5, N2=15, } \Delta t=0.2 \text{ y r=4.}$

Capítulo 6

Simulación

6.1 Modelo matemático

Un modelo matemático para simular el ensayo Jominy requiere ser formulado en coordenadas cilíndricas en dos dimensiones (Figura 6.1), en estado inestable y propiedades termofísicas variables.





A. Respuesta térmica

La formulación matemática para el problema de conducción de calor dentro de la probeta Jominy en estado inestable considerando flujo bidimensional de calor está dada por la ecuación [14]:

$$\rho C p \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right) = - \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \left(-k \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left(-k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right\} + q$$
[6.1]

donde q es el calor que se genera durante la descomposición de la austenita a perlita o a martensita.

Las condiciones inicial y de frontera necesarias para resolver esta ecuación son: i) Condición inicial. En el tiempo igual a cero, la probeta tiene una temperatura uniforme:

$$T(r,z) = T_0$$
 $t = 0$ $0 \le r \le r_0$ $0 \le z \le L$ [6.2]

i i) Frontera aislada en el eje de simetría de la probeta (r=0). No existe flujo de calor a través de esta frontera:

$$-k\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \qquad t > 0 \qquad r = 0 \qquad 0 \le z \le L \qquad [6.3]$$

i i i) Frontera convectiva en la superficie en contacto con el aire ($r=r_0$). Flujo de calor por radiación y convección natural:

$$-k\frac{\partial T}{\partial r} = -h_r(T_{\infty} - T) \qquad t > 0 \qquad r = r_0 \qquad 0 \le z \le L \qquad [6.4]$$

i v) Frontera convectiva en la parte baja de la probeta en contacto con el chorro de agua
 (z=0). Flujo de calor por radiación y convección forzada:

$$-k\frac{\partial T}{\partial z} = -h\left(T_{\infty} - T\right) \qquad t > 0 \qquad z = 0 \qquad 0 \le r \le r_0$$
[6.5]

v) Frontera convectiva en la parte superior de la probeta en contacto con el aire (z=L).
 Flujo de calor por radiación y convección natural:

$$-k\frac{\partial T}{\partial z} = -h_z(T_{\infty} - T) \qquad t > 0 \qquad z = L \qquad 0 \le r \le r_0$$
[6.6]

El término de "generación", q, se calcula a partir de la siguiente ecuación:

$$q = \rho \Delta H \frac{\Delta F}{\Delta t}$$
[6.7]

donde ΔF es el cambio de fracción transformada de perlita o martensita y ΔH el calor latente liberado.

B. Transformación de fase

La cinética de transformación de austenita a perlita es descrita por la ecuación de Avrami[15, 16]:

$$F_p = 1 - \exp\left[b(T)\theta_j^{n(T)}\right]$$
[6.8]

donde b(T) y n(T) son parámetros cinéticos del material dependientes de la temperatura. Suponiendo la fracción transformada de inicio y fin como $F_{in} = 0.01$ y $F_f = 0.99$ respectivamente, los parámetros son calculados como sigue [17, 18]:

$$n(T) = \frac{\ln\left[\frac{\ln(1 - F_{in})}{\ln(1 - F_{f})}\right]}{\ln\left(\frac{t_{in}}{t_{f}}\right)}$$
[6.9]

 $b(T) = -\frac{\ln(1 - F_{in})}{t_{in}^{n(T)}}$ [6.10]

 t_{in} y t_f son determinados como función de la temperatura a partir del correspondiente diagrama TTT como se muestra en la Figura 6.2.



Figura 6.2: Diagrama TTT donde se muestra la determinación de t_{in} y t_{f} .

El tiempo de transformación isotérmico θ_i es calculada a partir de:

 $\theta_i = \theta_i + \Delta t \tag{6.11}$

у

$$\theta_{j} = \left[\frac{\ln\left(\frac{1}{1-F^{(j-1)}}\right)}{b(T)}\right]^{1/n(T)}$$
[6.12]

donde Δt es el paso del tiempo corriente y θ_j el tiempo para alcanzar la fracción transformada previa como si se hubiera transformado isotérmicamente a la temperatura nueva.

La transformación a perlita inicia cuando la temperatura de un volumen dado ha cruzado la curva de inicio de transformación del diagrama TTT. Cuando la temperatura es igual o menor a Ms, la transformación de austenita a perlita cede su lugar a la transformación de austenita a martensita. La fracción de martensita es calculada con la ecuación de Koistinen-Marburger [17, 9]:

$$F_m = (1 - \exp[-\alpha(T_{Ms} - T)])(1 - F_p)$$
[6.13]

donde $\alpha = 1.10\text{E-2 K}^{-1}$, T_{Ms} es la temperatura de inicio de la transformación martensítica y F_p es la fracción de perlita formada. Esta ecuación tiene la desventaja de que no modela la irreversibilidad de la transformación de fase [8].

C. Dureza

Una vez que se conoce la respuesta térmica y la microestructura final, la dureza se estima con la regla de mezclas [19]:

$$Hv = X_M H_{VM} + X_B H_{VB} + (X_F + X_P) H_{V(F+P)}$$
[6.14]

Donde H_v es la dureza Vickers; X_M, X_B, X_F y X_P son la fracción de martensita, bainita, ferrita y perlita, respectivamente; H_{VB}, H_{VB}, y H_{VF+P} son la dureza de la martensita, bainita y la mezcla de la ferrita y perlita respectivamente. Para el cálculo de estas se usaron formulas empíricas [19] que son función de la composición del acero y de la velocidad de enfriamiento:

$$Hv_{M} = 127 + 949 C + 27 Si + 11 Mn + 8 Ni + 16 Cr + 21 \log Vr$$
[6.15]

$$Hv_{B} = -323 + 185 C + 330 Si + 153 Mn + 65 Ni + 144 Cr + 191 Mo$$

+ (89 + 53 C -55 Si - 22 Mn - 10 Ni - 20 Cr - 33 Mo) log Vr [6.16]

$$Hv_{(F+P)} = 42 + 223 C + 53 Si + 30 Mn + 12.6 Ni + 7 Cr + 19 Mo$$

$$+ (10 - 19 Si + 4 Ni + 8 Cr + 130 V) \log Vr$$
[6.17]

donde Vr es la velocidad de enfriamiento en grados Celsius por hora a 700 °C

Método de solución

La formulación matemática del problema de transferencia de calor y microestructural no tiene solución analítica por lo que se implemento una solución numérica con el método explicito de diferencias finitas [20]. El método consiste en efectuar un balance de calor en un elemento diferencial. La discretización del sistema se presenta en la Figura 6.3, en ella se aprecia que se requieren nueve ecuaciones para nueve nodos tipo diferentes que modelan el sistema.



Figura 6.3: Discretización de la probeta Jominy

Se requiere realizar un balance de energía para cada nodo con la ecuación general: Entrada + Generación = Salida + Acumulación

se considera que el flujo de calor va del centro y debajo de la probeta hacia fuera y hacia arriba de ella por lo que cada ecuación contará con entradas y salidas de calor (Figura 6.4), el termino de generación está dado por el calor liberado durante la transformación de fase y, como se trata de un enfriamiento continuo (sistema en estado inestable) existe en cada volumen el término de acumulación.



Figura 6.4: Volumen de control donde se muestran las entradas y salidas de calor.

El procedimiento de cálculo para resolver el problema se presenta resumido en el diagrama de flujo de la Figura 6.5





6.2 Validación del coeficiente de transferencia de calor de la base de la probeta

El coeficiente de transferencia de calor de la base de la probeta, fue calculado a partir de los resultados obtenidos de la estimación de flujo de calor del IHCP, con la relación:

$$h = -\frac{q}{\Delta T}$$
[6.18]

donde q es el flux de calor y ΔT la diferencia de temperaturas entre la superficie de la probeta y el medio.

La validación del coeficiente de transferencia de calor se realizó comparando los resultados experimentales con los simulados con el modelo. En la Figura 6.6 se graficó la prueba 3_304 (probeta de acero inoxidable con cubierta superior y lateral) y la respuesta térmica simulada sin tomar en cuenta las pérdidas de calor laterales. Experimentalmente no se logró la unidireccionalidad del flujo de calor aunque si se aproximó; esto se aprecia en la Figura 6.7 donde se graficó la respuesta térmica de la prueba 1_304 (prueba estándar) que presenta una velocidad de enfriamiento superior desviándose aun más de la simulación pero siempre la posición menos afectada es la más cercana a la superficie. Por lo tanto las pérdidas laterales fueron incluidas en la simulación. El coeficiente de transferencia de calor convectivo (hr y hz) para la superficie lateral fue calculado usando la siguiente correlación [21]:

$$Nu = 0.59(Gr \,\mathrm{Pr})^{0.25}$$
 [6.19]

donde Gr es el numero de Grashoff, Pr el numero de Prandtl y Nu el numero de Nusselt que está definido como:

$$Nu = \frac{hzL}{k}$$
[6.20]

donde L es la altura de la probeta y k la conductividad térmica del aire; de ésta ecuación fue estimado hz y hr. El componente de radiación fue calculado a partir de:

$$hrad = \varepsilon \left[\frac{\sigma \left(T^4 - T_f^4 \right)}{T - T_f} \right]$$
[6.21]

donde ε es la emisividad y σ es la constante de Stefan-Bolztmann, y se ha tomado un factor de visión de 1. El coeficiente total utilizado para estimar las pérdidas laterales es la suma del componente convectivo y de radiación:

$$h = hz + hrad$$
[6.22]

Los resultados obtenidos tomando en cuenta las pérdidas laterales se muestran en la Figura 6.8, donde se observa que los resultados experimentales son similares a los simulados por lo que el coeficiente estimado por medio del IHCP fue validado. Las Figuras 6.9 y 6.10 muestran la validación para el coeficiente estimado a partir de los datos experimentales de la prueba 5_4140 donde las pérdidas de calor laterales fueron incluidas. La respuesta térmica de la Figura 6.9 fue simulada sin el termino de generación de calor, en ella se puede observar que sin el efecto de la recalescencia la velocidad de enfriamiento es mayor. La Figura 6.10 muestra la respuesta térmica considerando la generación de calor de la transformación de fase en donde los resultados experimentales concuerdan más aceptablemente con los simulados.



Figura 6.6: Respuesta térmica simulada (líneas) y experimental de la prueba 3_304 (símbolos). En la simulación se utilizo el coeficiente de transferencia de calor estimado con la prueba 3_304 (prueba con cubierta lateral y superior).



Figura 6.7: Respuesta térmica simulada (líneas) y experimental (símbolos) de la prueba 1_304 (prueba estándar). En la simulación se utilizó el coeficiente estimado con la prueba 3_304. Las pérdidas de calor lateral no fueron incluidas.



Figura 6.8: Respuesta térmica simulada (líneas) y experimental (símbolos) de la prueba 1_304 (prueba estándar). En la simulación se utilizó el coeficiente estimado con la prueba 1_304. Las pérdidas de calor lateral fueron incluidas.



Figura 6.9: Respuesta térmica simulada sin generación de calor (líneas) y experimental (símbolos) de la prueba 5_4140. En la simulación se utilizó el coeficiente estimado con la





Figura 6.10: Respuesta térmica simulada (líneas) y experimental (símbolos) de la prueba 5_4140. En la simulación se utilizó el coeficiente estimado con la prueba 6_4140. Las pérdidas de calor lateral fueron incluidas.

6.3 Análisis de sensibilidad

Se realizó un análisis de sensibilidad del modelo matemático para conocer la influencia de algunas variables sobre la respuesta térmica y microestructural en la probeta Jominy. La Figura 6.11 muestra la respuesta térmica obtenida con los parámetros teóricos (tal y como se encuentran en la literatura). Este es el "escenario medio".



Figura 6.11: Respuesta térmica simulada de la probeta Jominy de acero AISI 1045 utilizando el coeficiente estimado con la prueba 1_304.

En la figura 6.12 se graficó la respuesta térmica para el escenario medio y para el caso en que no se toma en cuenta la generación de energía de transformación de fase de austenita a perlita ni de austenita a martensita. Cuando la energía generada durante la transformación de fase no es tomada en cuenta, la respuesta térmica no presenta recalescencia por lo que la probeta Jominy presenta un enfriamiento similar al de un acero que no transforma. En el escenario medio es visto que en puntos cercanos a la superficie que ésta en contacto con el chorro de agua la recalescencia prácticamente no se presenta debido a que la energía generada durante la transformación de fase es eliminada rápidamente por la alta eficiencia de extracción de calor, por consiguiente la dureza y microestructura son las mismas para ambos casos (con y sin generación de energía, Tabla 6.1 y 6.2). En posiciones alejadas de la superficie existe diferencia entre el escenario medio y la respuesta térmica sin generación de energía, en este la recalescencia si se presenta debido a que en estos puntos la extracción de calor es menor y como los perfiles de temperatura no son los mismos para los dos casos la dureza y microestructura tampoco lo son. Para el escenario medio, al tenerse una velocidad de enfriamiento menor, la dureza final es menor (Tablas 6.3, 6.4 y 6.5). La respuesta microestructural se presenta en las Figuras 6.13 y 6.14 en donde se observa que la fracción de perlita transformada en el escenario medio se retrasa mientras más recalescencia se presente. En la superficie la respuesta es la misma para ambos casos, escenario medio y sin generación de energía, pero cambia en puntos alejados. A la distancia de 2.03 mm la fracción de martensita se retrasa debido a la influencia de la generación de calor en puntos mas alejados a la superficie.



Figura 6.12: Comparación de la respuesta térmica simulada sin tomar en cuenta la generación de energía de transformación de fase (líneas discontinuas) y del escenario medio

(líneas con símbolos) de la probeta Jominy de acero AISI 1045.



Figura 6.13: Comparación de la respuesta microestructural simulada sin tomar en cuenta la generación de energía de transformación de fase (líneas continuas) y del escenario medio (líneas discontinuas) de la probeta Jominy de acero AISI 1045..



Figura 6.14: Comparación de la respuesta microestructural simulada sin tomar en cuenta la generación de energía de transformación de fase (líneas continuas) y del escenario medio (líneas con discontinuas) de la probeta Jominy de acero AISI 1045.

Se ha visto que cambiando la generación de energía se modifica la respuesta térmica, microestructural y de dureza a excepción de aquellos puntos que están cercanos a la superficie. Esto se sigue comprobando con las Figuras 6.15, 6.16 y 6.17 donde se presentan los casos en que el calor latente (ΔH) es modificado en una fracción de ± 0.2 ; con un aumento de este valor, la velocidad de enfriamiento es menor por lo que se obtiene una respuesta microestructural más lenta (debido a que la generación de calor aumenta) y una dureza menor. La respuesta térmica no se ve afectada si se modifica la temperatura de inicio de transformación de la martensita, Figura 6.18. Nuevamente esto es debido a la eficiencia de extracción de calor, ya que sin importar si la generación de energía ocurre más temprano o más tarde, esta es liberada rápidamente. La transformación de austenita a perlita no se ve afectada significativamente con el aumento de *Ms* (Figura 6.19), sólo se ve ligeramente afectada por una temprana liberación de energía (recalescencia). El aumento de *Ms* hace que la transformación martensitica se adelante y se produzca más martensita, con el correspondiente aumento de la dureza (Figura 6.20, Tabla 6.1 y 6.2); esto es debido a que al haber una mayor diferencia entre la temperatura ambiente y Ms se puede producir más fase martensítica.

Parámetro	Fracción de perlita	Fracción de martensita	Dureza HRC
Escenario medio	0.00	0.96	58.69
q = 0	0.00	0.96	58.69
$q + \Delta q (\Delta H=1.2* \Delta H)$	0.00	0.96	58.69
q - Δq (ΔH=0.8* ΔH)	0.00	0.96	58.69
Ms = 423	0.00	0.99	59.78
Ms = 303	0.00	0.95	58.32
n + 1	0.00	0.96	58.69
n - 1	0.00	0.96	58.69
b + 1	0.00	0.96	58.69
b - 1	0.00	0.96	58.69

Tabla 6.1. Predicción de microestructura y dureza en la superficie de la probeta Jominy de acero AISI 1045 como función de parámetros cinéticos y termodinámicos.
Tabla 6.2. Predicción de microestructura y dureza en la posición de 2 mm de la probeta

 Jominy de acero AISI 1045 como función de parámetros cinéticos y termodinámicos.

Parámetro	Fracción de perlita	Fracción de martensita	Dureza HRC
Escenario medio	0.00	0.95	58.10
q = 0	0.00	0.95	58.10
q + Δq (ΔH=1.2* ΔH)	0.00	0.95	58.10
q - Δq (ΔH=0.8* ΔH)	0.00	0.95	58.10
Ms = 423	0.00	0.99	59.45
Ms =303	0.00	0.94	57.72
n + 1	0.02	0.94	57.94
n - 1	0.00	0.96	58.47
b + 1	0.01	0.94	57.80
b - 1	0.00	0.95	58.10

 Tabla 6.3. Predicción de microestructura y dureza en la posición de 10 mm de la probeta

 Jominy de acero AISI 1045 como función de parámetros cinéticos y termodinámicos.

Parámetro	Fracción de perlita	Fracción de martensita	Dureza HRC
Escenario medio	0.99	0.00	24.23
q = 0	0.99	0.00	24.29
q + Δq (ΔH=1.2* ΔH)	0.99	0.00	24.22
q - Δq (ΔH=0.8* ΔH)	0.99	0.00	24.27
Ms = 423	0.99	0.00	24.25
Ms = 303	0.99	0.00	24.25
n + 1	0.99	0.00	24.10
n - 1	0.99	0.00	24.28
b + 1	0.99	0.00	24.17
b - 1	0.99	0.00	24.26

 Tabla 6.4. Predicción de microestructura y dureza en la posición de 25 mm de la probeta

 Jominy de acero AISI 1045 como función de parámetros cinéticos y termodinámicos.

Parámetro	Fracción de perlita	Fracción de martensita	Dureza HRC
Escenario medio	0.99	0.00	22.36
q = 0	0.99	0.00	22.81
q + Δq (ΔH=1.2* ΔH)	0.99	0.00	22.33
q - Δq (ΔH=0.8* ΔH)	0.99	0.00	22.54
Ms = 423	0.99	0.00	22.43
Ms = 303	0.99	0.00	22.36
n + 1	0.99	0.00	22.49
n - 1	0.99	0.00	22.55
b + 1	0.99	0.00	22.53
b - 1	0.99	0.00	22.43

Parámetro	Fracción de perlita	Fracción de martensita	Dureza HRC
Escenario medio	0.99	0.00	21.88
$\mathbf{q} = 0$	0.99	0.00	22.10
$q + \Delta q (\Delta H=1.2* \Delta H)$	0.99	0.00	21.86
q - Δq (ΔH=0.8 * ΔH)	0.99	0.00	21.91
Ms = 423	0.99	0.00	21.88
Ms = 303	0.99	0.00	21.88
n + 1	0.99	0.00	21.64
n - 1	0.99	0.00	21.94
b + 1	0.99	0.00	21.83
b - 1	0.99	0.00	21.91

 Tabla 6.5. Predicción de microestructura y dureza en la posición de 50 mm de la probeta

 Jominy de acero AISI 1045 como función de parámetros cinéticos y termodinámicos.

El efecto sobre la respuesta térmica de cambiar el parámetro n(T) de la ecuación de Avrami es mostrado en la Figura 6.21, donde se ve que un aumento en este parámetro incrementa la recalescencia en posiciones más alejadas a la superficie.

La respuesta microestructural mostrada en las Figuras 6.22 y 6.23 fue afectada cuando se aumentó el parámetro n(T) provocando un incremento en la rapidez de transformación, debido a esto el calor latente es liberado en un tiempo más corto provocando un aumento en la recalescencia. Cuando se disminuye el parámetro n(T), a una distancia de 2 mm no se

presenta una cantidad significativa de perlita; esto es porque, aunque el perfil térmico cruce la curva de inicio de transformación del diagrama TTT, la velocidad de transformación es muy lenta por lo que no alcanza a transformar antes de que se alcance la temperatura *Ms* (Tabla 6.2). Debido al aumento de la recalescencia la evolución de la fase martensítica se ve afectada retrasándola en posiciones alrededor de los 2 mm, pero en regiones más cercanas este efecto es casi imperceptible (Figura 6.23). En posiciones alejadas de la superficie sólo existe fase perlita por lo que las diferencias de dureza en estas zonas sólo se deben a la diferencia de rapidez de enfriamiento provocada por el aumento o disminución de la recalescencia (Tablas 6.3, 6.4 y 6.5).

La Figura 6.24 presenta la respuesta térmica simulada para los casos en que el parámetro b(T) es aumentado y disminuido, donde apenas se percibe una temprana recalescencia a 50 mm, esto debe indicar que la transformación de fase de austenita a perlita aumentó su rapidez con el aumento del parámetro como es visto en la Figura 6.25 donde la respuesta microestructural se acelera.

El aumento del parámetro b(T) está asociado con rápidas transformaciones por lo que se presenta la fase perlita a una distancia de 2 mm, esto indica que la curva de enfriamiento en ésta posición cruzó la curva TTT; en cambio con la disminución del parámetro no se presenta perlita debido a la lenta transformación. (aunque la curva haya pasado por una zona de perlita antes de llegar a la transformación martensítica (Tabla 6.2)).



Figura 6.15: Respuesta térmica simulada para el caso en que la energía generada durante la transformación de fase fue aumentada en una fracción de 0.2 (líneas discontinuas) y disminuida en la misma fracción (líneas con símbolos) de la probeta Jominy de acero AISI

1045.





de acero AISI 1045.



Figura 6.17: Respuesta microestructural simulada para el caso en que la energía generada durante la transformación de fase fue aumentada en una fracción de 0.2 (líneas discontinuas) y disminuida en la misma fracción (líneas con símbolos) de la probeta Jominy

de acero AISI 1045.



Figura 6.18: Comparación de la respuesta térmica simulada con Ms = 423 °C (líneas continuas) y con Ms = 303 °C (líneas discontinuas) de la probeta de acero AISI 1045.



Figura 6.19: Comparación de la respuesta microestructural simulada con Ms = 423 (líneas discontinuas) y Ms = 303 (líneas con símbolos) de la probeta de acero AISI 1045.



Figura 6.20: Comparación de la respuesta microestructural simulada con Ms = 423 (líneas continuas) y Ms = 303 (líneas con símbolos) de la probeta de acero AISI 1045.



Figura 6.21: Comparación de la respuesta térmica simulada con n-1 (líneas discontinuas) y con n+1 (líneas con símbolos) de la probeta de acero AISI 1045.



Figura 6.22: Comparación de la respuesta microestructural simulada con n-1 (líneas discontinuas) y con n+1 (líneas con símbolos) de la probeta de acero AISI 1045.



Figura 6.23: Comparación de la respuesta microestructural simulada con n-1 (líneas continuas) y con n+1 (líneas discontinuas) de la probeta de acero AISI 1045.



Figura 6.24: Comparación de la respuesta térmica simulada con b-1 (líneas discontinuas) y con b+1 (líneas con símbolos) de la probeta de acero AISI 1045.



Figura 6.25: Comparación de la respuesta microestructural simulada con b-1 (líneas discontinuas) y con b+1 (líneas con símbolos) de la probeta de acero AISI 1045.



Figura 6.26: Comparación de la respuesta microestructural simulada con b-1 (líneas continuas) y con b+1 (líneas discontinuas) de la probeta de acero AISI 1045.

6.4 Predicción

El modelo fue aplicado para predecir la respuesta térmica y microestructural de los aceros AISI 1045 y 4140. Las Figuras 6.27 y 6.28 presentan los diagramas TTT utilizados en la simulación. La respuesta térmica experimental también fue utilizada para predecir la microestructura esperada mediante el uso de diagramas CCT mostrados en las Figuras 6.29 y 6.30.



Figura 6.27: Diagrama TTT del acero 1045 [22].

Type: 4137/4140 Composition: Fe - 0.37% C - 0.77% Mn - 0.98% Cr - 0.21% Mo Grain size: 7-8 Austenitized at 843°C (1550°F)



Figura 6.28: Diagrama TTT del acero 4140 [23].

El coeficiente de transferencia de calor utilizado para la simulación fue el obtenido con la prueba 1_304. Experimentalmente el acero AISI 1045 presenta poca recalescencia en las curvas de enfriamiento porque su microestructura es de menos de 100% de perlita (presenta fase ferrítica). La respuesta térmica simulada en comparación con la experimental (Figura 6.31) es aceptable aunque se observa una mayor recalescencia en la simulación; esto es debido a que, en el modelo, no fue considerada la transformación ferritita. En puntos de la probeta más cercanos a la superficie en contacto con el chorro de agua en donde se presentan velocidades de enfriamiento mayores, se produce menos ferrita y más perlita (esto porque se acerca a la nariz de la curva TTT) por lo que se esperaría una mayor recalescencia pero ésta se presenta en menor grado debido a la alta eficiencia de extracción de calor. La respuesta microestructural y dureza que se predice se presentan en las Figuras 6.32 y 6.33 respectivamente.

En el acero AISI 4140 (Figura 6.34) se observa que los perfiles térmicos se desplazan ligeramente hacia arriba. Pero, si se utiliza el coeficiente estimado con la prueba 6_4140, el ajuste es mejor (Figura 6.35) aunque se sigue presentando una discrepancia en zonas donde la extracción de calor es menos eficiente además de que tampoco se considero en este caso la transformación ferrítica provocando que la curva de enfriamiento simulada se desplace hacia arriba. La respuesta microestructural y dureza que se predice se presentan en las Figuras 6.36 y 6.37 respectivamente.



Figura 6.29: Diagrama CCT del acero 4140 [13].



Figura 6.30: Diagrama CCT del acero 1045 [13].

Para obtener las microestructuras con los datos experimentales, se calcularon las velocidades de enfriamiento[24] a 700 y 750 °C para el acero 1045 y 4140 respectivamente. Estos resultados se leyeron sobre los diagramas CCT correspondientes para predecir las microestructuras resultantes. Las microestructuras, pronosticadas con el diagrama CCT y simuladas con el modelo, predicen 100% de martensita hasta una distancia de 2 mm y 100% de perlita después de ésta, lo que concuerda con los resultados experimentales (Tabla 6.6) para el acero 1045. De las fotomicrografias obtenidas del acero 4140 no es posible distinguir entre las fases martensita y bainita aunque por las durezas presentes se puede

deducir que, a partir de 10 mm, se obtiene una mezcla de estas fases. Con el diagrama CCT se pronostico que se obtiene la mezcla después de 10 mm y con el modelo después de 2 mm. Estas discrepancias pueden deberse a que los diagramas utilizados (CCT y TTT) son específicos para una determinada temperatura y tiempo de austenización (tamaño de grano) y composición química.

Pronosticada con el diagrama			
Experimental	CCT(con rapidez de	Simulada con el modelo	
	enfriamiento experimental)		
100% martensita	100% martensita	96% martensita	
100% martensita	100% martensita	95% martensita	
100% perlita	100% perlita	99% perlita	
100% perlita	100% perlita	99% perlita	
100% perlita	100% perlita	99% perlita	
	<i>Experimental</i> 100% martensita 100% martensita 100% perlita 100% perlita 100% perlita	Pronosticada con el diagramaExperimentalCCT(con rapidez de enfriamiento experimental)100% martensita100% martensita100% martensita100% martensita100% perlita100% perlita100% perlita100% perlita100% perlita100% perlita	

Tabla 6.6: Respuesta microestructural de la probeta Jominy de acero AISI 1045.

		Pronosticada con el	
	Frnerimental	diagrama CCT(con	Simulada con el
	Experimental	rapidez de enfriamiento	modelo
		experimental)	
superficie	100% martensita	100% martensita	96% martensita
2 mm	Martensita	100% montaneite	05% mortonaita
2 11111	+ austenita retenida	100% martensita	93% martensita
10 mm	bainita + martensita	100% montonoite	71% martensita
TO IIIII	+ austenita retenida	100% martensita	29% banita
25 mm	bainita + martensita	30% martensita	90% hainita
25 1111	+austenita retenida	70% bainita	9970 Daninta
50 mm	bainita + martensita	0.05% martensita	00% bainita
50 mm	+austenita retenida	95% bainita	9970 Uanina

Tabla 6.7: Respuesta microestructural de la probeta Jominy de acero AISI 4140.

Las microestructuras obtenidas con el modelo matemático y los diagramas CCT y las velocidades de enfriamiento fueron utilizadas para predecir la dureza en la posición donde se encontraban los termopares experimentalmente (Tablas 6.8 y 6.9). Los resultados obtenidos son similares y no se salen del rango de durezas de las curvas de templabilidad. (Figuras 6.33 y 6.37). En general, los resultados predichos con el modelo son ligeramente más cercanos a los datos experimentales.

Por la evidencia estudiada la curva TTT del acero 4140 correspondiente a la experimentación debe de estar más hacia la izquierda esto porque transforma bainita a distancias mas próximas a la superficie en contacto con el chorro de agua con una subsiguiente disminución en la dureza, esto sólo puede ser por una composición química diferente, microestructura inicial, tamaño de grano inicial y temperatura y tiempo de austenización.

	Pronosticada con	Proposticada con
Experimental	microestructuras del diagrama CCT	microestructuras del modelo
61.6		58.7
56.0	59.8	58.1
27.0	25.8	24.2
22.7	20.7	22.4
22.1	20.1	21.9
	<i>Experimental</i> 61.6 56.0 27.0 22.7 22.1	Pronosticada conExperimentalmicroestructuras del diagrama CCT61.656.059.827.025.822.720.722.120.1

Tabla 6.8: Durezas en la probeta Jominy de acero AISI 1045.

Tabla 6.9: Durezas en la probeta Jominy de acero AISI 4140.

		Pronosticada con	Proposticada con
	Experimental	microestructuras del diagrama CCT	microestructuras del modelo
superficie	58.1		56.9
2 mm	56.3	57.9	56.5
10 mm	54.3	56.9	52.9
25 mm	40.9	43.8	37.0
50 mm	32.5	36.0	33.8



Figura 6.31: Respuesta térmica experimental y simulada de la probeta Jominy de acero AISI 1045 utilizando el coeficiente de transferencia de calor estimado con la prueba 1_304.



Figura 6.32: Respuesta microestructural simulada de la probeta Jominy de acero AISI 1045 utilizando el coeficiente de transferencia de calor estimado con la prueba 1_304.



Figura 6.33: Curva de templabilidad para el acero 1045.







Figura 6.35: Respuesta térmica experimental y simulada de la probeta Jominy de acero AISI 4140 utilizando el coeficiente de transferencia de calor estimado con la prueba

6_4140.



Figura 6.36: Respuesta microestructural simulada de la probeta Jominy de acero AISI 4140 utilizando el coeficiente de transferencia de calor estimado con la prueba 6_4140.



Figura 6.37: Banda de templabilidad para el acero 4140.

Capítulo 7

Conclusiones

- Se formuló un modelo matemático que puede predecir con una precisión aceptable la respuesta térmica y microestructural en cualquier posición dentro de la probeta Jominy.
- El utilizar una cubierta lateral de acero al carbono en el ensayo Jominy disminuye las pérdidas de calor laterales, pero no las elimina por completo, por lo que es necesario incluirlas en la simulación.
- En posiciones cercanas a la superficie en contacto con el medio de enfriamiento el flujo de calor es prácticamente unidireccional (flujo en la dirección axial), además de que depende de las propiedades del acero.
- Es necesaria una precisa estimación del flux extraído por el agua para una buena determinación de la respuesta térmica.
- Una simulación más cercana a la realidad debe incluir la transformación de austenita a ferrita, además de un adecuado conocimiento del tamaño de grano inicial.
- Una vez que se conoce la rapidez de enfriamiento y la microestructura, es posible predecir la dureza que se obtendrá en la probeta Jominy.

81

Apéndice A

Problema inverso de conducción de calor IHCP [27]

El objetivo al resolver el problema inverso de conducción de calor (IHCP) es encontrar el mejor estimado de los elementos en las historias de densidad de flujo de calor $q(t_i)$ y temperatura $T(R, t_i)$ en la superficie de la probeta, utilizando las mediciones de temperatura Y_{ji} (j = 1; i = 1, 2, ..., M). El problema es no lineal puesto que las propiedades termofísicas dependen de la temperatura.

En la solución numérica secuencial de especificación de la función se supone que la densidad de flujo de calor es constante a través de un número específico de pasos de tiempo futuros, i.e. después de que los valores $q_1, q_2,...,q_{M-1}$ se han estimado, las densidades de flujo de calor $q_{M+1},...,q_{M+r-1}$ se suponen temporalmente iguales a q_M (la densidad de flujo de calor promedio entre t_{M-1} y t_M que se estima al tiempo de cálculo actual M).

$$q_{M+1} = q_{M+2} = \dots = q_{M+r-1} = q_M$$
[1.1]

donde r representa el número de pasos de tiempo futuros utilizados para el cálculo.

El problema por resolver es matemáticamente "mal planteado", en el sentido de que la existencia, unicidad y/o estabilidad de la solución no están aseguradas; una posible solución es transformar al problema inverso en una solución aproximada "bien planteada".

A diferencia del problema directo, los pasos de tiempo pequeños causan dificultad en el IHCP para el cálculo de los elementos de densidad de flujo de calor. Esta dificultad se reduce significativamente utilizando valores de temperaturas futuras en conjunto con un criterio de mínimos cuadrados.

La existencia de la solución a un problema inverso se garantiza si se minimiza la norma de mínimos cuadrados para dicha solución.

Sea la norma de mínimos cuadrados:

$$S = \sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{n} \left(Y_{j,M+i-1} - T_{j,M+i-1} \right)^{2}$$
[1.2]

y puesto que $T_{j, M+i-l}$ es una función de q_M , derivando a S con respecto a q_M se tiene:

$$\frac{\partial S}{\partial q_M} = 2\sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^n \left(Y_{j,M+i-1} - T_{j,M+i-1} \right) \left(-\frac{\partial T_{j,M+i-1}}{\partial q_M} \right)$$
[1.3]

igualando a cero:

$$\sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{n} \left(Y_{j,\mathcal{M}+i-1} - T_{j,\mathcal{M}+i-1} \left(-\frac{\partial T_{j,\mathcal{M}+i-1}}{\partial q_{M}} \right) = 0$$
[1.4]

donde $T_{j, M+i-1}$ y $\frac{\partial T_{j,M+i-1}}{\partial q_M}$ son evaluadas en el mínimo de S. La temperatura es

una función de q_M y para pequeños cambios en q_K de un tiempo al siguiente, la serie de Taylor sobre q_{M-1} se expresa como:

$$T_{j,M+i-1} = T_{j,M+i-1}^* + (q_M - q_{M-1})T_{j,M+i-1;q}^*$$
[1.5]

la notación * significa que T se evalúa utilizando las propiedades y la densidad de flujo de calor (q_{M-1}) para el tiempo t_{M-1} . El término:

$$T_{j,M+i-1;q}^{*} = \frac{\partial T_{j,M+i-1}}{\partial q_{1,i}}$$
[1.6]

es llamado el coeficiente de sensitividad; la diferencia $q_M - q_{M-1}$ representa una corrección en la densidad de flujo de calor.

La expansión por serie de Taylor es exactamente verdadera y no una aproximación si las ecuaciones que determinan el problema directo son lineales, por lo que no es necesario iterar para estimar q_{M_t} *i.e.*, para pequeños pasos de tiempo Δt , las propiedades k y ρ Cpcambian poco de un paso de tiempo al siguiente en cada sección dentro del cuerpo de la probeta. En otras palabras aunque la distribución de temperatura del centro a la superficie de la probeta varié extremadamente y, consecuentemente las propiedades termofísicas del material al depender de la temperatura, de un paso de tiempo t_i , al siguiente t_{i+1} , la distribución se considera que permanece puntualmente constante mientras se calcula q_M .

Substituyendo 1.5 en 1.4 se tiene:

$$\sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{n} \left(Y_{j,M+i-1} - \left(T_{j,M+i-1}^{*} + \left(q_{M} - q_{M-1} \right) T_{j,M+i-1;q}^{*} \right) \right) \left(-T_{j,M+i-1;q}^{*} \right) = 0$$
[1.7]

$$\sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{n} \left(Y_{j,M+i-1} - T_{j,M+i-1}^{*} - \left(q_{M} - q_{M-1} \right) T_{j,M+i-1;q}^{*} \right) \left(-T_{j,M+i-1;q}^{*} \right) = 0$$
[1.8]

$$\sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{n} \left(Y_{j,M+i-1} - T_{j,M+i-1}^{\star} \right) \left(-T_{j,M+i-1;q}^{\star} \right) + \sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{n} \left(q_{M} - q_{M-1} \right) \left(T_{j,M+i-1;q}^{\star} \right)^{2} = 0 \quad [1.9]$$

$$\sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{n} \left(Y_{j,M+i-1} - T_{j,M+i-1}^{*} \right) \left(-T_{j,M+i-1;q}^{*} \right) + \left(q_{M} - q_{M-1} \right) \sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{n} \left(T_{j,M+i-1;q}^{*} \right)^{2} = 0 \quad [1.10]$$

$$(q_{M} - q_{M-1}) \sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{n} (T_{j,M+i-1;q}^{\star})^{2} = \sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{n} (Y_{j,M+i-1} - T_{j,M+i-1}^{\star}) (T_{j,M+i-1;q}^{\star})$$
[1.11]

$$q_{M} - q_{M-1} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{n} \left(T_{j,M+i-1;q}^{*}\right)^{2}} \sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{n} \left(Y_{j,M+i-1} - T_{j,M+i-1}^{*}\right) \left(T_{j,M+i-1;q}^{*}\right)$$
[1.12]

Si:

$$\Delta M = \sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{n} \left(T_{j,M+i-1;q}^{\bullet} \right)^2$$
[1.13]

$$q_{M} - q_{M-1} = \frac{1}{\Delta M} \sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{n} \left(Y_{j,M+i-1} - T_{j,M+i-1}^{\star} \right) \left(T_{j,M+i-1;q}^{\star} \right)$$
[1.14]

Dado que los coeficientes de sensitividad cambian con el tiempo y la posición, para pequeños pasos de tiempo estos son calculados considerando también a las propiedades termofísicas invariantes durante el cálculo de la densidad de flujo de calor. Al hacer esta consideración las Ecs. 1.4, 1.5, 1.6 y 1.7 se linealizan. Después de que la densidad de flujo de calor q_M fue calculada, se calcula la distribución de temperatura a través del cuerpo de la probeta mediante un algoritmo con un método numérico de diferencias finitas, utilizando el valor de la densidad de flujo de calor calculado como condición de frontera en la superficie de la probeta. Utilizando los nuevos valores de temperatura se actualizan nuevamente el

valor de las propiedades termofísicas, se incrementa al índice M y continua el procedimiento.

El método utilizado para el cálculo de los coeficientes de sensitividad consiste en tomar la derivada de las ecuaciones 1.4 a 1.7 en su forma diferencial y resolver el sistema de ecuaciones resultante. La forma de las ecuaciones de diferencias finitas para los coeficientes de sensitividad son las mismas que las utilizadas para el problema original con la variable dependiente T.

Al tiempo t_M el valor de la función q(t) es uno solo e igual a q_M , el tiempo inicial es $t_{M-1} y f(r)$ la distribución de temperatura conocida al inicio en la probeta al tiempo t_{M-1} . Los parámetros k, pCp son evaluados a la temperatura inicial $T_{j,M-1}$. Puesto que los coeficientes en las ecuaciones 1.4 a 1.6 constituidos por los parámetros k y pCp no cambian mientras se calcula q_M , las ecuaciones se linealizan, por lo que la única variable que es una función de q_M es T, se tiene que:

$$Tq = \frac{\partial T_{j,M+i-1}}{\partial q_M}$$
[1.15]

donde T_q es la notación del coeficiente de sensitividad.

Tomando la derivada de las ecuaciones 1.4 a 1.7 tenemos:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(kr\frac{\partial Tq}{\partial r}\right) = \rho Cp\frac{\partial Tq}{\partial t}$$
[1.16]

$$-k \frac{\partial Tq}{\partial r} = 1$$
, en $r = R$ [1.17]

$$\frac{\partial Tq}{\partial r} = 0$$
, en $r = 0$ [1.18]

$$Tq(r,t) = 0$$
, para $t = 0$; en $0 < r \le R$ [1.19]

Las ecuaciones para la variable dependiente Tq tienen la misma forma que las ecuaciones para el problema original de la variable T, lo que significa que los mismos procedimientos de cálculo para la variable T se utilizan para determinar los coeficientes de sensitividad, reduciéndose el tiempo de calculo significativamente.

Apéndice B

Propiedades termofísicas

Tabla B.1: Propied	ades termofísicas	del acero	AISI 4140	[28]
--------------------	-------------------	-----------	-----------	------

Temperatura, °C	k, $W m^{-1} \circ C^{-1}$	$\rho Cp, J^{\circ}C^{-1}m^{-3}$
900	33.10	4.39E6
600	33.10	4.39E6
400	37.70	4.06E6
200	42.30	3.70E6
100	42.70	3.70E6
25	42.70	3.70E6

Tabla B.2: Propiedades termofísicas del acero AISI 304 [29]

Temperatura, °C	k, $W m^{-1} \circ C^{-1}$	$\rho Cp, J \circ C^{-1} m^{-3}$
900	26.80	4.83E6
850	26.40	4.86E6
800	26.80	4.87E6
750	26.40	4.82E6
550	23.02	4.88E6
500	21.80	4.70E6
250	17.60	4.27E6
50	15.90	4.00E6

Temperatura, °C	k, $W m^{-1} \circ C^{-1}$	$\rho Cp, J \circ C^{-1} m^{-3}$
900	25.96	4.63E6
850	25.33	4.63E6
800	24.70	4.63E6
750	24.07	4.63E6
250	17.79	4.63E6
50	15.28	4.63E6
0	14.65	4.63E6

Tabla B.3: Propiedades termofísicas del acero AISI 1045 [30]

Bibliografía

- B. Hernández-Morales, A. Ingalls-Cruz, J. A. Barrera-Godínez y R. Colás. Estimation of End-Quench Heat Transfer Coefficients Using an Inverse Heat Transfer Analysis. Proceedings of the 20th ASM Heat Treating Society Conference, ASM International, 2000, pp 719-726.
- B. Hakberg and T. Hogberg. A Mathematical Model for Hardening of Steel. Materials Science and Engineering, 1978, pp 205-211.
- J. Apraiz B. Tratamientos Térmicos de los Aceros. Editorial Dossat, 8ª edición, 1981.
- G. Kraus. Steels: Heat Treatment and Processing Principles. ASM International, 1989.
- M. A. Grossman y E. C. Bain. Principios de Tratamiento Térmico. American Society for Metals, Editorial Blume, primera edición española, 1972.
- ASTM A 255. Standard Method for End-Quench Test for Hardenability of Steel. Annual Book of ASTM Standards, 1988.
- M. M. Charies R. Evaluación del Coeficiente de Transferencia de Calor en el Ensayo Jominy. 1994. Tesis de Licenciatura. UNAM.
- D. Homberg. A Numerical Simulation of the Jominy End-Quench Test. Acta Materialia, vol 44, No 11, 1996, pp. 4375-4385.
- S. G. Chen, Cheng-I Weng y J. Lin. Inverse Estimation of Transient Temperature Distribution in the End Quenching Test. *Journal of Materials Processing Technology*, 86, 1999, pp 257-263.

- P. Le Masson, P. Rogeon, D. Carron y J. J. Quémener. Thermometallurgical Numerical Simulation: A Sensitivity Analysis of the Jominy End-Quench Test Modelling. La Revue de Métallurgie-CIT/Science et Gene des Matériaux, 2000, pp 1056 –1064.
- 11. P. Le Masson, E. Artioukhine y T. Loulou. Experimental and Numerical Estimations of a Two-Dimensional Convection Heat Transfer Coefficient During a Metallurgical Jominy End-Quench Test. Proceedings of the 4th International Conference on Inverse Problems in Engineering. ASM International, Rio de Janeiro, Brazil, 2002, pp 517-527
- Metals Handbook. Volume 3, Properties and selection: stainless steels, tool materials and special-purpose metals. Ninth edition, ASM, Materials Park, Ohio, E.E.U.U., p. 5.
- Atlas of Continuous Cooling Transformation Diagrams for Engineering Steels. American Society for Metals, pp 32 y 188.
- G. H. Geiger y D. R. Poirer. Transport Phenomena in Materials Processing. The Mineral, Metals and Materials Society, 1994.
- J. D. Verhoeven. Fundamentos de Metalurgia Física. Editorial Limusa, 1987, p
 466.
- E. B. Hawbolt, B. Chau y J. K. Brimacombe. Kinetics of Austenite-Perlite Transformation in Eutectoid Carbon Steel. *Metallurgical Transactions A*, 1983, vol 14A, pp 1803-1815.
- P.R. Woodard, S. Chandrasekar y H.T.Y Yang. Analysis of Temperature and Microestructure in the Quenching of Steel Cylinders. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 1999, vol 30B, pp 815-822.

- P. K. Agarwal and J. K. Brimacombe. Mathematical Model of Heat Flow and Austenite-Perlite Transformation in Eutectoid Carbon Steel Rods for Wire. *Metallurgical Transactions B*, 1981, vol 12B, pp 121-133.
- M. V. Ll, D. V. Niebuhr, L. Meekisho y D. G. Atteridge. A Computational Model for the Prediction of Steel Hardenability. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 1998, vol 29B, pp 661-670.
- A. Nieves y Federico C. Domínguez. Métodos Numéricos Aplicados a la Ingeniería, CECSA, 1995, pp. 533-588.
- B.V. Karlekar y R.M. Desmons. Transferencia de Calor. Mc Graw-Hill, 2^a. edición, 1985, p. 62.
- Handbook of Residual Stress and Deformation of Steels. G. Totten, M. Howes y T. Inoue (editores). ASM International, Materials Park, Ohio, E.E.U.U., 2002, p. 248.
- Atlas of Time-Temperature Diagrams for Irons and Steels. ASM International, 1991, p 34.
- B. Carnahan, H. A. Luther y J. O. Wilkes. Applied Numerical Methods. Ed. Wiley.
- 25. C. R. Brooks. Principles of the Heat Treatment of Plain Carbon and Low Alloy Steels. ASM International, 1996, p 449.
- 26. E. R. Parker. Materials Data Book for Engineers and Scientists, Mc Graw-Hill Book Company, p 27.
- 27. J. S. Téllez M. Desarrollo de un Nuevo Dispositivo para Caracterizar la Extracción de Calor en Baños de Temple. 2000. Tesis de Licenciatura. UNAM.
 28. E. A. Brandes y G. B. Brook. Smithells Metals Reference Book, Seventh Edition,
 - 92

pp 14-29.

- 29. British Iron and Steel Research Association (BISRA). Physical Constants of Some Commercial Steels at Elevated Temperatures. Butterworth's Scientific Publications, Surrey, U.K., 1953, pp. 3 -- 14.
- 30. Base de datos del paquete comercial DEFORM3D-HT (www.deform.com).
- Metals Handbook. Volume 8, Mechanical Testing. Ninth Edition, ASM, Materials Park, Ohio, E.E.U.U.,p 110.
- 32. P. C. Campbell, E. B. Hawbolt y J. K. Brimacombe. Microstructural Engineering Applied to the Controlled Cooling of Steel Wire Rod: Part III. Mathematical Model-Formulation and Predictions. *Metallurgical Transactions A*, 1991, vol 22A, pp 2791-2805.