

**“SIMULACIÓN DE LA EVOLUCIÓN TÉRMICA
Y MICROESTRUCTURAL DURANTE EL
AUSTEMPERIZADO DEL HIERRO DÚCTIL”**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

**MAESTRO EN CIENCIA E
INGENIERÍA DE MATERIALES**

P R E S E N T A

I . Q . M . OCTAVIO VÁZQUEZ GÓMEZ

**Director de tesis:
Dr. José Antonio Barrera Godínez**



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.

*Este trabajo esta dedicado a las personas que
llenar mi vida de dicha y que me motivan
todos los días a seguir adelante
por este camino.*

Wordito y Rosey

Agradecimientos:

A la Universidad Nacional Autónoma de México, por la oportunidad que me dio para realizar mis estudios de posgrado.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, por la beca para mis estudios de maestría.

Al apoyo brindado por el Macroproyecto "Tecnologías para la Universidad de la Información y la Computación", de la UNAM (proyecto MTUIC-19), para la construcción de modelos computacionales.

Al Dr. José Antonio Barrera Godínez, por su apoyo y invaluable asesoría.

Al Dr. José Bernardo Hernández Morales por su apoyo y asesoría en el desarrollo experimental.

Al M. en I. Héctor Vergara y al M. en I. Jorge Sergio Téllez por su apoyo incondicional en el desarrollo de este trabajo.

A mi gran amigo el M. en I. Edgar López por los numerosos consejos y por su apoyo brindado en todo momento durante mis estudios de maestría.

A las M. en C. Guillermina González Mancera y Cecilia Salcedo Luna por su apoyo en la caracterización microestructural.

A mi madre Luz Rosaura Gómez Guevara, mi hermano Eduardo y familia, por su gran ejemplo para abatir los obstáculos de la vida y seguir siempre adelante.

A la familia Montesinos-Gómez por su cariño y apoyo.

A mis amigos incondicionales, Tziran, Junko, Alejandro, Fernando, los Chong y demás amigos con los que he compartido grandes momentos a lo largo de mi vida.

RESUMEN

El hierro dúctil austemperizado es una subclase de los hierros colados que fue desarrollado para mejorar las propiedades mecánicas del hierro dúctil o nodular mediante su tratamiento térmico. El tratamiento térmico del austemperizado consiste en un ciclo térmico que inicia con una austenización entre 850 - 950 °C seguida de un enfriamiento rápido a una temperatura por debajo de la temperatura de inicio de la formación de bainita (B_s) y por arriba de la temperatura de inicio de formación de la martensita (M_s). El tratamiento del austemperizado permite obtener una excelente combinación de propiedades mecánicas (alta resistencia mecánica, alta resistencia al desgaste, buena tenacidad, entre otras) gracias a su microestructura formada durante el austemperizado, conocida habitualmente como *ausferrita*, la cual es una combinación de ferrita bainítica, austenita retenida de alto contenido de carbono y nódulos de grafito.

En el presente trabajo se desarrolló un modelo matemático que permite la simulación del proceso de austemperizado en piezas cilíndricas de hierro nodular. Se estima la respuesta térmica y microestructural durante el ciclo térmico. El modelo se fundamenta en la aplicación de la ecuación general de conducción de calor y el modelo cinético de Avrami para las transformaciones difusivas, tomando en cuenta las propiedades termofísicas, la composición química del hierro y los parámetros térmicos del austemperizado. Se aplicó el método de elemento finito utilizando elementos de tipo lineal en una sola dirección en estado transitorio con el término de generación de calor asociado con la transformación de fase. El modelo utiliza la condición de la frontera pieza-medio de enfriamiento resolviendo el problema inverso de conducción de calor y con base en la respuesta térmica experimental obtenida con piezas cilíndricas de hierro nodular austemperizadas a 295 °C a diferentes tiempos de austemperización. Adicionalmente se realizaron una serie de caracterizaciones del hierro austemperizado mediante difracción de rayos X, análisis metalográficos y mediciones de dureza para cuantificar la evolución de la ausferrita en función del tiempo de austemperización. Los resultados experimentales fueron empleados para validar el modelo termoestructural mediante la comparación de la respuesta simulada y la experimental. En conclusión, el modelo es capaz de estimar la concentración de las fases formadas del tratamiento de austemperizado y el perfil de dureza para diferentes aleaciones de hierro y bajo distintos parámetros térmicos de una manera precisa y confiable.

ABSTRACT

The austempered ductile iron (ADI) is a cast-iron subclass developed to improve the ductile (nodular) iron mechanical properties by its heat treatment. The austempering heat treatment consists of a thermal cycle that begins with an austenization between 850 and 950 °C followed by a sudden cooling at a temperature below the bainite formation line (Bs) and above the martensite formation line (Ms). The austempering treatment allows reaching an excellent combination of mechanical properties (high mechanical resistance, high wear resistance, good tenacity, among others) due to its microstructure formed by the austempering, usually known as ausferrite, which is a bainitic ferrite, high-carbon retained austenite and graphite nodules combination.

In this work, a mathematical model was developed that allows to simulate the austempering process of nodular-iron cylindrical pieces. The thermal and microstructural responses are estimated during the thermal cycle. The model is based on the application of the general heat conduction equation and the Avrami kinetic model, suitable for diffusive transformations, taking into account the thermophysical properties, the iron chemical composition and the austempering thermal parameters. The finite element method was applied using linear type elements in one dimension under unsteady state with the generation term associated to the phase transformation. The model uses a piece-cooling medium boundary condition which was determined by solving the heat-conduction inverse problem (IHCP) and based on the experimental thermal response obtained from nodular-iron cylindrical pieces austempered at 295C under different austempering times. Additionally, a series of characterizations were performed on the austempered iron by X-ray diffraction, metallography studies, and hardness measurements to quantify the ausferrite evolution as a function of austempering time. The experimental results were utilized to validate the thermostructural model by comparison of the simulated to the experimental responses. In conclusion, the model is able to estimate the formed phases concentrations and the hardness profiles, for several nodular iron alloys under varying austempering-treatment thermal parameters in a precise and reliable manner.

Índice

1. Introducción	1
1.1. Hierros colados	1
1.2. Hierro dúctil austemperizado	5
1.2.1. Propiedades mecánicas del ADI	8
1.2.2. Aplicaciones del ADI	9
1.3. Problemática	9
1.4. Justificación	10
1.5. Objetivo	10
1.6. Metas	11
2. Antecedentes	12
2.1. Austemperizado	12
2.2. Ciclo térmico y transformaciones de fases	13
2.3. Elementos aleantes y la cinética de transformación	14
2.4. Modelos matemáticos del austemperizado	16
2.5. Caracterización microestructural	18
3. Desarrollo del modelo matemático	19
3.1. Evolución del campo térmico	19
3.1.1. Análisis térmico	19
3.1.2. Ecuaciones gobernantes	20
3.1.3. Condiciones de la frontera	21
3.1.4. Condición inicial	21
3.1.5. Simplificaciones y suposiciones	21
3.1.6. Determinación de la condición de la frontera	22
3.1.7. Verificación del campo térmico	23
3.1.8. Validación del campo térmico	24
3.2. Evolución del campo microestructural	24
3.2.1. Distribución de carbono en la austenita	25
3.2.2. Transformación bainítica	29
3.2.3. Transformación martensítica	30
3.2.4. Validación microestructural	31

3.3. Evolución del campo de durezas	32
3.4. Método de solución	33
3.5. Formulación del método de solución	33
3.6. Implementación del modelo	39
3.7. Análisis de sensibilidad	41
3.8. Aplicación	41
4. Procedimiento Experimental	43
4.1. Probetas	44
4.2. Dispositivo experimental	45
4.3. Tratamientos térmicos	45
4.4. Microscopía óptica	48
4.5. Microscopía electrónica de barrido	48
4.6. Dureza	48
4.7. Difracción de rayos X	48
5. Resultados y discusión	51
5.1. Verificación del modelo térmico	51
5.1.1. Sistema sin generación de calor	51
5.1.2. Sistema con generación de calor	52
5.2. Medio de enfriamiento	54
5.2.1. Sistema de enfriamiento sin agitación	54
5.2.2. Sistema de enfriamiento con agitación	55
5.3. Determinación de la condición de la frontera	58
5.4. Validación del campo térmico	62
5.5. Validación microestructural	68
5.5.1. Microscopía óptica	69
5.5.2. Microscopía electrónica de barrido	70
5.5.3. Dureza	71
5.5.4. Difracción de rayos X	72
5.5.5. Temperatura de Austemperización	74
5.6. Análisis de sensibilidad	77
5.6.1. Generación de calor	77
5.6.2. Temperatura de inicio de la transformación martensítica, M_s	80
5.6.3. Parámetros cinéticos de la transformación ausferrítica	83
5.6.4. Temperatura de Austenización	87
5.6.5. Elementos aleantes	88
5.7. Predicciones	90
5.7.1. Evolución de las Fases	90
6. Conclusiones	93
Bibliografía	94

Apéndices	97
A. Problema Inverso de Conducción de Calor, [32]	97
B. Difusividades térmicas	100
C. Diagramas TTT	101
D. Sistema Fe-C-Si	103

Índice de figuras

1.1.	Micrografía de la microestructura de un hierro gris tomada a 100X y atacada químicamente con picral al 4% (ácido trinitrofenol). Las zonas grises corresponden a la perlita, las zonas claras a la ferrita y las zonas oscuras a las hojuelas de grafito [1].	2
1.2.	Micrografía de la microestructura de un hierro blanco tomada a 250 X y atacada químicamente con picral al 4% (ácido trinitrofenol). Las zonas grises se identifican como perlita, las zonas claras como cementita y los cumulos de ledeburita [1].	3
1.3.	Clasificación general de los hierros colados	4
1.4.	Diagrama esquemático del efecto de la rapidez de enfriamiento y la concentración de carbono y silicio sobre la microestructura de los hierros colados.	5
1.5.	Límites de aproximación de la composición química en función del contenido de silicio y carbono para aceros y para algunos hierros colados.	6
1.6.	Micrografía de un hierro dúctil tomada a 100X y atacada químicamente con nital al 2% (solución de ácido nítrico). Las zonas claras corresponden a la ferrita y las zonas oscuras a los nódulos de grafito [1].	7
2.1.	Ciclo térmico del proceso de austemperizado del hierro dúctil.	13
3.1.	Análisis termico del proceso de austemperizado.	20
3.2.	Ilustración esquemática del origen de la curva T_0 sobre el diagrama de fases Fe-C, los valores α y γ hacen referencia a la ferrita y austenita respectivamente.	26
3.3.	Concentración de carbono en la ferrita como una función de la temperatura de austemperización debido al efecto del atrapamiento de carbono por la formación de carburos de transición.	29
3.4.	Diagrama de flujo para la solución del del modelo del austemperizado del hierro dúctil.	40
4.1.	Diagrama de flujo del procedimiento experimental para la caracterización del medio de enfriamiento y la determinación de la condición de frontera.	43

4.2. Diagrama de flujo del procedimiento experimental para la caracterización del hierro dúctil austemperizado.	44
4.3. Diseño de la probeta experimental	45
4.4. Dispositivo experimental creado para las pruebas de enfriamiento y de austemperizado del hierro dúctil.	46
4.5. Efecto del tiempo de austenización sobre la dureza del hierro dúctil. Las piezas fueron austenizadas a $920\text{ }^{\circ}\text{C}$ y enfriadas en agua a temperatura ambiente.	47
5.1. Respuestas térmicas calculadas tanto por la solución analítica como por la solución numérica durante el tratamiento de temple en agua sin transformación de fase utilizando una temperatura de austenización de $900\text{ }^{\circ}\text{C}$, un tiempo de tratamiento de 100 s así como un coeficiente de transferencia de calor de $450\text{ } \frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{ }^{\circ}\text{C}}$. Nótese que la respuesta de la solución numérica se traslapa con la de la solución analítica.	52
5.2. Respuesta térmica de un acero eutectoide durante el tratamiento de temple en agua utilizando una temperatura de austenización de $900\text{ }^{\circ}\text{C}$ y un tiempo de tratamiento de 100 s	53
5.3. Respuestas térmicas experimentales de las pruebas de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable AISI 304, en un baño de sales sin agitación. . .	54
5.4. Temperatura del medio de enfriamiento en función del tiempo para las pruebas de enfriamiento, en las piezas de acero inoxidable AISI 304, en un baño de sales sin agitación.	55
5.5. Respuestas térmicas experimentales de las pruebas de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable AISI 304, en un baño de sales con agitación. . .	56
5.6. Temperatura del medio de enfriamiento en función del tiempo para las pruebas de enfriamiento, en las piezas de acero inoxidable AISI 304, en un baño de sales con agitación.	57
5.7. Efecto de la agitación sobre la templabilidad del acero inoxidable AISI 304, para las pruebas de enfriamiento con y sin agitación, en el medio de enfriamiento.	58
5.8. Efecto de la agitación en el medio de enfriamiento sobre el flux de calor, en función de la temperatura de superficie, para las pruebas de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable.	59
5.9. Efecto del número de pasos futuros, r , sobre el flux de calor en función de la temperatura de la superficie para las pruebas de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable con agitación del medio de enfriamiento. El número de nodos espaciales entre la superficie de la pieza y la posición del termopar se mantiene constante, $n = 20$	60

5.10. Efecto del flux de calor a distintos valores de r sobre la respuesta térmica simulada para las pruebas de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable con agitación del medio de enfriamiento. El número de nodos espaciales entre la superficie de la pieza y la posición del termopar se mantiene constante, $n = 20$	61
5.11. Efecto del número de pasos futuros, r , sobre el flux de calor en función del tiempo para las pruebas de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable con agitación del medio de enfriamiento. El número de nodos espaciales entre la superficie de la pieza y la posición del termopar se mantiene constante, $n = 20$	62
5.12. Efecto del número de nodos espaciales entre la superficie de la pieza y posición del termopar, n , sobre el flux de calor en función del tiempo para las pruebas de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable con agitación del medio de enfriamiento. El número de pasos futuros se mantiene constante, $r = 2$	63
5.13. Efecto del flux de calor a distintos valores de n sobre la respuesta térmica simulada para las pruebas de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable con agitación del medio de enfriamiento. El número de pasos futuros se mantiene constante, $r = 2$	64
5.14. Respuestas térmicas obtenidas experimentalmente a partir de las pruebas de austemperizado, en las piezas de hierro dúctil a un tiempo de austemperización de 120 s, 240 s, 390 s y 2200 s. Las piezas se austenizarán a una temperatura de $920\text{ }^{\circ}\text{C}$ durante 60 minutos y enfriadas a una temperatura de austemperización de $295\text{ }^{\circ}\text{C}$	65
5.15. Zona de transformación amplificada alrededor de los $305\text{ }^{\circ}\text{C}$ para las pruebas de austemperizado a 120, 240, 390 y 2200 segundos. Las piezas se austenizaron a $920\text{ }^{\circ}\text{C}$ durante 60 minutos y enfriadas a una temperatura de austemperización de $295\text{ }^{\circ}\text{C}$. Notese que la recalescencia generada por la transformación de fase se presenta en todas curvas a un mismo tiempo.	66
5.16. Comparación entre la respuesta térmica experimental y simulada a partir de una temperatura de austemperización de 295°C , un tiempo de austemperización de 390 segundos y una temperatura de austenización de $920\text{ }^{\circ}\text{C}$. La respuesta simulada se calculó con la condición a la frontera determinada en las piezas de acero inoxidable.	67
5.17. Comparación entre la respuesta térmica experimental y simulada con el modelo del austemperizado a partir de una temperatura de austemperización de 295°C , un tiempo de austemperización de 390 segundos y una temperatura de austenización de $920\text{ }^{\circ}\text{C}$. La respuesta simulada se calculó con la condición de la frontera determinada con las piezas de hierro dúctil.	68
5.18. Zona de transformación amplificada alrededor de los $305\text{ }^{\circ}\text{C}$, para la respuesta térmica simulada y experimental.	69

5.19. Metalografías de las piezas de hierro dúctil A 536 grado 65-45-12, con matriz ferrítica, austemperizadas a 1000 X con una temperatura de austenización de 920 °C por 60 minutos y una temperatura de austemperización de 295 °C a distintos tiempos de austemperización: a) 120, b) 240, c) 390 y d) 2200 segundos.	70
5.20. Micrografías de las piezas de hierro dúctil tomadas con el microscopio electrónico de barrido a 3000 X después del tratamiento térmico del austemperizado realizado a 120 y 240 segundos con una temperatura de austemperización de 295 °C y una temperatura de austenización de 920 °C.	71
5.21. Comparación entre la dureza experimental y la simulada a distintos tiempos de austemperización.	72
5.22. Difractogramas de Rayos X obtenidos para las piezas austemperizadas a 295 °C con una temperatura de austenización de 920 °C a distintos tiempos de austemperización: a) 120 y b) 2200 segundos	73
5.23. Comparación entre la fracción en volumen de austenita retenida medida y la calculada por medio del modelo en función del tiempo.	74
5.24. Comparación entre la fracción de austenita retenida experimental y las fracciones simuladas con el modelo de Yescas y el modelo del austemperizado desarrollado en este trabajo para una hierro nodular con 3.5C - 2.5Si - 0.55Mn - 0.15Mo - 0.31Cu wt. %.	75
5.25. Ilustración esquemática del efecto de la temperatura de austemperización sobre la concentración de carbono en la austenita residual [11].	76
5.26. Efecto de la generación de calor sobre la respuesta térmica simulada a distintos valores de ΔH^*	78
5.27. Efecto del tiempo de austemperización sobre la fracción de austenita retenida simulada a distintos valores de ΔH^*	79
5.28. Efecto del tiempo de austemperización sobre la dureza del material simulada a distintos valores de ΔH^*	80
5.29. Efecto del tiempo de austemperización sobre la fracción en volumen de austenita retenida simulada a distintos valores de M_s^*	81
5.30. Efecto del tiempo de austemperización sobre la fracción en volumen de martensita simulada a distintos valores de M_s^*	82
5.31. Efecto del tiempo de austemperización sobre la dureza del material simulada a distintos valores de M_s^*	83
5.32. Desplazamiento del tiempo final de transformación del diagrama TTT. Los círculos corresponden a los tiempos de inicio y fin de la transformación bainítica reportados por Cisneros [13], para un hierro nodular con 3.72C - 2.26Si - 0.24Mn wt. %.	84
5.33. Efecto del tiempo de austemperización sobre la fracción en volumen de austenita retenida simulada a distintos valores ψ	85
5.34. Efecto del tiempo de austemperización sobre la dureza del ADI simulada a distintos valores ψ	86

5.35. Efecto de la temperatura de austenización sobre fracción en volumen de austenita retenida simulada.	87
5.36. Ilustración esquemática del efecto de la temperatura de austenización sobre la concentración de carbono en austenita sobrepuesta en el diagrama de fases Fe-C [11].	88
5.37. Efecto del porcentaje en peso de elementos aleantes sobre el porcentaje en volumen de austenita retenida para una aleación 3.70 C - 3.0 Si - 0.18 Mn.	89
5.38. Efecto del tiempo de austemperización sobre el porcentaje en volumen de las fases formadas durante el tratamiento térmico del austemperizado.	90
5.39. Efecto del tiempo de austemperización sobre el porcentaje en volumen de los tipos austenita durante el tratamiento térmico del austemperizado.	91
C.1. Diagrama TTT para un hierro nodular con 3.37C - 2.62Si - 0.031Mn % wt. Austenizado a 900 °C por 20 minutos [2].	101
C.2. Diagrama TTT para un hierro nodular con 3.32C - 2.58Si - 0.031Mn - 0.49Mo % wt. Austenizado a 900 °C por 20 minutos [2].	102
D.1. Sección vertical del diagrama Fe-C-Si con 2 % wt de Si.	103

Índice de tablas

1.1. Especificación ASTM A 895 para hierros dúctiles austemperizados.	9
4.1. Composición química del acero AISI 304 y el hierro nodular ASTM A536 grado 65-45-12	44
4.2. Planos de difracción preferentes empleados para la austenita y la ferrita bainítica.	50
B.1. Difusividades térmicas del acero inoxidable y del hierro dúctil en función de la temperatura	100

Capítulo 1

Introducción

En este capítulo se presenta una breve introducción al hierro dúctil austemperizado con énfasis en sus características estructurales, las cuales son importantes para el entendimiento de este trabajo.

1.1. Hierros colados

En general, los hierros colados son aleaciones de Fe-C-Si que en ocasiones contienen pequeñas concentraciones de otros elementos aleantes. La figura D.1, del apéndice D, muestra la sección vertical del diagrama Fe-C-Si al 2 % wt. de Si. Los hierros se clasifican de acuerdo a la ASTM (American Society Testing Materials) mediante la apariencia de la superficie de fractura, la microestructura y las propiedades mecánicas [1]. Históricamente, solo existían dos clasificaciones para los hierros colados: los hierros con una apariencia de fractura gris y los hierros con una apariencia de fractura blanca, conocidos coloquialmente como hierro gris y hierro blanco respectivamente. Una de las principales diferencias entre los hierros grises y los hierros blancos es que un hierro gris puede ser fácilmente maquinado mientras que un hierro blanco no puede ser maquinado con facilidad. Estas diferencias son consecuencias de la forma en que se presenta el carbono. Los hierros grises se caracterizan por tener un alto contenido de grafito, el cual se encuentra en forma de hojuelas, en la figura 1.1, se muestra la microestructura típica de un hierro gris obtenido a partir de una reducida velocidad de enfriamiento durante el proceso de colada.

Por otro lado, los hierros blancos se obtienen con una alta rapidez de enfriamiento durante el proceso de colado haciendo que el carbono no se encuentre en forma de hojuelas de grafito sino como un nuevo microconstituyente llamado cementita (Fe_3C). La

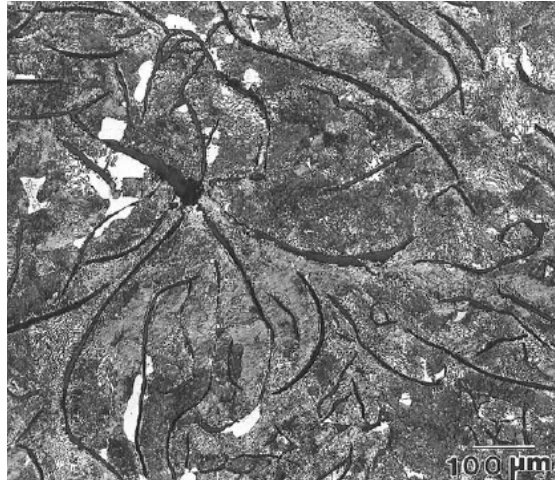


Figura 1.1: Micrografía de la microestructura de un hierro gris tomada a 100X y atacada químicamente con picral al 4% (ácido trinitrofenol). Las zonas grises corresponden a la perlita, las zonas claras a la ferrita y las zonas oscuras a las hojuelas de grafito [1].

microestructura típica de un hierro blanco se muestra en la figura 1.2.

Sin embargo, en la actualidad existe una variedad más amplia de hierros colados, como son: los hierros moteados, los hierros maleables, los hierros vermiculares, los hierros dúctiles y los hierros austemperizados. Estos materiales son variantes de los hierros grises o de los blancos a partir de algún tratamiento térmico o de la adición de elementos aleantes. Una clasificación general de los hierros colados se ilustra en la figura 1.3, de la página 4, y esta clasificación se encuentra basada en la forma en la que se presenta el grafito y el tipo de microestructura de la matriz.

Existen dos factores que determinan el tipo de microestructura que se forma en la matriz de los hierros colados. Estos factores son la composición química y la rapidez de enfriamiento al momento del proceso de colada. La figura 1.4, de la página 5, muestra un diagrama esquemático del efecto de la concentración de carbono y de silicio así como la rapidez de enfriamiento sobre la microestructura del hierro colado.

A partir de la figura 1.4, se puede observar que al incrementar la rapidez de enfriamiento disminuye la tendencia a la formación de grafito promoviéndose la formación de los hierros blancos mientras que un incremento en la concentración de carbono y silicio promueven la formación de hierros grises. Un incremento en las concentraciones de carbono y silicio originan un punto de fusión bajo, el cual se relaciona directamente con la

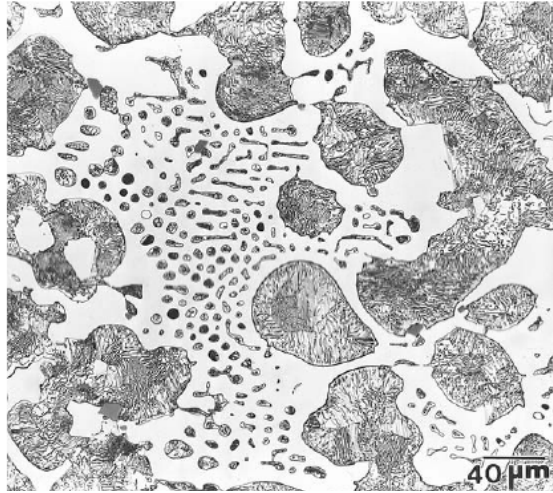


Figura 1.2: Micrografía de la microestructura de un hierro blanco tomada a 250 X y atacada químicamente con picral al 4% (ácido trinitrofenol). Las zonas grises se identifican como perlita, las zonas claras como cementita y los cumulos de ledeburita [1].

composición eutéctica de los hierros colados. La composición eutéctica de los hierros colados ocurre a los 4.3 wt. % C cuando el silicio no se encuentra presente en la aleación. Una característica principal de los hierros colados es su alto contenido de silicio, por lo que la influencia del silicio sobre el contenido de carbono se denota por la ecuación empírica:

$$\%C + \frac{1}{3} \%Si = 4.3 \quad (1.1)$$

Dado que el contenido de carbono y de silicio tienen una influencia directa sobre la composición eutéctica, se ha encontrado conveniente combinar el efecto de estos dos elementos dentro de un factor que describa que tan cercano se encuentra la composición eutéctica en un hierro colado, conocido como carbón equivalente, CE [44]:

$$CE = \%C + \frac{1}{3} \%Si \quad (1.2)$$

Cuando el CE es de 4.3 wt. % la aleación es considerada eutéctica. Por otro lado, cuando $CE < 4.3$ wt. %, representa una aleación hipoeutéctica y cuando la aleación contiene un mayor contenido de carbono y de silicio que la composición eutéctica es considerada hipereutéctica, $CE > 4.3$ wt. %. La figura 1.5, de la página 6 muestra los límites de aproximación de la composición química para los aceros y algunos hierros colados a partir del contenido de carbono y silicio.

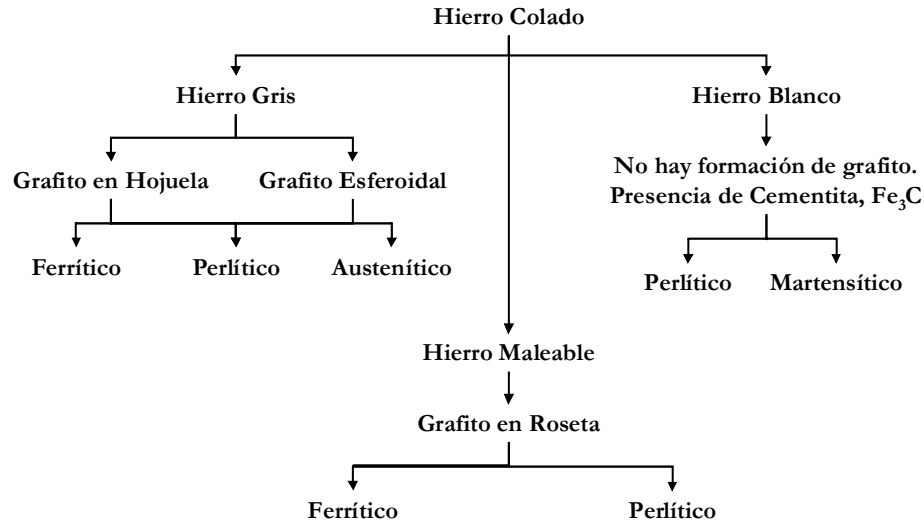


Figura 1.3: Clasificación general de los hierros colados

A partir de la figura 1.5 se observa que los aceros quedan localizados en la parte inferior del diagrama, a bajas concentraciones de silicio y de carbono. También, se muestra la línea de separación entre los aceros y los hierros colados, la cual se origina al incrementar el contenido de carbono y silicio hasta el punto en el cual el CE se encuentra por arriba del 2 *wt. %*. Por arriba de la línea de separación de los aceros, el carbono puede presentarse en forma de carburo de hierro o cementita (hierro blanco) o en forma de grafito (hierro gris) a una misma concentración de silicio y por debajo de la composición eutéctica. Por otro lado, el hierro dúctil, también conocido como hierro nodular o de grafito esferoidal [1], es una variación del hierro gris, el cual se forma a partir de la adición de pequeñas cantidades de magnesio y de cerio durante el proceso de solidificación. Estos elementos promueven el incremento del número de sitios de nucleación del grafito y modifican la dirección de crecimiento que como resultado conlleva a la formación de un grafito esferoidal. El cambio morfológico al grafito esferoidal incrementa la ductilidad de 5 a 20 veces en comparación con la ductilidad del hierro gris además de incrementar la resistencia mecánica [30]. Las propiedades mecánicas del hierro dúctil son obtenidas principalmente por el control de la microestructura que se forma en la matriz, la cual puede ser ferrítica, perlítica o una mezcla de ambas. Una matriz ferrítica es a veces deseable debido a que ofrece una excelente maquinabilidad y una alta ductilidad mientras que una estructura perlítica ofrece una alta resistencia mecánica, pero con una baja ductilidad [44]. Cabe señalar, que los hierros

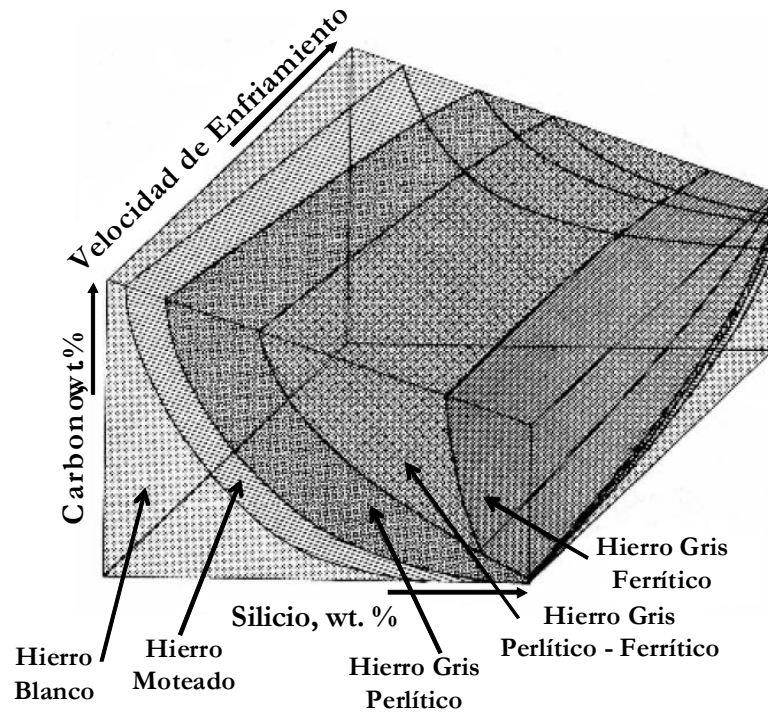


Figura 1.4: Diagrama esquemático del efecto de la rapidez de enfriamiento y la concentración de carbono y silicio sobre la microestructura de los hierros colados.

dúctiles generalmente cuentan con una matriz perlítica, sin embargo, el recocido en estos hierros causa la precipitación del carbono de la perlita sobre el grafito existente generando así una matriz ferrítica. La figura 1.6, de la página 7, muestra la estructura típica de un hierro dúctil con una matriz ferrítica. Dado que las propiedades mecánicas del hierro nodular dependen esencialmente del tipo de matriz, un gran esfuerzo se ha realizado para mejorar la microestructura de éste por medio de la aplicación del tratamiento isotérmico del austemperizado.

1.2. Hierro dúctil austemperizado

El hierro dúctil austemperizado o ADI (Austempered Ductile Iron) es una subclase de los hierros dúctiles, el cual se encuentra constituido por una mezcla de ferrita bainítica y austenita retenida con alto contenido de carbono así como por nódulos de grafito, las cuales se obtienen a partir del tratamiento isotérmico en el rango de transformación bainítica.

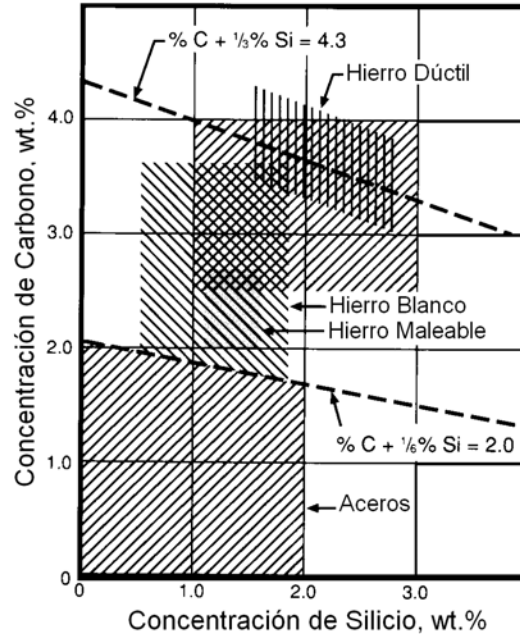


Figura 1.5: Límites de aproximación de la composición química en función del contenido de silicio y carbono para aceros y para algunos hierros colados.

Cabe señalar que una de las claves características de la descomposición eutectoide de austenita a perlita es el hecho de que la ferrita y la cementita crecen cooperativamente manteniendo en todo momento el balance del carbono. La transformación bainítica en analogía con la transformación perlítica origina un microconstituyente formado por placas de ferrita y una fase residual como pueden ser los carburos, la martensita o la austenita. El balance del carbono en la transformación bainítica se vuelve inestable y más complejo debido a que estas fases alcanzan solubilidades muy superiores a las del equilibrio. Por esta razón se debe hacer énfasis que el término de ferrita bainítica no pretende llevar connotaciones de ningún tipo acerca de su contenido de carbono durante el crecimiento de las placas sino se refiere sólo al hecho de distinguir la componente ferrítica de la bainita convencional [9]. La ferrita bainítica se genera a partir de la descomposición de la austenita a una temperatura de transformación isotérmica por debajo de la temperatura de inicio de la bainita, B_s , y por encima de la temperatura de inicio de la martensita, M_s y es extremadamente fina con un espesor aproximado de $0.2 \mu m$ y $10 \mu m$ de longitud. El crecimiento de estas placas se da en conglomerados denominados pacas. Dentro de cada

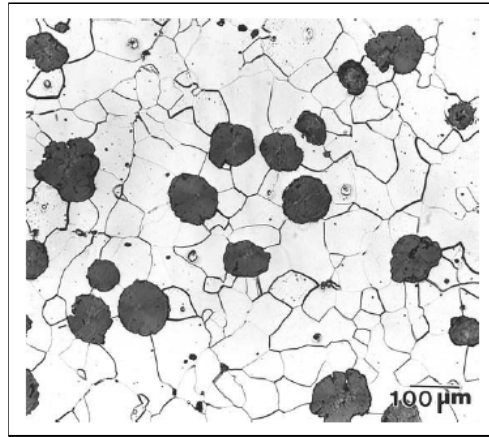


Figura 1.6: Micrografía de un hierro dúctil tomada a 100X y atacada químicamente con nital al 2% (solución de ácido nítrico). Las zonas claras corresponden a la ferrita y las zonas oscuras a los nódulos de grafito [1].

paca, las placas se orientan en la misma dirección cristalográfica. Una placa individual generalmente se conoce como sub unidad. Durante el crecimiento de cada placa de ferrita bainítica se origina un rechazo de carbono hacia los alrededores. El carbono rechazado por la ferrita bainítica es distribuido dentro de la austenita residual para su enriquecimiento. En el caso de los aceros, la austenita residual atrapada entre las placas de ferrita se transforma a cementita u otra fase residual mientras que en los ADI ésta se retiene aún a temperatura ambiente debido a su enriquecimiento con carbono y al alto contenido de silicio, el cual retarda la precipitación de la cementita. La austenita retenida puede alcanzar fracciones en volumen tan altas como 0.6. Cabe mencionar, que en el ADI es necesario distinguir entre la austenita residual, la cual se produce isotérmicamente a la temperatura de transformación y la austenita retenida, la cual permanece remanente sin transformarse a alguna otra fase a temperatura ambiente. Las proporciones de estas fases son fuertemente dependientes de la composición química y los parámetros del tratamiento térmico, por lo que, existe una gran gama de aleaciones de hierro dúctil susceptibles al austemperizado que compiten con las aleaciones de aluminio o de acero forjado [30]. Los parámetros térmicos deben ser tales que permitan el enriquecimiento óptimo de la austenita con carbono durante la formación de la ferrita bainítica para lograr una máxima fracción de austenita retenida. Sin embargo, un tiempo de austemperización demasiado largo contribuye a la descomposición de la austenita residual enriquecida en ferrita y carburos de hierro. Existe un período de tiempo denominado "*la ventana de procesamiento*",

en el cual la microestructura formada durante el tratamiento térmico permanece sin alteraciones a la temperatura de austemperización. Esto conduce a la necesidad de diseñar y controlar con precisión tratamientos térmicos de austemperizado que permitan obtener eficientemente estas fases dado que la presencia de fases residuales como la martensita o los carburos perjudican directamente en las propiedades mecánicas del ADI.

1.2.1. Propiedades mecánicas del ADI

Las propiedades mecánicas del ADI se encuentran fuertemente relacionadas con la microestructura formada durante el tratamiento térmico del austemperizado, las cuales como se han mencionado son fuertemente dependientes de los parámetros térmicos seleccionados para cada tipo de aleación. El ADI puede alcanzar resistencias de hasta 1700 MPa con un porcentaje de elongación del 1.7% para aplicaciones en las cuales se requiera una alta resistencia al desgaste. El ADI también puede alcanzar una resistencia medianamente alta entre los 900 - 1200 MPa con un porcentaje de elongación del 16%, cuando lo que se busca es mantener una buena ductilidad [30]. El ADI puede ser dividido en dos clases:

1. Clase I: hierros dúctiles transformados a una baja temperatura de austemperización, los cuales exhiben una matriz compuesta por ferrita bainítica inferior. Estos hierros cuentan con una alta resistencia y dureza y son particularmente utilizados para aplicaciones donde se requiera una alta resistencia ante esfuerzos de contacto.
2. Clase II: hierros dúctiles transformados a una alta temperatura de austemperización, los cuales exhiben una matriz compuesta por ferrita bainítica superior. Estos hierros cuentan con una dureza entre los 260 - 350 HB y una excelente combinación de alta ductilidad y tenacidad con una alta resistencia a la fatiga y al desgaste, además de ser razonablemente maquinables y pueden ser utilizados en aplicaciones estructurales.

Actualmente la ASTM ha establecido la especificación A 895 para el ADI [5], tabla 1.1, con base a los valores mínimos requeridos para el esfuerzo máximo de tensión, el de cedencia, la resistencia al impacto y el mínimo porcentaje de elongación así como la dureza.

Grado	Esfuerzo máximo min <i>MPa(ksi)</i>	Esfuerzo a la cedencia min <i>MPa(ksi)</i>	ϵ min, %	Dureza <i>HB</i>	Resistencia al impacto <i>J(ft - lbf)</i>
125-80-10	862 (125)	552 (80)	10	269 - 321	102 (75)
150-100-7	1034 (150)	690 (100)	10	302 - 363	81 (60)
175-125-4	1207 (175)	862 (125)	4	341 - 444	61 (45)
200-155-1	1379 (200)	1069 (155)	1	388 - 477	34 (25)
230-185	1586 (230)	1276 (185)	—	444 - 555	—

Tabla 1.1: Especificación ASTM A 895 para hierros ductiles austemperizados.

1.2.2. Aplicaciones del ADI

El potencial de uso para el ADI es muy basto y variado. Muchos de los componentes fabricados con este material se utilizan en la fabricación de transportes de carga, tractores y automóviles así como en componentes en el campo de la minería y la construcción entre otras [30, 15]. A continuación, se presenta una lista más detallada de los componentes fabricados con el ADI:

1. Industria automotriz: cigüeñales, engranajes, aros dentados y engranajes de distribución para motores a diesel.
2. Transportes de carga y tractores: mensulas para suspensores de muelles, placas para pernos en U, abrazaderas, conectores de rodillo y engranajes para motores.
3. Minería: coronas dentadas, cadenas, bolas para molinos, bandas de rodamiento y placas de desgaste.
4. Construcción: bandas de transporte, cilindros hidráulicos, brazos de soporte y engranajes.

1.3. Problemática

Aunque el ADI fue desarrollado en los años 1960's puede considerarse como un nuevo material debido a que el tratamiento térmico del austemperizado sólo se ha aplicado incipientemente a nivel industrial en los últimos años. Aunque el estudio del ADI ha sido abundante y se ha desarrollado en diferentes ramas, la mayoría de estos esfuerzos se han enfocado a la caracterización de las propiedades mecánicas, algunos al conocimiento de la evolución microestructural y unos pocos han tratado de establecer las bases para su

producción desde el proceso de colada. Sin embargo, el desarrollo de modelos matemáticos que permitan cuantificar o estimar las propiedades mecánicas o la microestructura del ADI sin la necesidad de recurrir a numerosos y engorrosos experimentos antes de una producción a escala ha sido muy escaso y no ha sido establecido claramente, por lo que es necesario encontrar las bases que conlleven a relacionar los fenómenos térmicos y microestructurales que ocurren en el tratamiento del austemperizado para el adecuado desarrollo en la producción del ADI.

1.4. Justificación

El ADI es un hierro complejo en su fabricación y en su tratamiento térmico lo que crea el reto de desarrollar el total de su potencial de aplicación a nivel industrial. El incipiente desarrollo de su aplicación se ha enfocado a producir unos cuantos componentes muy especializados después de numerosas pruebas de ensayo y error. Por otro lado, los modelos matemáticos permiten disminuir el número de pruebas a realizar; además de ser una herramienta poderosa en el desarrollo de nuevos productos y en el diseño de técnicas para mejorar la microestructura de las aleaciones ferrosas y sus propiedades mecánicas, lo cual permitiría cubrir el constante requerimiento de nuevos materiales que cumplan con las demandas de la sociedad actual. Sumado a lo anterior, se ha probado experimentalmente que el ADI puede ofrecer una excelente combinación en propiedades mecánicas equivalentes a los aceros de forja o de colada a un costo de producción similar que los hierros dúctiles, al mismo tiempo de proveer una extensa gama de aleaciones gracias a las diferentes combinaciones de las condiciones de operación del tratamiento térmico. Se ha demostrado también que el ADI puede alcanzar una resistencia de 870 MPa con un rango de 10 - 15 % de elongación o hasta 1700 MPa con un porcentaje de elongación del 1 - 3 % [30]. Con base en lo anterior, el estudio del ADI representa una alternativa sustentable plenamente justificada tanto desde el punto de vista científico como por su posible potencial económico y su capacidad de diversificar sus usos.

1.5. Objetivo

Desarrollar un modelo matemático con base en ecuaciones determinísticas para estimar precisamente la transferencia de calor acoplada con la cinética de transformación que permita cuantificar la evolución del campo térmico y microestructural que se obtiene de una pieza de hierro dúctil durante el tratamiento térmico del austemperizado.

1.6. Metas

Para el desarrollo del objetivo de este trabajo se plantean las siguientes metas:

1. Construir un dispositivo experimental para realizar el tratamiento térmico del austemperizado y obtener datos que permitan validar el modelo matemático.
2. Caracterizar térmicamente el baño de sales para llevar acabo el proceso de austemperizado de hierro dúctil.
3. Estimar la condición térmica en la intercara pieza - baño de sales para elaborar un modelo térmico.
4. Elaborar un modelo térmico del austemperizado.
5. Elaborar un modelo microestructural del austemperizado incluyendo:
 - a) Predicción y validación de la evolución microestructural de la ferrita bainítica mediante el modelo matemático.
 - b) Determinar el porcentaje de austenita retenida y el contenido de carbono en el hierro tratado durante el proceso de austemperizado.
6. Desarrollar un modelo capaz de estimar simultáneamente el campo térmico y microestructural del austemperizado de hierro dúctil a partir del acoplamiento de los modelos anteriores.
7. Caracterizar microestructuralmente el hierro dúctil austemperizado para validar las predicciones del modelo microestructural.

Capítulo 2

Antecedentes

2.1. Austemperizado

El tratamiento térmico del ADI ha sido estudiado en los últimos años por su óptima combinación en las propiedades mecánicas obtenidas durante el austemperizado [24]: alta resistencia mecánica, buena tenacidad, alta resistencia a la fractura y una alta resistencia al desgaste. Existen estudios que revelan que sus propiedades mecánicas dependen fuertemente de la microestructura formada durante el austemperizado, *Moore et al* [25]; y que ésta a su vez depende de las variables del proceso como son: las condiciones de operación (temperaturas y tiempos de austemperización y austenización), la composición química, la estructura de colada y la cinética de transformación [26, 4-8]. Cabe señalar, que el hierro dúctil austemperizado es una sub-clase de los hierros dúctiles, la cual se encuentra caracterizada microestructuralmente por ferrita bainítica, austenita de alto contenido de carbono y nódulos de grafito, cuya mezcla en conjunto se conoce como *ausferrita* [13]. Como se ha mencionado, la ASTM ha establecido una especificación para el ADI, la A 895, esta especificación consiste de 5 grados que incorporan la resistencia a la tensión, a la cedencia y el porcentaje de elongación [1]. Dado que el proceso depende de un gran número de variables, el control es difícil de lograr, por lo que, diferentes autores se han enfocado en el estudio del tratamiento desde diversos enfoques de investigación, la mayoría dirigida hacia la medición de las propiedades mecánicas. Sin embargo, no se han logrado establecer las bases para desarrollar modelos matemáticos que permitan optimizar el tratamiento térmico a partir de relacionar la estructura del material con las condiciones de operación y las propiedades mecánicas.

2.2. Ciclo térmico y transformaciones de fases

La evolución microestructural durante el tratamiento térmico del austemperizado puede ser explicado mediante un diagrama TTT (temperatura, tiempo y transformación). La figura 2.1 ilustra el ciclo térmico del proceso de austemperizado sobrepuesto en un diagrama TTT para un hierro nodular.

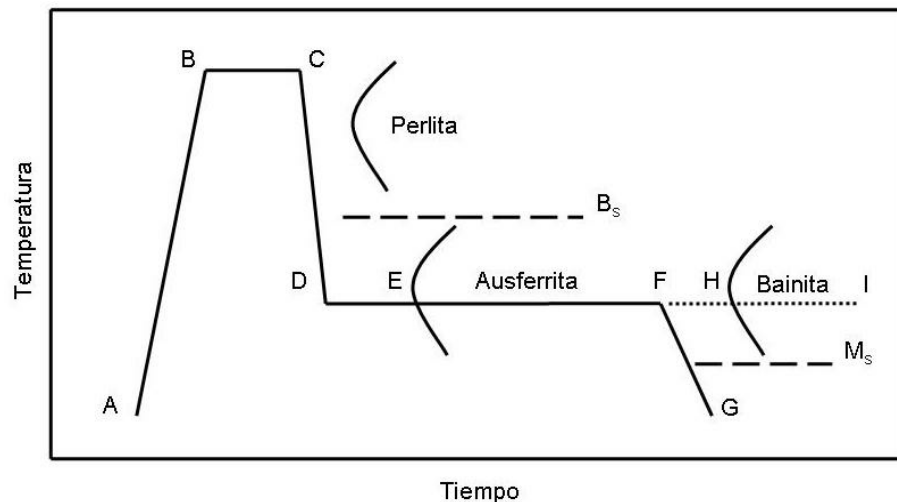


Figura 2.1: Ciclo térmico del proceso de austemperizado del hierro dúctil.

La primera parte del ciclo de austemperizado, línea ABC del diagrama, consiste en la austenización a una temperatura de 850 – 950 °C, desde un tiempo de 15 minutos hasta 2 horas, dependiendo de la matriz del hierro colado. El tiempo de austenización permite disolver el carbono en austenita asegurando una máxima solubilidad. La austenización es seguida de un rápido enfriamiento en un baño de sales, línea CD, hasta una temperatura por debajo de la temperatura de inicio de la bainita, B_s , para evitar la transformación de austenita a perlita. Cabe señalar, que el tratamiento térmico de austemperizado en aceros sólo involucra la formación de bainita, compuesta por placas de ferrita y carburos de hierro. En cambio en el austemperizado de hierros colados se involucran dos etapas de transformación que requieren un mayor control térmico en su aplicación. La primera etapa de transformación, se da a tiempos cortos, línea DE, donde se presenta la nucleación de las placas de ferrita bainítica en los alrededores de los nódulos de grafito, seguida de un crecimiento progresivo hacia las zonas intercelulares a tiempos más largos de transformación, línea EF, hasta completar la transformación bainítica cuando las energías libres

de la ferrita y la austenita se igualan a la temperatura de transformación. Las líneas que representan el equilibrio entre ambas fases está determinada por la extrapolación de las líneas de solvus, A_{e1} y A_{e3} , de la ferrita y la austenita respectivamente según la porción del diagrama de fases Fe-C, figura 3.2, de la página 26. Durante esta etapa se da el enriquecimiento de la austenita con carbono mediante el mecanismo de difusión, logrando que la austenita alcance niveles entre 1.8 y 2.2 wt. % C [36]. Una vez completada la transformación de la ausferrita, se continúa con un enfriamiento a temperatura ambiente, línea FG. Durante este enfriamiento, parte de la austenita residual remanente de la transformación parcial de la ausferrita, puede transformarse a martensita. Esta transformación de la austenita residual remanente a martensita es posible, sí y sólo si, existe una transformación parcial de la ferrita bainítica y si la temperatura del hierro es menor a M_s . Para obtener una combinación óptima de las propiedades mecánicas la formación de martensita debe evitarse y puede hacerse mediante el control del tiempo de austemperización, t_{ab} . Los tiempos cortos de austemperización conllevan a un enriquecimiento con carbono inadecuado de la austenita, por lo que cierta cantidad de austenita residual permanece remanente en la matriz propiciando la formación de martensita. Por otro lado, si se mantiene el hierro a la temperatura de transformación por períodos de tiempo demasiado prolongados, se da inicio a la segunda etapa de transformación del austemperizado, donde la austenita estabilizada con carbono se descompone en ferrita bainítica y carburos de hierro (bainita convencional en aceros), línea HI. Esta descomposición de la austenita debe evitarse dado que la precipitación de carburos perjudica directamente las propiedades mecánicas del material. Para mantener una óptima combinación de las propiedades mecánicas del hierro austemperizado este debe ser enfriado cuidadosamente a temperatura ambiente entre estas dos etapas de transformación. Este intervalo de tiempo se le conoce como la "*ventana de procesamiento*", [25]. La principal ventaja de la ventana de procesamiento es que la microestructura formada en la matriz permanece estable durante un intervalo de tiempo a la temperatura de transformación. La magnitud de la ventana de procesamiento depende fuertemente de la temperatura de transformación y la concentración de los elementos aleantes como son: el silicio, el manganeso, el molibdeno, el cobre y níquel.

2.3. Elementos aleantes y la cinética de transformación

Existen muchos estudios sobre la cinética de transformación y el efecto de los elementos aleantes en el tratamiento térmico del ADI donde se ha demostrado que la presencia de ele-

mentos aleantes como el Cu, Ni y el Mo retardan la primera etapa de transformación [30]. En el apéndice C, se muestra el efecto de los elementos aleantes sobre el tiempo de inicio de la transformación bainítica sobrepuesto en un diagrama TTT. El manganeso también se adiciona a las aleaciones de hierro dúctil para mejorar la templeabilidad, pero tiene una tendencia elevada a segregarse en las zonas intercelulares durante la solidificación formando carburos, los cuales retardan la transformación de la ferrita bainítica. Ahmadabadi [4], también estudió el efecto del Mn sobre la cinética de transformación y determinó que la segregación del Mn también repercute en las propiedades mecánicas y la maquinabilidad del hierro debido a la formación de carburos. Esto se debe a que los carburos contribuyen a originar sitios desfavorables para la nucleación de las placas de ferrita retardando así la transformación bainítica. Similarmente, Cisneros [13], reporta que la adición de elementos aleantes como el Cu, Mo y el Ni, retardan el inicio y fin de la transformación bainítica. El níquel al igual que el cobre suele ser adicionado hasta en un 2 *wt. %* Ni. El níquel puede reducir ligeramente la resistencia a la tracción por debajo de los 350 °C, pero incrementa la ductilidad y la tenacidad a la fractura. La adición de estos elementos se hace para permitir la aplicación de este tratamiento térmico en piezas de sección gruesa, donde los gradientes térmicos dentro de las piezas causan heterogeneidades microestructurales y por consiguiente diferencias en las propiedades mecánicas. Al igual que el Mn, estos elementos tienden a formar carburos que retardan el inicio y fin de la transformación bainítica. Entre los principales carburos formados en la primera etapa de transformación del austemperizado se encuentran los carburos hexagonales ϵ , los cuales tienden a precipitarse dentro de las placas de ferrita a bajas temperaturas de transformación [40]. Yazdani [36], también ha estudiado el efecto del Mo sobre la cinética de transformación y determinó que una concentración de 0.13 *wt. %* Mo no retarda significativamente la formación de ausferrita en las zonas intercelulares. Aunque una variación en el contenido de Mo, de 0.13 a 0.25 *wt. %*, origina un ligero retardo en la cinética de transformación de la ausferrita [38]. También se ha demostrado que un porcentaje de Mo mayor a 0.4 *wt. %* tiende a segregarse en las zonas intercelulares convirtiéndose en carburos [30]. Cabe señalar, que los carburos de molibdeno son muy estables y difíciles de disolver durante la austenización por lo que el uso de este elemento debe ser limitado [41]. La cinética de transformación de la ausferrita en el austemperizado se encuentra basada en un modelo cinético del tipo Avrami, similarmente como ocurre con otras transformaciones difusivas. De hecho, Yescas [40], Thomson [34], Cisneros [13], Ahmadabadi [4], emplean modelos cinéticos del tipo Avrami para estimar la fracción transformada de austenita retenida o para determinar experimentalmente los parámetros cinéticos de los diagramas tiempo, temperatura y transformación (TTT).

2.4. Modelos matemáticos del austemperizado

El desarrollo de modelos matemáticos para el control del tratamiento térmico del austemperizado del hierro dúctil ha sido una área muy poco estudiada en los últimos años, de manera que estos modelos pueden ser citados. Thomson [34], desarrolló un modelo capaz de relacionar el efecto de la segregación de los elementos aleantes en la matriz ausferrítica, los parámetros térmicos de operación y la cinética de transformación, con la finalidad de estimar las propiedades mecánicas con base a correlaciones empíricas y algunos fundamentos termodinámicos. Lamentablemente, el modelo no tiene la capacidad de relacionar la transferencia de calor con la cinética de transformación. Estos aspectos fundamentales son imprescindibles para aprovechar la templabilidad del hierro y predecir la microestructura en piezas de sección gruesa. Similarmente, Yescas [40], desarrolló un modelo mediante el uso de redes neuronales, el cual es un método de análisis regresional que fija una función flexible no lineal del tipo hiperbólica [10], con el propósito de estimar el contenido de austenita retenida al final del tratamiento térmico del austemperizado. Yescas, concluye que los tiempos de austemperización cortos producen un inadecuado enriquecimiento con carbono en la austenita retenida. Esto se debe a que existen zonas con austenita residual remanente, la cual es inestable, promoviéndose la formación de fases residuales mientras que los tiempos largos dan oportunidad al inicio de la segunda etapa de transformación. De acuerdo con lo anterior, es de suma importancia controlar la cantidad de austenita retenida para lograr la óptima combinación de las propiedades mecánicas. Una fracción de austenita retenida máxima es un indicativo que la transformación ausferrítica se ha llevado a cabo por completo, por lo que, una disminución en esta variable puede ser indicio de que ha ocurrido la descomposición de la austenita en ferrita bainítica y carburos. Cabe señalar, que el modelo de Yescas no se encuentra fundamentado en un modelo determinístico basado en los fenómenos que ocurren en el tratamiento térmico, más bien, hace uso de una base de datos bien consolidada para obtener estimaciones del porcentaje de austenita retenida. Con respecto a la ventana de procesamiento, Zahiri [42], con la finalidad de optimizar el tratamiento térmico para la óptima obtención de las propiedades mecánicas, propone un modelo matemático basado en una modificación del modelo de transformación bainítica para aceros con alto contenido de silicio ($> 1.5wt. \% Si$). Este modelo predice las condiciones a las cuales queda confinada la ventana de procesamiento. La ventana de procesamiento queda confinada en un intervalo de tiempo entre el fin de la primera etapa de transformación, t_1 , y el inicio de la segunda etapa de transformación, t_2 . El tiempo t_1 está definido como el tiempo al cual no más del 3% en volumen de

martensita se encuentra presente en la matriz. Como se ha señalado, la martensita se forma durante el enfriamiento a temperatura ambiente a partir de la austenita residual remanente que aún queda en la matriz y la cual no ha sido enriquecida con carbono durante la transformación isotérmica. Es decir, t_1 es aproximadamente igual al tiempo en el cual la fracción en volumen de austenita residual remanente cae por debajo del 3% en volumen. El tiempo t_2 , es el tiempo al cual el 90% de la austenita retenida permanece en la matriz aún iniciada la descomposición de esta fase en ferrita bainítica y carburos. Zahiri se basa en datos termodinámicos y cinéticos para la obtención de dichos tiempos dejando de lado la transferencia de calor. Sin embargo, una de sus principales contribuciones es la introducción del factor de autocatálisis, con el cual cuantifica el fenómeno de activación en la formación de las placas de ferrita. Esto es, la nucleación de placas de ferrita a partir de otras previamente formadas, lo cual queda limitado por el contenido de carbono en la intercara ferrita/austenita. La desventaja del modelo de Zahiri yace en que se requiere una calibración con datos experimentales para cada aleación específica. Tampoco considera la segregación de los elementos aleantes para determinar dicho factor de autocatálisis. Al igual que los modelos anteriores este modelo tampoco tiene un fundamento basado en las ecuaciones determinísticas que gobiernan la transferencia de calor ni la cinética de transformación que ocurren durante el austemperizado. Posteriormente, Zahiri [43] reporta que es posible mejorar las predicciones del modelo anterior ahora utilizando una función para el factor de autocatálisis tomando en cuenta el efecto de la segregación de los elementos aleantes y la temperatura de austemperización. Una última aportación es un modelo matemático que estima la rapidez de enfriamiento crítica en el proceso de austemperizado y fue propuesto por Teng [33]. Teng, a diferencia de los autores anteriores, establece un modelo con base a ecuaciones determinísticas fundamentado en la ecuación general de calor por conducción en un sistema bidimensional. Sin embargo, este modelo no tiene la capacidad de predecir el campo microestructural y es utilizado únicamente para estimar la rapidez de enfriamiento crítica para evitar que parte de la pieza entre en la zona de transformación perlítica en piezas de sección gruesa. Por otro lado, existe muy poca información acerca de las propiedades termofísicas del hierro austemperizado, las cuales son fundamentales para la caracterización de la transferencia de calor. Bayati [8], reporta las propiedades termofísicas a diferentes condiciones de operación y para diferentes microestructuras presentes en los hierros austemperizados así como la influencia de la estructura sobre dichas propiedades. De acuerdo con todo lo anterior, se ve necesario establecer las bases que permitan la formulación de modelos matemáticos que describan y acoplen los fenómenos que ocurren en el proceso del austemperizado. La idea principal de

este trabajo es crear las bases necesarias para acoplar los dos campos más importantes en el austemperizado del hierro dúctil: 1) el campo térmico, gobernado por la transferencia de calor en la intercara pieza/medio de enfriamiento y 2) la cinética de transformación de la ferrita bainítica, la cual determina el contenido máximo de austenita retenida al final de la primera etapa de reacción del proceso térmico.

2.5. Caracterización microestructural

Una forma de caracterizar microestructuralmente los hierros dúctiles austemperizados es cuantificando la fracción en volumen de las fases presentes en la matriz ausferrítica. En este sentido, se ha reportado y demostrado que la utilización de la técnica de difracción de rayos X y el método de comparación directa, *Cullity* [14], junto con un análisis metalográfico suelen ser herramientas útiles para cuantificar la evolución de estas fases. La técnica de difracción de rayos X y el análisis metalográfico se aplican para determinar de forma cualitativa las fases presentes en la matriz. Los datos obtenidos por difracción de rayos X se reportan en un difractograma cuyo análisis permite identificar las fases que se encuentran en mayor porcentaje. Por otro lado, el método de comparación directa es utilizado para calcular de forma cuantitativa las fracciones en volumen de austenita retenida y de ferrita. Este método se basa en la comparación de las intensidades integradas de cada una de las fases presentes en un material policristalino asumiendo que sólo 2 fases se encuentran presentes. En general la gran mayoría de los autores han reportado la utilización de la técnica de difracción de rayos X y el método de comparación directa como una herramienta para la caracterización de los hierros austemperizados, como por ejemplo, *Rundman et al* [28], quien reporta un estudio completo del hierro dúctil austemperizado mediante el uso de la técnica de difracción de rayos X, donde concluye que la difracción de rayos X, es una potente herramienta para el estudio de los hierros austemperizados. Dicha técnica puede ser utilizada no sólo para determinar la fracción en volumen de la austenita retenida sino también para determinar el contenido de carbono en la austenita después del tratamiento de austenización así como para determinar el contenido de carbono en la austenita residual al final del tratamiento de austemperización.

Capítulo 3

Desarrollo del modelo matemático

El desarrollo de un modelo matemático que sea capaz de estimar el campo térmico y microestructural durante el proceso de austemperizado puede dividirse en: 1) Determinación de la evolución del campo térmico, 2) Determinación de la evolución del campo microestructural, 3) Acoplamiento termoestructural y 4) Uso de la microestructura para la predicción de la evolución del campo de durezas. En este capítulo, cada uno de estos pasos se desarrollará con base a las leyes físicas gobernantes y al conocimiento del tratamiento térmico del austemperizado.

3.1. Evolución del campo térmico

La evolución del campo térmico se encuentra determinada por los mecanismos y las leyes determinísticas que gobiernan la transferencia de calor, así como por las condiciones a la frontera e inicial del sistema. En las siguientes subsecciones se profundizará cada una de estas partes.

3.1.1. Análisis térmico

En la figura 3.1, se muestra un esquema que presenta los mecanismos de transferencia de calor que ocurren en el proceso de austemperizado para una pieza de hierro dúctil. La transferencia de calor por conducción se presenta en el interior de la pieza mientras que el mecanismo por convección se presenta en la frontera pieza/medio de enfriamiento. El flujo de calor se transfiere de la pieza hacia el medio de forma radial, por lo que es válido suponer un sistema asiximétrico con aislamiento térmico en el eje de simetría dado que se tiene una pieza mucho más larga que gruesa.

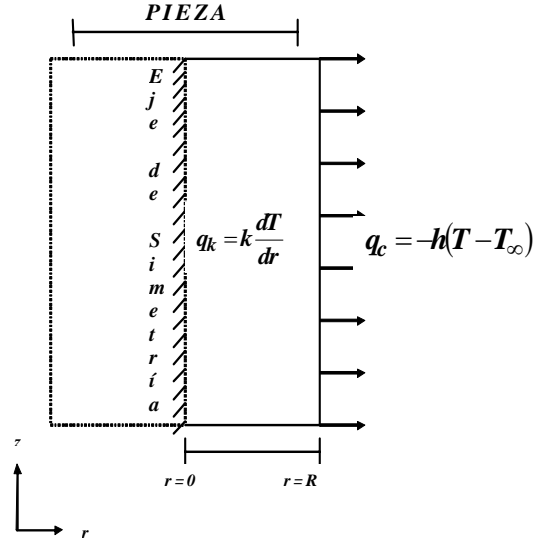


Figura 3.1: Análisis térmico del proceso de austemperizado.

3.1.2. Ecuaciones gobernantes

La conducción de calor dentro de un sólido se describe con base a la ecuación general de conducción de energía [27], la cual se expresa como:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \phi - \dot{q} = 0 \quad (3.1)$$

donde ϕ es la densidad de flujo de calor o también conocida como flux de calor, ∇ es el operador divergencia y \dot{q} es la cantidad de calor generada por la transformación de fase. Además, la primera ley de Fourier establece en forma general que:

$$\phi = -k \nabla T \quad (3.2)$$

donde k es la conductividad térmica del material y ∇T es el gradiente de temperatura. Sustituyendo la ley de Fourier en la ecuación 3.1, se obtiene que:

$$\rho C_p \frac{\partial (T)}{\partial t} - \nabla (k \nabla T) - \dot{q} = 0 \quad (3.3)$$

La generación de calor del sistema se debe a las transformaciones de fase que ocurren durante el austemperizado y la cual se puede estimar a partir del cambio en la fracción en volumen de cada una de las fases con respecto al tiempo y la posición:

$$\dot{q}(r, t) = \rho(T) \sum_i^n \Delta H_i \frac{\partial F_i}{\partial t} \quad (3.4)$$

donde $\frac{\partial F_i}{\partial t}$ es la rapidez de transformación y ΔH_i es el calor liberado de la fase i . Cada transformación ya sea de austenita a ferrita bainítica ó de austenita a martensita tiene un valor característico de entalpía de transformación, la cual corresponde con el calor liberado. Todas las contribuciones de energía por el calor liberado deben ser tomadas en cuenta en el término de generación.

3.1.3. Condiciones de la frontera

Para resolver la ecuación diferencial 3.1 se deben aplicar las condiciones de la frontera pertinentes que describan los fenómenos que ocurren en la frontera de la pieza durante el proceso de austemperizado. Las condiciones de la frontera de la pieza son:

Frontera convectiva en la superficie lateral. El flujo de calor en la frontera lateral se encuentra caracterizado por el mecanismo de convección con el medio de enfriamiento:

$$CF1: \quad r = R \quad 0 \leq z \leq L \quad -k(T) \Big|_{r=R} \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \Big|_{r=R} = -h(T_\infty - T|_{r=R}) \quad (3.5)$$

Frontera aislada en el eje de simetría. Debido a que el flujo de calor se transfiere de forma radial se puede considerar un sistema asiximétrico donde la transferencia de calor en el eje simetría es nula.

$$CF2: \quad r = 0 \quad 0 \leq z \leq L \quad -k(T) \Big|_{r=0} \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0 \quad (3.6)$$

3.1.4. Condición inicial

Considerando la austenización previa al austemperizado se puede afirmar que toda la pieza se encuentra a la misma temperatura de austenización antes del enfriamiento en el baño de sales fundidas:

$$CI: \quad t = 0 \quad 0 \leq r \leq R \quad T(r, t) = T_\gamma \quad (3.7)$$

3.1.5. Simplificaciones y suposiciones

- *Sistema unidireccional:* debido a que el diámetro de las pieza ($\frac{1}{2}in$), es menor en comparación a su longitud ($2\frac{1}{2}in$), puede considerarse un problema con longitud infinita, donde los gradientes térmicos en las otras direcciones son muy pequeños y pueden ser despreciados.

- *Estado inestable o transitorio*: se considera un sistema inestable debido a que la temperatura de la pieza disminuye en función del tiempo durante el proceso de austemperizado.
- *Propiedades termofísicas variables*: las propiedades termofísicas del material se encuentran en función de la temperatura de la pieza.
- *Generación de calor*: el calor generado por la transformación bainítica debe considerarse como una fuente de calor dentro de la ecuación general de energía.
- *Coordenadas cilíndricas*: debido a que la geometría de las piezas es cilíndrica.

Con base en las suposiciones anteriores, la ecuación que rige la transferencia de calor durante el proceso de austemperizado se encuentra dada por la siguiente expresión:

$$\rho(T) \cdot C_p(T) \frac{\partial T(r, t)}{\partial t} = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(-rk(T) \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \right) + \dot{q}(r, t) \quad (3.8)$$

la cual es una ecuación diferencial parcial no homogénea de coeficientes variables y cuya solución requiere el uso de métodos numéricos. Las suposiciones del modelo fueron propuestas con base a las características del modelo físico.

3.1.6. Determinación de la condición de la frontera

La determinación de la condición de la frontera se realiza experimentalmente con base en las respuestas térmicas obtenidas durante pruebas de enfriamiento de piezas de acero inoxidable AISI 304, la selección de este acero se debe a que se trata de un material austenítico que no presenta transformación de fase bajo estas condiciones de enfriamiento. Para las pruebas de enfriamiento se utilizó el mismo baño de sales fundidas donde se efectúan las pruebas de austemperizado en las piezas de hierro dúctil. Con estas pruebas se adquirió la respuesta térmica en la superficie lateral (condición de la frontera) y se estimó el flujo de calor resolviendo el problema inverso de conducción de calor (IHCP).

El IHCP se resolvió por medio de un programa de computo nombrado WinProbe, el cual fue verificado y validado por Hernández-Morales [17], la descripción del método de solución del IHCP se muestra en el apéndice A. Este programa fue verificado utilizando un coeficiente de transferencia de calor conocido para resolver el problema directo de transferencia de calor (DHCP). La respuesta térmica obtenida fue utilizada para obtener el coeficiente de transferencia de calor resolviendo el IHCP por medio de WinProbe. El coeficiente de transferencia de calor obtenido mediante WinProbe fue usado nuevamente

para resolver el problema directo. El programa se verificó y se validó por medio de la comparación de ambos resultados.

Los valores del coeficiente de transferencia de calor en la superficie de la pieza como función de la temperatura superficial obtenidos mediante WinProbe están basados en una medición de la temperatura hecha con una frecuencia de adquisición de 0.309 segundos. Los coeficientes de transferencia de calor se asocian con los parámetros r y n utilizados por el método de solución del IHCP. El parámetro r , es el número de pasos o el número de datos futuros que el método utiliza para la convergencia del problema. El parámetro n , es el número de nodos entre el punto donde se encuentra colocado el termopar experimentalmente y la superficie lateral de la pieza.

La solución del problema directo de transferencia de calor se implementó en Abaqus[®] V 6.5 edición estudiantil. Los modelos desarrollados mediante este simulador son resueltos mediante el método de elemento finito en su forma implícita y explícita. Para la implementación del modelo de simulación, se construyó una malla de 20 elementos lineales en la dirección radial, las suposiciones mencionadas en la sub-sección 3.1.5 fueron utilizadas sin considerar la generación de calor por transformación de fase debido a que los aceros inoxidable austeníticos no presentan transformación alguna como se ha mencionado anteriormente.

Para la realización de las pruebas de enfriamiento se emplea un dispositivo semiautomático para sumergir las probetas en un baño de sales a una velocidad controlada y reproducible. Las respuestas térmicas adquiridas se emplean para resolver el IHCP y así obtener valores de flux de calor en la frontera lateral de la pieza. Con base en el flux de calor y la temperatura del medio de enfriamiento se obtienen los coeficientes de transferencia de calor en función de la temperatura. Con este coeficiente y la temperatura se define la condición de la frontera (ecuación 3.5).

3.1.7. Verificación del campo térmico

La evolución del campo térmico obtenida por el modelo se verifica mediante la comparación con una solución analítica. La finalidad de esta verificación es corroborar la fundamentación matemática del modelo. Para esto, se elige un problema térmico para el cual existe una solución analítica y que también pueda ser simulado por el modelo. Se obtiene la solución analítica y la predicción del modelo y finalmente se comparan.

Para la verificación de este modelo se utilizó la solución analítica para un sistema de

enfriamiento de tipo newtoniano, el cual se encuentra dado por la siguiente expresión:

$$\rho C_p V \frac{dT}{dt} = -h(T - T_\infty) A \quad (3.9)$$

donde ρ es la densidad del material, C_p es el calor específico, V es el volumen, h es el coeficiente de transferencia de calor y T_∞ es la temperatura del fluido o del medio de enfriamiento. Cabe señalar que para considerar un sistema de enfriamiento newtoniano se debe asegurar que se tiene un espesor lo suficientemente delgado o una alta conductividad del material lo que conlleva a que los gradientes térmicos internos sean tan pequeños que puedan ser ignorados y así poder considerar a la temperatura sólo como una función del tiempo [27].

La solución analítica de la ecuación 3.9 se muestra a continuación:

$$T = T_\infty + (T_0 - T_\infty) \exp\left(-\frac{hA}{\rho C_p V} t\right) \quad (3.10)$$

esta solución se compara con la respuesta térmica calculada con el modelo del austemperizado sin considerar la transformación de fase.

3.1.8. Validación del campo térmico

Para la validación del campo térmico se utilizan también las mismas respuestas térmicas medidas mediante las pruebas de enfriamiento del acero inoxidable AISI 304. La ventaja de utilizar las pruebas de enfriamiento con este material es que se evita la posible recalcificación causada por el calor generado por la transformación bainítica, la cual se presenta en otras aleaciones. Las respuestas térmicas predichas por el modelo se comparan con las respuestas experimentalmente medidas.

3.2. Evolución del campo microestructural

El modelo para predecir la evolución microestructural del hierro dúctil durante el tratamiento térmico del austemperizado puede ser dividido en tres partes. La primera de ellas comprende la acumulación de carbono dentro de la austenita. La segunda y tercera involucran la cinética de transformación de la ferrita bainítica y de la martensita. La transformación martensítica puede darse cuando la transformación bainítica no se lleva a cabo en su totalidad y cuando la temperatura M_s se encuentra por arriba de la temperatura ambiente.

3.2.1. Distribución de carbono en la austenita

El tratamiento térmico de austemperizado del hierro dúctil comprende 2 etapas de transformación, las cuales se separan por un intervalo de tiempo llamado *ventana de procesamiento* [25]. En la primera etapa, la austenita formada durante la austenización se transforma a ferrita bainítica junto con una porción de austenita de alto contenido de carbono, a este arreglo de fases más los nódulos grafito, se conoce como *ausferrita* como se ha mencionado anteriormente en el capítulo 2. Debe señalarse que se presupone que la concentración de carbono presente en los nódulos de grafito no afecta la concentración de carbono inicial que se distribuye en la austenita durante la transformación bainítica y por lo cual, no se considera en el modelo microestructural. En la segunda etapa de transformación, la austenita de alto contenido de carbono se descompone en ferrita y carburos de hierro, los cuales tienden a precipitarse dentro de la matriz disminuyendo las propiedades mecánicas del material. El control del tiempo de austemperización es importante para lograr un adecuado tratamiento térmico. A tiempos cortos, la austenita sufre un inadecuado enriquecimiento de carbono causando un bajo contenido de austenita retenida lo que origina la formación de fases residuales como la martensita. A tiempos largos, se da inicio a la segunda etapa, la cual se debe evitar porque conduce a la disminución de las propiedades mecánicas, por la formación de carburos. Se requiere de un tiempo óptimo de austemperización que se encuentre dentro del rango de tiempo de la ventana de procesamiento para el adecuado control y la obtención de las propiedades mecánicas. Una forma de determinar el tiempo óptimo de austemperización es determinar la fracción en volumen de austenita retenida de alto contenido de carbono en función del tiempo por medio de un modelo cinético para así conocer el tiempo para el cual se logre obtener un máximo en dicha fase. De esta forma se determina el tiempo que tarda en enriquecerse con carbono la austenita durante la transformación bainítica. Cabe recordar, que la *austenita retenida* difiere de la *austenita residual* en que la austenita retenida es la cantidad de austenita a temperatura ambiente mientras que la austenita residual es la cantidad de austenita a la temperatura de transformación isotérmica.

La distribución de carbono al punto donde la transformación de la ferrita bainítica cesa se encuentra dado [41] por:

$$C_{\gamma}^{\circ} = x_{\alpha_b} C_{\alpha_b} + x_{\gamma} C_{\gamma} \quad (3.11)$$

donde C_{γ}° es la concentración de carbono al inicio de la transformación bainítica, C_{α_b} y C_{γ} son las concentraciones de carbono en la ferrita bainítica y en la austenita residual respectivamente; x_{α_b} y x_{γ} son las fracciones de volumen de ferrita bainítica y austenita.

Concentración de carbono en la austenita retenida

El valor de \bar{C}_γ se determina mediante el diagrama de fases Fe-C cuando la reacción bainítica cesa de acuerdo a la curva T_0 . El concepto de la curva T_0 es la extensión de las líneas de solvus al equilibrio Ae_1 y Ae_3 , que limitan la zona $\alpha + \gamma$ en el diagrama de fases, la extrapolación de estas líneas por debajo de la temperatura eutectoide se encuentra relacionada con el equilibrio termodinámico entre las fases. El punto en el cual las 2 fases alcanzan la misma composición química y la misma energía libre se conoce como C_γ [9], como se ilustra en la figura 3.2.

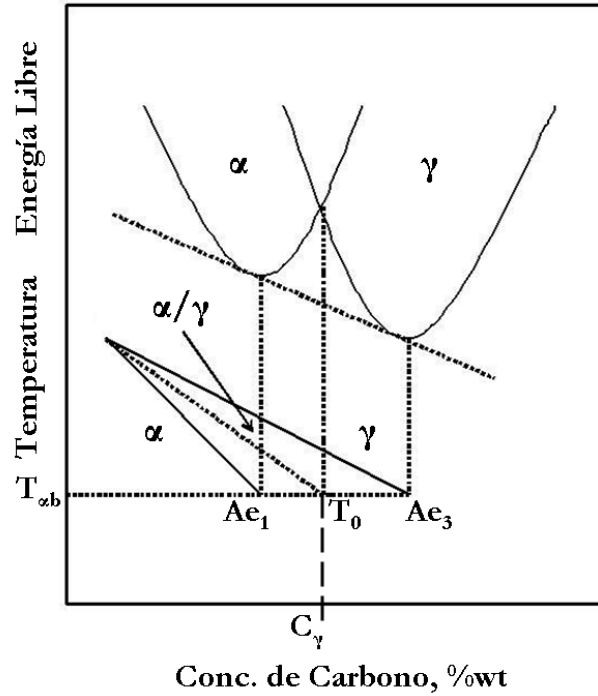


Figura 3.2: Ilustración esquemática del origen de la curva T_0 sobre el diagrama de fases Fe-C, los valores α y γ hacen referencia a la ferrita y austenita respectivamente.

Chang [11] determinó empíricamente una relación para C_γ en función de la concentración de los elementos aleantes y la temperatura de austemperización, $T_{\alpha b}$. La temperatura se encuentra dada en grados $^{\circ}C$.

$$C_\gamma = 3.072 - 0.0016 \times T_\alpha - 0.24 \times \%Wt.Si - 0.161 \times \%Wt.Mn - 0.115 \times \%Wt.Ni \\ + 0.25 \times \%Wt.Cu + 0.06 \times \%Wt.Mo + 2.69 \times \%Wt.Cr \quad (3.12)$$

Además, se ha demostrado que la concentración de carbono en la austenita no está limitada exactamente al valor de C_γ cuando la temperatura de austemperización se encuentra entre 300 y 550 °C debido a la distribución heterogénea de carbono dentro de la austenita. Datos reportados por Chang [12], muestran que la concentración de carbono en la austenita residual tiende a ser ligeramente mayor al valor determinado teóricamente por la curva T_0 . Lo anterior se debe al crecimiento de las placas de ferrita, las cuales al formarse expulsan de forma inmediata una mayor cantidad de carbono hacia las vecindades próximas originando un inadecuado enriquecimiento con carbono en la austenita en las zonas intercelulares. Yescas [41], propone un valor de corrección del 1.33 % del valor teórico para estimar la concentración de carbono en la austenita al punto de equilibrio.

Concentración inicial de carbono en la austenita

El valor de C_γ° se ha correlacionado empíricamente como una función de la temperatura de austenización y del contenido de silicio, Voigt [35]:

$$C_\gamma^\circ = \frac{T_\gamma}{420} - 0.17 \%Wt. Si - 0.95 \quad (3.13)$$

donde T_γ es la temperatura de austenización en °C. Sin embargo, Chang [11] propuso una correlación en función del efecto de otros elementos aleantes sobre la concentración de carbono previa a la transformación bainítica:

$$C_\gamma^\circ = -1.70 + 0.0028 \times T_\gamma + 0.11 \times \%Wt.Mn - 0.057 \times \%Wt. Si - 0.058 \times \%Wt.Ni \\ + 0.013 \times \%Wt.Cu - 0.12 \times \%Wt.Mo \quad (3.14)$$

Fuerza motriz

La fuerza motriz se define como la diferencia entre las concentraciones de carbono en la austenita inicial, C_γ° , y la austenita residual, C_γ , durante la transformación ausferrítica. Chang [11], estudia el efecto de la curva T'_0 sobre la concentración de carbono en austenita al inicio y al final de la transformación. Explica también que C_γ° se incrementa al aumentar la temperatura de austenización mientras que C_γ disminuye al aumentar la temperatura de austemperización. Para maximizar la fuerza motriz, $(C_\gamma - C_\gamma^\circ)$, se requiere disminuir las temperaturas de austenización y austemperización dentro de los límites permitidos para asegurar una máxima formación de ferrita bainítica y por consiguiente una alta estabilidad de la austenita enriquecida con carbono, la cual de este modo, queda retenida entre las placas de ferrita. Para asegurar la estabilidad de la austenita retenida en aceros

con alto contenido de Si se requiere una relación entre la fracción en volumen de austenita y ferrita de 0.15, para el caso de los hierros colados este valor puede ser menor.

Fracción en volumen de austenita

La fracción en volumen de la austenita residual puede ser estimada por medio de la regla de la palanca si las concentraciones de las fases se conocen. Considerando que la concentración de carbono en la ferrita es de 0.03 wt. % C [11], la fracción de volumen de austenita residual se puede estimar utilizando la concentración de carbono al inicio de la transformación y la concentración de carbono en la austenita residual al momento en que cesa la transformación bainítica como:

$$x_{\gamma} = \frac{C_{\gamma}^{\circ} - 0.03}{C_{\gamma} - 0.03} \quad (3.15)$$

Sin embargo, existe la desventaja que esta relación está limitada a la formación de ferrita bainítica superior debido a que la concentración de carbono en la ferrita es subestimada a bajas temperaturas de austemperización. Es más, los resultados reportados por Chang [11] muestran que este valor subestima la concentración de carbono para el caso de la ferrita bainítica inferior pero propone un valor de 0.37 wt. % C para una temperatura de austemperización por debajo de los 350 °C. Este cambio en la concentración de carbono en la ferrita se origina por el atrapamiento de carbono debido a la formación de carburos. Yescas [41] explica que la presencia de carburos de transición durante la transformación de la ferrita bainítica inferior debe tomarse en cuenta ya que el carbono no se encuentra disponible para el enriquecimiento de la austenita residual. Por otro lado, existe evidencia de que la concentración de carbono en la ferrita se incrementa en función de la disminución de la temperatura de austemperización, por lo que una solución aceptable al problema de la precipitación de carburos de transición dentro de la ferrita es suponer una temperatura de austemperización más elevada. Takahashi [31] determina el perfil de concentraciones de carbono en la ferrita durante la etapa de transición de la ferrita bainítica superior a la ferrita bainítica inferior como una función de la temperatura de austemperización para el control de la precipitación de carburos, según se muestra en la figura 3.3.

Fracción en volumen de la ferrita bainítica

La fracción en volumen de la ferrita bainítica se puede determinar a partir de un modelo cinético. Utilizando la fracción transformada y la ecuación 3.11, se puede estimar la variación de carbono en la austenita retenida y el tiempo que tarda en alcanzar su

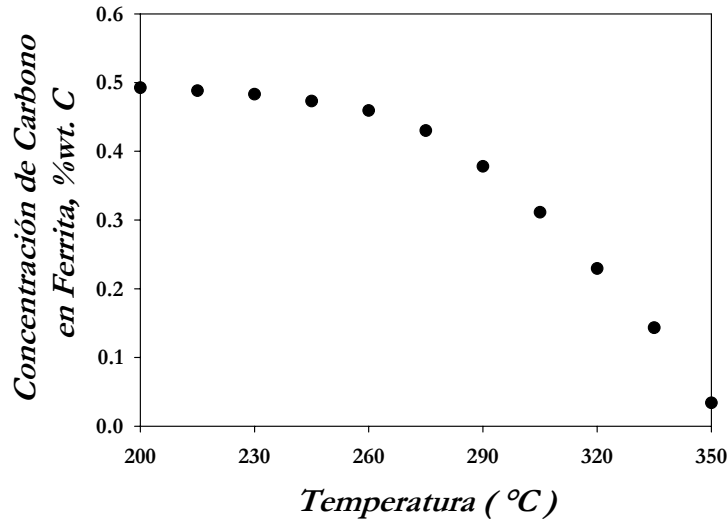


Figura 3.3: Concentración de carbono en la ferrita como una función de la temperatura de austemperización debido al efecto del atrapamiento de carbono por la formación de carburos de transición.

máxima fracción antes de la descomposición de la austenita residual. En los párrafos siguientes se profundizarán los modelos de transformación bainítica y martensítica.

3.2.2. Transformación bainítica

La cinética de transformación isotérmica de la austenita en ferrita bainítica durante el proceso de austemperización se ha determinado a partir del modelo descrito por Johnson - Mehl - Avrami [23, 11, 12, 13], según la siguiente ecuación:

$$x_{\alpha_b} = 1 - \exp(-\theta t^n) \quad (3.16)$$

donde x_{α_b} es la fracción en volumen de ferrita bainítica transformada, t es el tiempo de reacción y θ y n son los parámetros cinéticos que describen la rapidez de transformación. Tanto θ como n son constantes fuertemente dependientes de la composición química del hierro y de la temperatura de austemperización. La determinación de estos parámetros se realiza a partir de los diagramas TTT, López [22]. A partir de suponer que la fracción en volumen de la ferrita bainítica inicial, $x_{\alpha_b}^i$, es igual a 0.01 y la fracción final, $x_{\alpha_b}^f$, a 0.99 y utilizando la ecuación 3.16 se pueden desarrollar las ecuaciones para estimar los

parámetros cinéticos de transformación:

$$n(T) = \frac{\ln \left[\frac{\ln(1-x_{\alpha_b}^i)}{\ln(1-x_{\alpha_b}^f)} \right]}{\ln \left(\frac{t_i}{t_f} \right)}$$

$$k(T) = -\frac{\ln(1-x_{\alpha_b}^i)}{t_i^{n(T)}} \quad (3.17)$$

donde t_i y t_f son los tiempos de inicio y final de transformación determinados a partir de la lectura de las curvas del diagrama TTT correspondiente.

El tiempo de transformación isotérmico o también conocido como el *tiempo virtual*, θ_j , es el tiempo para obtener la fracción en volumen de ferrita bainítica transformada a la temperatura de austemperización para cada paso de tiempo, Δt , y se define como:

$$\theta_j = \dot{\theta}_j + \Delta t \quad (3.18)$$

donde $\dot{\theta}_j$ es el tiempo transcurrido para alcanzar la fracción transformada previa y se define como:

$$\dot{\theta}_j = \left[\frac{\ln \left(\frac{1}{1-x_{\alpha_b}^{k-1}} \right)}{k(T)} \right]^{\frac{1}{n(T)}} \quad (3.19)$$

Dado que la alta concentración de silicio en los hierros dúctiles retarda la presencia de perlita, la fracción de austenita residual se calcula como:

$$x_\gamma = 1 - x_{\alpha_b} \quad (3.20)$$

conocida la fracción en volumen de austenita residual y a partir de la ecuación 3.11, se puede estimar la fracción máxima en volumen de ferrita bainítica mediante la siguiente ecuación:

$$x_{\alpha_b}^{\text{máx}} = \frac{C_\gamma - C_\gamma^\circ}{C_\gamma - C_{\alpha_b}} \quad (3.21)$$

3.2.3. Transformación martensítica

Aunque la martensita es una fase residual e indeseable su determinación es indispensable para obtener un modelo preciso. Para determinar la cinética de transformación de la martensita en el modelo microestructural se incluye la máxima fracción en volumen de

ferrita bainítica, $x_{\alpha_b}^{\text{máx}}$. La formación de martensita está restringida a condiciones donde la transformación bainítica se lleva a cabo parcialmente y donde la temperatura M_s se encuentra por encima de la temperatura ambiente. Por otro lado, en el caso donde la temperatura M_s , es menor a la temperatura ambiente, la austenita residual enriquecida con carbono queda permanentemente retenida a temperatura ambiente durante el enfriamiento posterior al austemperizado, por lo que, la máxima fracción en volumen de austenita retenida, $x_{\gamma}^{\text{máx}}$, se calcula como:

$$x_{\gamma}^{\text{máx}} = 1 - x_{\alpha_b}^{\text{máx}} \quad (3.22)$$

donde $x_{\alpha_b}^{\text{máx}}$ se calcula a partir de la ecuación 3.21. Por otro lado, cuando M_s excede la temperatura ambiente y se encuentra por debajo de la temperatura B_s , la fracción máxima en volumen de austenita retenida se calcula como:

$$x_{\gamma}^{\text{máx}} = 1 - x_{\alpha_b}^{\text{máx}} - x_{\alpha'} \quad (3.23)$$

donde $x_{\alpha'}$ es la fracción en volumen de martensita, la cual se calcula a partir de la relación descrita por Koistinen - Marburger [19], la cual describe la cinética atérmica de la transformación martensítica en una pieza que ha sido previamente austenizada:

$$1 - x_{\alpha'} = \exp(-C_1 [M_s - T]) \quad (3.24)$$

donde C_1 es una constante determinada a partir de datos experimentales. Para aplicar este modelo cinético al modelo microestructural, la temperatura del medio después del austemperizado debe ser aproximadamente igual a la temperatura ambiente.

3.2.4. Validación microestructural

Debido a que los modelos térmicos acoplados a una fuente de calor interna no tienen soluciones analíticas simples y publicadas en la literatura, el modelo microestructural no se puede verificar respecto alguna solución analítica. Sin embargo, el modelo se logra validar rigurosamente respecto a pruebas experimentales bajo diferentes tiempos de austemperización. Las piezas austemperizadas se caracterizan estructuralmente con diferentes técnicas experimentales para obtener resultados que permitan validar de forma cualitativa y cuantitativa la evolución microestructural.

Caracterización microestructural

Para caracterizar la evolución microestructural se efectuaron mediciones de dureza a las piezas de hierro dúctil austemperizadas a diferentes tiempos de austemperización. Se

realizó un análisis cualitativo a partir de microscopía óptica y de barrido para determinar las fases en la matriz después del tratamiento térmico del austemperizado así como un análisis por medio de la técnica de difracción de rayos X para cuantificar la fracción en volumen y el contenido de carbono presente en la austenita retenida.

3.3. Evolución del campo de durezas

La estimación de la distribución de durezas se realiza aplicando la regla de las mezclas, que permite establecer que:

$$H_{RC} = X_{\alpha_b} H_{RC_{\alpha_b}} + X_{\alpha'} H_{RC_{\alpha'}} + X_{\gamma} H_{RC_{\gamma}} \quad (3.25)$$

donde H_{RC} es la dureza en Rockwell C del hierro austemperizado; X_{α_b} , $X_{\alpha'}$, X_{γ} son las fracciones en volumen de la ferrita bainítica, la martensita y la austenita retenida respectivamente; $H_{RC_{\alpha_b}}$, $H_{RC_{\alpha'}}$ y $H_{RC_{\gamma}}$ son las durezas características o estimadas de la ferrita bainítica, de la martensita y de la austenita respectivamente en la escala de Rockwell C. Las formulas empíricas desarrolladas por Maynier et al. [21] fueron utilizadas para el calculo de $H_{v_{\alpha_b}}$ y $H_{v_{\alpha'}}$ como funciones de la composición química y la velocidad de enfriamiento:

$$\begin{aligned} H_{v_{\alpha_b}} = & -323 + 185 \%Wt.C + 330 \%Wt.Si + 153 \%Wt.Mn + 65 \%Wt.Ni + 144 \%Wt.Cr \\ & + 191 \%Wt.Mo + (89 + 53 \%Wt.C - 55 \%Wt.Si - 22 \%Wt.Mn - 10 \%Wt.Ni \\ & - 20 \%Wt.Cr - 33 \%Wt.Mo) \log V_r \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} H_{v_{\alpha'}} = & 127 + 949 \%Wt.C + 27 \%Wt.Si + 11 \%Wt.Mn + 8 \%Wt.Ni \\ & + 16 \%Wt.Cr + 21 \log V_r \end{aligned} \quad (3.27)$$

donde V_r es la velocidad de enfriamiento calculada a 700 °C. Cabe señalar, que las correlaciones de dureza están basadas en pruebas realizadas en aceros, por lo que los resultados que se obtendrán serán aproximaciones a las durezas reales obtenidas en el ADI; además que estas durezas se reportan en la escala Vickers. La correlación propuesta para la bainita considera una mezcla de placas de ferrita y carburos, microestructura típica en aceros, este microconstituyente se espera que tenga una mayor dureza que la ferrita bainítica presente en los ADI, sin embargo, esta diferencia puede quedar compensada por la dureza de la austenita retenida, para la cual se propone un valor de $H_{RC_{\gamma}} = 20 HRC$.

3.4. Método de solución

Debido a que el problema, que resuelve la evolución térmica y microestructural del hierro dúctil austemperizado, está basado en una ecuación diferencial parcial, no homogénea de coeficientes variables, su solución requiere el uso de métodos numéricos. Entre los métodos más utilizados se encuentran los métodos de diferencias finitas y el método de elemento finito, los cuales son empleados para aproximar la solución de ecuaciones diferenciales parciales o ecuaciones integrales como las que se obtienen en este modelo. El método seleccionado para resolver el modelo es el método de elemento finito, el cual consiste en eliminar las ecuaciones diferenciales parciales o reescribirlas como un sistema de ecuaciones ordinarias. Para esto, el método de elemento finito propone una *solución ensayo* basada en los métodos de residuo pesado para aproximarla a la solución analítica. El sistema se divide en secciones finitas de volumen llamadas elementos, los cuales se encuentran conectados por medio de nodos colocados en sus entornos o vértices. Cada elemento tiene información asociada a su geometría y sus propiedades termofísicas, por lo que, la solución del problema se da mediante la interpolación entre los nodos de cada elemento que en conjunto conforman un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, el cual se resuelve por técnicas estándar como el método de Euler, Runge Kutta, etc. En la siguiente subsección se profundiza sobre la formulación del problema del austemperizado empleando el método de elemento finito.

3.5. Formulación del método de solución

Para formular un problema de transferencia de calor utilizando el método de elemento finito es necesario proponer una solución de ensayo que se aproxime a la solución analítica, de la forma:

$$U(r, t) \approx \tilde{U}(r, a(t)) \quad (3.28)$$

esta puede reescribirse como una función que depende de los parámetros adyacentes y las funciones de interpolación, como se muestra a continuación:

$$\tilde{U}(r, a(t)) = \phi_o(r) + \phi_1(r) a_1(t) + \phi_2(r) a_2(t) + \dots + \phi_n(r) a_n(t) \quad (3.29)$$

$\phi_i(r)$ son las funciones de interpolación y $a_i(t)$ son los parámetros o nodos adyacentes entre los elementos, puede apreciarse que estos parámetros dependen del tiempo debido a que se trata de un problema en estado inestable. Esta ecuación también puede reescribirse utilizando únicamente los parámetros adyacentes de interpolación y una función alterna

que describa el grado y el tipo de elemento a utilizar como una función polinomial, es decir:

$$\tilde{U}(r, a(t)) = a_0(t) + a_1(t)r + a_2(t)r^2 + a_3(t)r^3 + \dots + a_n(t)r^n \quad (3.30)$$

Para determinar las funciones de interpolación es necesario proponer un nuevo sistema de ecuaciones que permita relacionar la función de interpolación entre los parámetros adyacentes de cada uno de los elementos como una función del tipo de elemento utilizando la forma de la solución de ensayo. Para el caso de un elemento lineal el sistema alterno se define como el sistema de 2 ecuaciones lineales:

$$\begin{bmatrix} 1 & r_1 \\ 1 & r_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_0(t) \\ a_1(t) \end{bmatrix} \quad (3.31)$$

los valores α_i son los valores de los parámetros de interpolación, los cuales son sustituidos dentro de la solución de ensayo

$$\tilde{U}(r, a(t)) = \frac{r_2 - r}{r_2 - r_1} + \frac{r - r_1}{r_2 - r_1}r \quad (3.32)$$

las relaciones $\frac{r_2 - r}{r_2 - r_1}$ y $\frac{r - r_1}{r_2 - r_1}$ son las funciones de interpolación $\phi_1^e(r)$ y $\phi_2^e(r)$ respectivamente para cada elemento. Los valores de $a_i(t)$ a su vez se definen por medio de las condiciones a la frontera y la condición inicial.

Conociendo las funciones de interpolación y la ecuación general de energía se puede aplicar el método de Galerkin, el cual es un método de residuo pesado que tiene como finalidad reducir la desviación existente entre la solución de ensayo y la solución analítica por medio de la integración del producto de una función residual con una función de peso en todo el dominio del elemento. La función de peso debe ser una función que obligue a la función residual a minimizar el *residuo* o la desviación existente por medio de la interpolación de los parámetros adyacentes. En este caso, las funciones de peso serán las funciones $\phi_i^e(x)$, y la función residual se definirá por medio de la ecuación general de conducción de calor, la cual se expresa como:

$$R(r, \{a(t)\}) = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(-rk(T) \frac{\partial T(r, t)}{\partial r} \right) + \dot{q} - \rho(T) Cp(T) \frac{\partial T(r, t)}{\partial t} \quad (3.33)$$

aplicando el método de Galerkin, se tiene que:

$$\int_{\Omega} r \cdot R(r, \{a(t)\}) \cdot \phi(r) dV = 0$$

$$\int_{\Omega} r \cdot \left[-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(-rk \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \dot{q} - \rho Cp \frac{\partial T}{\partial t} \right] \cdot \phi(r) dV = 0 \quad (3.34)$$

integrando por partes:

$$\begin{aligned} -r \left(-k \frac{\partial T}{\partial r} \right) \phi(r) + k \int_{r_1}^{r_2} r \frac{dT(r)}{dr} \frac{d\phi(r)}{dr} dr + \int_{r_1}^{r_2} r \dot{q} \phi(r) dr \\ - \rho Cp \frac{\partial T}{\partial t} \int_{r_1}^{r_2} r \phi(r) dr = 0 \end{aligned} \quad (3.35)$$

La solución de ensayo puede tratarse como la función $\tilde{T}(r, a(t))$ en semejanza a $\tilde{U}(r, a(t))$, es decir:

$$\tilde{T}(r, a(t)) = a_1(t) \phi_1^e(r) + a_2(t) \phi_2^e(r) = \sum_{j=1}^n a_j(t) \phi_j^e(r) \quad (3.36)$$

a partir de la ecuación 3.1, se ve que es necesario determinar las derivadas con respecto al tiempo y la posición:

$$\frac{d\tilde{T}(r, a(t))}{dr} = a_1(t) \frac{d\phi_1^e(r)}{dr} + a_2(t) \frac{d\phi_2^e(r)}{dr} = \sum_{j=1}^n a_j \frac{d\phi_j^e(r)}{dr} \quad (3.37)$$

$$\frac{d\tilde{T}(r, a(t))}{dt} = \frac{da_1(t)}{dt} \phi_1^e(r) + \frac{da_2(t)}{dt} \phi_2^e(r) = \sum_{j=1}^n \frac{da_j(t)}{dt} \phi_j^e(r) \quad (3.38)$$

luego, sustituyendo las ecuaciones anteriores, en la ecuación 3.1, se obtiene que:

$$\begin{aligned} k(T) \left[\sum \int_{r_1}^{r_2} r \frac{d\phi_j(r)}{dr} \frac{d\phi_i(r)}{dr} dr \right] a_j(t) + \rho(T) Cp(T) \left[\sum \int_{r_1}^{r_2} r \phi_j(r) \phi_i(r) dr \right] \frac{da_j(t)}{dt} = \\ -r \left(-k(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right) \phi_i(r) + \int_{r_1}^{r_2} r \dot{q} \phi_i(r) dr \end{aligned} \quad (3.39)$$

esta ecuación puede reescribirse en su forma matricial, como:

$$[K] \{a_j(t)\} + [C] \left\{ \frac{da_j(t)}{dt} \right\} = \{FI\} + \{FB\} \quad (3.40)$$

A partir de la ecuación 3.39, se pueden determinar las componentes de la matriz conductiva, de la matriz de capacitancia y las cargas a la frontera e internas asociadas a las condiciones a la frontera e inicial y al término de generación de calor relacionado con la transformación de fase. Para calcular las componentes de la matriz conductiva, se utiliza el término:

$$k(T) \sum_j \int_{r_1}^{r_2} r \frac{d\phi_j^e(r)}{dr} k \frac{d\phi_i^e(r)}{dr} dr \quad (3.41)$$

Las componentes de la matriz conductiva se determinan a partir de las funciones de interpolación en cada uno de los elementos. A continuación se muestra el cálculo necesario para determinar la componente K_{11} para un elemento en general, para esto es necesario sustituir los valores $\frac{d\phi_i^e(r)}{dr}$ y $\frac{d\phi_j^e(r)}{dr}$, y realizar la integral correspondiente:

$$K_{11}^e = k \int_{r_1}^{r_2} \frac{r dr}{(r_2 - r_1)^2} = \frac{k^e(T) r_c^e}{\Delta r^e} \quad (3.42)$$

donde

$$r_c^e = \frac{r_1^e + r_2^e}{2} \quad (3.43)$$

y

$$\Delta r^e = r_2^e - r_1^e \quad (3.44)$$

debido a que se trata de una matriz cuadrática y simétrica, las componentes pueden quedar definidas a partir de la componente K_{11}^e , es decir la componentes $K_{22}^e = K_{11}^e$ y $K_{12}^e = K_{21}^e = -K_{11}^e$

Para las componentes de la matriz de capacitancia se utiliza el segundo término de la ecuación 3.39

$$\rho(T) Cp(T) \left[\sum \int_{r_1}^{r_2} r \phi_j(r) \phi_i(r) dr \right] \frac{da_j(t)}{dt} \quad (3.45)$$

siguiendo el mismo procedimiento, se espera que C_{11}^e sea igual a:

$$C_{11}^e = \rho(T) Cp(T) \int_{r_1}^{r_2} r \left(\frac{r_2 - r}{r_2 - r_1} \right)^2 dr = \rho(T) Cp(T) \frac{\Delta r^e}{6} (r_c^e + r_1^e) \quad (3.46)$$

tomando en cuenta que la matriz de capacitancia no es simétrica, es necesario obtener el valor correspondiente para la componente C_{22}^e , la cual siguiendo el procedimiento anterior, se obtiene como:

$$C_{22}^e = \rho Cp \int_{r_1}^{r_2} r \frac{(r - r_1)^2}{(r_2 - r_1)^2} dr = \rho Cp \frac{\Delta r^e}{6} (r_c^e + r_2^e) \quad (3.47)$$

Las componentes C_{21}^e y C_{12}^e no tienen relación alguna con C_{11}^e y C_{22}^e por lo que es necesario determinarlas al igual que las otras componentes utilizando el mismo procedimiento:

$$C_{21}^e = \rho Cp \int_{r_1}^{r_2} r \frac{(r_2 - r)(r - r_1)}{(r_2 - r_1)^2} dr = \rho Cp \left(r_c^e \frac{\Delta r^e}{6} \right) \quad (3.48)$$

la componente C_{12}^e es igual a la componente C_{21}^e .

Por otro lado, los términos asociados con las cargas de la frontera para cada uno de los elementos se encuentran dados por:

$$FB_i^e = -r \left(-k \frac{\partial T}{\partial r} \right) \phi_i^e(r) \quad (3.49)$$

a partir de esta relación se puede apreciar que cada término se encuentra dado por una densidad de flujo de calor, el cual a su vez se define con base a la condición de la frontera del tipo convectiva,

$$-r \left(-k \frac{\partial T}{\partial r} \right) \phi_i(r) = -rh(t) (T - T_\infty) \phi_i^e(r) \quad (3.50)$$

sustituyendo la solución de ensayo en la expresión anterior se tiene:

$$-rh(t) (T - T_\infty) \phi_i(r) = -rh(t) [\sum \phi_j^e(r) \phi_i^e(r)] a_j(t) + rh(t) T_\infty \phi_i^e(r) \quad (3.51)$$

el primer término de la derecha se asocia a una matriz conocida como la matriz convectiva $[K_{cf}]$ y se adiciona a la matriz conductiva $[K]$. Debido a que el coeficiente de transferencia de calor se estima en la superficie lateral de la pieza solamente se toma en cuenta una componente diferente de cero, es decir:

$$[K_{cf}] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & : & : & 0 \\ 0 & : & : & : & 0 \\ : & : & : & : & : \\ : & : & : & : & : \\ 0 & 0 & : & : & r_2^e h(t) \end{bmatrix} a_j(t) \quad (3.52)$$

El segundo término de la ecuación 3.51, contribuye a las cargas de frontera. Para las componentes de un elemento en general, FB_1^e y FB_2^e son:

$$FB_1^e = r_1 h(t) T_\infty \phi_1(r) = -r_1^e h(t) T_\infty \quad (3.53)$$

y

$$FB_2^e = r_2 h(t) T_\infty \phi_1(r) = r_2^e h(t) T_\infty \quad (3.54)$$

similarmente a lo hecho con la matriz convectiva con respecto al coeficiente de transferencia de calor, todos los términos FB_i^e se vuelven cero excepto la última componente del vector:

$$\{FB\} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ r_2^e h(t) T_\infty \end{bmatrix} \quad (3.55)$$

El último término de la ecuación 3.39 se encuentra asociado con el calor liberado por la transformación de fase ocurrida durante el tratamiento térmico del austemperizado. Para formular la generación de calor es necesario partir de:

$$\{FI_i^e\} = \int_{r_1}^{r_2} r \dot{q}_r \phi_i^e(r) dr \quad (3.56)$$

donde

$$\dot{q}_r = \Delta H \frac{\Delta F}{\Delta t} \quad (3.57)$$

donde ΔH es la entalpía asociada al calor liberado y $\frac{\Delta F}{\Delta t}$ es la rapidez de transformación. El valor de \dot{q}_r no depende de la distancia, por lo que se puede considerar constante durante el intervalo de tiempo corriente, pero antes es necesario evaluar la integral para cada uno de los parámetros adyacentes de cada elemento:

$$FI_1^e = \dot{q}_r \int_{r_1}^{r_2} r \phi_1^e(r) dr = \dot{q}_r \frac{\Delta r}{6} (r_2 + 2r_1) \quad (3.58)$$

y

$$FI_2^e = \dot{q}_r \int_{r_1}^{r_2} r \phi_2^e(r) dr = \dot{q}_r \frac{\Delta r}{6} (r_1 + 2r_2) \quad (3.59)$$

las cargas internas y de la frontera se suman en un mismo arreglo matricial de la forma:

$$[C] \left\{ \frac{da(t)}{dt} \right\} + [K] \{a(t)\} + [K_{cf}] \{a(t)\} = \{FB\} + \{FI\} \quad (3.60)$$

Además de lo anterior, se requiere evaluar los términos asociados con las derivadas de tiempo. Para esto, es necesario evaluar cada término al final de cada paso de tiempo n :

$$[C] \left\{ \frac{da(t)}{dt} \right\}_n + [K] \{a(t)\}_n + [K_{cf}] \{a(t)\}_n = \{FB\}_n + \{FI\}_n \quad (3.61)$$

las matrices $[K]$, $[K_{cf}]$ y $[C]$ no requieren de un sufijo debido a que se determinan a un tiempo atras, por lo que puede considerarse como matrices constantes.

La derivada de tiempo se aproxima por medio de una diferencia finita hacia atras en el tiempo:

$$\left\{ \frac{da(t)}{dt} \right\}_n \simeq \frac{\{a\}_n - \{a\}_{n-1}}{\Delta t_n} \quad (3.62)$$

donde $\Delta t_n = t_n - t_{n-1}$. Cabe señalar, que la ecuación 3.62 es una relación vectorial, que indica que la expresión diferencial aplica separadamente para cualquier parámetro adyacente dentro de un elemento en el vector. Tal que, para un parámetro i ,

$$\left(\frac{da_i(t)}{dt} \right)_n \simeq \frac{(a_i)_n - (a_i)_{n-1}}{\Delta t_n} \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3.63)$$

sustituyendo la ecuación 3.62 dentro de la ecuación 3.61 y considerando que todos los términos son conocidos:

$$\left(\frac{1}{\Delta t_n} [C] + [K] + [K_{cf}] \right) \{a\}_n = \{FB\}_n + \{FI\}_n + \frac{1}{\Delta t_n} [C] \{a\}_{n-1} \quad (3.64)$$

la ecuación 3.64, es un sistema de ecuaciones algebraicas de la forma:

$$[K_{eff}] \{a\}_n = \{F_{eff}\} \quad (3.65)$$

donde $[K_{eff}]$ es la matriz de rigidez efectiva y $\{F_{eff}\}$ es un vector de carga efectivo. El sistema de ecuaciones 3.65, se puede resolver por medio de un método de eliminación gaussiana para la inversión de la matriz $[K_{eff}]$ o por un método de solución directa como el algoritmo de Thomas.

3.6. Implementación del modelo

Se creó un código en Visual Basic V 6.0 para resolver el modelo del austemperizado del hierro dúctil. La figura 3.4, muestra el diagrama de flujo del algoritmo desarrollado. Este programa utiliza las propiedades termofísicas del material y del medio de enfriamiento como son: la densidad, el calor específico, la conductividad térmica y el coeficiente de transferencia de calor del baño de sales. El código involucra, las condiciones de operación como son: las temperaturas de austenización, de austemperización, de inicio de transformación martensítica y la del medio de enfriamiento y el tiempo de austemperización. Utiliza también, los parámetros cinéticos de la transformación de la ferrita bainítica y la composición química del hierro dúctil, tomando en cuenta el porcentaje en masa de carbono, silicio, manganeso, molibdeno, cobre, níquel y cromo. Con base en la geometría de la pieza, la cual queda limitada a piezas cilíndricas largas, se proponen los parámetros de

solución del modelo como son: el número de elementos y el paso de tiempo. Con todos estos datos el código resuelve el problema térmico del austemperizado con o sin transformación de fase tomando en cuenta el enfriamiento posterior al tratamiento térmico.

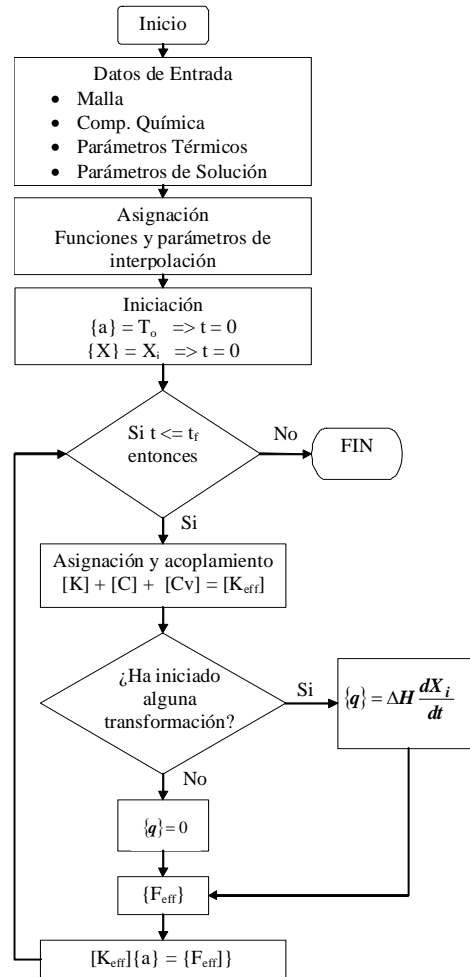


Figura 3.4: Diagrama de flujo para la solución del del modelo del austemperizado del hierro dúctil.

Este modelo se basa en la formulación descrita en la sección anterior, donde como primer paso el modelo asigna los parámetros y las funciones de interpolación con base a la geometría de la pieza seguida de la inicialización de las variables del proceso como son: la temperatura de austenización y las fracciones en volumen de la ferrita bainítica y de la martensita de acuerdo a las condiciones a la frontera e inicial. Se asignan las compo-

nentes de las matrices de conducción, de capacitancia y de convección, interpolando las propiedades termofísicas en función de la temperatura, y sí la condición de transformación se cumple se prosigue a resolver el campo microestructural mediante los parámetros cinéticos para cada una de las transformaciones de fase. Se asignan las componentes de los vectores de carga y de frontera y se agrupa el sistema de ecuaciones diferenciales, el cual se resuelve con un método de solución directa. Este procedimiento se repite hasta que la simulación alcanza el tiempo de austemperización especificado, luego continúa con la simulación del enfriamiento de la pieza a temperatura ambiente. Al final de la simulación se obtiene la temperatura de cada uno de los nodos adyacentes para cada elemento en función del tiempo y la posición, así como las fracciones en volumen de cada una de las fases presentes en el ADI.

3.7. Análisis de sensibilidad

El análisis de sensibilidad determina el efecto de las variables tanto del modelo como del proceso sobre la respuesta del campo térmico y microestructural del austemperizado. Se analiza el efecto del término de generación y los parámetros cinéticos de la transformación bainítica sobre la respuesta térmica y la evolución microestructural y el efecto de la temperatura de inicio de transformación martensítica sobre el contenido de austenita retenida.

3.8. Aplicación

El modelo tiene la capacidad de predecir la respuesta térmica y microestructural del austemperizado para diferentes aleaciones de hierro dúctil y para diferentes parámetros térmicos con la finalidad de seleccionar nuevas combinaciones de aleaciones y tratamientos. Se basa en la caracterización del medio de enfriamiento por medio de la respuesta térmica y la geometría de las piezas para determinar la templabilidad del material y discernir la viabilidad del proceso para piezas de sección gruesa. Las piezas de sección gruesa requieren un medio de enfriamiento con una mayor extracción de calor o de la adición previa de elementos aleantes que permitan retardar el inicio de la transformación bainítica. Entre los elementos más utilizados se encuentran el Mo, el Ni y el Cu. Sin embargo, la adición de estos elementos debe ser controlada ya que cantidades en exceso pueden perjudicar las propiedades mecánicas del hierro austemperizado. El modelo también determina el efecto de los elementos aleantes sobre la fracción en volumen de austenita retenida. La austenita

retenida a su vez determina las fracciones en volumen de las fases residuales como la martensita. Estas fracciones se utilizan para estimar la dureza del material y controlar las variables del proceso.

Capítulo 4

Procedimiento Experimental

En este capítulo se describen los procedimientos experimentales aplicados para estimar la condición de la frontera y validar la predicción del campo térmico y microestructural mediante la caracterización del hierro dúctil austemperizado. A continuación se explican los procedimientos experimentales para el tratamiento térmico del austemperizado y para la determinación de la condición de la frontera.

La figura 4.1, muestra el esquema del procedimiento experimental para la determinación de la condición de la frontera a partir de pruebas de enfriamiento con piezas cilíndricas de acero inoxidable AISI 304 austenítico utilizando dos medios de enfriamiento: sales fundidas con agitación y sales fundidas sin agitación.



Figura 4.1: Diagrama de flujo del procedimiento experimental para la caracterización del medio de enfriamiento y la determinación de la condición de frontera.

La figura 4.2, muestra el esquema del procedimiento experimental para el desarrollo del tratamiento térmico del austemperizado en piezas cilíndricas de hierro dúctil A 526 65-45-12 con una matriz ferrítica. El análisis por difracción de rayos X, por microscopía óptica y por microscopía de barrido así como la medición de durezas tiene la finalidad de caracterizar la microestructura del material para la validación del modelo.

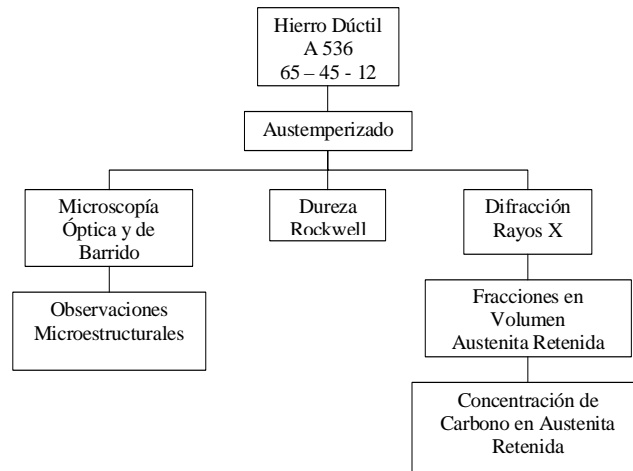


Figura 4.2: Diagrama de flujo del procedimiento experimental para la caracterización del hierro dúctil austemperizado.

4.1. Probetas

Se maquinaron probetas cilíndricas de $\frac{1}{2}$ pulgada de diámetro por $2\frac{1}{2}$ pulgadas de altura a partir de una barra de $1\frac{1}{2}$ pulgada de diámetro de hierro dúctil, ASTM A 536 grado 65-45-12 y de acero inoxidable austenítico, AISI 304. Las composiciones químicas de los materiales se muestran en la tabla 4.1.

Material	%C	%Si	%Mn	%P	%Mg	%S	%Cr	%Ni
AISI 304	0.04	0.43	1.5	0.035	-	0.021	18.25	8.09
ASTM A536	3.70	3.0	0.18	0.069	0.045	0.011	-	-

Tabla 4.1: Composición química del acero AISI 304 y el hierro nodular ASTM A536 grado 65-45-12

A las probetas se les maquinaron 2 barrenos de $\frac{1}{16}$ de pulgada de diámetro para la colocación de dos termopares, uno al centro de la probeta con una profundidad de $1\frac{1}{4}$ de pulgada y otro a 1.5 mm de la superficie lateral con la misma profundidad, como se muestra en la figura 4.3. Las probetas se instrumentaron con termopares tipo K, con cubierta de inconel de $\frac{1}{16}$ de pulgada de diámetro.

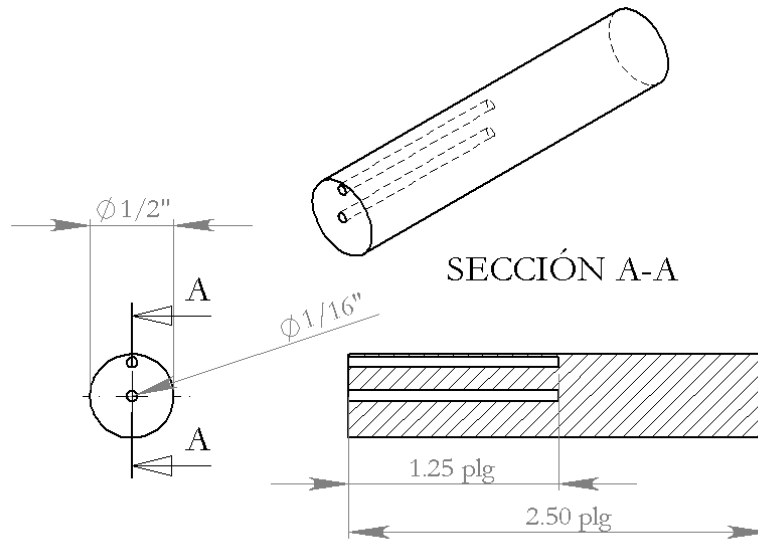


Figura 4.3: Diseño de la probeta experimental

4.2. Dispositivo experimental

El dispositivo creado para las pruebas de enfriamiento y de austemperizado consta de las siguientes partes: 1) horno de resistencias de sales, 2) pieza y guía de inmersión, 3) soporte metálico, 4) sistema semi-automático de inmersión y 5) horno de resistencias de colocación vertical. El dispositivo se muestra en la figura 4.4.

4.3. Tratamientos térmicos

Se realizó un tratamiento térmico de enfriamiento en sales fundidas utilizando probetas de acero inoxidable AISI 304 con el objetivo de caracterizar el medio de enfriamiento

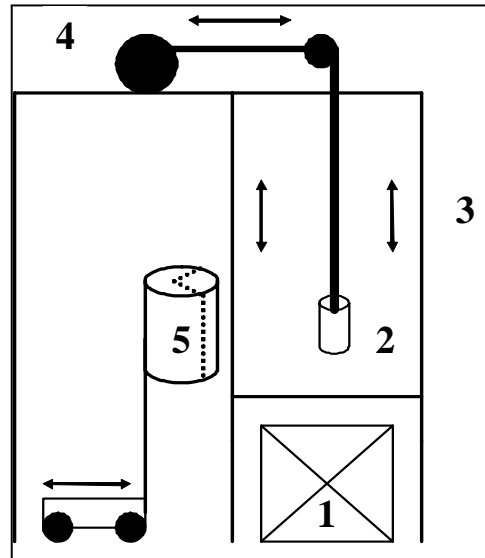


Figura 4.4: Dispositivo experimental creado para las pruebas de enfriamiento y de austemperizado del hierro dúctil.

sin las contribuciones por el calor generado por la transformación bainítica. Con estos resultados, se determinó la condición de la frontera en la superficie lateral. Las sales utilizadas en la experimentación corresponden a una mezcla de nitritos de potasio y nitratos de sodio. Además, se realizaron pruebas sin y con agitación implementando un dispositivo de inyección de aire para aumentar la rapidez de enfriamiento. Las pruebas de enfriamiento se realizaron a partir de un calentamiento controlado a una temperatura de 920°C , a la cual las piezas fueron mantenidas durante 5 minutos para su estabilización térmica y enfriadas posteriormente en un baño de sales a 300°C , hasta alcanzar el equilibrio térmico. Una vez alcanzado el equilibrio térmico las piezas fueron enfriadas fuera del baño de sales hasta alcanzar la temperatura ambiente. Las pruebas fueron realizadas utilizando un solo termopar a una distancia de 1.5 mm de la superficie lateral y una profundidad de $1\frac{1}{4}$ de pulgada con una frecuencia de adquisición de 0.309 s.

Para el austemperizado se utilizaron probetas de hierro dúctil, A 536 grado 65-45-12, las cuales fueron austenizadas a 920°C durante un período de 60 minutos. El tiempo de austenización fue determinado mediante pruebas de enfriamiento en discos del mismo hierro de 10 mm de longitud por $\frac{1}{2}$ pulgada de diámetro a diferentes tiempos de austenización. Estas se realizaron a partir de una temperatura de austenización de 920°C seguida de un enfriamiento en agua después del tiempo de permanencia. Las durezas de estas piezas

fueron medidas y representadas gráficamente con respecto al tiempo, figura 4.5.

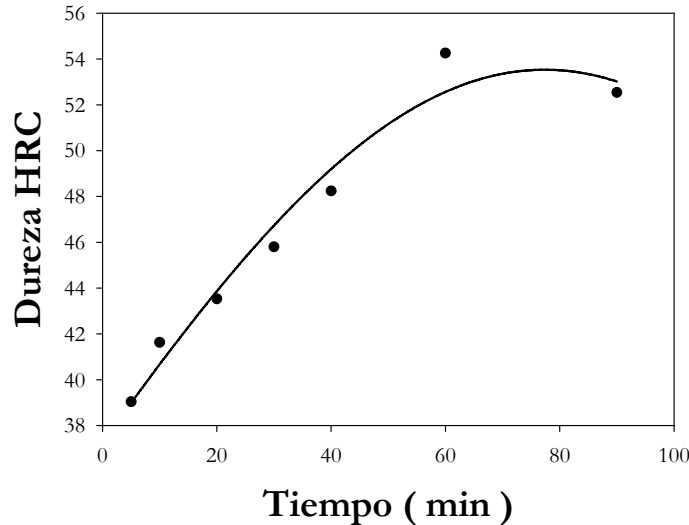


Figura 4.5: Efecto del tiempo de austenización sobre la dureza del hierro dúctil. Las piezas fueron austenizadas a $920\text{ }^{\circ}\text{C}$ y enfriadas en agua a temperatura ambiente.

A partir de la figura 4.5, se observa que la dureza se incrementa en función del tiempo de austenización llegando a un valor máximo entre 60 - 70 minutos, en este punto se espera que el carbono se haya solubilizado de manera homogénea en la austenita ya que después de este tiempo la dureza empieza a decaer probablemente al crecimiento de grano de la austenita. La etapa de austenización es importante ya que se requiere solubilizar de manera homogénea el carbono en la austenita para lograr una óptima formación de las fases que conforman a la ausferrita.

Para las pruebas de austemperizado, las piezas de hierro dúctil fueron sumergidas en una cama de grafito para evitar su oxidación durante el calentamiento y la etapa de austenización. Una vez austenizadas, las probetas fueron enfriadas dentro de un baño de sales fundidas con agitación durante períodos de 120, 240, 390 y 2200 segundos. Los tiempos fueron establecidos a partir de los datos reportados por Cisneros [13]. Una vez alcanzado el tiempo de austemperización las probetas fueron enfriadas en agua para retener la fase formada por el tratamiento térmico.

En ambos tratamientos, la respuesta térmica de las probetas fue medida continuamente mediante el uso termopares tipo K, de $\frac{1}{16}$ de pulgada de diámetro, conectados a un tarjeta de adquisición de datos NI 4350 de National Instruments. Los datos transmitidos

al adquirente fueron convertidos y almacenados mediante el software Virtual Bench.

4.4. Microscopía óptica

Después del austemperizado las probetas fueron preparadas para un análisis metalográfico. Las probetas se cortaron transversalmente con una longitud de 5 mm y se montaron en baquelita. La superficie de cada probeta fue desbastada convencionalmente con lijas de SiC y pulidas con alúmina de 1.0 y 0.3 μm . Después del desbaste y pulido, fueron atacadas químicamente con Nital al 2% y observadas en un microscopio óptico, Olympus PMG3, mediante el software Image-Pro Plus para analizar y adquirir imágenes de las microestructuras observadas.

4.5. Microscopía electrónica de barrido

Debido a que es difícil discernir la presencia de martensita a tiempos cortos de austemperización, las probetas austemperizadas fueron sometidas a microscopía electrónica de barrido (MEB) para determinar cualitativamente esta fase. Las probetas fueron preparadas con el mismo procedimiento empleado para el análisis metalográfico y fueron observadas mediante un microscopio JEOL JSM-35CF con electrones secundarios a 20 Kv.

4.6. Dureza

Para la medición de durezas, se realizaron cortes transversales en las probetas, de 5mm de longitud, seguidas del mismo procedimiento empleado para el análisis metalográfico. Las durezas fueron medidas mediante un durómetro Macromet^H Hardness Tester en la escala Rockwell C. Las mediciones fueron realizadas en la dirección radial.

4.7. Difracción de rayos X

El contenido de carbono en la austenita retenida, así como la fracción en volumen de las fases presentes en las probetas austemperizadas fueron medidas mediante la técnica de difracción de rayos X. Un difractómetro Siemens D5000 fue empleado para un barrido en la escala de 2θ de 45 a 105 ° con un paso de 0.02° cada 0.6 s utilizando una radiación de Cu K_{α} a 35 mV y 30 mA. Las muestras fueron cortadas transversalmente con una

longitud de 5 mm y preparadas para un análisis metalográfico convencional antes de ser sometidas a difracción de rayos X.

La fracción en volumen de la austenita retenida fue estimada mediante el método de comparación directa, el cual se basa en la comparación de las intensidades integradas de la ferrita y de la austenita asumiendo que solo estas 2 fases se encuentran presentes. La relación de las intensidades difractadas de los picos de 2 fases de una muestra policristalina está dada por [14]:

$$\frac{I_\gamma}{I_{\alpha_b}} = \frac{R_\gamma x_\gamma}{R_{\alpha_b} x_{\alpha_b}} \quad (4.1)$$

donde I_i son las intensidades integradas de cada fase, x_i es la fracción en volumen de cada fase y R_i es una constante que depende de θ , hkl y del tipo de sustancia, la expresión para R_i se da como:

$$R = \frac{1}{v^2} \left[|F|^2 p \left(\frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta} \right) \right] e^{-2M} \quad (4.2)$$

donde

- v^2 es el volumen de la celda unitaria,
- F es el factor de estructura,
- p es el factor de multiplicidad,
- $\left(\frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta} \right)$ es el factor de Lorentz y
- e^{-2M} es el factor de temperatura.

Considerando que todos los materiales exhiben una orientación preferente, se tomó el promedio de las intensidades integradas de al menos 3 reflexiones específicas para los planos de ferrita y austenita.

Cabe señalar, que a tiempos cortos de austemperización los planos de difracción de la martensita y la ferrita se traslapan, por lo que se consideran como una mezcla o una sola fase.

Las fracción en volumen para cada una de las fases se obtiene mediante las relaciones $\frac{I_\gamma}{I_{\alpha_b}}$ y $\frac{R_\gamma}{R_{\alpha_b}}$ y de la regla de conservación de las fases:

$$\frac{I_\gamma}{I_{\alpha_b}} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{3} \frac{I_i^\gamma}{I_i^{\alpha_b}} \quad (4.3)$$

Fase	Plano de Difracción
austenita	<i>200</i>
austenita	<i>220</i>
austenita	<i>311</i>
ferrita bainítica	<i>002 / 200</i>
ferrita bainítica	<i>112 / 211</i>
ferrita bainítica	<i>220</i>

Tabla 4.2: Planos de difracción preferentes empleados para la austenita y la ferrita bainítica.

$$\frac{R_\gamma}{R_{\alpha_b}} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{3} \frac{R_i^\gamma}{R_i^{\alpha_b}} \quad (4.4)$$

$$x_\gamma + x_{\alpha_b} = 1 \quad (4.5)$$

Por otro lado, la concentración de carbono se calcula a partir del parámetro de red de la austenita retenida, el cual fue determinado a partir del espaciamiento interplanar de los picos difractados y la ley de Bragg. La concentración de carbono en la austenita retenida se calcula con la correlación desarrollada por Dyson & Holmes [15]:

$$\begin{aligned} a_\gamma = & 3.578 + 0.033C + 0.00095Mn - 0.0002Ni + 0.0006Cr \\ & + 0.0220N + 0.0056Al - 0.0004Co + 0.0015Cu + 0.0031Mo \\ & + 0.0051Nb + 0.0039Ti + 0.0018V + 0.0018W \end{aligned} \quad (4.6)$$

Capítulo 5

Resultados y discusión

En este capítulo se muestran los resultados obtenidos al verificar, validar y aplicar el modelo térmico y microestructural del austemperizado del hierro dúctil. Cabe señalar que en este trabajo a las curvas de enfriamiento en función del tiempo se les denomina respuestas térmicas.

5.1. Verificación del modelo térmico

Para la verificación del modelo térmico se siguieron los procedimientos descritos en la subsección 3.1.7, para los casos cuando no existe la generación de calor en el sistema y también para cuando este término se relaciona con el calor generado por la transformación de fase durante el austemperizado.

5.1.1. Sistema sin generación de calor

La figura 5.1, muestra la temperatura en función del tiempo obtenida tanto por la solución analítica como por la solución numérica para un sistema de enfriamiento newtoniano. Ambas respuestas fueron calculadas a partir de considerar que no existe ninguna fuente interna de calor en el sistema.

A partir de la figura 5.1, se observa que ambos comportamientos térmicos en función del tiempo son muy parecidos ya que las temperaturas se traslapan unas con otras, lo cual indica que la solución numérica converge hacia la solución analítica y por lo cual se considera que el modelo térmico queda verificado para el caso cuando no hay generación de calor en el sistema. Esto se observó también bajo otras condiciones de cálculo.

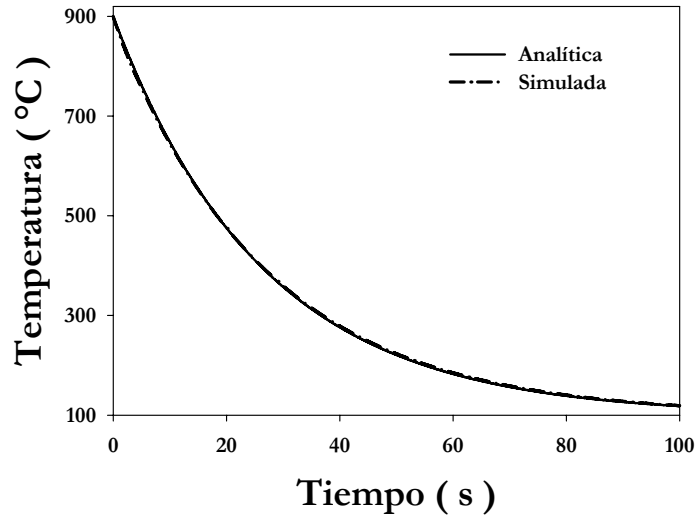


Figura 5.1: Respuestas térmicas calculadas tanto por la solución analítica como por la solución numérica durante el tratamiento de temple en agua sin transformación de fase utilizando una temperatura de austenización de $900\text{ }^{\circ}\text{C}$, un tiempo de tratamiento de 100 s así como un coeficiente de transferencia de calor de $450\text{ }\frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{ }^{\circ}\text{C}}$. Nótese que la respuesta de la solución numérica se traslapa con la de la solución analítica.

5.1.2. Sistema con generación de calor

Debido a la falta de información referente a modelos matemáticos que estimen el campo térmico acoplado al campo microestructural en el tratamiento térmico del austemperizado, se busco información acerca de modelos que describieran el enfriamiento continuo de piezas cilíndricas tomando en cuenta alguna transformación de fase. Agarwal [3], reporta datos experimentales concernientes al enfriamiento de piezas cilíndricas de acero eutectoide 1080 y la descomposición de la austenita a perlita. Las condiciones de simulación para calcular la respuesta térmica se apegaron a las condiciones experimentales. Se consideró un sistema de enfriamiento, del tipo newtoniano, con generación de calor por transformación de fase. El mecanismo controlante es la convección hacia el medio de enfriamiento que se da en la superficie lateral y se considera que las propiedades termofísicas del material son constantes. Cabe mencionar, que durante el enfriamiento de este material se requiere estimar la fracción transformada de perlita. El modelo del austemperizado se utilizó para estimar la fracción transformada de perlita por medio de un modelo cinético de transformación del tipo Avrami, véase la subsección 3.2.2.

En la figura 5.2, se muestran los perfiles de temperatura tanto experimental como simulado con el modelo del austemperizado, en función del tiempo para una pieza cilíndrica de acero eutectoide 1080. El perfil experimental proviene de los datos publicados por Argawel [3].

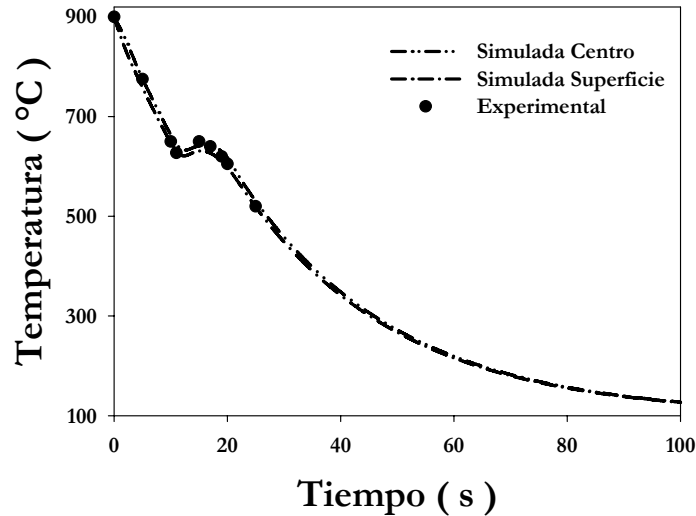


Figura 5.2: Respuesta térmica de un acero eutectoide durante el tratamiento de temple en agua utilizando una temperatura de austenización de $900\text{ }^{\circ}\text{C}$ y un tiempo de tratamiento de 100 s .

Se puede apreciar de la figura 5.2, que la temperatura disminuye en función al tiempo y que ambos comportamientos son muy parecidos entre si. Se puede decir que el modelo predice precisamente la fracción transformada dado que las predicciones de la magnitud de la recalescencia generada por la transformación de fase son muy similares a la respuesta experimental. Se observa que aunque el modelo se ha verificado ante un sistema de enfriamiento newtoniano, es capaz de predecir precisamente los gradientes térmicos en la dirección r . También, se ve que la diferencia entre las temperaturas de la superficie y del centro de la pieza para un tiempo dado no es significativa. De acuerdo con estos resultados se da por verificado el modelo térmico del austemperizado con generación de calor por transformación de fase.

5.2. Medio de enfriamiento

Para la determinación de la condición de la frontera en la superficie lateral de la pieza se requirió la caracterización del medio de enfriamiento, para esto se realizaron pruebas de enfriamiento empleando piezas cilíndricas de acero inoxidable AISI 304. Estas pruebas se realizaron con y sin agitación del medio de enfriamiento.

5.2.1. Sistema de enfriamiento sin agitación

Para determinar la condición de la frontera en la superficie lateral durante el austemperizado sin agitación del medio de enfriamiento se construyó la figura 5.3, la cual muestra las respuestas térmicas experimentales de las pruebas enfriamiento sin agitación en piezas cilíndricas de acero inoxidable AISI 304 a partir de una temperatura inicial de 920 °C.

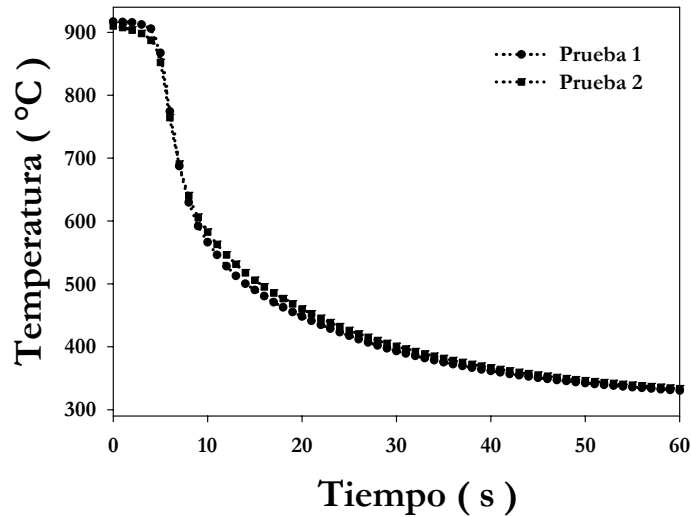


Figura 5.3: Respuestas térmicas experimentales de las pruebas de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable AISI 304, en un baño de sales sin agitación.

En esta figura, se muestran las curvas de enfriamiento medidas experimentalmente para dos pruebas de enfriamiento hechas a las mismas condiciones de operación. Se puede apreciar que existe una pequeña diferencia entre ambas curvas de enfriamiento muy probablemente debido a que la temperatura del baño no fue uniforme durante el enfriamiento. Para estudiar la causa de esta aparente falta de reproducibilidad en el dispositivo experimental se procede a comparar las temperaturas del baño de sales en ambas pruebas.

La figura 5.4 muestra la temperatura del medio de enfriamiento, baño de sales, en función del tiempo para los experimentos mostrados en la figura 5.3.

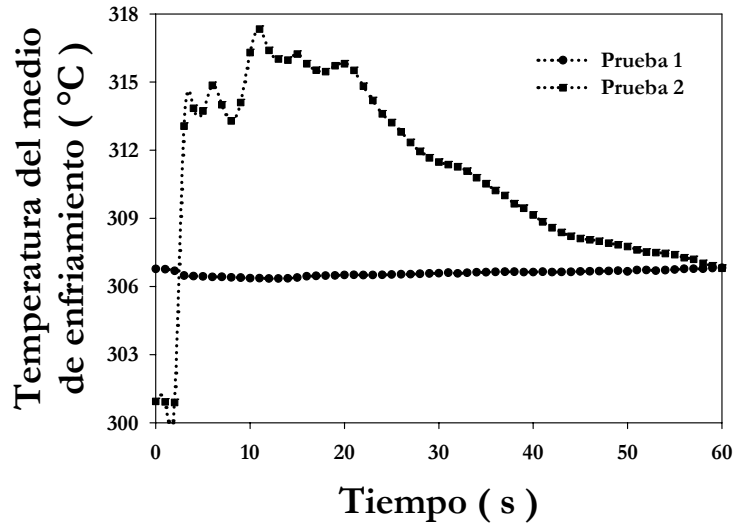


Figura 5.4: Temperatura del medio de enfriamiento en función del tiempo para las pruebas de enfriamiento, en las piezas de acero inoxidable AISI 304, en un baño de sales sin agitación.

Se observa claramente, que para la prueba 2, la temperatura del medio de enfriamiento se incrementa debido a la energía que aporta la pieza al momento de la inmersión alcanzando una diferencia de casi 15°C con respecto a la temperatura inicial antes de la inmersión. Cabe señalar, que la temperatura del medio de enfriamiento durante la prueba 1 no se ve alterada por el calor transferido de la pieza hacia al baño de sales. Esto es posiblemente debido a que la punta del termopar fue desplazada durante la inmersión y a que la temperatura adquirida corresponde a de la zona cercana a la superficie del crisol, donde el efecto de la inmersión se detecta con menor intensidad.

5.2.2. Sistema de enfriamiento con agitación

Para minimizar el efecto causado por el calentamiento del medio de enfriamiento debido a la inmersión de la pieza así como a la presencia de gradientes térmicos dentro del baño de sales, se decidió modificar el dispositivo experimental incorporando un sistema de inyección de aire como se mencionó en el capítulo de procedimientos experimentales. La figura 5.5, muestra las curvas de enfriamiento de las pruebas 3 y 4, con agitación del medio

de enfriamiento, empleando piezas de acero inoxidable AISI 304. Las curvas mostradas corresponden a la prueba estándar y a la prueba de reproducibilidad.

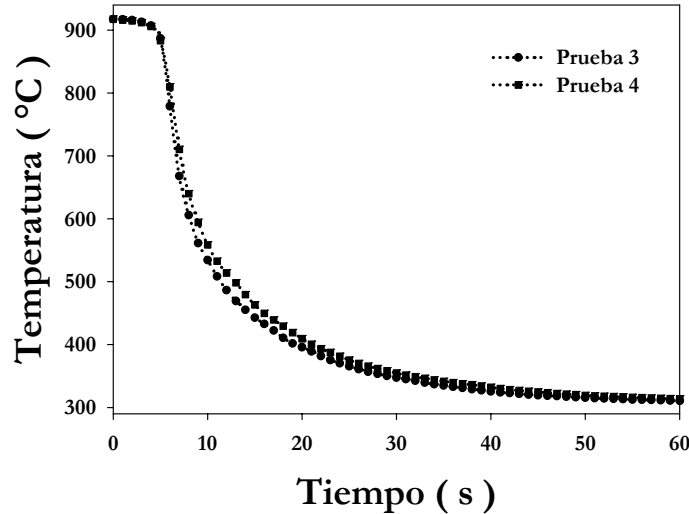


Figura 5.5: Respuestas térmicas experimentales de las pruebas de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable AISI 304, en un baño de sales con agitación.

A partir de la figura 5.5, se observa que la respuesta térmica en ambas curvas es muy parecida. Esto se debe a que la inyección de aire en el sistema tiene la capacidad de disipar el calor suministrado por la pieza al momento de la inmersión y homogenizar la temperatura del baño de sales.

Para corroborar lo anterior, se incluye la figura 5.6, donde se muestra la temperatura del medio de enfriamiento en función del tiempo al momento de la inmersión para las pruebas mencionadas en la figura 5.5.

De la figura 5.6, se puede observar que la temperatura del medio de enfriamiento se incrementa a partir de la inmersión de la pieza y se mantiene constante alrededor de los $306\text{ }^{\circ}\text{C}$ para ambas pruebas. En comparación con las pruebas realizadas sin agitación, el incremento en la temperatura del medio disminuye alcanzando una diferencia de apenas $6\text{ }^{\circ}\text{C}$ con respecto a la temperatura inicial antes de la inmersión.

El efecto de la agitación impulsada por la inyección de aire sobre la rapidez de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable se muestra en la figura 5.7, de la página 58, en la cual se compara la templabilidad del acero al incorporar la nariz de inicio de transformación de la ferrita bainítica de acuerdo al diagrama TTT para un hierro dúctil de baja

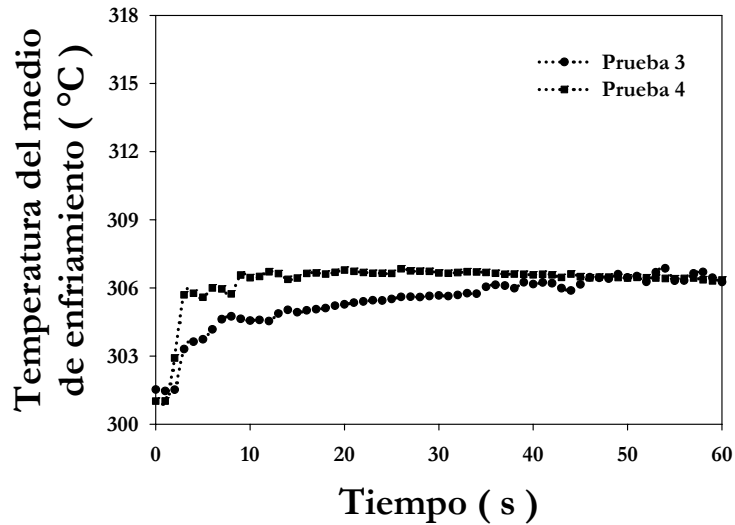


Figura 5.6: Temperatura del medio de enfriamiento en función del tiempo para las pruebas de enfriamiento, en las piezas de acero inoxidable AISI 304, en un baño de sales con agitación.

aleación [13].

En la figura 5.7, se observa que la agitación dentro del baño de sales mejora la templeabilidad del acero inoxidable, esto asegura que la nariz de transformación (línea continua) no sea cruzada antes de alcanzar la temperatura del medio de enfriamiento. Se puede observar también, que la agitación dentro del baño de sales incrementa la rapidez de enfriamiento entre los 300 y 600 °C. Esto aumenta el rango de temperatura, en el cual se puede hacer el tratamiento térmico antes de cruzar la nariz de transformación de acuerdo al diagrama TTT. Por otro lado, las pruebas sin agitación muestran una rapidez de enfriamiento menor, esto provoca que el hierro inicie su transformación antes de alcanzar la temperatura del medio. Esto es considerado como un tratamiento térmico de enfriamiento continuo, el cual genera gradientes térmicos y microestructurales dentro del material provocando una disminución en las propiedades mecánicas. Con base en lo anterior, es posible afirmar que se logra el control del tratamiento térmico por medio de la agitación del medio de enfriamiento. Además, al considerar que la difusividad térmica del hierro dúctil es mayor que la del acero inoxidable, se ve que se tendrá una rapidez de enfriamiento todavía mayor. Con estas mejoras, el dispositivo experimental quedó listo para realizar las pruebas de austemperizado con las piezas de hierro dúctil.

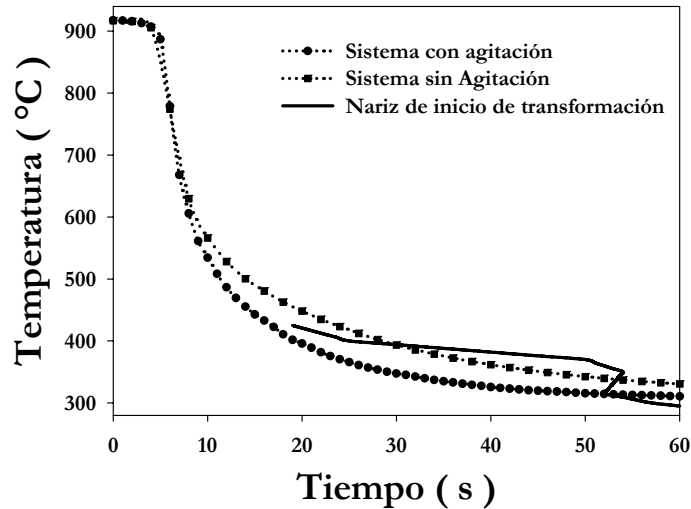


Figura 5.7: Efecto de la agitación sobre la templabilidad del acero inoxidable AISI 304, para las pruebas de enfriamiento con y sin agitación, en el medio de enfriamiento.

5.3. Determinación de la condición de la frontera

Con base en las respuestas térmicas obtenidas para las pruebas de enfriamiento del acero inoxidable, AISI 304, mostradas en la sección anterior, se estima y se compara el flux de calor para cada caso de acuerdo a los procedimientos establecidos en la subsección 3.1.6. En la figura 5.8, se muestra el efecto de la agitación del medio de enfriamiento sobre el flux de calor en función de la temperatura de la superficie.

Con base en la figura 5.8, se puede ver que cuando el sistema se encuentra sin agitación, la extracción de calor hacia el medio de enfriamiento es menor en comparación a cuando hay agitación. Cuando no hay agitación, el enfriamiento se encuentra controlado por el mecanismo de convección natural. Por otro lado, para cuando el medio de enfriamiento se encuentra agitado, se observa un mayor flux de calor en la superficie lateral, el cual se mantiene elevado aún a temperaturas cercanas a la temperatura del baño de sales; esto se debe a que la agitación promueve de manera más eficaz la transferencia de calor por el mecanismo de convección forzada. La agitación homogeniza la temperatura del baño debido a que genera una recirculación en el sistema, la cual contribuye a distribuir el calor dentro del medio de enfriamiento.

De acuerdo con el análisis anterior, se muestra que la agitación dentro del baño de sales mejora las condiciones de enfriamiento. Por lo que a continuación se muestra un

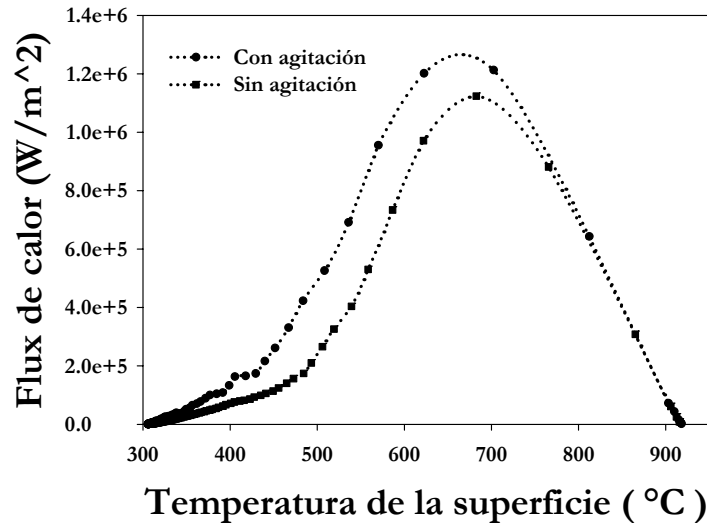


Figura 5.8: Efecto de la agitación en el medio de enfriamiento sobre el flux de calor, en función de la temperatura de superficie, para las pruebas de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable.

análisis más detallado para estimar los fluxes de calor en función de la temperatura de la superficie, variando los parámetros r y n del problema inverso de conducción de calor, de acuerdo a los procedimientos de la subsección 3.1.6. En la figura 5.9, se ilustran los fluxes de calor estimados en función de la temperatura de la superficie a diferentes valores de r , para las piezas de acero inoxidable durante su enfriamiento dentro de un baño de sales con agitación.

A partir de figura 5.9, se puede observar que al incrementar el número de pasos futuros, r , con un número de nodos espaciales entre la posición del termopar y la superficie constante, $n = 20$, el máximo del flux de calor disminuye y se recorre ligeramente hacia temperaturas más altas mientras que la curva en forma de campana se hace más suave. Esto se debe que al resolver el IHCP con una r más alta se utiliza un mayor número de datos de la curva de enfriamiento experimental para obtener la convergencia hacia la solución mientras que a una r más baja se puede sobrestimar el flux de calor. Estas diferencias entre los fluxes de calor son considerables, por lo que se requiere conocer con precisión el efecto del flux de calor sobre la respuesta térmica simulada, a diferentes valores de r , mediante la comparación de la respuesta térmica experimental con la simulada.

En la figura 5.10, se muestra el efecto del flux de calor a distintos valores de r sobre

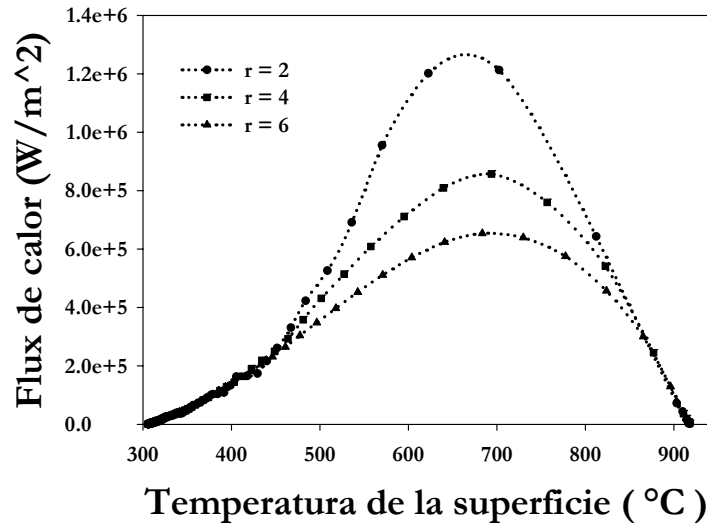


Figura 5.9: Efecto del número de pasos futuros, r , sobre el flux de calor en función de la temperatura de la superficie para las pruebas de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable con agitación del medio de enfriamiento. El número de nodos espaciales entre la superficie de la pieza y la posición del termopar se mantiene constante, $n = 20$.

la respuesta térmica simulada para las piezas de acero inoxidable durante su enfriamiento dentro de un baño de sales con agitación.

A partir de la figura 5.10, se puede observar que existe una subestimación de la temperatura en el rango de 700 - 900 °C y una sobrestimación en el rango de 350 - 700 °C, cuando se utiliza una r igual a 6. Este efecto disminuye al reducir el valor de r debido a que la magnitud del flux de calor estimado es menor al incrementarse el valor de r como se mostró en la figura 5.9.

Sin embargo, para profundizar en la explicación de dichos comportamientos es necesario conocer el flux de calor estimado en función del tiempo. La figura 5.11, de la página 62, contiene los fluxes de calor estimados en función del tiempo a diferentes valores de r para las piezas de acero inoxidable durante su enfriamiento dentro de un baño de sales con agitación.

De la figura 5.11, se ve que al incrementar el valor de r la extracción de calor tiende a iniciar a tiempos más cortos y las curvas de flux de calor se adelantan en el tiempo provocando la subestimación de la temperatura, véase la figura 5.10, en el rango de 700 - 900 °C. Se puede observar también, que el flux de calor para todas las curvas alcanza

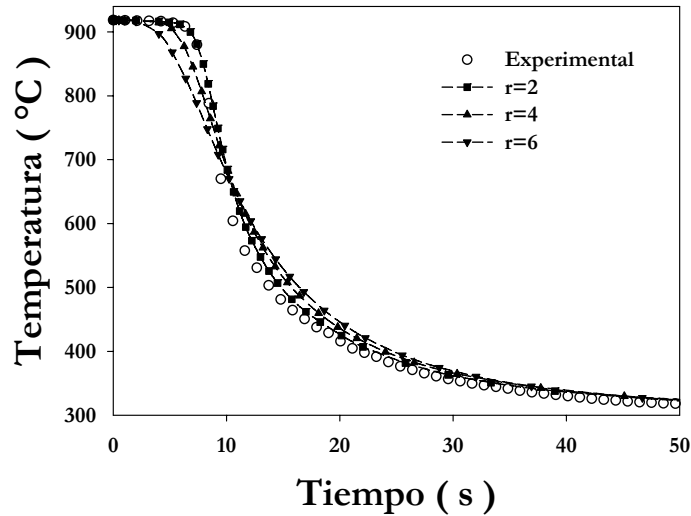


Figura 5.10: Efecto del flux de calor a distintos valores de r sobre la respuesta térmica simulada para las pruebas de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable con agitación del medio de enfriamiento. El número de nodos espaciales entre la superficie de la pieza y la posición del termopar se mantiene constante, $n = 20$.

su máximo alrededor de los 10 segundos, punto en el cual la temperatura empieza a sobrestimarse debido a que la magnitud del flux disminuye al incrementarse el valor de r , véase la figura 5.10, en el rango de $350 - 700\text{ }^{\circ}\text{C}$. Con base en lo anterior, se puede afirmar que la respuesta térmica simulada es sensible al valor de r debido a que este parámetro influye fuertemente en la magnitud y la forma de la curva del flux de calor. Por lo que, a partir de este punto se decide utilizar una $r = 2$ para estimar la respuesta térmica en las piezas de acero inoxidable durante su enfriamiento dentro de un baño de sales fundidas con agitación.

Por último, en la figura 5.12, de la página 63, se presenta el efecto del número de nodos espaciales, entre la posición del termopar y la superficie de la pieza, sobre el flux de calor estimado en función del tiempo para las piezas de acero inoxidable, durante su enfriamiento dentro de un baño de sales fundidas con agitación

A partir de la figura 5.12, se observa que no existen diferencias considerables en la forma ni en la magnitud del flux de calor en función del tiempo a diferentes valores de n . Sin embargo, es necesario corroborar estas observaciones por medio de la comparación de las respuestas térmicas simuladas con la experimental. Para esto, en la figura 5.13, de la

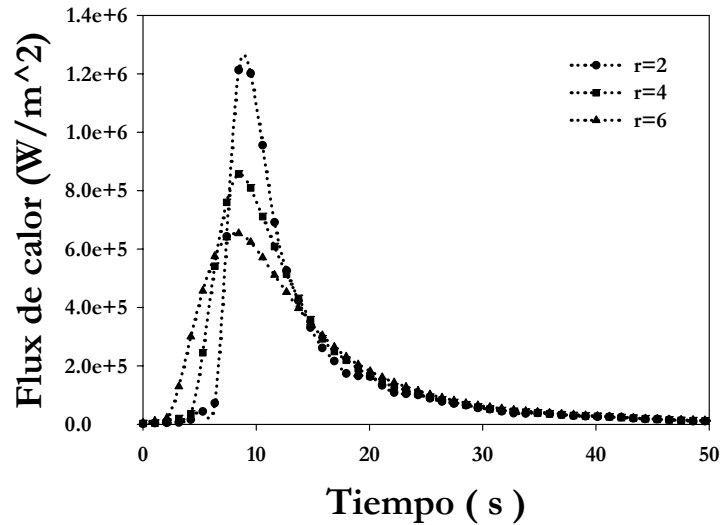


Figura 5.11: Efecto del número de pasos futuros, r , sobre el flux de calor en función del tiempo para las pruebas de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable con agitación del medio de enfriamiento. El número de nodos espaciales entre la superficie de la pieza y la posición del termopar se mantiene constante, $n = 20$.

página 64, se ilustra la influencia de los distintos valores de n sobre la respuesta térmica simulada para las piezas de acero inoxidable durante su enfriamiento dentro de un baño de sales fundidas con agitación.

En la figura 5.13, se observa que las respuestas térmicas simuladas no presentan diferencias significativas entre ellas, ya que se ajustan de manera aceptable a la respuesta térmica experimental. De acuerdo con el análisis anterior, se mostró que es posible obtener buenas estimaciones de la respuesta térmica simulada cuando r es igual a 2 y n es igual a 20. Con esto, se da por validada la condición de la frontera en la superficie lateral de las piezas de acero inoxidable durante su enfriamiento dentro del baño de sales fundidas con agitación.

5.4. Validación del campo térmico

A continuación se muestran las curvas de enfriamiento obtenidas experimentalmente enfriando las piezas de hierro dúctil austemperizadas a distintos tiempos de permanencia. Cabe mencionar, que estos resultados se utilizaron para validar el modelo térmico del aus-

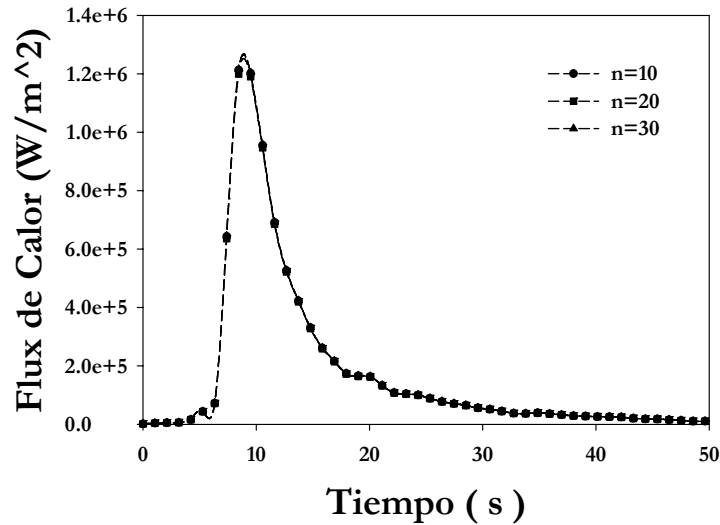


Figura 5.12: Efecto del número de nodos espaciales entre la superficie de la pieza y posición del termopar, n , sobre el flux de calor en función del tiempo para las pruebas de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable con agitación del medio de enfriamiento. El número de pasos futuros se mantiene constante, $r = 2$.

temperizado utilizando la condición de la frontera determinada a partir del enfriamiento de piezas de acero inoxidable en un baño de sales fundidas con agitación.

La figura 5.14, presenta las respuestas térmicas obtenidas experimentalmente por medio de las pruebas de austemperizado, en las piezas de hierro dúctil para un tiempo de austemperización, t_{ab} , de 120, 240, 390 y 2200 segundos a partir de una temperatura de austemperización, T_{ab} , de 295 °C. Las piezas se austenizaron con una temperatura de 920 °C durante 60 minutos.

A partir de la figura 5.14, se puede observar que no existen diferencias significativas entre las curvas de enfriamiento durante el tratamiento térmico del austemperizado dado que las condiciones de operación se controlaron de manera precisa en todas las pruebas realizadas. Sin embargo, debido a que los tiempos de austemperización no fueron los mismos para todas las pruebas es posible observar pequeñas diferencias alrededor de la temperatura de transformación relacionadas con la recalescencia generada por la transformación de fase, lo cual motiva el siguiente análisis.

La figura 5.15, muestra la zona de transformación ampliada alrededor de los 304°C para observar la recalescencia generada por la transformación de la ferrita bainítica a

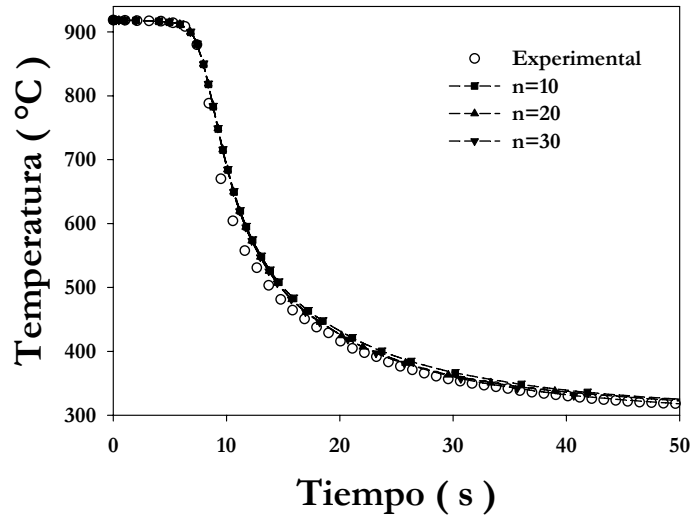


Figura 5.13: Efecto del flux de calor a distintos valores de n sobre la respuesta térmica simulada para las pruebas de enfriamiento en las piezas de acero inoxidable con agitación del medio de enfriamiento. El número de pasos futuros se mantiene constante, $r = 2$.

diferentes tiempos de austemperización.

Con base en la figura 5.15, se observa que la transformación de la ferrita bainítica inicia a un mismo tiempo a diferentes temperaturas de austemperización esto se debe a que la forma de la nariz de inicio del diagrama TTT se presenta como una línea casi vertical entre los 300 a 315 °C. La temperatura de las piezas al momento de la transformación difiere entre cada prueba con una diferencia aproximada de 5 °C, esto se debe a que la temperatura del medio de enfriamiento se incrementa ligeramente a causa del calor suministrado por la pieza al momento de la inmersión, por lo que la temperatura real del medio oscila entre los 300 a 305 °C. Se muestra también, que la temperatura máxima alcanzada por la recalcancia se presenta a un mismo tiempo de austemperización, esto refleja el grado de reproducibilidad de las pruebas de austemperización, las cuales se realizaron con el máximo control posible de las condiciones de operación.

Con base a los resultados anteriores, se procedió a validar el modelo térmico del austemperizado mediante la comparación de la respuesta térmica simulada con la experimental. Los resultados simulados se calcularon a partir de la condición de la frontera determinada con los fluxes de calor estimados con las piezas de acero inoxidable. Cabe señalar, que estos fluxes fueron convertidos a coeficientes de transferencia de calor ya que el modelo

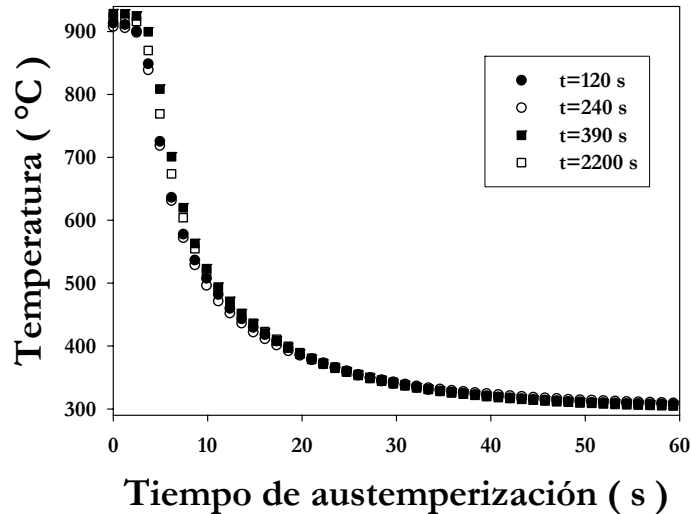


Figura 5.14: Respuestas térmicas obtenidas experimentalmente a partir de las pruebas de austemperizado, en las piezas de hierro dúctil a un tiempo de austemperización de 120 s, 240 s, 390 s y 2200 s. Las piezas se austenizaron a una temperatura de 920 °C durante 60 minutos y enfriadas a una temperatura de austemperización de 295 °C.

solución del modelo fue desarrollado a partir de coeficientes en función de la temperatura de la superficie y no a partir de fluxes de calor.

La comparación entre la respuesta térmica experimental y la simulada con el modelo del austemperizado se muestra en la figura 5.16. La respuesta térmica simulada se calculó a partir de una temperatura de austemperización de 295 °C, un tiempo de austemperización de 390 segundos y una temperatura austenización de 920 °C.

A partir de la figura 5.16, se observa que la respuesta térmica simulada se retrasa unos cuantos segundos después de dar inicio el enfriamiento de la pieza de hierro dúctil. Esto posiblemente se debe a que la difusividad térmica del acero inoxidable es menor en comparación con la del hierro dúctil, ver cuadro Apéndice B. También, porque la condición de la frontera se calculó mediante la solución del IHCP con las propiedades termofísicas del acero inoxidable, lo cual provoca una subestimación del flux de calor en la superficie lateral de la pieza. Debido a lo anterior, es necesario estimar nuevamente la condición de la frontera a partir de la respuesta térmica experimental de las pruebas de austemperizado, pero ahora con base en las propiedades termofísicas del hierro dúctil. Aplicando el mismo procedimiento para la determinación de la condición de la frontera

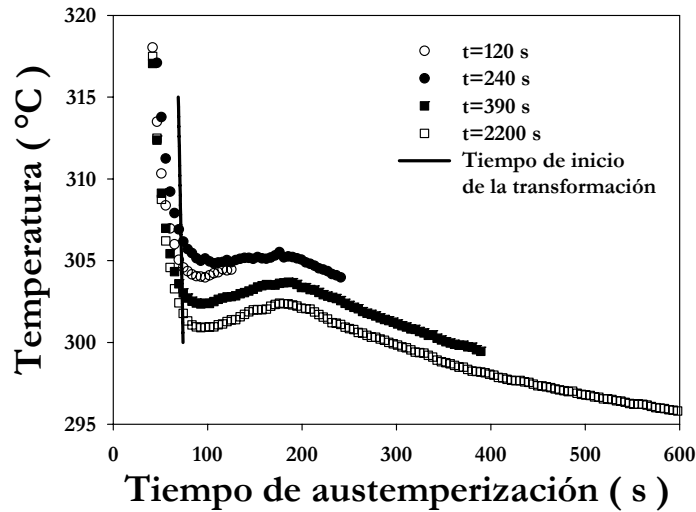


Figura 5.15: Zona de transformación amplificada alrededor de los $305\text{ }^{\circ}\text{C}$ para las pruebas de austemperizado a 120, 240, 390 y 2200 segundos. Las piezas se austenizaron a $920\text{ }^{\circ}\text{C}$ durante 60 minutos y enfriadas a una temperatura de austemperización de $295\text{ }^{\circ}\text{C}$. Notese que la recalentamiento generada por la transformación de fase se presenta en todas curvas a un mismo tiempo.

en las piezas de acero inoxidable se procedió a resolver el IHCP y realizar el análisis de sensibilidad correspondiente con las curvas de enfriamiento durante el austemperizado de las piezas de hierro dúctil, con lo cual se determinó que es adecuado utilizar un coeficiente de transferencia de calor estimado con base en la solución del IHCP con una $r = 2$ y $n = 20$, los mismos valores empleados para el acero inoxidable.

Una vez determinada la condición de la frontera con la respuesta térmica experimental de las pruebas de austemperizado se procede a la validación del modelo térmico. En la figura 5.17, de la página 68, se presenta la respuesta térmica simulada con el modelo aplicando la condición de la frontera mediante el coeficiente de transferencia de calor en función de la temperatura de la superficie, con una $r = 2$ y una $n = 20$ y se compara con la experimental. La simulación se realizó a partir de una temperatura de austemperización de $920\text{ }^{\circ}\text{C}$, una temperatura de austemperización de $295\text{ }^{\circ}\text{C}$ y un tiempo de austemperización de 390 segundos.

Se puede observar en la figura 5.17, que tanto la temperatura simulada como la experimental disminuyen a medida que transcurre el tiempo de austemperización. Con estos resultados, se comprueba que efectivamente, el modelo predice el enfriamiento de la pieza

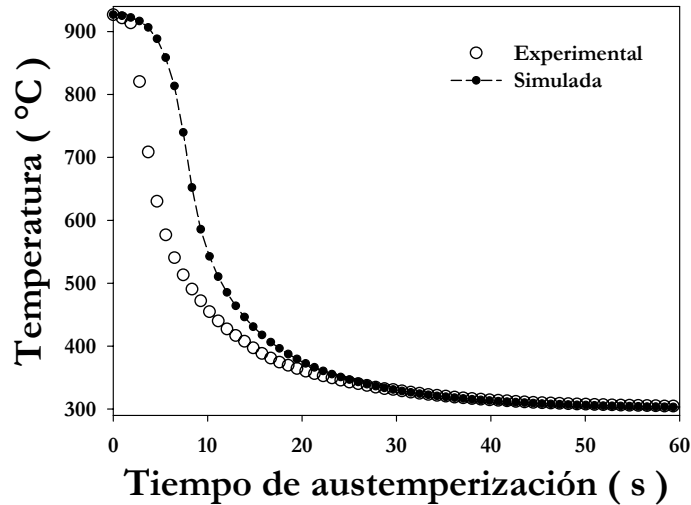


Figura 5.16: Comparación entre la respuesta térmica experimental y simulada a partir de una temperatura de austemperización de 295°C , un tiempo de austemperización de 390 segundos y una temperatura de austenización de 920°C . La respuesta simulada se calculó con la condición a la frontera determinada en las piezas de acero inoxidable.

desde la temperatura de austenización hasta la temperatura de austemperización. También, se puede observar que la respuesta térmica simulada se sobrepone a la respuesta térmica experimental a lo largo del tiempo de austemperización sin existir diferencias considerables en la rapidez de enfriamiento en ambas curvas. Sin embargo, es necesario comprobar que el efecto de la generación de calor sobre la respuesta térmica ha sido considerado con precisión, por lo que se requiere analizar la recalescencia generada por la transformación de fase. La figura 5.18, muestra la zona de transformación ampliada alrededor de los 305°C de la figura 5.17, para observar el fenómeno de recalescencia.

A partir de la figura 5.18, se puede ver que tanto la respuesta térmica simulada como la experimental presentan recalescencia, la cual esta asociada al calor liberado por la transformación de fase. El calor liberado incrementa la temperatura de la pieza hasta un máximo donde ésta empieza a descender hasta alcanzar el equilibrio térmico con el medio de enfriamiento. También se observa, que la respuesta térmica simulada sigue sobreponiéndose a la respuesta térmica experimental. Esta congruencia es consecuencia de que el modelo térmico considera de manera precisa la evolución microestructural de la ferrita bainítica en función del tiempo de austemperización ya que la acopla al término de generación de calor en cada paso de tiempo. Esto demuestra que utilizando el

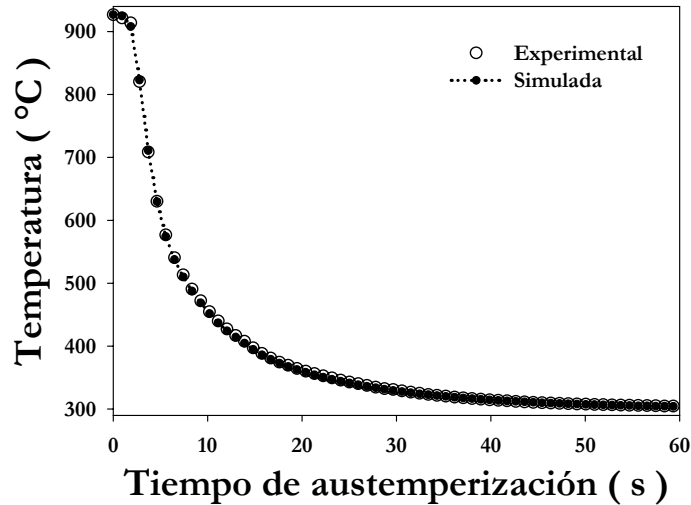


Figura 5.17: Comparación entre la respuesta térmica experimental y simulada con el modelo del austemperizado a partir de una temperatura de austemperización de 295°C , un tiempo de austemperización de 390 segundos y una temperatura de austenización de 920°C . La respuesta simulada se calculó con la condición de la frontera determinada con las piezas de hierro dúctil.

modelo cinético de Avrami, las propiedades termofísicas del hierro dúctil, la condición de la frontera con el medio de enfriamiento y los parámetros térmicos del proceso de austemperizado, es posible estimar la respuesta térmica acoplada a la transformación de fase para el tratamiento térmico del austemperizado del hierro dúctil. Dado que este comportamiento se observó también para otras corridas, se considera que el modelo térmico queda debidamente validado.

5.5. Validación microestructural

Los resultados que se presentan a continuación se utilizaron para validar el modelo microestructural del austemperizado del hierro dúctil, de acuerdo a los procedimientos experimentales descritos en la subsección 3.2.4, que cuantifican la evolución microestructural de la ausferrita como una función de las variables del proceso.

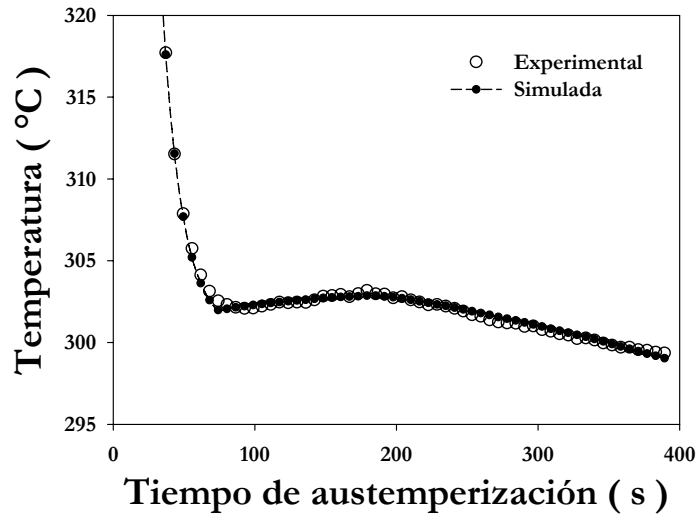


Figura 5.18: Zona de transformación ampliada alrededor de los 305 °C, para la respuesta térmica simulada y experimental.

5.5.1. Microscopía óptica

La figura 5.19, muestra las metalografías obtenidas para las pruebas de austemperizado del hierro dúctil realizadas a una temperatura de austemperización de 295 °C a distintos tiempos de austemperización y temperatura de austenización de 920 °C.

A partir de las metalografías de la figura 5.19, se puede ver la evolución microestructural de la ausferrita en función del tiempo de austemperización. En general, en las metalografías se observan texturas constituidas por zonas blancas que corresponden a la austenita retenida, zonas oscuras que corresponden a las placas de ferrita bainítica y nódulos de grafito en los alrededores. Cabe señalar, que la fase martensítica que se produce a tiempos cortos de austemperización, es difícil de distinguir debido al parecido morfológico con la ferrita bainítica, por lo que para su observación se utilizó el microscopio electrónico de barrido a mayores aumentos. El tiempo de austemperización influye sobre la formación de las placas de ferrita bainítica dado que se observa que al incrementar el tiempo de austemperización, la matriz se satura por completo de esta fase. También se observa, que la ferrita bainítica tiende a crecer en los alrededores de los nódulos de grafito y que la precipitación de carburos, los cuales se asocian con la descomposición de la austenita retenida, se hace más evidente a tiempos de austemperización largos.

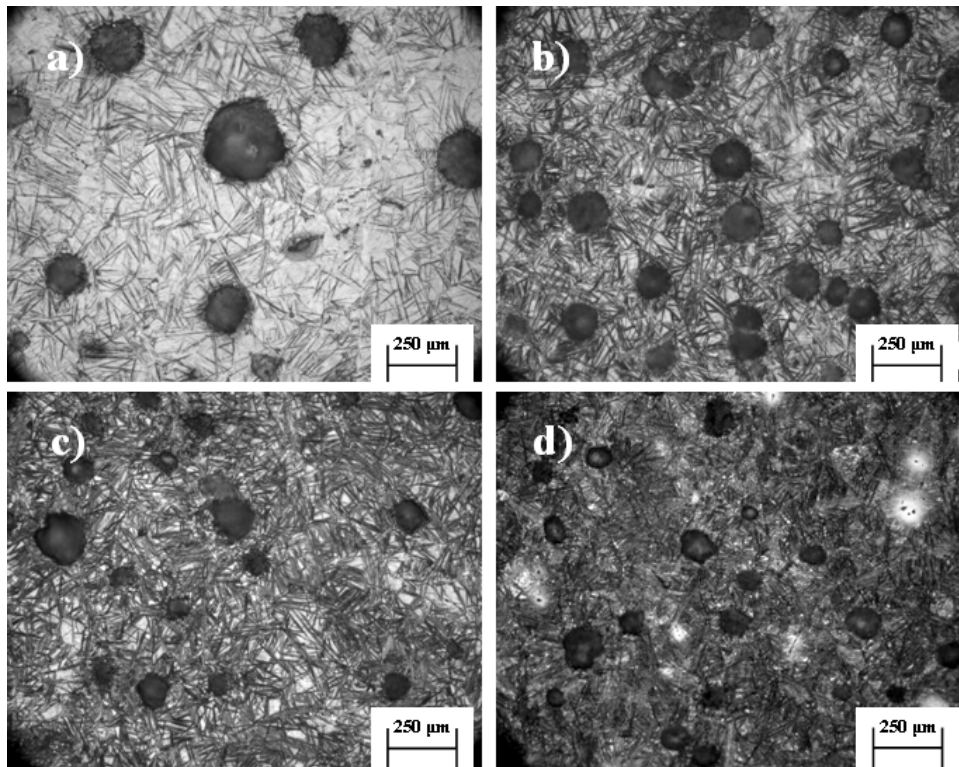


Figura 5.19: Metalografías de las piezas de hierro dúctil A 536 grado 65-45-12, con matriz ferrítica, austemperizadas a 1000 X con una temperatura de austenización de 920 °C por 60 minutos y una temperatura de austemperización de 295 °C a distintos tiempos de austemperización: a) 120, b) 240, c) 390 y d) 2200 segundos.

5.5.2. Microscopía electrónica de barrido

En las micrografías de la figura 5.20, se muestra la matriz del hierro dúctil junto a un nódulo de grafito después del tratamiento térmico del austemperizado a 120 y 240 segundos respectivamente. Las imágenes se tomaron con el microscopio electrónico de barrido a 3000 X, según se señala en la sección 4.5.

Con base en estas micrografías se puede decir que se tiene una microestructura típica de un hierro nodular que ha sido sujeto a un tratamiento térmico de austemperizado a tiempos cortos. En ambas micrografías se observa a la fase martensítica en los alrededores de los nódulos de grafito (gran mancha oscura) y entre las placas de ferrita bainítica. Este hecho corrobora que los tiempos de austemperización cortos promueven un inadecuado enriquecimiento de la austenita con carbono lo que causa que cierta cantidad de esta fase

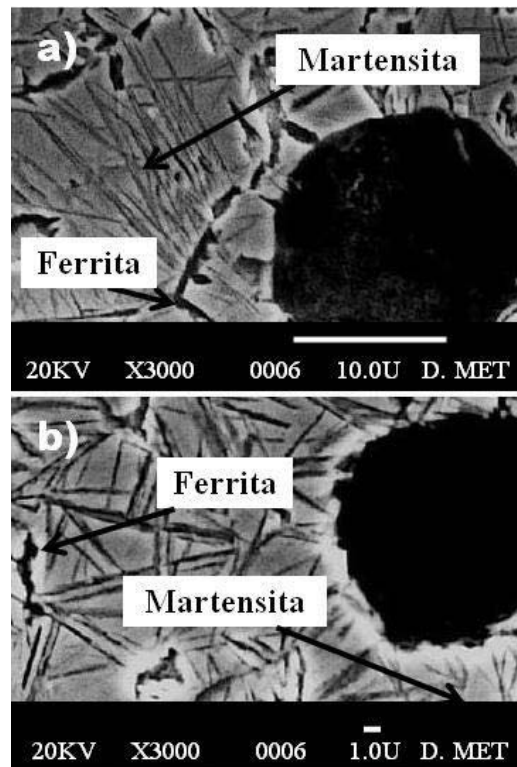


Figura 5.20: Micrografías de las piezas de hierro dúctil tomadas con el microscopio electrónico de barrido a 3000 X después del tratamiento térmico del austemperizado realizado a 120 y 240 segundos con una temperatura de austemperización de 295 °C y una temperatura de austenización de 920 °C.

se mantenga inestable facilitando la formación de fases residuales como la martensita. Sin embargo, a tiempos más largos de austemperización la formación de martensita se inhibe debido a que existe una mayor formación de placas de ferrita bainítica que retienen por completo a la austenita residual por medio del enriquecimiento de esta fase con carbono.

5.5.3. Dureza

En la figura 5.21, se ilustra el efecto del tiempo de austemperización sobre la dureza (HRC) del ADI a 295 °C, tanto experimental como estimada con el modelo termoestructural del austemperizado del hierro dúctil.

A partir de la figura 5.21, se puede observar que la dureza del ADI disminuye al avanzar el tiempo de austemperización tanto para la medida experimentalmente como la estimado.

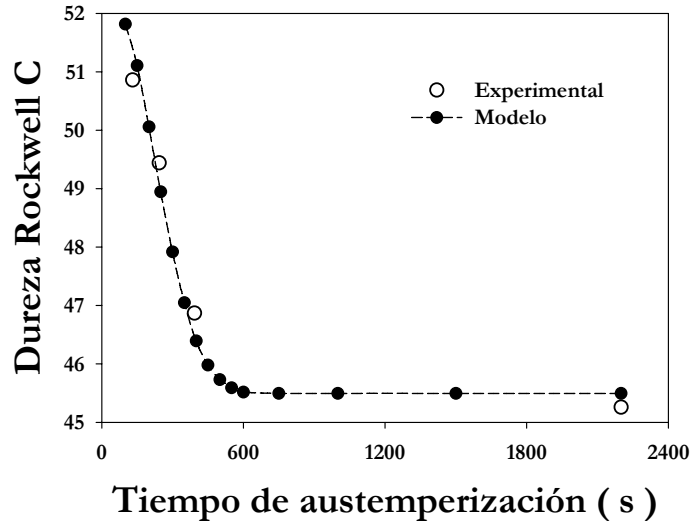


Figura 5.21: Comparación entre la dureza experimental y la simulada a distintos tiempos de austemperización.

Esto es debido a que la concentración de las fases formadas durante el austemperizado cambian con el tiempo. A tiempos de austemperización cortos se observa una elevada dureza del ADI debido a que se forma una cierta cantidad de martensita, la cual contribuye al incremento de la dureza. La presencia de esta fase a tiempos cortos se corroboró con las micrografías tomadas con el microscopio electrónico de barrido, ver sección 5.5.2. A tiempos largos de austemperización la dureza del ADI disminuye debido a que ahora la matriz se encuentra formada predominantemente por las placas de ferrita bainítica y de austenita retenida con alto contenido de carbono. La dureza de estas fases es menor en comparación con la dureza de la martensita, por lo que la dureza del ADI disminuye. Se puede observar también, que el modelo predice con una buena aproximación las mediciones de dureza experimentales porque el modelo estima con precisión las concentraciones de las fases en el ADI de acuerdo al avance de la transformación de la ausferrita con el tiempo.

5.5.4. Difracción de rayos X

Los resultados de las piezas austemperizadas obtenidos por la técnica de difracción de rayos X se muestran en los difractogramas de la figura 5.22. En éstos se señalan las intensidades relativas de los picos indexados que corresponden a la ferrita bainítica y a la austenita retenida para un tiempo de austemperización de 120 y 2200 segundos.

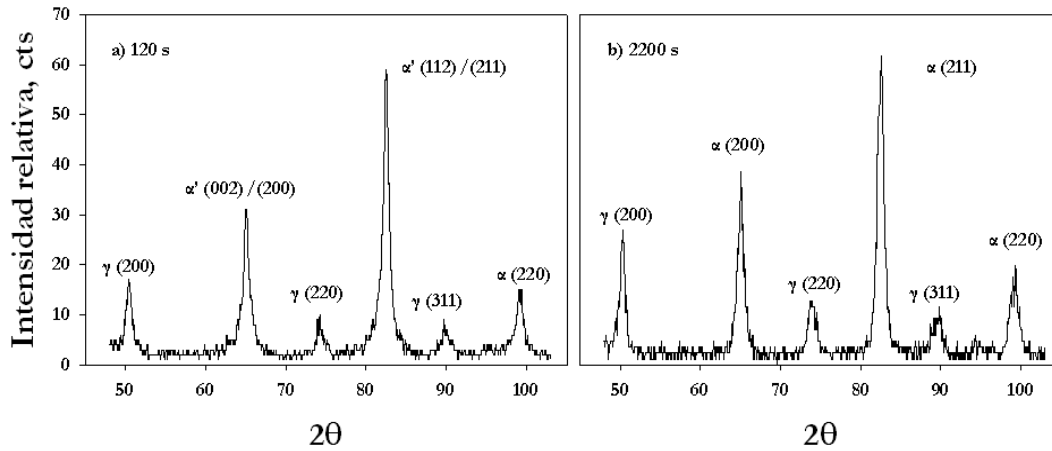


Figura 5.22: Difractogramas de Rayos X obtenidos para las piezas austemperizadas a 295 °C con una temperatura de austenización de 920 °C a distintos tiempos de austemperización: a) 120 y b) 2200 segundos

A partir de la figura 5.22, se observa que a tiempos de austemperización cortos las posiciones en las que difracta la ferrita bainítica aparecen superpuestas en las reflexiones de la martensita. Se ha reportado [18], que al tener la martensita una celda cristalina tetragonal, los planos de una misma familia difractan en posiciones 2θ diferentes, provocando que los picos de difracción de estos planos se empalmen y se observen asimétricos. La corroboración de la presencia de martensita para tiempos cortos de austemperización se mostró en la sub sección 5.5.2. Por otro lado, es importante destacar que a medida que el tiempo de austemperización se incrementa, la intensidad relativa de los picos difractados de la ferrita bainítica y de la austenita también lo hacen, proporcionando de esta manera, una evidencia indirecta del aumento de estas fases como resultado del desarrollo de la primera etapa de reacción del austemperizado. En la figura 5.23, se presenta el efecto del tiempo de austemperización sobre la fracción en volumen de austenita retenida calculada mediante el método de comparación directa. La respuesta simulada se estimó con una temperatura de austemperización de 295 °C en función del tiempo de austemperización y una temperatura de austenización de 920 °C.

Con base en la figura 5.23, se puede ver que la fracción en volumen de austenita retenida experimental se incrementa en función del tiempo de austemperización hasta alcanzar su máxima fracción aproximadamente a los 400 segundos, después de este punto la fracción de austenita retenida tiende a disminuir. Esta disminución puede deberse al

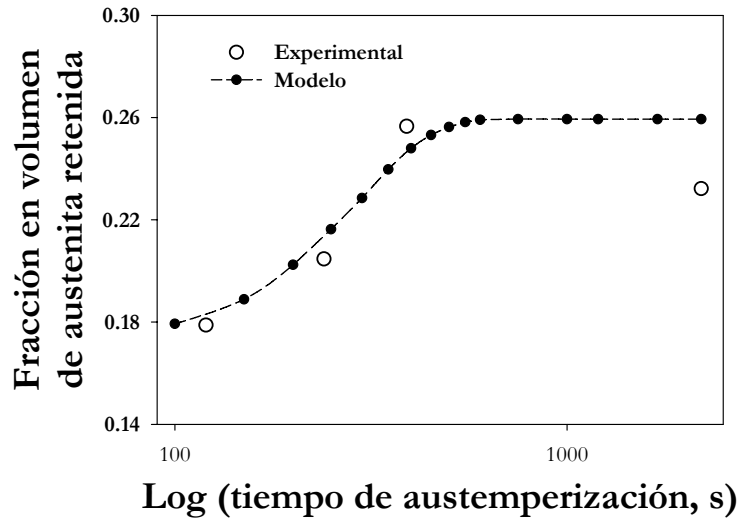


Figura 5.23: Comparación entre la fracción en volumen de austenita retenida medida y la calculada por medio del modelo en función del tiempo.

inicio de la segunda etapa de transformación del tratamiento térmico del austemperizado. Durante esta segunda etapa de transformación se da la descomposición de la austenita retenida, en ferrita bainítica y carburos de hierro, lo que provoca la disminución de esta fase. A tiempos de austemperización largos, la fracción en volumen de austenita retenida simulada con el modelo muestra un alejamiento respecto a las mediciones experimentales. Esto se debe a que el modelo microestructural se limita a resolver los fenómenos que ocurren en la primera etapa de transformación considerando a la fracción en volumen de austenita retenida como una constante después de completar la transformación bainítica. Dado que las estimaciones del modelo a tiempos de austemperización cortos coinciden con las mediciones experimentales obtenidas por difracción de rayos X, se considera que el modelo del austemperizado del hierro dúctil queda validado en el aspecto microestructural.

5.5.5. Temperatura de Austemperización

El modelo termoestructural también fue validado mediante el estudio del efecto de la temperatura austemperización sobre la fracción en volumen de austenita retenida. La figura 5.24, muestra el efecto de la temperatura de austemperización, T_{ob} , sobre la fracción en volumen de austenita retenida medida experimentalmente por Yescas [40], la predicha por el modelo de Yescas [40] y la predicha por el modelo del austemperizado desarrollado

en este trabajo. Las simulaciones se hicieron con una temperatura de austenización, T_{ab} , de 950°C , un tiempo de austemperización, t_{ab} , de 1600 segundos y una temperatura de inicio de transformación martensítica, M_s , de 210°C para el modelo del austemperizado.

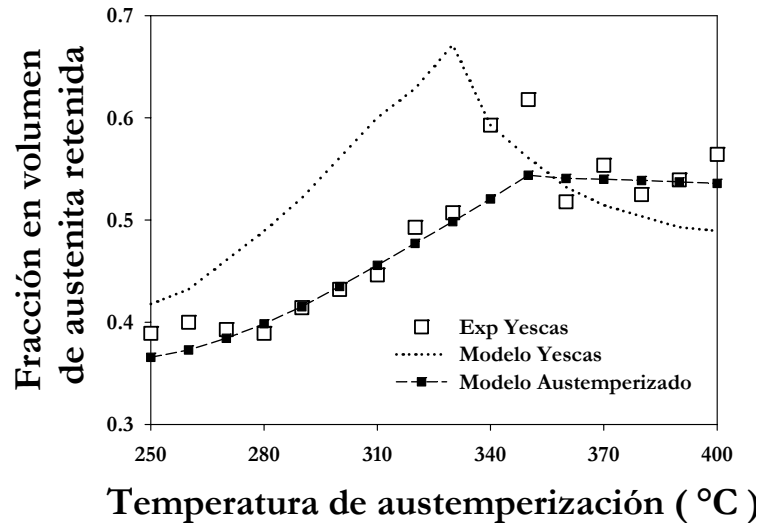


Figura 5.24: Comparación entre la fracción de austenita retenida experimental y las fracciones simuladas con el modelo de Yescas y el modelo del austemperizado desarrollado en este trabajo para una hierro nodular con 3.5C - 2.5Si - 0.55Mn - 0.15Mo - 0.31Cu wt. %.

Con base en la figura 5.24, se puede decir que existen dos mecanismos distintivos que conducen a la retención de la austenita en función de la temperatura de austemperización. El primer mecanismo se observa en el rango de $250 - 340^{\circ}\text{C}$, donde la fracción de austenita se incrementa con la temperatura de austemperización. Esta variación en la fracción de austenita se puede explicar con base en el atrapamiento de carbono en solución dentro de la ferrita. Como se ha mostrado en la figura 3.3, de la página 29, se ve que al disminuir la temperatura de austemperización de 340 a 200°C , la concentración de carbono en la ferrita se incrementa. Este incremento en la concentración de carbono en la ferrita favorece la precipitación de carburos de transición. Estos carburos son muy estables a bajas temperaturas, por lo que una parte considerable del carbono en solución en la ferrita no se encuentra disponible para la retención de la austenita. Sin embargo, al incrementar la temperatura de austemperización hasta los 340°C , los carburos tienden a ser menos estables debido a la disminución en la concentración de carbono en la ferrita lográndose retener una mayor cantidad de austenita. Después de los 340°C , la concentración de

carbono en la ferrita permanece casi constante alrededor de 0.03 wt. % C, esto provoca un cambio en el mecanismo de retención de la austenita. A partir de los 340 °C, se presenta el segundo mecanismo de retención, donde la fracción de austenita retenida disminuye al incrementarse la temperatura de austemperización desde los 340 hasta los 400 °C. Esto puede explicarse con base en el estudio de la porción del diagrama de fases Fe-C, mostrado en la figura 5.25. En este diagrama se muestra el efecto de la temperatura de austemperización sobre la concentración de carbono en la austenita residual, C_γ , a partir de la extrapolación de la líneas de solvus cuando se tiene un enfriamiento fuera del equilibrio. La línea punteada corresponde a la concentración de carbono en la austenita residual en función de la temperatura de austemperización de acuerdo a la curva T_0 , véase la subsección 3.2.1

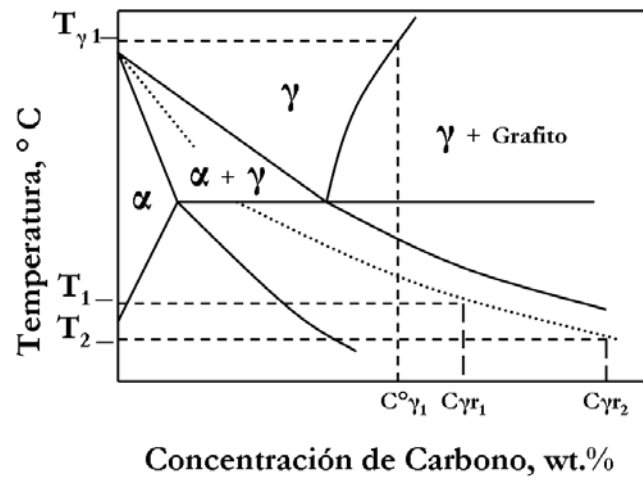


Figura 5.25: Ilustración esquemática del efecto de la temperatura de austemperización sobre la concentración de carbono en la austenita residual [11].

Con base en las isotermas señaladas en este diagrama se puede afirmar que la concentración de carbono en la austenita residual disminuye al incrementar la temperatura, de T_2 a T_1 , para dar $C_{\gamma 2} > C_{\gamma 1}$, estas diferencias en la concentración de carbono inciden en la fuerza motriz para la transformación de la austenita a ferrita bainítica, la cual se definió como la diferencia entre las concentraciones de carbono en la austenita residual y la austenita inicial antes de la transformación bainítica ($C_\gamma - C_\gamma^{\circ}$). Cuando la temperatura de austemperización se incrementa, la fuerza motriz disminuye reteniéndose una menor cantidad de austenita, véase la figura 5.24. Esto provoca que una cierta cantidad de austenita

residual quede sin retener, la cual al enfriarse a temperatura ambiente se transforma a martensita. De acuerdo con lo anterior, se puede explicar porque la fracción de austenita retenida disminuye al incrementarse la temperatura de austemperización por arriba de los 340°C . Las predicciones del modelo del austemperizado desarrollado se pueden comparar con las del modelo de Yescas y se puede ver que el modelo aquí propuesto es capaz de estimar la fracción de austenita retenida de forma más aceptable y más precisa que el de Yescas de 250 a 340°C . Esta superioridad del modelo desarrollado se debe a que se consideran aspectos fundamentales de la cinética de transformación de fases y el transporte de energía.

5.6. Análisis de sensibilidad

El análisis de sensibilidad consiste en conocer la influencia de las variables independientes del modelo matemático sobre las predicciones de la respuesta térmica y microestructural en el austemperizado del hierro dúctil. A continuación, se presentan los resultados obtenidos a partir de las simulaciones realizadas a diferentes condiciones de operación.

5.6.1. Generación de calor

El término de generación de calor, \dot{q} , es el calor liberado que se asocia con la transformación de fase durante la evolución microestructural de la ferrita bainítica. Cabe recordar, que la generación de calor se definió en la ecuación 3.4, de la página 20. Además, debe señalarse que mediante la simulación se varió la entalpía de transformación de la ferrita bainítica para determinar su efecto sobre la respuesta térmica simulada y sobre el perfil de durezas del ADI.

Para observar el efecto de la generación de calor sobre la respuesta térmica se construye la figura 5.26, donde se muestra la respuesta térmica en función del tiempo de austemperización para distintos valores de ΔH . El valor de ΔH utilizado para calcular ΔH^* fue de $92000 \frac{\text{J}}{\text{Kg}}$, las predicciones fueron hechas a partir de una temperatura de austenización 920°C , una temperatura de austemperización de 295°C y un tiempo de austemperización de 390 segundos.

Como se puede observar en la figura 5.26, la temperatura simulada disminuye en función del tiempo a distintos valores de ΔH^* . También, se observa que las curvas de enfriamiento simuladas con valores de ΔH^* diferentes de cero, presentan un incremento en la temperatura alcanzando un máximo a alrededor de los 180 segundos iniciado el austem-

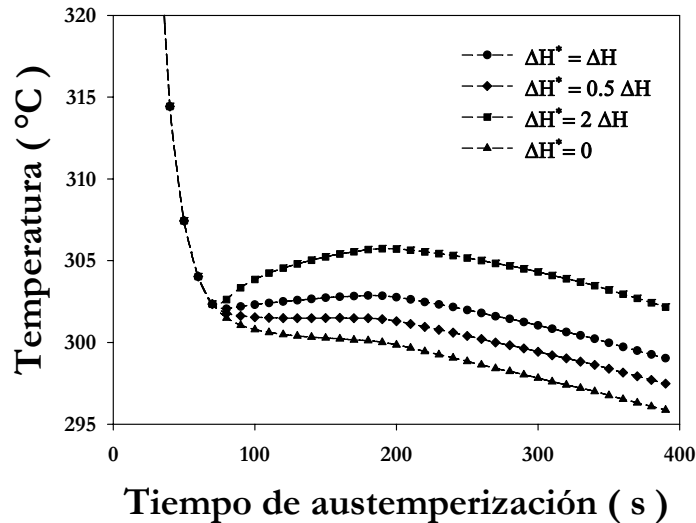


Figura 5.26: Efecto de la generación de calor sobre la respuesta térmica simulada a distintos valores de ΔH^* .

perizado. Se sabe, que la recalcencia causada por el calor liberado por la transformación bainítica suele ser denotada por un incremento en la temperatura hasta un máximo, a partir del cual empieza a disminuir hasta lograr el equilibrio térmico con el medio de enfriamiento. Cuando el valor de ΔH^* es igual a cero, la respuesta térmica simulada no presenta recalcencia ya que no existe ninguna generación de calor en el sistema causada por el calor liberado por la transformación de fase, pero si se observa una disminución en el valor de la temperatura causado por el enfriamiento que hace el baño de sales fundidas. Al aumentar el valor de ΔH^* , el efecto de la recalcencia se incrementa y se hace más notorio. El incremento en la temperatura de la pieza no se considera significativo dado que se trata de una pequeña diferencia de $5^\circ C$, lo que puede llevar a pensar que en general existe una dependencia débil respecto al calor generado.

El efecto de la generación de calor sobre la fracción en volumen de austenita retenida simulada en función del tiempo a distintos valores de ΔH se ilustra en la figura 5.27. La respuesta simulada se calculó con base a las mismas condiciones de operación que la figura 5.26.

A partir de la figura 5.27, se observa que la fracción en volumen de austenita retenida simulada muestra un comportamiento sigmoideal. Este comportamiento puede atribuirse a que el modelo cinético sigue una cinética de transformación basada en el modelo de

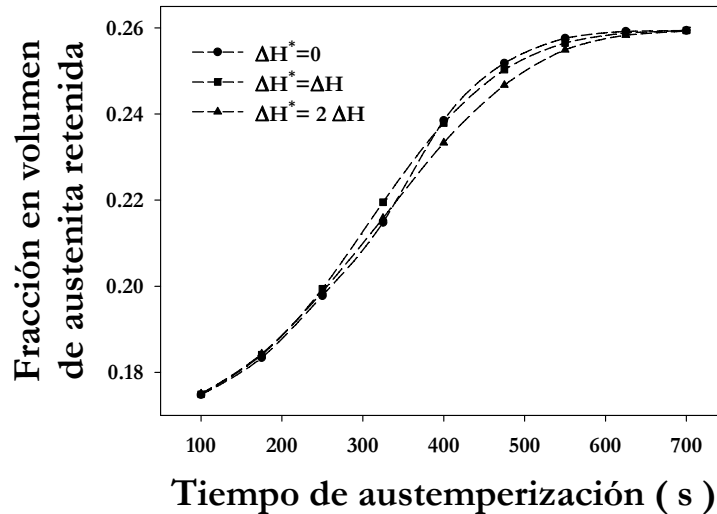


Figura 5.27: Efecto del tiempo de austemperización sobre la fracción de austenita retenida simulada a distintos valores de ΔH^* .

Avrami. La fracción de austenita retenida aumenta al incrementarse el tiempo de austemperización alcanzando un máximo alrededor de los 700 segundos, tiempo en el cual se completa la transformación de la ferrita bainítica. También, se observa el efecto de la entalpía sobre la rapidez de transformación, cuando ΔH^* es igual a cero se obtiene una rapidez de transformación más alta debido a que no existe generación de calor originada por la transformación de fase mientras que al incrementar el valor de ΔH^* se obtienen rapidezces de transformación más bajas. Cabe mencionar, que la generación de calor en el sistema incrementa la temperatura de la pieza haciendo que el sistema requiera un mayor tiempo para extraer el calor liberado antes de alcanzar el equilibrio térmico con el medio de enfriamiento. Las diferencias mostradas anteriormente en cuanto a la rapidez de transformación no son significativas ya que las variaciones son de algunas décimas de fracción. Por último, el efecto del tiempo de austemperización sobre la dureza del material a diferentes valores de ΔH^* , se ilustra en la figura 5.28. Las durezas simuladas se calcularon a partir de las condiciones de operación descritas en la figura 5.26.

A partir de la figura 5.28, se puede decir que la dureza del material simulada disminuye en función del tiempo de austemperización. Se observa que cuando ΔH^* es igual a cero, la dureza del material decae más rápidamente a tiempos cortos, debido que la fracción de austenita retenida es mayor, como se mostró en la figura 5.27. Al lograrse

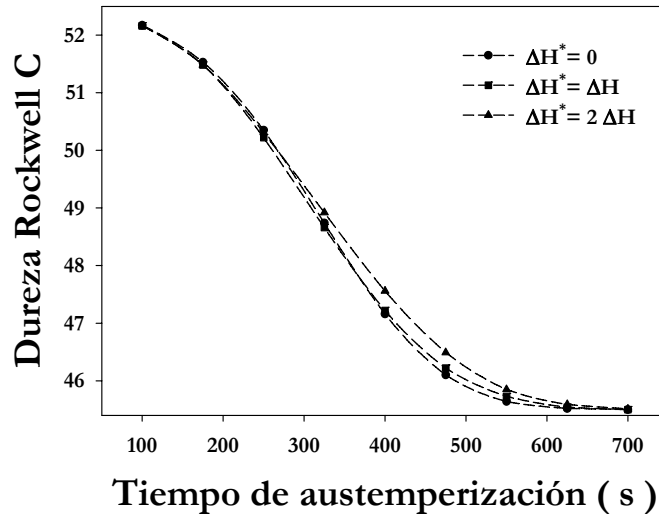


Figura 5.28: Efecto del tiempo de austemperización sobre la dureza del material simulada a distintos valores de ΔH^* .

una mayor formación de la austenita retenida se tiene una menor cantidad de austenita residual, la cual es indispensable para llevar acabo la transformación martensítica haciendo que la contribución en dureza de está fase sea menor y por lo tanto se obtiene menor dureza. Cabe recordar, que la dureza de la martensita es mayor en comparación con la dureza de la austenita y la ferrita. Por otro lado, cuando el ΔH^* se incrementa, la dureza simulada disminuye más lentamente ya que la rapidez de transformación de la ferrita bainítica es menor causando que la fracción de austenita retenida disminuya, ver figura 5.27. Una disminución en la fracción de austenita retenida repercute en una mayor cantidad de austenita residual. Esto origina que la contribución en dureza por parte de la martensita sea mayor y por consiguiente la dureza del ADI. Finalmente, se puede decir que las diferencias mostradas se encuentran relacionadas directamente con la rapidez de transformación de la ferrita bainítica, pero al igual que en los resultados anteriores según el modelo, las variaciones tampoco son significativas.

5.6.2. Temperatura de inicio de la transformación martensítica, M_s

Como se ha venido mencionado, la transformación parcial de la ferrita bainítica a tiempos de austemperización cortos incrementa la fracción en volumen de austenita residual. La austenita residual remanente es transformada a martensita durante el enfriamiento

a temperatura ambiente posterior al tratamiento térmico. La variable que controla la fracción de austenita retenida y la dureza del material a la temperatura ambiente es la temperatura de inicio de transformación martensítica (M_s). A continuación se ilustra el efecto del tiempo de austemperización sobre la fracción en volumen de austenita retenida simulada a distintos valores de M_s^* , según se muestra en la figura 5.29. El valor de M_s^* , fue calculado a partir de una $M_s = 210\text{ }^\circ\text{C}$, la utilizada en el modelo. La respuesta microestructural simulada se calculó a partir de una temperatura de austenización de $920\text{ }^\circ\text{C}$ y una temperatura de austemperización de $300\text{ }^\circ\text{C}$ a distintos tiempos de austemperización.

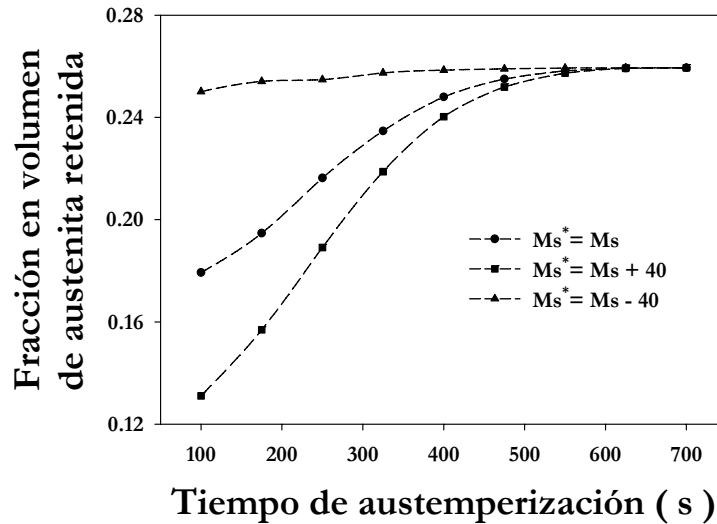


Figura 5.29: Efecto del tiempo de austemperización sobre la fracción en volumen de austenita retenida simulada a distintos valores de M_s^* .

A partir de la figura 5.29, se observa que para todos los valores de M_s^* , la fracción de austenita retenida se incrementa en función al tiempo de austemperización debido a que se completa la transformación bainítica dejando una austenita retenida que no se transformará ni aún durante el enfriamiento posterior al tratamiento térmico. Sin embargo, a tiempos cortos, la fracción en volumen de austenita retenida se incrementa al disminuir la temperatura M_s^* . Esto se debe a que cuando la transformación martensítica inicia a temperaturas más bajas, se consume una menor cantidad de austenita residual, la cual eventualmente es susceptible a transformarse parcialmente en martensita durante el enfriamiento posterior. Esta transformación parcial depende de la temperatura, por lo que, a menor valor de M_s^* , se obtiene una menor cantidad de martensita, lo que conduce a un

incremento en la fracción de austenita retenida a tiempos cortos.

En la figura 5.30, se ilustra el efecto del tiempo de austemperización sobre la fracción en volumen de martensita simulada a distintos valores de M_s^* . Los resultados simulados se obtuvieron a partir de las mismas condiciones de operación utilizadas para la figura 5.29.

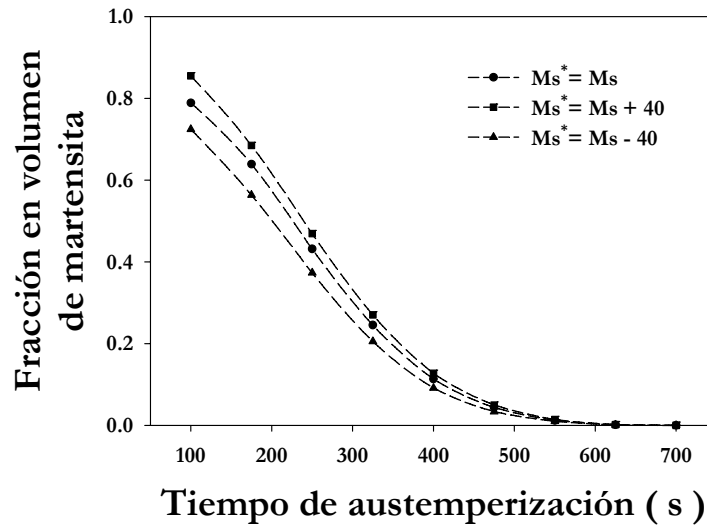


Figura 5.30: Efecto del tiempo de austemperización sobre la fracción en volumen de martensita simulada a distintos valores de M_s^* .

A partir de la figura 5.30, se deduce que la fracción simulada de martensita disminuye en función del tiempo de austemperización para todos los valores de M_s^* . Se observa, que cuando el valor M_s^* se incrementa, la fracción de martensita aumenta a tiempos cortos. Cabe recordar, que a tiempos cortos la transformación de la ferrita bainítica se lleva acabo parcialmente incrementando la fracción de austenita residual. Por lo que, una temperatura M_s^* alta permite transformar una mayor cantidad de austenita residual a martensita mientras que una temperaturas M_s^* baja, transforma una menor cantidad de austenita residual a martensita. Se observa también, que a tiempos largos de austemperización, la fracción de martensita no se ve afectada por el valor de M_s^* debido a que la transformación de la ferrita bainítica se completa a tiempos cortos. La austenita retenida en este punto se mantiene estable por el alto contenido de carbono previniéndose la formación de una fase residual como la martensita, durante el enfriamiento posterior al tratamiento térmico.

Por último y con base a los resultados mostrados anteriormente, se ilustra el efecto del

tiempo de austemperización sobre la dureza del material simulada a distintos valores de M_s^* , ver figura 5.31. Los resultados simulados se obtuvieron a partir de las condiciones de operación utilizadas en la figura 5.29.

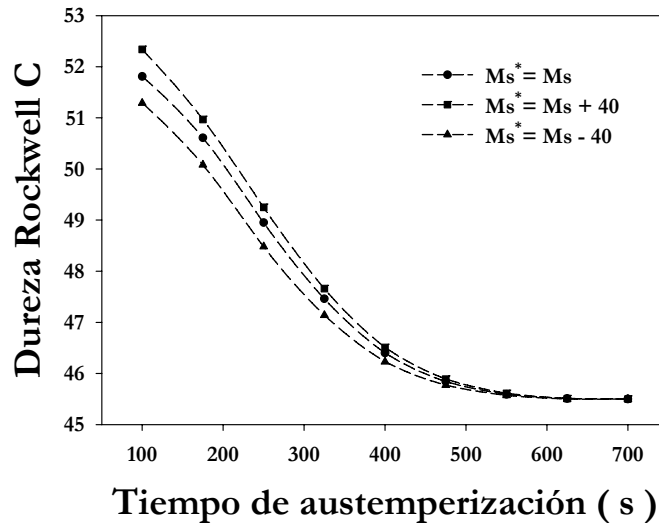


Figura 5.31: Efecto del tiempo de austemperización sobre la dureza del material simulada a distintos valores de M_s^* .

Conforme a la figura 5.31, se observa que la dureza del material disminuye en función del tiempo de austemperización para todos los valores M_s^* . Se puede observar, que al aumentar el valor de M_s^* a tiempos cortos, la dureza del material se incrementa. Esto se debe a que la fracción en volumen de martensita se incrementa, por lo que su contribución en la dureza del material es mayor. Cuando el valor de M_s^* decrece, la dureza del material disminuye debido a que se obtiene una fracción de martensita menor. Finalmente, a tiempos de austemperización largos, la dureza simulada se mantiene independiente del valor de M_s^* ya que la matriz resultante al punto donde cesa la reacción bainítica queda constituida principalmente por austenita de alto contenido de carbono no transformable y ferrita bainítica cuyas durezas son menores en comparación con la dureza de la martensita.

5.6.3. Parámetros cinéticos de la transformación ausferrítica

Como se ha señalado, en la subsección 3.2.2, de la página 29, el modelo microestructural del austemperizado del hierro dúctil se basa en la cinética de transformación a partir de un modelo cinético del tipo Avrami. Por lo que también, es necesario conocer el efecto

de los parámetros cinéticos para estimar la fracción en volumen de ferrita bainítica y por consiguiente la fracción de austenita retenida, ver ecuación 3.16, de la página 29. Una forma de evaluar el efecto de los parámetros cinéticos sobre la evolución microestructural, es simulando el desplazamiento de las "narices" sea de inicio o final de transformación del diagrama TTT. A partir de los parámetros cinéticos publicados por Cisneros [13], se construyó una ecuación para "desplazar" la nariz final de transformación a diferentes temperaturas, correlacionando el tiempo final de transformación y el número de datos disponibles del diagrama TTT.

$$t_f^* = t_f \cdot \left[1 - \frac{1 - \psi}{t_f \cdot n} (n - 1) \right] \quad (5.1)$$

donde ψ es el parámetro de ajuste que permite desplazar el tiempo final de transformación a diferentes temperaturas, n es el número de datos disponibles del diagrama TTT y t_f es el tiempo final sin alterar la nariz de transformación del diagrama TTT. La figura 5.32, muestra porción del diagrama TTT con el desplazamiento de las curvas de final de transformación con valores de ψ de 150 y 500 a partir de los resultados reportados por Cisneros [13].

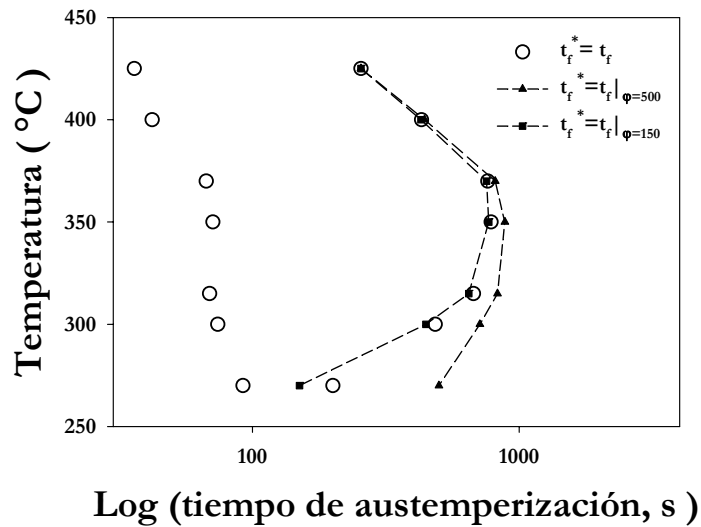


Figura 5.32: Desplazamiento del tiempo final de transformación del diagrama TTT. Los círculos corresponden a los tiempos de inicio y fin de la transformación bainítica reportados por Cisneros [13], para un hierro nodular con 3.72C - 2.26Si - 0.24Mn wt. %.

A partir de la figura 5.32, se puede ver que los tiempos finales de transformación

se pueden recorrer hacia valores mayores o menores dependiendo del valor de ψ . Así, el parámetro resulta útil para cuantificar el desplazamiento de la nariz del diagrama TTT y de esta manera analizar el efecto de los parámetros cinéticos sobre la evolución microestructural. Cuando la nariz del tiempo final de transformación se recorre hacia la derecha, el tiempo para completar la transformación se hace mayor mientras que hacia la izquierda el tiempo se hace menor. Estas diferencias repercuten directamente en los parámetros cinéticos y por consiguiente en la evolución de las fases durante el austemperizado.

La figura 5.33, muestra el efecto del tiempo de austemperización sobre la fracción en volumen de austenita retenida simulada a valores de ψ de 150 y 500, a partir de una temperatura de austenización de 920°C , una temperatura de austemperización de 300°C y un tiempo de austemperización de 1200 segundos.

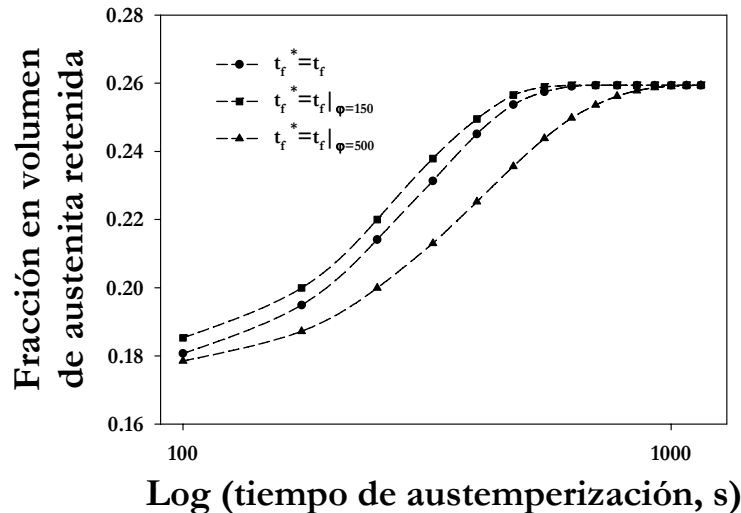


Figura 5.33: Efecto del tiempo de austemperización sobre la fracción en volumen de austenita retenida simulada a distintos valores ψ .

De la figura 5.33, se observa que la fracción en volumen de austenita retenida se incrementa en función del tiempo de austemperización hasta alcanzar un máximo alrededor de los 1000 segundos cuando la ferrita bainítica alcanza su máxima transformación. Cuando la nariz del tiempo final de transformación se recorre a tiempos largos en el diagrama TTT ($\psi = 500$), la evolución microestructural de la austenita retenida se retarda debido a que se requiere de un tiempo más largo para completar la transformación. Similarmente,

cuando el tiempo final de transformación se acorta la formación de austenita retenida es más rápida, por lo que se requiere un tiempo más corto para alcanzar la misma transformación. Esta capacidad del modelo es valiosa porque permite aplicarla a otro hierro con distinta composición química, cuyo diagrama TTT se tenga disponible.

El efecto del tiempo de austemperización sobre la de dureza del ADI simulada a distintos valores de ψ , se ilustra en la figura 5.34. Los resultados mostrados se obtuvieron bajo las mismas condiciones de operación que la figura 5.33.

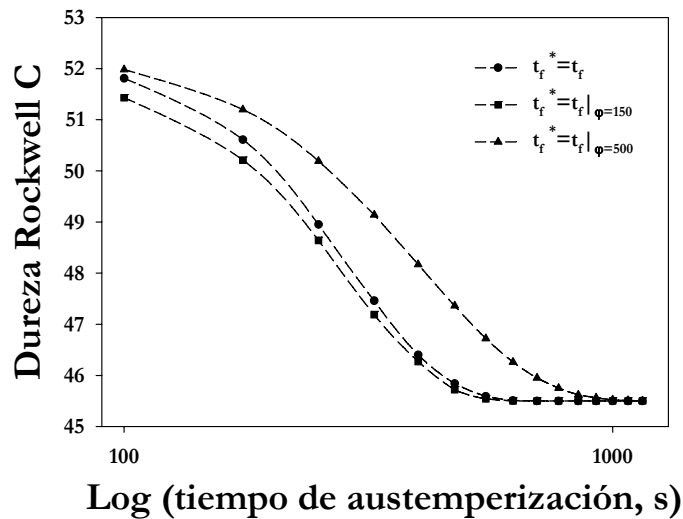


Figura 5.34: Efecto del tiempo de austemperización sobre la dureza del ADI simulada a distintos valores ψ .

En la figura 5.34 se muestra que la dureza del ADI disminuye en función del tiempo de austemperización para todos los valores de ψ . Se observa que cuando ψ se incrementa, se obtiene una dureza mayor a un tiempo de austemperización más largo. Esto se debe a que un tiempo final de transformación mayor limita la formación de las placas de ferrita bainítica, al requerirse más tiempo para completar su transformación. Esto promueve la formación de una mayor cantidad de martensita a partir de la austenita residual sin transformar. Como se ha señalado, la presencia de una mayor cantidad de martensita en la matriz ausferrítica incrementa la dureza del material debido a que su dureza es mayor en comparación con la ferrita y la austenita. Por otro lado, cuando el tiempo final de transformación es menor, la dureza decae rápidamente a tiempos cortos de austemperización debido a que la rapidez de transformación de la ferrita bainítica se incrementa impidiendo

la formación de martensita, con la consecuente disminución en la dureza.

5.6.4. Temperatura de Austenización

Como se ha señalado, la temperatura de austenización es un parámetro que determina la concentración de carbono en austenita antes de dar inicio la transformación de la ferrita bainítica, ver la figura 5.25, de la página 76. El efecto de esta variable se refleja en la concentración de austenita retenida al final del tratamiento térmico. La figura 5.35, ilustra el efecto de la temperatura de austenización sobre la fracción en volumen de austenita retenida simulada a una temperatura de austemperización, $T_{\alpha b}$, de 300°C , un tiempo de austemperización, $t_{\alpha b}$, de 1600 segundos y una temperatura de transformación martensítica, M_s , de 210°C .

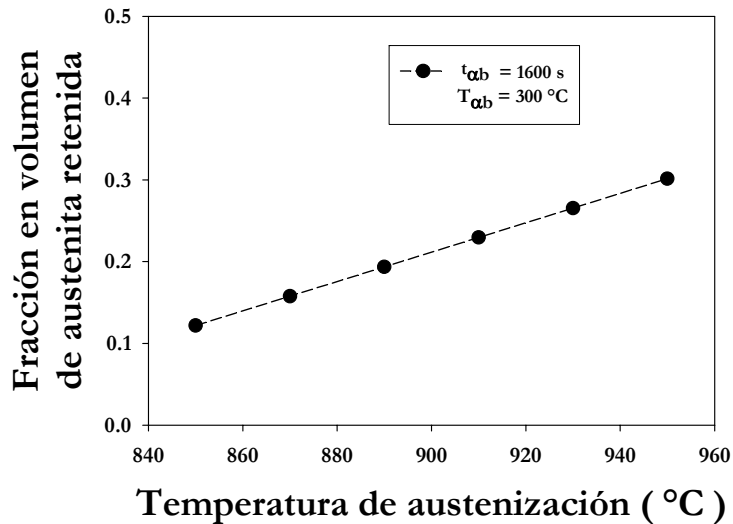


Figura 5.35: Efecto de la temperatura de austenización sobre fracción en volumen de austenita retenida simulada.

A partir de la figura 5.35, se observa que la fracción en volumen de austenita retenida se incrementa proporcionalmente con la temperatura de austenización. Una mayor temperatura de austenización promueve una mayor formación de austenita retenida debido a que se tiene una mayor concentración de carbono en austenita durante la austenización. Esto se puede corroborar mediante un análisis del diagrama de fases Fe-C. Para esto, en la figura 5.36, se observa el efecto de la temperatura de austenización sobre la concentración de carbono en la austenita inicial antes de su transformación a ferrita bainítica causado

por el rapido enfriamiento del austemperizado.

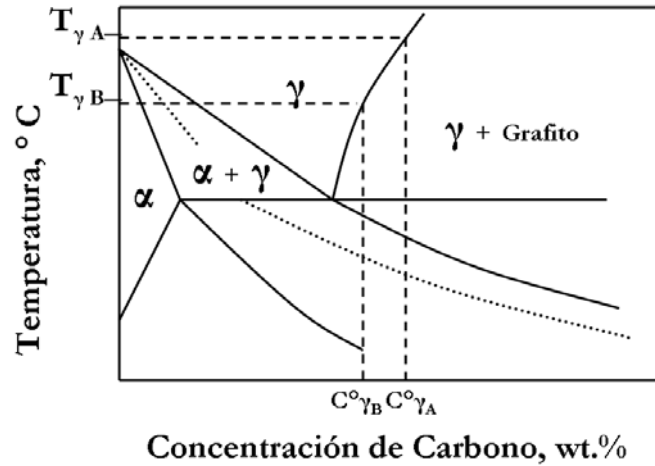


Figura 5.36: Ilustración esquemática del efecto de la temperatura de austenización sobre la concentración de carbono en austenita sobrepuesta en el diagrama de fases Fe-C [11].

Con base en la figura 5.36, se puede ver que a una temperatura de austenización, T_A , elevada se incrementa la concentración de carbono en austenita, ver la línea solvus en el diagrama, al inicio de la transformación. Esta concentración de carbono en austenita es importante debido a que controla la retención de la austenita residual durante el austemperizado. Una mayor concentración de carbono en austenita al inicio de la transformación de la ferrita bainítica incrementa la fracción en volumen de austenita retenida porque aumenta su fuerza motriz como se indicó en la subsección 3.2.1.

5.6.5. Elementos aleantes

El efecto de los elementos aleantes sobre la fracción en volumen de austenita retenida simulada se muestra en la figura 5.37. Los resultados mostrados fueron obtenidos a partir de una temperatura de austenización, T_{γ} , de $920\text{ }^{\circ}\text{C}$, una temperatura de austemperización, T_{ab} , de $300\text{ }^{\circ}\text{C}$, un tiempo de austemperización, t_{ab} , de 1600 segundos. Cabe señalar, que las variaciones en la concentración de los elementos se hace con respecto a la composición química nominal del hierro dúctil mostrada en tabla 4.1, de la página 44.

A partir de la figura 5.37, se observa que la fracción en volumen de austenita retenida

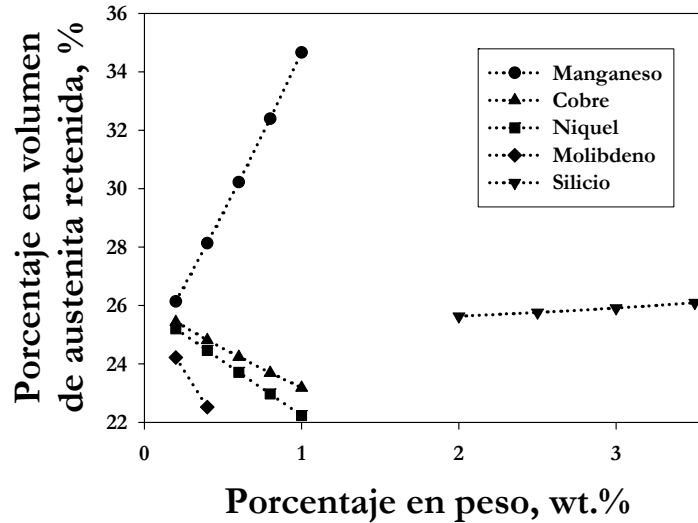


Figura 5.37: Efecto del porcentaje en peso de elementos aleantes sobre el porcentaje en volumen de austenita retenida para una aleación 3.70 C - 3.0 Si - 0.18 Mn.

simulada se incrementa notoriamente en función del porcentaje en peso de manganeso, desde 26 % hasta 35 % en volumen de austenita retenida, en un rango de 0.2 - 1.0 %wt. de Mn. También se sabe, que un porcentaje por arriba del 0.3 %wt. de Mn puede ser dañino para el tratamiento térmico del austemperizado debido a que puede conducir a la segregación de carburos en las zonas intercelulares. Cabe señalar, que el modelo no considera la segregación de los elementos aleantes ni su efecto directo en la cinética de transformación de la ausferrita. En esta figura, también, se observa que la concentración de los elementos aleantes como el cobre, el níquel y molibdeno disminuye el porcentaje de austenita retenida. Aunque el objetivo de estos elementos es mejorar la templabilidad del hierro su uso a su vez debe ser limitado en los rangos establecidos ($\text{Cu} < 0.8\% \text{ wt.}$, $\text{Ni} < 2.0\% \text{ wt.}$, $\text{Mo} < 0.4\% \text{ wt.}$) para evitar la formación de carburos y el retardo en la cinética de transformación [30]. Por último, se observa que un aumento en la concentración del silicio no causa ningún efecto significativo en el porcentaje de austenita retenida, pero si permite promover la formación de nódulos grafito durante la colada y al mismo tiempo retardar la formación de cementita durante el austemperizado del hierro nodular.

5.7. Predicciones

Una de las principales aplicaciones del modelo es la predicción de la evolución microestructural de las fases formadas durante el tratamiento térmico del austemperizado, las cuales son: la ferrita bainítica, la martensita y la austenita retenida. Cabe reiterar, que al conocer las concentraciones de estas fases se permite predecir las durezas en función del tiempo de austemperización.

5.7.1. Evolución de las Fases

En la figura 5.38, se muestra el efecto del tiempo de austemperización sobre la evolución microestructural simulada de cada una de las fases formadas. La predicción de estas fases se llevó a cabo con una temperatura de austenización, T_γ , de 920 °C, una temperatura de austemperización, T_{ab} , de 300 °C, un tiempo de austemperización, t_{ab} , de 700 segundos y una temperatura de inicio de transformación martensítica, M_s , de 210 °C para una aleación con 3.7% wt. C - 3.0% wt. Si - 0.18% wt. Mn.

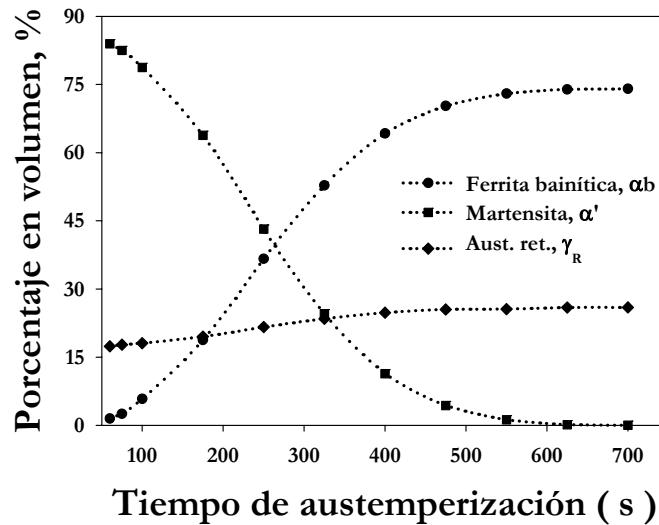


Figura 5.38: Efecto del tiempo de austemperización sobre el porcentaje en volumen de las fases formadas durante el tratamiento térmico del austemperizado.

A partir de la figura 5.38, se observa que el porcentaje en volumen de martensita disminuye en función del tiempo de austemperización. Esto se debe a que la evolución de la ferrita bainítica consume austenita residual al grado en el cual toda la austenita se

estabiliza, debido al enriquecimiento con carbono, y queda retenida, incluso a temperatura ambiente, desfavoreciendo así la formación de martensita. Por otro lado, se observa que la ferrita bainítica se incrementa en función al tiempo de austemperización debido a que la reacción avanza hasta alcanzar su transformación completa. Por otro último, la austenita retenida tiende a incrementarse ligeramente en función del tiempo de austemperización y de la evolución microestructural de la ferrita bainítica hasta lograr el equilibrio termodinámico entre estas dos fases. Para un análisis profundo de la evolución y conformación de la austenita retenida se construyó la figura 5.39. Las condiciones de operación, así como la composición química utilizada para las predicciones mostradas en esta figura corresponden a las empleadas en la figura 5.38.

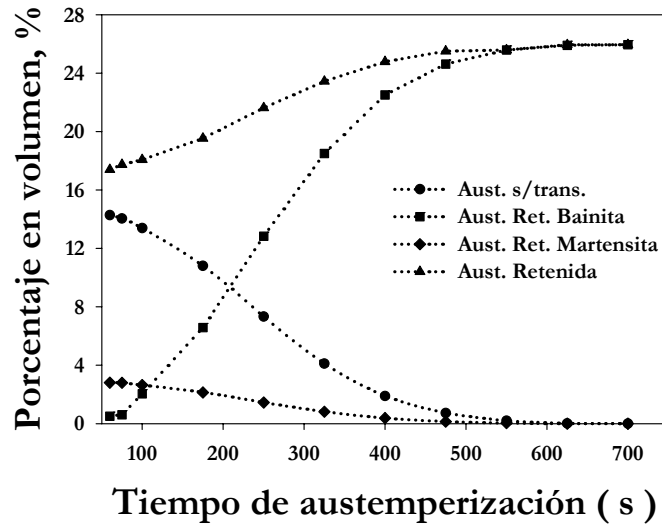


Figura 5.39: Efecto del tiempo de austemperización sobre el porcentaje en volumen de los tipos austenita durante el tratamiento térmico del austemperizado.

En la figura 5.39, se ilustra que la austenita retenida simulada está conformada por distintos tipos de austenita que contribuyen a su total durante la evolución termoestructural de la ausferrita. Se observa que existe un porcentaje de austenita residual que disminuye en función del tiempo de austemperización y la evolución microestructural de la ferrita bainítica. Esta austenita puede transformarse a martensita debido a un inadecuado enriquecimiento de la austenita con carbono y es independiente al contenido de austenita que se retiene por la transformación de la ferrita bainítica. Cabe señalar, que entre mayor sea la transformación de la ferrita bainítica, menor será el contenido de austenita residual.

También, se observa que cierta cantidad de austenita queda retenida en función del tiempo de austemperización debido a la transformación de la ferrita bainítica, lo cual promueve la retención de esta fase por el enriquecimiento de la austenita residual con carbono. Debe señalarse que la transformación martensítica retiene cierta cantidad de austenita residual, la cual tiende a disminuir en función del tiempo de austemperización. Esto ocurre porque la formación de martensita queda limitada a la cantidad disponible de austenita residual que no se retiene por la transformación bainítica. Por último, la suma de los tres tipos de austenita a temperatura ambiente conforman la austenita retenida, la cual se incrementa en función del tiempo de austemperización y de la evolución de la ferrita bainítica.

Capítulo 6

Conclusiones

Se demostró que es posible desarrollar un modelo matemático con base a las leyes físicas de la transferencia de calor acoplado a un modelo cinético del tipo Avrami para el tratamiento isotérmico del austemperizado. El método de elemento finito demostró ser una herramienta valiosa para la solución de este modelo. El modelo matemático fue verificado y validado mediante la comparación de resultados experimentales a distintas condiciones de operación. Se mostró también, que es posible estimar la condición de la frontera mediante la solución del problema inverso de conducción de calor con base en la respuesta térmica experimental. Las comparaciones de las respuestas térmicas simuladas con las experimentales confirmaron lo anterior.

La evolución microestructural se validó en función del tiempo de austemperización y se concluyó que la evolución microestructural simulada se aproxima con precisión a los resultados obtenidos experimentalmente. Cabe señalar, que mediante el modelo se corroboró que los tiempos de austemperización cortos generan un inadecuado enriquecimiento de la austenita con carbono propiciando la formación de fases residuales como la martensita, lo cual fue confirmado mediante las durezas medidas y las micrografías obtenidas por el microscopio electrónico de barrido, las cuales demuestran la presencia de la martensita a tiempos cortos de austemperización. Mediante comparación del modelo del austemperizado con un modelo termodinámico [40], con base en la fracción máxima de austenita retenida estimada en función de la temperatura de austemperización, se concluyó que el modelo aquí desarrollado logra predecir con mucha precisión los resultados experimentales publicados en esta referencia. Por último, se utilizó la evolución de las fases presentes en el ADI para la predicción de la dureza obtenida por el austemperizado.

Bibliografía

- [1] ASM Handbook. **Metallographer's Guide: Practices and Procedures for Irons and Steels**. Vol. 1, American Society for Metals, 2002.
- [2] George F. VanderVoort. **Atlas of Time-Temperature Diagrams for Irons and Steels**. American Society for Metals, 1991.
- [3] P. K. Agarwal and J. K. Brimacombe. *Metallurgical Transactions B*. Vol. 12-B, 1981, 121-133.
- [4] M. Nili Ahmadabadi and S. Farjami. *Materials Science and Technology*. Vol. 19, 2003, 645-649.
- [5] M. Avrami. *J. Chem Phys.*, 7, 1939, 1103-1112.
- [6] M. Avrami. *J. Chem Phys.*, 8, 1940, 212-224.
- [7] M. Avrami. *J. Chem Phys.*, 9, 1940, 177-184.
- [8] H. Bayati and R. Elliot. *Materials Science and Technology*. 15, 1999, 265-277.
- [9] H. K. D. H. Bhadeshia. **Bainite in Steels**. The Institute of Materials, 1992.
- [10] H. K. D. H. Bhadeshia. **ISI International**. Vol. 39 No. 10, 1999, 966-979.
- [11] L. C. Chang. *Metallurgical and Materials Transactions A*. Vol. 34-A, 2003, 211-217.
- [12] L. C. Chang. *Scripta Materialia*. Vol. 39-1, Mar 1998, 35-38.
- [13] M. M. Cisneros G, M. J. Pérez L., R. E. Campos C., and E. Valdés C. *Int. J. Cast Metals Res*, 11, 1999, 425-430.
- [14] Cullity B. D. **Elements of X-ray diffraction**. Edit., M. A. Addison - Wesley, 1978.
- [15] Dyson D. J. and Holmes B. *Journal of the Iron and Steel Institute*, 1970, 469-474.
- [16] K. L. Hayrynen, K. R. Brandenburg and J. R. Keough. *AFS Transactions*. 02 - 084, 1-10.

- [17] B. Hernández-Morales, A. Ingalls-Cruz, J. A. Barrera-Godínez y R. Colás. **Proceedings of the 20th ASM Heat Treating Society Conference**. 2000, 719-726.
- [18] José Luis Hernández R., Rafael E. Campos C., Alonso de la Garza S. M. **XXVI Simposio Nacional de Siderurgia**. 2007, 192-203.
- [19] D. P. Koistinen, R. E. Marburger. *Acta Metall.* 7, 1959, 59.
- [20] George Krauss. **Steel: Heat Treatment and Processing Principles**. American Society for Metals, 1989.
- [21] P. Maynier, J. dollet, and P. Bastien. **Hardenability Concepts with Applications to Steels, AIME**. 1978, 518-544.
- [22] E. López. **Desarrollo de un Nuevo Dispositivo para Caracterizar la Extracción de Calor en Baños de Temple**. 2000. Tesis de Licenciatura. UNAM.
- [23] W. A. Johnson and R. F. Mehl. *Trans. AIME*, 135, 1939, 416-458.
- [24] D. J. Moore, T. N. Rouns, and K. B. Rundman. *AFS Transactions*. 103, 1985, 705-718.
- [25] D. J. Moore, T. N. Rouns, and K. B. Rundman. *AFS Transactions*. 48, 1986, 255-264.
- [26] Olivera Eric, Milan Jovanovic, Leposa va Sidanin, Dragan Rajnovic, and Slavica Zec. *Materials and Design*. 27, 2006, 617-622.
- [27] D. R. Pourier and G. H. Geiger. **Transport Phenomena in Materials Processing**. Minerals, Metals, & Materials Society, 1998.
- [28] K. B. Rundman and R. C. Klug. *AFS Transactions*. 115, 1982, 499-508.
- [29] P. W. Shelton and A. A. Bonner. *Journal of Materials Processing Technology*. 173, 2006, 269-274.
- [30] Rio Tinto Iron & Titanium Inc. **Ductile Iron Data for Design Engineers**. 1st ed. Montreal: QIT-Fer et Titane Inc, Sorel and Richards Bay Minerals, 1990.
- [31] M. Takahashi. H. K. D. H. Bhadeshia. *Materials Science and Technology*. 6, 1990, 592.
- [32] J. S. Téllez. **Simulación de la Evolución Microestructural en el Ensayo Jominy**. 2005. Tesis de Licenciatura. UNAM.
- [33] Teng-Shih Shih and Lih-Ren Hwang. Determination of Critical Cooling Rates for the Ausferrite Transformation in ADIs. *Transactions of the JFS*. Vol. 14 (1995) 48-58.

-
- [34] R. C. Thomson, J. S. James and D. C. Putman. *Materials Science and Technology*. Vol 16, 2000, 1412-1419.
- [35] R. C. Voigt. C. R. Loper. **Proceedings of the 1st International Conference on Austempered Ductile Iron ASM**. 1984, 83-103.
- [36] S. Yazdani and R. Elliot. *Materials Science and Technology*. 15, 1999, 531-540.
- [37] S. Yazdani and R. Elliot. *Materials Science and Technology*. 15, 1999, 541-546.
- [38] S. Yazdani and R. Elliot. *Materials Science and Technology*. 15, 1999, 885-895.
- [39] S. Yazdani and R. Elliot. *Materials Science and Technology*. 15, 1999, 896-902.
- [40] M. A. Yescas, H. K. D. H. Bhadeshia, D. J. MacKay. *Materials Science and Engineering A*. A-311, 2001, 162-173.
- [41] M. A. Yescas, H. K. D. H. Bhadeshia. *Materials Science and Engineering A*. A-333, 2002, 60-66.
- [42] S. H. Zahiri, E. V. Pereloma, and C. H. J. Davies. *Materials Science and Technology*. Vol 17, 2001, 1563-1568.
- [43] S. H. Zahiri, E. V. Pereloma, and C. H. J. Davies. *Materials Science and Technology*. Vol 18, 2002, 1163-1167.
- [44] Charles F. Walton. **Gray and Ductile Iron Castings Handbook**. Gray and Ductile Iron Founders' Society Inc, 1971.

Apéndice A

Problema Inverso de Conducción de Calor, [32]

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_{ij} ($j = 1; i = 1, 2, \dots, M$). 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 calor es constante a través de un número específico de pasos de tiempo futuros, i.e. después que los valores q_1, q_2, \dots, q_{M-1} se han estimado, las densidades de flujo de calor $q_{M+1}, \dots, q_{M+r-1}$ 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).

$$q_{M+1} = q_{M+2} = \dots = q_{M+r-1} = q_M \quad (\text{A.1})$$

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:

$$S = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^n (Y_{j,M+i-1} - T_{j,M+i-1}) \quad (\text{A.2})$$

y puesto que $T_{j,M+i-1}$ es una función de q_M , derivando a S con respecto q_M se tiene:

$$\frac{\partial S}{\partial q_M} = 2 \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^n (Y_{j,M+i-1} - T_{j,M+i-1}) \left(-\frac{\partial T_{j,M+i-1}}{\partial q_M} \right) \quad (\text{A.3})$$

igualando a cero:

$$\sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^n (Y_{j,M+i-1} - T_{j,M+i-1}) \left(-\frac{\partial T_{j,M+i-1}}{\partial q_M} \right) = 0 \quad (\text{A.4})$$

donde $T_{j,M+i-1}$ y $\frac{\partial T_{j,M+i-1}}{\partial q_M}$ son evaluados 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:

$$T_{j,M+i-1} = T_{j,M+i-1}^* + (q_M - q_{M-1}) \cdot T_{j,M+i-1;q}^* \quad (\text{A.5})$$

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:

$$T_{j,M+i-1;q}^* = \frac{\partial T_{j,M+i-1}}{\partial q_M} \quad (\text{A.6})$$

es llamado el coeficiente de sensibilidad; 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 , *i.e.*, para pequeños pasos de tiempo Δt , las propiedades k , ρ y Cp cambian poco de un paso de tiempo al siguiente en cada sección dentro del cuerpo de la pieza. En otras palabras aunque la distribución de temperatura del centro a la superficie de la pieza varíe 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 .

Sustituyendo A.4 y A.5 se tiene:

$$q_M - q_{M-1} = \frac{1}{\sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^n (T_{j,M+i-1;q}^*)^2} \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^n (Y_{j,M+i-1} - T_{j,M+i-1}^*) \cdot T_{j,M+i-1;q}^* \quad (\text{A.7})$$

si

$$\Delta M = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^n (T_{j,M+i-1;q}^*)^2 \quad (\text{A.8})$$

$$q_M - q_{M-1} = \frac{1}{\Delta M} \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^n (Y_{j,M+i-1} - T_{j,M+i-1}^*) \cdot T_{j,M+i-1;q}^* \quad (\text{A.9})$$

Dado que los coeficientes de sensibilidad cambian con el tiempo y la posición, para pequeños pasos de tiempo son calculados considerando también a las propiedades termofísicas invariantes durante el cálculo de la densidad de flujo de calor. Al hacer esta consideración las ecuaciones A.4-A.9 se linealizan. Después de que la densidad de flujo de calor q_M fue calculada, se determina la distribución de temperatura a través del cuerpo de la pieza 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 pieza. 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 sensibilidad consiste en tomar la derivada de las ecuaciones A.4 a A.9 en su forma diferencial y resolver el sistema de ecuaciones resultantes. La forma de las ecuaciones de diferencias finitas para los coeficientes de sensibilidad 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 sólo 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 y $\rho C p$ son evaluados a la temperatura inicial $T_{j,M-1}$. Puesto que los coeficientes en las ecuaciones A.4 y A.6 constituidos por los parámetros k y $\rho C p$ 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:

$$T_q = \frac{\partial T_{j,M+i-1}}{\partial q_M} \quad (\text{A.10})$$

donde T_q es la notación del coeficiente de sensibilidad.

Tomando la derivada de las ecuaciones A.4-A.9 se tiene:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(k \frac{\partial T_q}{\partial r} \right) = \rho C p \frac{\partial T_q}{\partial t} \quad (\text{A.11})$$

$$-k \frac{\partial T_q}{\partial r} = 1, \text{ en } r = R \quad (\text{A.12})$$

$$\frac{\partial T_q}{\partial r} = 0, \text{ en } r = 0 \quad (\text{A.13})$$

$$T_q(r, t) = 0, \text{ para } t = 0; \text{ en } 0 < r < R \quad (\text{A.14})$$

Las ecuaciones para la variable dependiente T_q 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 sensibilidad, reduciéndose el tiempo de calculo significativamente.

Apéndice B

Difusividades térmicas

A continuación se presentan las difusividades térmicas tanto para el acero inoxidable austenítico AISI 304 como para el hierro nodular A536 grado 65-45-12, con matriz ferrítica, en función de la temperatura.

Difusividad Térmica		Temperatura
Inox 304	Hierro Dúctil A536	$^{\circ}C$
3.539E-06	7.379E-06	200
3.792E-06	7.017E-06	300
4.134E-06	6.342E-06	400
4.476E-06	5.822E-06	500
4.934E-06	5.602E-06	600

Tabla B.1: Difusividades térmicas del acero inoxidable y del hierro dúctil en función de la temperatura

Apéndice C

Diagramas TTT

A continuación se presentan los diagramas TTT (temperatura, tiempo y transformación) para aleaciones de hierro dúctil mostrando el efecto de los elementos aleantes sobre el tiempo de inicio de la transformación bainítica.

Figura C.1: Diagrama TTT para un hierro nodular con 3.37C - 2.62Si - 0.031Mn % wt. Austenizado a 900 °C por 20 minutos [2].

Figura C.2: Diagrama TTT para un hierro nodular con 3.32C - 2.58Si - 0.031Mn - 0.49Mo% wt. Austenizado a 900 °C por 20 minutos [2].

Apéndice D

Sistema Fe-C-Si

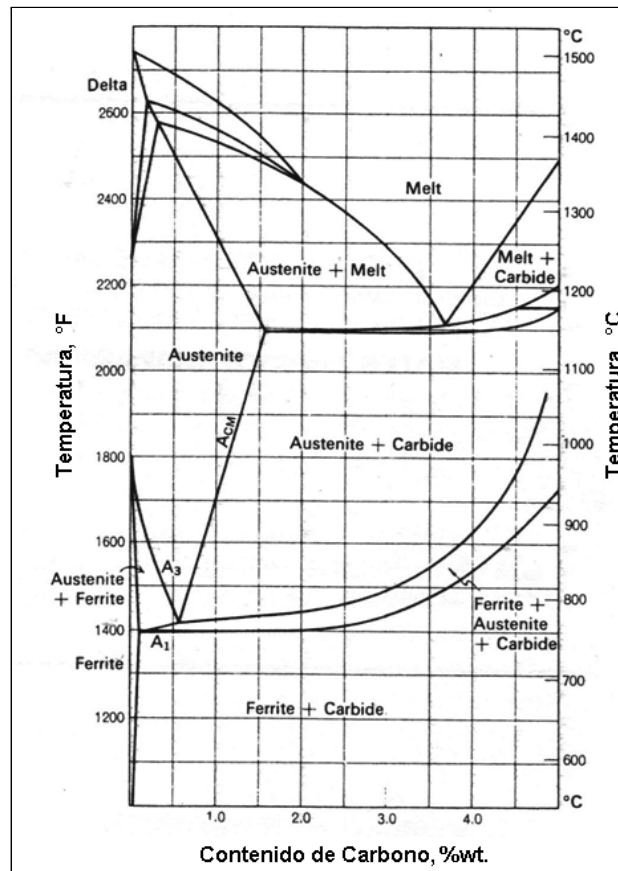


Figura D.1: Sección vertical del diagrama Fe-C-Si con 2% wt de Si.