



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

---

---

**FACULTAD DE QUÍMICA**

***MODELADO DEL PERFIL DE TEMPERATURAS Y  
TRANSFORMACIONES DE FASE DEL AUSTEMPERIZADO***

***T E S I S***

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:  
INGENIERA QUÍMICA METALÚRGICA**

**P R E S E N T A**

**ANA CRISTINA MARTÍNEZ VILLASEÑOR**



Ciudad Universitaria, Cd. Mx.

2018



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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

## **JURADO ASIGNADO**

**PRESIDENTE:** ANTONIO HUERTA CERDAN  
**VOCAL:** JOSÉ ANTONIO BARRERA GODÍNEZ  
**SECRETARIO:** ARTURO ALEJANDRO SANCHEZ SANTIAGO  
**1° SUPLENTE:** JUAN MANUEL DE LA ROSA CANALES  
**2° SUPLENTE:** JUAN CARLOS CONTRERAS GUZMAN

### **SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:**

**FACULTAD DE QUÍMICA. EDIFICIO D, DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA METALÚRGICA**

**ASESOR DEL TEMA:**

\_\_\_\_\_  
**DR. JOSÉ ANTONIO BARRERA GODÍNEZ**

**SUSTENTANTE:**

\_\_\_\_\_  
**ANA CRISTINA MARTÍNEZ VILLASEÑOR**

*Añade a tu saber acciones que sean dignas de Él. Añade la fe, la virtud, la paciencia y la templanza.  
Añade el amor que es el alma de todo lo demás. Entonces te preocupará menos renunciar al  
Paraíso, porque dentro de ti encontrarás otro lugar, mucho más bello y venturoso.*

*El Paraíso Perdido.  
John Milton.*

## ***Dedicatoria***

*A mi Creador y Salvador y a su Madre Santísima,  
que lo hacen todo en mí.*

*Al amor más grande que Dios me ha regalado,  
Juan Manuel Sevilla Montero.  
Juntos movemos el Universo  
desde la banca de un parque.*

*A mi mamá Renata Villaseñor Infante,  
que ama sin condición y siempre  
está junto a mí.*

*A mis abuelos Arturo Villaseñor y Cristina Infante,  
y a mi tía Bárbara Villaseñor, mis segundos  
padres, educadores y amores.*

*A mis hermanas, Valentina y Lucca Martínez  
que desde el momento en que nacieron son  
mi inspiración.*

## **AGRADECIMIENTOS**

Agradezco a Dios primeramente por la vida y el amor que me regala cada día. Por permitirme estudiar en esta maravillosa Universidad, y por actuar en mí para poder terminar mi carrera. Porque sin ti nada puedo, pero a tu lado todo lo puedo, y a mi Madre del cielo, por el amor incondicional y la ayuda que me da cada instante de mi vida. Todo a Jesús por María, todo a María para Jesús.

Agradezco a mi esposo en Dios, Juan Manuel Sevilla Montero, porque este camino y lucha la hacemos juntos. Porque tu vida es mi inspiración, porque nunca me dejas caer ni rendirme, porque tu sola presencia me fortalece, porque tu felicidad es mi objetivo y tu amor mi camino.

Agradezco a mi mamá, Renata Villaseñor Infante que siempre ha creído en mí. Que me apoya con su amor incondicional y su cuidado y que nunca se va de mí lado.

Agradezco a mis abuelos Arturo Villaseñor y Cristina Infante, que siguen siendo mis segundos padres y me alientan a dar siempre lo mejor de mí. A mi tía Bárbara Villaseñor por su amor, su cariño, sus consejos, y por ser igualmente como una madre para mí. A mis hermanas Valentina y Lucca Martínez Villaseñor, me gustaría ser un buen ejemplo, para que también encuentren ese lugar bello y venturoso dentro de sus ustedes.

Agradezco a Alejandra y Manuel Sevilla Domingo, porque ambos son un ejemplo y modelo a seguir para mí, por la amistad que me han regalado y por su apoyo y aliento para la culminación de mis estudios.

Agradezco a la familia García Infante todo el apoyo que me han brindado, así como a mi tía Kolumba Infante Moreno. Gracias por todo.

Agradezco a la Universidad Nacional Autónoma de México la formación tanto académica como cultural que me proporcionó, así como a todos los que hacen posible que la grandeza de esta máxima casa de estudios perdure en ella y en los que nos sentimos orgullosos de ser parte de la misma.

Agradezco al Dr. José Antonio Barrera Godínez el apoyo y las oportunidades que me ha proporcionado a lo largo de la carrera como maestro y asesor, así como su interés no solo en transmitir conocimientos a sus alumnos, sino también en buscar su transformación como ingenieros y personas. Agradezco al Dr. José Bernardo Hernández Morales por todas las oportunidades que me proporcionó. Gracias por creer en mí. Gracias al M. en C. Antonio Huerta Cerdán por ser mi tutor desde el inicio de mi carrera, por orientarme y apoyarme siempre que lo necesité.

Agradezco a todos los profesores que tuve el honor de tener durante la carrera, en especial a los del Departamento de Ingeniería Metalúrgica.

# RESUMEN

Desde la revolución industrial, la necesidad de producir materiales con propiedades cada vez más específicas y de mayor calidad, ha propiciado no solo la investigación y el desarrollo de procesos en los que se obtengan materiales que cumplan con estas características, sino también la optimización de dichos procesos utilizando los recursos tecnológicos que surgen con el avance de la ciencia. Los tratamientos térmicos son algunos de los principales procesos metalúrgicos que se utilizan para la obtención de materiales con propiedades específicas, tal como el Hierro Nodular Austemperizado (ADI por sus siglas en inglés), el cual se obtiene por medio del tratamiento térmico de austemperizado, cuyo ciclo térmico específico dota al hierro nodular de una microestructura que le proporcionará una resistencia y dureza útiles para piezas principalmente utilizadas en la industria automotriz.

La simulación matemática de dicho tratamiento térmico, permite obtener información tal como el tiempo óptimo de cada etapa del ciclo térmico, lo cual permitirá llevar a cabo el proceso con mayor efectividad y precisión para obtener las propiedades deseadas en el material.

El enfoque de esta tesis es la descripción de un modelo matemático de los perfiles de temperatura y de la transformación de fases dentro de una pieza de hierro de forma cilíndrica al llevarse a cabo el proceso de austemperizado. Se utilizó el método de diferencias finitas para obtener los perfiles de temperatura resolviendo la ecuación de conducción de calor y se realizó un modelo con base en las concentraciones y fracciones de cada fase microestructural para predecir sus transformaciones.

Se obtuvo un modelo termo-estructural que permite al usuario adaptar fácilmente las condiciones deseadas para el proceso, tales como temperaturas, tiempos de tratamiento, composición química y mediante el cual puede obtener resultados confiables de perfiles térmicos y microestructurales en el material tratado.

# ÍNDICE

Resumen .....	5
1 Introducción .....	8
1.1 Breve recorrido histórico de los materiales .....	8
1.2 La revolución del Hierro .....	11
1.3 Tratamientos Térmicos: El Austemperizado .....	17
1.4 Hierro Nodular Austemperizado .....	18
1.5 Justificación .....	21
1.6 Planteamiento del problema .....	22
2 Hipótesis .....	23
3 Objetivo .....	23
4 Metodología del trabajo .....	24
5 Revisión de la literatura .....	25
5.1 Proceso de Austemperizado .....	25
5.2 Modelos matemáticos previamente aplicados al proceso .....	31
5.2.1 Percepción macroscópica adoptada .....	31
5.2.2 Mecanismos considerados .....	31
5.2.3 Ecuaciones y nomenclatura .....	32
5.3 Cinética de transformación en el Austemperizado .....	31
5.3.1 Distribución de carbono al término de la transformación de la ferrita acicular, $C_{\gamma}^0$ .....	33
5.3.2 Concentración de carbono en la austenita retenida, $C_{\gamma R}$ .....	33
5.3.3 Concentración inicial de carbono en la austenita, $C_{\gamma}^0$ .....	34
5.3.4 Fracción en volumen de la ferrita acicular, $X_{\alpha F}$ .....	34
5.3.5 Fracción en volumen de la austenita retenida, $x_{\gamma R}$ .....	35
6 Desarrollo del modelo matemático .....	37
6.1 Metas y objetivos del modelo .....	37
6.1.1 Modelo térmico .....	37
6.1.2 Modelo microestructural .....	37
6.2 Análisis del proceso metalúrgico a modelar .....	38
6.3 Modelo térmico .....	39
6.3.1 Mecanismos participantes y controlantes .....	39
6.3.2 Formulación matemática .....	40
6.4 Modelo microestructural .....	42
6.5 Suposiciones y simplificación del modelo .....	42
6.6 Selección del método de solución .....	43
6.7 Método de solución .....	44
6.8 Ecuaciones de solución .....	45
6.9 Algoritmo computacional de solución .....	45

6.10	Validación del modelo .....	47
6.11	Versiones del simulador .....	47
7	Resultados y discusión de resultados .....	49
7.1	Modelo termo-estructural (simulador) .....	49
7.2	Implementación del modelo en la computadora .....	49
7.3	Verificación del modelo utilizando condiciones extremas .....	50
7.4	Validación del modelo en condiciones reales .....	52
8	Conclusiones .....	56
9	Bibliografía .....	57
Apéndice I Diagrama CCT (Continuous Cooling Transformation) .....		60
Apéndice II Interface del modelo termo estructural (simulador) .....		61
II.1	Portada del simulador .....	61
II.2	Datos de entrada .....	61
II.3	Datos de salida .....	64
II.4	Rutinas, subrutinas y procedimientos .....	70

# I. INTRODUCCIÓN

## 1.1 Breve recorrido histórico de los materiales

Un nuevo mundo. Sin duda de esta manera llamarían nuestros antepasados a estos tiempos tecnológicos. Tiempos que no son más que la consecuencia y buen resultado de la asidua labor del hombre prehistórico de materializar su creatividad e ingenio, virtudes adquiridas gracias a su instinto y necesidad de supervivencia.

Congruente y atinado fue el historiador danés Christian Jürgensen Thomsen, al incorporar el tan hoy conocido “Sistema de las edades” [1] como una forma de clasificar la vida y evolución tecnológica del hombre en la Tierra.

Edad de piedra, cobre, bronce y hierro, son la forma más común en que nos referimos a algún periodo de la historia de la humanidad. No es de sorprenderse que se haya adoptado esta clasificación cuando se sabe que los grandes acontecimientos de la historia del hombre han ocurrido en su mayoría debido al descubrimiento de algún método para adquirir un material con propiedades cada vez mejores.

Situaciones desde el tan conocido Imperio Romano, hasta aquellas que hoy en día permanecen como secretos a voces y leyendas, como los llamados Pueblos del Mar, adjudican su grandeza, florecimiento y grandes batallas ganadas al desarrollo de uno o varios materiales.

Tanto en el ámbito bélico como el arquitectónico y artístico dichos descubrimientos sirvieron -y lo siguen haciendo- para fortalecer la economía, poderío y desarrollo tecnológico de las naciones.

Ejemplo claro de las grandes ventajas de obtener nuevos materiales es el de los Aceros de Damasco. Desarrollado en Oriente Medio a inicios del siglo XII, este material fue utilizado para la elaboración de espadas que hasta nuestros días se consideran legendarias por su dureza y filo inigualables.

Cuenta la historia sobre un encuentro entre Ricardo Corazón de León y el Sultán Saladino en Palestina, enemigos en la guerra de las Cruzadas Cristianas. Ambos se jactaban del poder de sus respectivas espadas. Ricardo tomó su enorme espada, la levantó con las dos manos y la dejó caer con fuerza sobre una maza (antigua arma utilizada en ese entonces). El impacto de la espada hizo saltar a la maza en pedazos.

Cuando llegó el turno a Saladino de presentar el poder de su espada, la colocó encima de un mullido cojín de pluma y la jaló suavemente. Sin ningún esfuerzo ni resistencia la espada se hundió en el cojín hasta cortarlo completamente como si fuera mantequilla. Ricardo y sus acompañantes europeos se miraban unos a otros incrédulamente. Sus dudas se disiparon cuando Saladino arrojó un velo hacia arriba que, flotando en el aire, cortó suavemente con su espada [2].

La espada de Ricardo corazón de León era tosca, pesada, recta y brillante. La de Saladino, era esbelta, ligera y de un azul opaco que, visto más de cerca, era producido por una textura compuesta de millones de curvas oscuras en un fondo blanco que caracterizan a los aceros de Damasco. Era tan dura que se podía afilar como una navaja de afeitar, y a su vez, sumamente tenaz, de manera que podía absorber los golpes del combate sin romperse.

Fue difícil para los europeos aceptar que la dureza y la tenacidad se pudieran conjugar de una manera tan extraordinaria. Todavía más difícil resulto entender y dominar la técnica de fabricación de los aceros de Damasco en Occidente.

Otro ejemplo de historia de éxito gracias al aporte de descubrimientos metalúrgicos es el misterio de los Pueblos del Mar.

A finales de la Edad de Bronce el mundo Mediterráneo vivía una época de esplendor. Las grandes civilizaciones florecían en un periodo de relativa paz y el comercio entre ellas era activo, lo que facilitaba el intercambio de ideas y conocimientos. Pero en torno al año 1200 a.C. todo pareció trastocarse. Una oleada de guerras y destrucción invadió el Mediterráneo Oriental, avanzando desde el Egeo y acabando a su paso con las grandes culturas de la época: Micenas, Creta, Asia

Menor, Chipre, Siria. Todas sus civilizaciones fueron destruidas. Aunque finalmente Egipto resistió a duras penas, y es gracias a este último que tenemos noticias de aquellos a los que llamaron los Pueblos del Mar [3].

Pero ¿cómo fueron capaces estos hombres de terminar con grandes imperios, uno detrás de otro?. Parece que la pista definitiva la dan algunos jeroglíficos egipcios encontrados en restos arqueológicos [4]. En sus inscripciones se puede ver cómo los guerreros de los Pueblos del Mar llevan armas distintas a los egipcios, con espadas más largas y de forma triangular.

Eso hace pensar que habían aprendido a forjar armas de hierro, lo que les permitía romper las armas enemigas y perforar las corazas de bronce con relativa facilidad. Una ventaja que pudo ser decisiva.

Fascinante es por tanto el hecho de que la metalurgia, siendo primeramente una técnica que logró convertirse en un arte por la belleza de su manejo y resultados, sea hoy una ciencia que el hombre no ha acabado de descubrir, perfeccionar y desarrollar a lo largo de estos miles de años de investigación de centenas de generaciones.

La naturaleza no deja de sorprendernos con sus bondades, y aun con millones de años de existencia, nos permite desarrollar métodos y técnicas que involucran la obtención de materiales con características antes impensables.

Encontrar los procesos que permiten obtener materiales con propiedades específicas para el uso que se le quiera dar al producto final, es el punto de partida de los investigadores de esta ciencia hoy en día. No sin olvidar que tenemos la obligación y derecho de aprovechar dichos beneficios lo más amable y agradecidamente posible con la naturaleza. Es por eso que esta ciencia, arte, y técnica tan rica y útil para el hombre, ha de desarrollar hoy en día métodos que permitan obtener los mayores beneficios de lo que nos da la tierra sin afectarla, permitiendo así su evolución y desarrollo natural posterior.

Desde la extracción de minerales, hasta la creación y mejoramiento de los materiales obtenidos y requeridos, los procesos metalúrgicos han ido evolucionando de tal manera que hoy es posible obtener miles de materiales con características y propiedades según se requiera mediante técnicas y procesos específicos. Y aún queda mucho por hacer.

## **1.2 La revolución del hierro**

Hoy en día se dice que vivimos en la era del acero, y con justa razón, ya que casi todo lo que nos rodea y que necesitamos para vivir, está hecho de este material.

En relación con la Edad del Hierro, son muchos los metalúrgicos de la época actual que se han planteado y tratado de explicar una serie de dudas que surgen justamente ahora que se dispone de mayor información sobre lo que es el hierro y sus compuestos. Una de estas preguntas es la siguiente: actualmente sabemos que las propiedades mecánicas del hierro puro son inferiores a las que presentan el cobre y el bronce. Así pues, ¿cómo es que el hierro pudo llegar a sustituir a esos materiales?; y por consecuencia, ¿cómo es posible que se haya considerado el paso de la Edad del Bronce a la Edad del Hierro como un avance sustancial en la historia de la humanidad?

En primer lugar, cabe mencionar que la secuencia histórica Edad del Bronce a la Edad de Hierro no es universalmente aceptada y hay bastantes estudios que presentan hechos bien fundamentados que se oponen a ella. T. A. Wertime lo resume de esta manera: "Las "edades" según los metales son clasificaciones útiles para una visión general de la historia, pero no dicen nada acerca de los verdaderos orígenes de la metalurgia" [1].

En segundo lugar, y considerando como válida la sustitución del bronce por el hierro, es posible explicarla de la manera siguiente: el hierro aparece inicialmente como producto de reducción de sus minerales, proceso que requiere de una temperatura menor que la del punto de fusión. El resultado de esto es una esponja metálica que, al ser martillada, se libera de sus escorias y permite formar una masa compacta y dúctil. Prueba de ello serían las muestras que se han encontrado y a las que se les

ha asignado, de acuerdo a técnicas actuales, un origen que data del tercer milenio a.C. [2].

El proceso de reducción por carbón consiste precisamente en el calentamiento en presencia de este elemento, y se sabe que si al hierro se le da un tratamiento consistente en elevar su temperatura y en presencia de carbón, lo que se obtiene es justamente el acero. Es decir, es altamente probable que lo que el hombre del siglo XV a.C. conoció y manipuló fuera lo que hoy se conoce como acero al carbón y no hierro.

No sería remoto que en este proceso de obtención del acero se hubiera tenido el convencimiento de que el simple calentamiento de los minerales seguido del enfriamiento consecuente diera por resultado un nuevo material, quebradizo a veces, más duro y menos maleable que el cobre, menos útil que el bronce pero más abundante y fácil de obtener.

Pronto debió haberse observado que si el calentamiento se prolongaba, se mejoraba la condición de fragilidad y se aumentaba notoriamente su dureza. Esto no podía ser otra cosa que el "resultado obvio" de la purificación del material, es decir, se pensaba que el acero era una forma más pura del hierro. Estas ideas prevalecieron hasta finales del siglo XVIII, cuando el metalurgista sueco Swen Rinman, en 1774, logró establecer ya de una manera científica que la diferencia entre hierro dulce, acero y hierro colado radica fundamentalmente en la cantidad de carbón que entra como aleante con el metal [2]. Este descubrimiento empezó a dar luz sobre lo que por muchos años constituyó el gran misterio, de los aceros de Damasco.

Por años, muchos herreros, forjadores y aún científicos de renombre, intentaron reproducir las propiedades de los aceros de Damasco. En 1819 el científico inglés Michael Faraday publicó un artículo, en el que proponía como solución al problema, la adición al acero de pequeñas cantidades de sílica y alúmina [5].

La propuesta no tuvo éxito pero consiguió inquietar a Jean Robert Breant, inspector de ensayos de la casa de moneda de París, para que éste iniciara una serie de experimentos consistentes en añadir distintos y variados elementos al acero.

Para 1821, Breant había llegado al meollo del asunto y pudo establecer que era el alto contenido de carbón el responsable de la resistencia y dureza poco comunes de los aceros de Damasco.

Lo que propiamente se puede llamar tecnología del acero tuvo sus inicios a inicios del siglo XIX, y alcanzó su consolidación alrededor de 1861, con la invención de hornos que permitieron su producción masiva y la sucesión abundante de nuevas aleaciones a base de este material [6].

La primera de ellas fue la obtenida a nivel experimental por Faraday, al fundir una mezcla de acero y níquel y una mezcla de acero y cromo, lo que ocurrió alrededor de 1819. Posteriormente se obtuvo el acero al tungsteno en 1858, y diez años más tarde, el acero al manganeso, que ha resultado ser una aleación con propiedades idóneas para la fabricación de herramienta. En 1877 se obtiene el acero al cromo. Cada una de estas aleaciones posee características que permiten su utilización de manera específica. En la actualidad, a más de un siglo de su surgimiento, se continúa trabajando intensamente en las aleaciones del acero.

Hoy en día sigue siendo un reto la obtención de aceros especiales, ya sea que se busque obtener mayor resistencia mecánica de éstos, mayor dureza o flexibilidad, o se busquen aleaciones que resistan temperaturas cada vez más elevadas con objeto de obtener materiales que vengan a resolver problemas en aeronáutica, en perforación de pozos petroleros o extracción de petróleo, o que se trate de producir materiales más resistentes a la corrosión por salinidad, acidez, etcétera.

Hoy la producción de acero es indicativa de la prosperidad de una nación y constituye la base para la producción en serie de muchas otras industrias, como la construcción naval, la construcción de edificios y la fabricación de automóviles, maquinaria, herramientas y equipamiento doméstico.

El desarrollo de los transportes, especialmente del marítimo, ha hecho económicamente rentable el intercambio internacional de las materias primas necesarias (mineral de hierro, carbón, gasóleo, chatarra y aditivos). Se han construido grandes fundiciones y acerías en las regiones costeras de los principales países industrializados, que se abastecen de las materias primas de los países exportadores capaces de satisfacer las actuales exigencias de materiales de ley alta.

Durante los últimos decenios, se han desarrollado y alcanzado con éxito los procesos conocidos como de "reducción directa". Los minerales de hierro, en especial los de ley alta o los enriquecidos, se reducen a hierro esponjoso por extracción del oxígeno que contienen, obteniéndose de este modo un material ferroso que sustituye a la chatarra [8].

Antes de la revolución industrial, el acero era un material caro que se producía en escala reducida para fabricar armas principalmente. Los componentes estructurales de máquinas, puentes y edificios eran de hierro forjado o fundiciones. Las fundiciones son aleaciones de hierro con carbono entre 2.5% y 5%. La aleación que contiene el 4.3% se conoce como "eutéctica" y es aquella donde el punto de fusión es mínimo, 1130°C. Esta temperatura es mucho más accesible que la del punto de fusión del hierro puro (1537°C). Los chinos ya en el siglo VI d.C., conocían y aprovechaban la composición eutéctica para producir fundiciones en hornos de leña. El producto de estos hornos era una aleación líquida llamada arrabio que contenía abundantes impurezas [7].

Por su baja temperatura de fusión, el arrabio servía como punto de partida para la fabricación de hierro fundido, al cual solamente se le eliminaban las impurezas manteniendo un alto contenido de carbono. El arrabio, ya en estado sólido, servía también para producir hierro forjado. Usualmente se introducía en lingotes a hornos de carbón de leña, dotados de sopladores de aire.

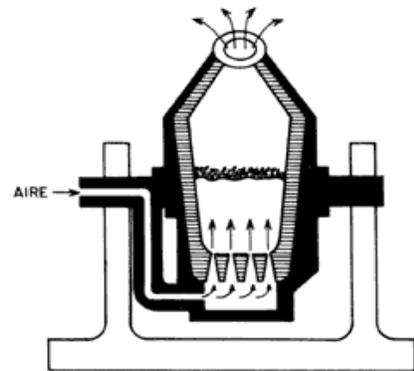


Figura 1. Convertidor de arrabio en acero inventado por Henry Bessemer.

El oxígeno del aire reaccionaba con el carbono y otras impurezas del arrabio formándose así escoria líquida y una esponja de hierro. El hierro esponja, casi puro, se mantenía sólido y la escoria líquida se removía a martillazos.

El primer paso para lograr la transformación masiva del arrabio en acero lo dio el inglés Henry Bessemer en 1856. La idea de Bessemer era simple: eliminar las impurezas del arrabio líquido y reducir su contenido de carbono mediante la inyección de aire en un "convertidor" de arrabio en acero. Se trata de una especie de crisol, como el que muestra en la figura 1, donde se inyecta aire soplado desde la parte inferior, que a su paso a través del arrabio líquido logra la oxidación de carbono. Así, el contenido de carbono se reduce del 4 o 5% a alrededor de un 0.5%.

Además, el oxígeno reacciona con las impurezas del arrabio produciendo escoria que sube y flota en la superficie del acero líquido. Como la combinación del oxígeno con el carbono del arrabio es una combustión que genera calor; Bessemer acertadamente sostenía que su proceso estaba exento de costos por energía [9].

La tecnología para producir, arrabio siempre estuvo inmersa en un proceso evolutivo. Un paso de una gran trascendencia se dio en el siglo XVIII, cuando el carbón mineral sustituyó al carbón de leña en los hornos. El uso del carbón de leña en las acerías dejó secuelas dramáticas en muchos países. En Inglaterra la devastación fue tan brutal que para mediados del siglo XVIII los bosques ya se habían agotado. Por más de un siglo Inglaterra tuvo que importar hierro o arrabio de Suecia, Rusia y de sus colonias americanas, debido a su insuficiencia de carbón de leña. Para bien de los bosques, en el siglo XVIII se inició el uso del carbón mineral para producir arrabio [10].

El carbón mineral usualmente contiene sustancias volátiles indeseables para la fabricación del arrabio. Se desarrolló entonces un método que consiste en triturar y calentar el carbón mineral en hornos para que las sustancias volátiles sean expelidas, dando lugar a un carbón más refinado llamado coque.

Cuando los convertidores "básicos" de arrabio en acero entraron en operación, ya se producía carbón mineral coquizado en plantas avanzada donde además de

purificar al carbón se, aprovechaban los gases expelidos. Se obtenían como subproductos amoniaco, benceno, tolueno, nafta aromática y brea de alquitrán.

Una vez desatada la producción masiva de acero durante la revolución industrial, la producción mundial creció vertiginosamente, como se indica en la figura 2, impulsada por una fiebre tecnológica sin precedentes y por una demanda industrial insatisfecha.

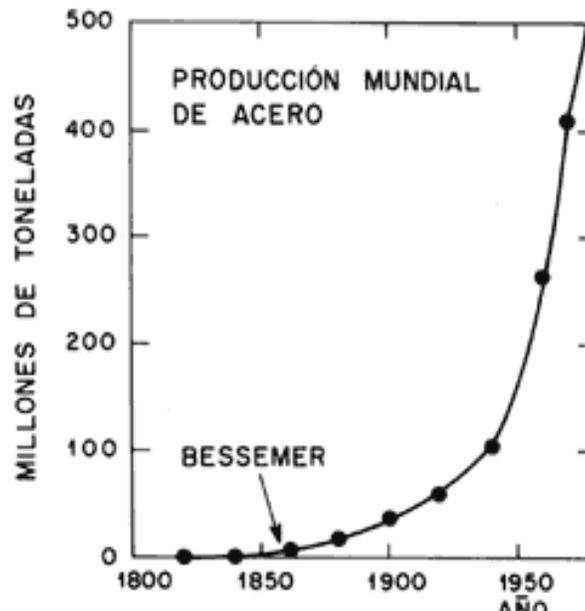


Figura 2. Gráfica de la producción mundial de acero en los últimos siglos [5]

Es así como el mundo llegó a la era del acero, siendo este el material más utilizado en muchos ámbitos de la vida del hombre, cuyas necesidades se han visto modificadas y aumentadas a lo largo del tiempo, por lo que siempre se requiere una constante investigación y estudio para innovar y mejorar las propiedades de este y muchos otros más materiales, con el fin de hacerlos cada vez más óptimos y eficaces para la vida del hombre. Es por esto que a lo largo de los años se han desarrollado nuevas técnicas que permiten obtener materiales con las características y propiedades requeridas según lo que se quiera obtener o producir.

### **1.3 Tratamientos Térmicos: El Austemperizado**

Existen diferentes procesos que permiten transformar la materia prima en un producto de vanguardia con las mejores propiedades mecánicas y químicas que puedan obtenerse. Algunos de ellos son los tratamientos térmicos, que son procesos controlados utilizados para modificar la microestructura de materiales, como metales y aleaciones, para aportar propiedades beneficiosas (mayor dureza superficial, resistencia a la temperatura, ductilidad y fortaleza), mejorado la vida útil de un componente.

En otras palabras, un tratamiento térmico es un conjunto de operaciones de calentamiento y enfriamiento, bajo condiciones controladas de temperatura, tiempo de permanencia, velocidad y presión, aplicadas a metales o aleaciones en estado sólido, con el fin de obtener propiedades mecánicas específicas, especialmente la dureza, la resistencia y la elasticidad. Los materiales a los que se aplica el tratamiento térmico son, principalmente, acero y fundiciones [10].

Existen muchos tipos de tratamientos térmicos, tales como el revenido, el recocido, el cementado, la carburización, el austempering y el martempering entre otros. Cada uno de ellos requiere de condiciones de temperatura, presión, tiempo y enfriamiento específicas, lo que llevará al metal a sufrir un cambio en su microestructura y por lo tanto en sus propiedades mecánicas mejorándolas.

Para los fines de esta tesis, se desarrolló un estudio más detallado sobre el tratamiento térmico de Austemperizado, siendo este un tratamiento isotérmico de alto rendimiento que imparte propiedades superiores a materiales ferrosos [10], dando por resultado un material llamado Hierro Dúctil (o nodular) Austemperizado (ADI por sus siglas en inglés), del cual se hablará más a detalle en la siguiente sección.

El ciclo térmico del Austemperizado implica tres etapas de transformación:

1. Llevar a cabo una austenización en el intervalo de 850 a 950 °C, hasta que se alcanza una disolución completa de carbono en austenita.

2. Enfriamiento rápido a una temperatura inferior a  $B_s$  y superior a  $M_s$ , normalmente en el intervalo de 250 a 450°C. Durante esta etapa la austenita se transforma isotérmicamente en una ferrita acicular y la austenita retenida se enriquece en carbono.
3. Enfriamiento a temperatura ambiente para formar la ausferrita, microestructura que consiste en una matriz de ferrita acicular y austenita retenida por su alto contenido de carbono.

La ferrita acicular nuclea en la superficie de los nódulos de grafito por un mecanismo de desplazamiento. Las microscópicas láminas de dicha ferrita crecen progresivamente en las zonas intercelulares hasta que la transformación se complete [11]. Su nucleación y crecimiento causan una partición de carbono en las áreas circundantes, enriqueciendo y eventualmente estabilizando la retención de austenita incluso a bajas temperaturas [12].

La adición de silicio inhibe la formación de cementita, obligando a la austenita a retener carbono, alcanzando concentraciones de carbono de 1.6 a 2.2 %wt [14]. Una vez avanzada la transformación ausferrítica, el componente de hierro se enfría a temperatura ambiente y parte de la austenita retenida se transforma en martensita. Esta transformación a martensita se dará sólo si la austenita presente no está lo suficientemente enriquecida con carbono para poder estabilizarse a temperatura ambiente. Aunque la martensita proporcione una buena resistencia mecánica, su formación debe limitarse, ya que su abundancia reduce la fracción volumétrica de austenita retenida y por lo tanto, se reduce la tenacidad y ductilidad buscadas al final en este proceso.

## **1.4 Hierro Nodular Austemperizado**

El ADI es un material muy empleado en el sector automotriz, ya que presenta algunas ventajas con respecto al acero y al hierro gris, como son mayor resistencia a la fatiga y mayor resistencia al desgaste, aunque con un costo de fabricación más elevado. Por su buena tenacidad el hierro nodular

austemperizado (ADI) se utiliza para la fabricación de piezas que experimentan ciclos de fatiga o desgaste prolongado, como, por ejemplo, cigüeñales, monoblocks, engranes, etc. Esto es debido, al tipo de estructura cristalográfica que posee, la cual inhibe el crecimiento y propagación de grietas. En años recientes, los fabricantes y usuarios de las fundiciones de hierro nodular han propuesto el potencial de uso de este material, como resultado del amplio rango de propiedades mecánicas que ofrecen. Desde su introducción comercial en 1948, las fundiciones de hierro nodular han sido una alternativa en cuanto a costo de fabricación con respecto a las aleaciones con cierta ductilidad, las fundiciones de acero, las piezas forjadas y otros tipos de materiales. Las fundiciones de hierro nodular son empleadas en cada campo de la ingeniería y en cada región geográfica del planeta y se les conoce con diferentes nombres, por ejemplo, hierros nodulares o hierros dúctiles [9-11].

Los hierros nodulares se convirtieron en una realidad industrial en 1948 y fueron producto de un tratamiento realizado en la fusión del hierro gris, lo que causó que el grafito que estaba presente en forma de hojuelas (figura 3-a) se transformaran en forma de esferas o nódulos (figura 3-b).

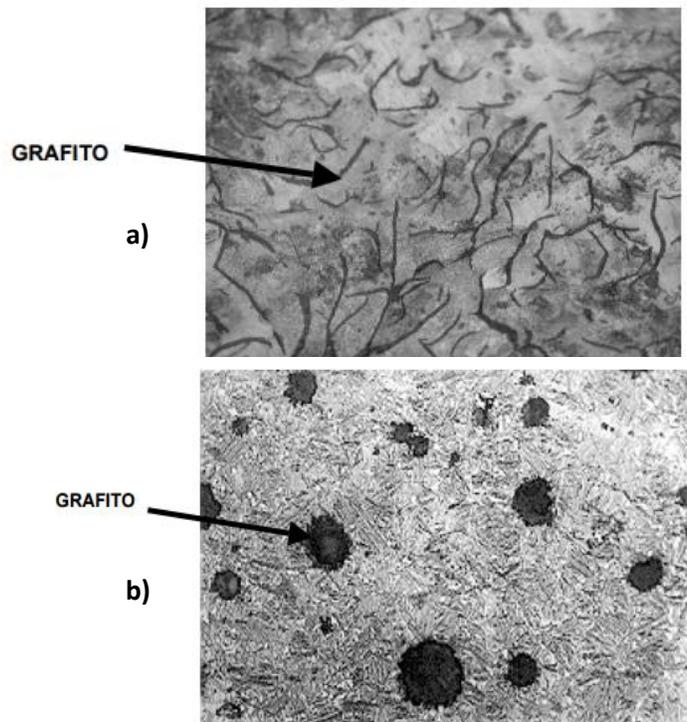


Figura 3 a) Hierro Gris con grafito en forma de hojuelas; b) Hierro Gris con grafito en forma de nódulos [8]

La forma nodular esférica del grafito reduce el efecto de agrietamiento cuando el material es sometido a cargas cíclicas, y por lo tanto, aumenta la resistencia a la fatiga, debido a que las esferas actúan como arrestadores de grietas [8].

En lo que respecta a su composición química, los hierros nodulares son similares al hierro gris, aunque con adiciones especiales de Magnesio y Cerio para provocar la nucleación y crecimiento del Carbono en forma nodular y dependiendo de la microestructura de la matriz existen los siguientes tipos [12]:

- Hierro Nodular Ferrítico
- Hierro Nodular Perlítico
- Hierro Nodular Perlítico-Ferrítico
- Hierro Nodular Martensítico
- Hierro Nodular Austemperizado

El hierro nodular austemperizado representa a un grupo de aleaciones de hierro que ofrecen una buena combinación de resistencia mecánica, dureza y resistencia al desgaste. Este tipo de aleaciones, además, tiene una excelente capacidad de deformación y una alta tenacidad, así como buena resistencia al desgaste y a la fractura. Es por ello que estas aleaciones son utilizadas para reducir el peso y el costo en la fabricación de diversos componentes.

Las propiedades relevantes de los hierros nodulares austemperizados son obtenidas por medio de un tratamiento térmico (con un control riguroso de la temperatura y el tiempo del tratamiento) que tiene como objetivo desarrollar una matriz con una estructura de ferrita acicular (60%) y austenita retenida (con alto contenido de carbón). La austenita retenida es térmicamente estable a bajas temperaturas y es difícil de maquinarse. Sin embargo, bajo condiciones adecuadas de esfuerzos, puede transformarse localmente en martensita (estructura dura y frágil) [10-11].

La ventaja de esta característica hace que los hierros nodulares austemperizados sean utilizados en piezas en las que se desea que la dureza del material aumente conforme se van experimentando tensiones de carga locales, por ejemplo, en flechas o en cojinetes. Además, los esfuerzos superficiales pueden ser puestos deliberadamente en una pieza antes de entrar en servicio, por ejemplo, se pueden inducir esfuerzos térmicos superficiales en una pieza, con los que se logra obtener una excelente resistencia al desgaste y a los esfuerzos por fatiga, esto se aplica por

ejemplo en la fabricación de dientes de engranes o las superficies de rodamiento de los cigüeñales.

En la tabla 1 se presentan las principales propiedades mecánicas de los Hierros Nodulares Austemperizados, de acuerdo a la norma ASTM A-897M-90 [12]:

Tabla 1. Propiedades mecánicas de los Hierros Nodulares Austemperizados (Norma ASTM A-897M-90)

Grado	Resistencia a la Tensión (MPa)	Esfuerzo de Cedencia (MPa)	Deformación (%)	Resistencia al Impacto (J) <sup>a</sup>	Dureza (HB) <sup>c</sup>
<b>850-550-10</b>	850	550	10	100	269-321
<b>1050-700-7</b>	1050	700	7	80	302-363
<b>1200-850-4</b>	1200	850	4	60	341-444
<b>1400-1100-1</b>	1400	1100	1	35	388-477
<b>1600-1300</b>	1600	1300	b	b	444-555

Desde su desarrollo, el hierro dúctil o nodular austemperizado (ADI), ha mostrado un aumento en sus propiedades mecánicas y su resistencia al desgaste, manteniendo su tenacidad y ductilidad características.

Esta combinación se da debido a la formación de “ausferrita”, microestructura que consiste en agregados de ferrita acicular y una matriz de austenita retenida rica en carbono con nódulos de grafito incrustados [6].

## 1.5 Justificación

Al llevar a cabo un tratamiento térmico de austemperizado, es necesario un control térmico muy preciso. Este control puede lograrse mediante la aplicación de modelos matemáticos derivados a partir del conocimiento de los fenómenos de transporte y de la descripción cuantitativa de la cinética de las transformaciones de fase que ocurren durante el tratamiento térmico.

Se utilizó el método de diferencias finitas debido a su gran sencillez conceptual y porque constituye un procedimiento muy adecuado para la resolución de una

ecuación bidimensional como las planteadas anteriormente ya que permite la resolución aproximada de ecuaciones diferenciales, convirtiéndolas en derivadas finitas.

Esta simulación toma en cuenta todas las condiciones posibles de transferencia de energía térmica que se puedan llegar a presentar en el proceso de austemperizado, lo que lo hace un modelo más completo y versátil que los que se encuentran en la literatura. Además, el código computacional se encuentra escrito de tal manera que permite al usuario cambiar fácilmente dichas condiciones y algunas otras propiedades tales como composición química del material.

Se eligió una pieza cilíndrica ya que muchas de las piezas tratadas térmicamente en la industria poseen dicha forma para posteriormente ser maquinadas, es decir, es una geometría que se utiliza comúnmente en este tipo de procesos.

Aunque el código tiene un hierro nodular específico preestablecido, el usuario puede utilizar el código para cualquier otro hierro siempre y cuando cuente con el diagrama CCT correspondiente.

## **1.6 Planteamiento del problema**

De acuerdo con lo establecido hasta ahora, es pertinente el desarrollo de un modelo matemático que integre la transferencia de calor y las cinéticas de transformación de fase que ocurren durante el austemperizado de un hierro nodular, con el fin de obtener resultados tanto de perfiles de temperatura como de transformaciones de fase que sean útiles para la optimización del tratamiento.

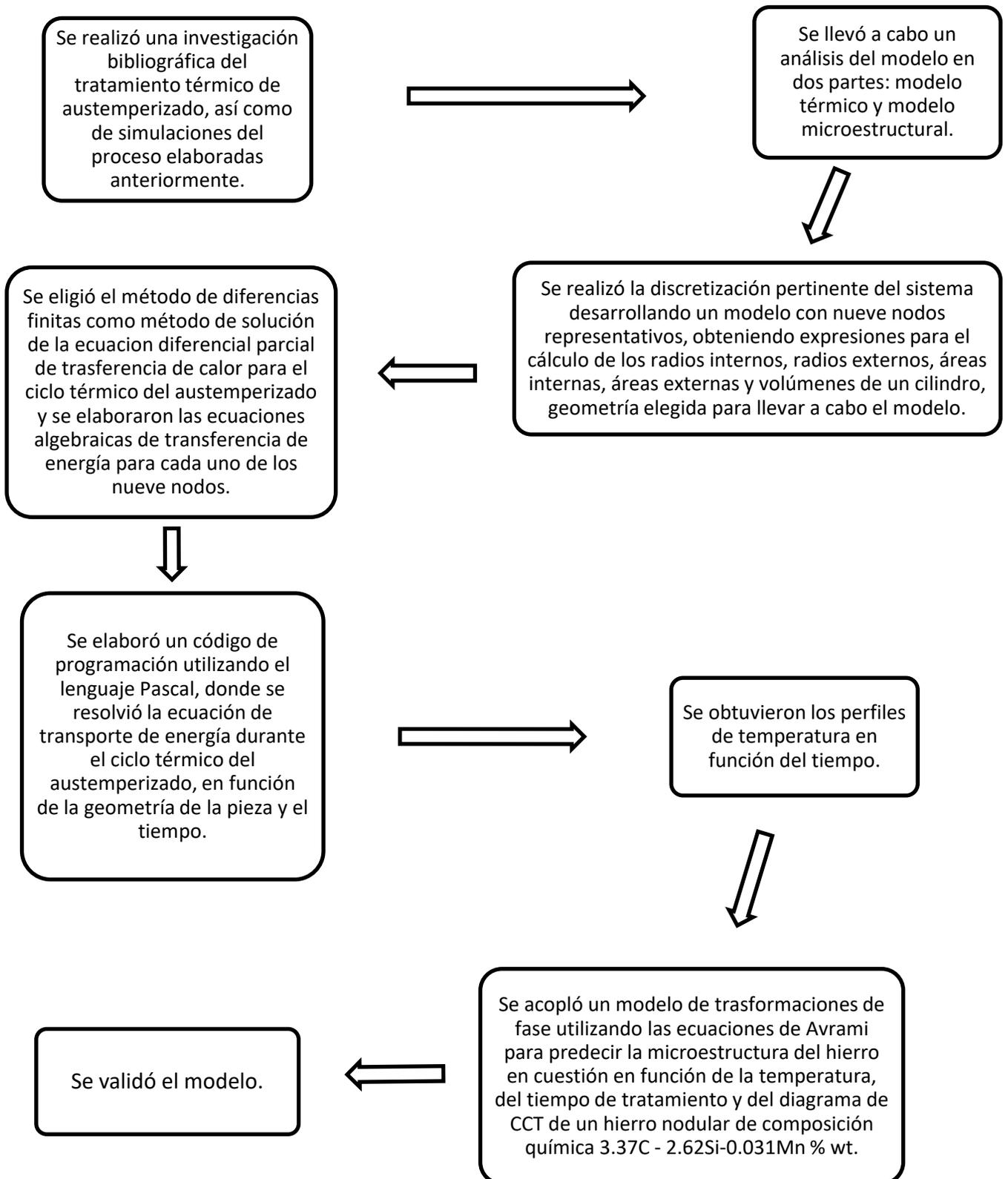
## **II. HIPOTESIS**

Mediante la simulación matemática del tratamiento térmico de austemperizado, es posible obtener los perfiles de temperatura y de transformaciones de fase del proceso, mismos que podrán ser utilizados para practicar dicho tratamiento a las condiciones óptimas de tiempo y temperatura en función de las propiedades que se quieran obtener en el material.

## **III. OBJETIVO**

Desarrollar un software específico para simular el ciclo térmico y predecir la microestructura final del proceso de austemperización en piezas cilíndricas de materiales ferrosos.

## IV. METODOLOGÍA DEL TRABAJO



# V. REVISIÓN DE LA LITERATURA

## 5.1 Proceso de Austemperizado

El ciclo térmico del Austemperizado implica tres etapas de transformación:

1. Austenización.
2. Enfriamiento rápido a una temperatura inferior a  $B_s$  y superior a  $M_s$ , normalmente en el intervalo de 250 a 450°C.
3. Enfriamiento lento a temperatura ambiente.

La ferrita acicular nuclea en la superficie de los nódulos de grafito por un mecanismo de desplazamiento. Las láminas de ferrita acicular crecen progresivamente en las zonas intercelulares hasta que la transformación se complete [8]. La nucleación y el crecimiento de la ferrita acicular causan una partición de carbono en las áreas circundantes, enriqueciendo y eventualmente estabilizando la retención de austenita incluso a bajas temperaturas [9].

A continuación, se describen más detalladamente cada una de estas tres etapas:

### a) Austenización:

Debido al calentamiento de la pieza a temperaturas entre 850 °C y 950 °C, la microestructura inicial de ferrita-perlita se transforma en austenita. Al ocurrir esto, el carbono contenido en las partículas de grafito se disuelve en la matriz de austenita recién formada. La temperatura y la duración utilizadas para la austenización son parámetros importantes de control del proceso, su determinación depende de la composición química de la pieza. La temperatura de austenización define la cantidad máxima de carbono que puede ser disuelto en la matriz de austenita, lo cual es de importancia, ya que el carbono estabiliza a la austenita a temperatura ambiente y determina su fracción en la microestructura del ADI. El tiempo de austenizado debe ser tal que la homogeneidad del carbono distribuido en la matriz

austenítica esté asegurada. Un resultado importante de la simulación que se lleva a cabo puede ser el tiempo mínimo de austenización para obtener una distribución completa de carbono en la matriz austenítica [9].

b) Enfriamiento rápido o temple a la temperatura del austemperizado:

El objetivo de esta etapa es obtener una austenita fuertemente subenfriada y saturada de carbono. El enfriamiento debe ser lo suficientemente rápido como para evitar transformaciones eutéctoides indeseadas y utilizando una temperatura inferior a  $B_s$  y superior a  $M_s$ , normalmente en el intervalo de 250 a 450°C.

Los parámetros críticos en esta etapa son la temperatura y el tiempo de austemperizado. La temperatura determina la cantidad máxima de carbono que posiblemente puede disolverse en austenita y, en consecuencia, la estabilidad de la austenita a temperatura ambiente [10]. Una temperatura que es demasiado alta conduce a una pobre carburación de la austenita. Por otro lado, una temperatura que es demasiado baja provoca la formación de martensita. El tiempo debe ser suficiente para garantizar la transformación ADI. Por otra parte, un tiempo demasiado largo promueve la precipitación de los carburos y la formación de bainita. Para esta etapa, la simulación implica principalmente resolver la ecuación de conducción de calor con las condiciones a la frontera adecuadas y tiene como objetivo definir el tiempo óptimo de mantenimiento a la temperatura elegida dentro del rango ya mencionado. A partir del diagrama CCT se obtienen los datos necesarios para la simulación de esta transformación, especificando las áreas en las que la precipitación de ferrita y perlita todavía es posible.

c) Enfriamiento a temperatura ambiente:

Esta etapa consiste en enfriar la pieza tratada térmicamente a temperatura ambiente. Durante esta etapa se forma la ausferrita, ferrita acicular, es decir, en forma de agujas, y al mismo tiempo la austenita retenida es saturada con el carbón

rechazado de la ferrita hasta aproximadamente 2% en peso. Este exceso de carbón hace que la austenita sea estable a temperatura ambiente [9-10]. La figura 4 muestra de forma esquemática la difusión controlada de la transformación ferrita-austenita.

También se puede ver como un proceso de dos etapas donde la primera puede considerarse únicamente a la austenización, y a la segunda se le considera tal cual como austemperizado que consiste en el enfriamiento rápido en un baño de sales donde y el posterior enfriamiento lento de la pieza hasta temperatura ambiente:

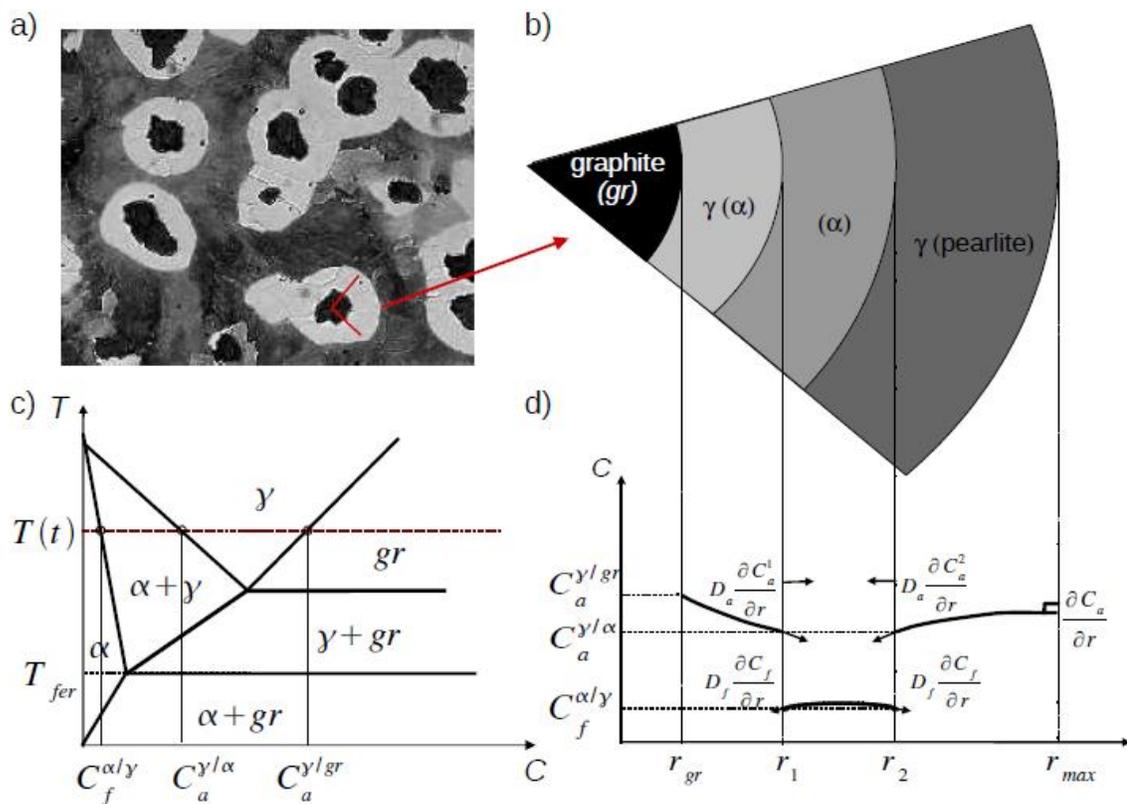


Figura 4. Difusión controlada de la transformación ferrita-austenita: a) Microestructura inicial; b) Diagrama esquemático de una celda eutéctica como cálculo dominante; c) Sección del diagrama de fases Fe-C; d) Esquema de los perfiles de concentración de carbono correspondientes a las fases mostradas en b) con condiciones a la frontera [10].

- Etapa I: Austenización

Se refiere al proceso de calentar la aleación dentro de un rango de temperatura entre 815 a 920°C, con la finalidad de formar estructuras cristalinas de austenita

homogénea. La temperatura elegida para este tratamiento depende de la siguiente etapa del proceso, así como del tipo de estructura final buscada. Una vez que se ha seleccionado la temperatura de austenización, la temperatura es controlada con una diferencia de  $\pm 10^{\circ}\text{C}$  [3].

- Etapa II: Austemperizado

Una vez que la aleación se ha transformado en austenita homogénea, se transfiere rápidamente al horno de austemperizado, en donde se utilizan diferentes tipos de baños de sales para mantener la temperatura en un rango de  $230$  a  $450^{\circ}\text{C}$ , en este paso se busca la transformación de la austenita en ferrita acicular. De acuerdo con las propiedades requeridas de la aleación, se selecciona la temperatura de austemperizado, aquí el control de temperatura y el tiempo del tratamiento térmico es de suma importancia (figura 5).

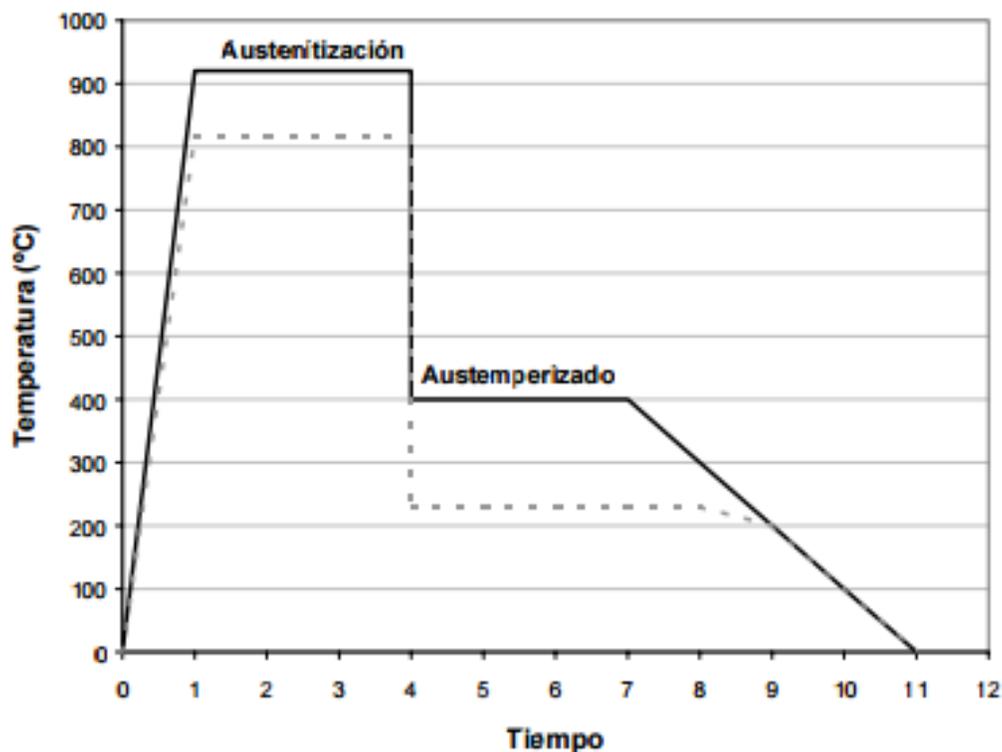


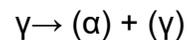
Figura 5. Proceso de austemperizado dividido en 2 etapas: austenización y Austemperizado [12].

### Etapas de la transformación del Austemperizado

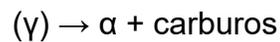
En la figura 6, se puede apreciar un ciclo típico del tratamiento térmico de austemperizado, en donde la pieza de fundición es austenizada entre 850 y 950°C, templada posteriormente en un baño de sal o aceite en un rango de temperatura de 300-500°C y mantenida a esta temperatura por el tiempo necesario para lograr la transformación de la austenita en bainita [12].

La transformación isotérmica, en el intervalo de temperatura del austemperizado se realiza en dos etapas:

- Etapa 1 (transformación parcial de austenita):



- Etapa 2 (descomposición de la austenita metaestable):



dónde:

$\gamma$ : Austenita homogénea

$(\alpha)$ : ferrita sobresaturada con carbono

$(\gamma)$ : austenita metaestable con alto contenido de carbono

$\alpha$ : ferrita

$\alpha + \text{carburos}$ : Ausferrita [10].

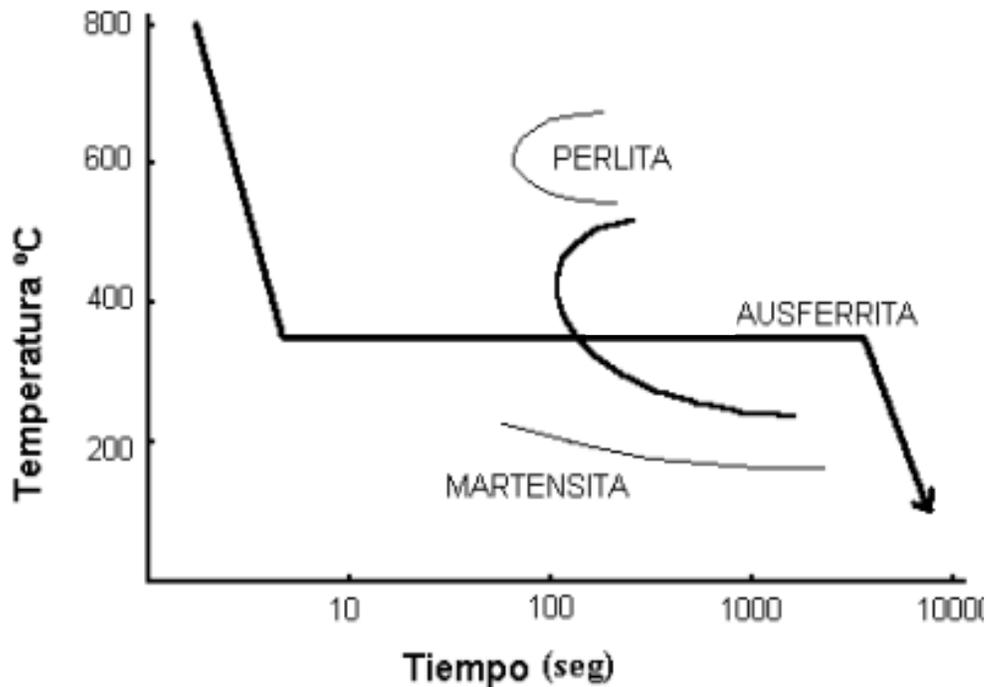


Figura 6. Diagrama de transformación isotérmica, mostrando la trayectoria térmica de un tratamiento térmico de austemperizado típico para el hierro nodular 1.5%Ni-0.3%Mo [12].

La nucleación y el crecimiento de la ausferrita causan una partición del carbono en las áreas circundantes, enriqueciendo y eventualmente estabilizando la retención de austenita incluso a bajas temperaturas como ya se ha mencionado [3-4]. Este enriquecimiento se ve reforzado por una alta concentración de silicio (mayor a 2%wt) que es típica en hierros dúctiles austemperizados.

La adición de silicio inhibe la formación de cementita, obligando a la austenita a alcanzar concentraciones de carbono de 1.6 a 2.2 %wt [14]. Una vez terminada la transformación ausferrítica, el componente de hierro se enfría a temperatura ambiente y parte de la austenita retenida se transforma en martensita [15]. Esta transformación a martensita se dará sólo si la austenita retenida no está lo suficientemente enriquecida con carbono para poder estabilizarse a temperatura ambiente.

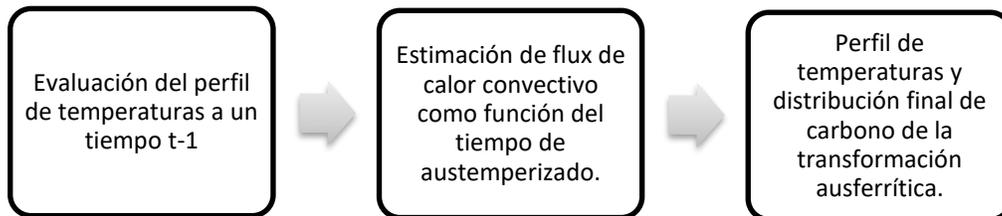
Como ya se ha mencionado, en esta tesis se busca realizar un modelo matemático de los perfiles de temperatura y de la transformación de fases dentro de una pieza

de hierro nodular en forma cilíndrica durante proceso de austemperizado. Para realizar el modelo matemático es necesario llevar a cabo:

1. Un análisis térmico desde la temperatura de austenización hasta la temperatura de transformación isotérmica.
2. Un análisis de la transformación de fases contemplando la evolución microestructural durante el tiempo del austemperizado.

## 5.2 Modelos matemáticos previamente aplicados al proceso

Los artículos revisados siguen en general el siguiente proceso para la elaboración del modelo:



### 5.2.1 Percepción macroscópica adoptada

Existen muchas variables que intervienen en el proceso entre ellas la temperatura de austenizado, el baño en sales y el tiempo de enfriamiento. Fue necesario considerar todas e integrarlas para tener una descripción completa del ciclo térmico. También se sabe que la transferencia de calor está asociada a las transformaciones de fase [10].

### 5.2.2 Mecanismos considerados

Se consideraron los mecanismos conducción, convección, radiación y contacto, sin embargo, al realizar las consideraciones adecuadas se tomó como mecanismo controlante a la conducción para la etapa de calentamiento (austenización) dentro de la pieza y la convección del seno del aire a la superficie de la pieza y viceversa durante el enfriamiento.

### 5.2.3 Ecuaciones y nomenclatura

Los mecanismos participantes considerados son la conducción y la convección, las ecuaciones gobernantes que se utilizaron para el desarrollo del modelo son:

1) Ecuación general de conducción [7]:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla(-k\nabla T) - q_G = 0 \quad (5.1)$$

2) Ecuación general de convección [10]:

$$q_c = -h_c(T_2 - T_1) \quad (5.2)$$

## 5.3 Cinética de transformación en el Austemperizado

Para llevar a cabo el modelo de la evolución microestructural del ADI durante el Austemperizado, hay que tener en cuenta las etapas que pueden ocurrir durante dicho proceso, teniendo lo siguiente:

1. Acumulación de carbono dentro de la austenita
2. Cinética de transformación de la ferrita acicular
3. Cinética de transformación de la martensita.

Como ya se ha mencionado anteriormente, la última de estas etapas puede llegar a darse cuando la segunda no se lleva a cabo en su totalidad o la temperatura  $M_s$  está por arriba de la temperatura ambiente. Durante la primera etapa, la austenita formada durante la austenización (primera etapa del modelo térmico), es transformada en ferrita acicular junto con una porción de austenita con alto contenido de carbono. A este arreglo de fases, más los nódulos de grafito, se le conoce como ausferrita.

Para la segunda etapa, 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. Es aquí donde cabe darle

crucial importancia al tiempo de austemperización, ya que, a tiempos cortos, la austenita tendrá un inadecuado enriquecimiento de carbono causando bajo contenido de austenita retenida, lo cual origina formación de fases residuales como la martensita, mientras que a tiempos largos de austemperizado, se da inicio a la segunda etapa, la cual se debe evitar ya que conduce a la disminución de las propiedades mecánicas debido a la formación de carburos.

### 5.3.1 Distribución de carbono al término de la transformación de la ferrita acicular, $C_{\gamma}^0$

Yescas en su artículo *Model for the maximum fraction of retained austenite in austempered ductile cast iron* [27], indica que la distribución de carbono al punto donde la transformación de la ferrita acicular cesa está dado por:

$$C_{\gamma}^0 = X_{\alpha_F} C_{\alpha_F} + x_{\gamma_R} C_{\gamma_R} \quad (5.3)$$

Donde  $C_{\gamma}^0$  es la concentración de carbono al inicio de la transformación ferrítica,  $C_{\alpha_F}$  y  $C_{\gamma_R}$  son las concentraciones de carbono en la ferrita acicular y en la austenita residual respectivamente y  $x_{\alpha_F}$  y  $x_{\gamma_R}$  son las fracciones de volumen de ferrita acicular y austenita retenida. A continuación, se presentan las ecuaciones para obtener cada una de estas variables, con el fin de despejar de la ecuación 5.3 la concentración de carbono en la ferrita acicular ( $C_{\alpha_F}$ ), la cual se utilizará para obtener la fracción en volumen máxima de austenita retenida, misma que indicará el tiempo óptimo de austemperización o de mantenimiento a la temperatura en baño de sales de la segunda etapa del proceso.

### 5.3.2 Concentración de carbono en la austenita retenida, $C_{\gamma_R}$

Para determinar el valor de  $C_{\gamma_R}$ , se tiene la siguiente relación en función de la concentración de los elementos aleantes y de la temperatura de austemperización  $T_{ab}$  en grados centígrados, [23]:

$$C_{\gamma R} = 3.072 - 0.0016 T_{\alpha b} - 0.24 \% Wt. Si - 0.161 \% Wt. Mn - 0.115 \% Wt. Ni \quad (5.4)$$

$$+ 0.25 \% Wt. Cu + 0.06 \% Wt. Mo + 2.69 \% Wt. Cr$$

### 5.3.3 Concentración inicial de carbono en la austenita, $C_{\gamma}^0$

Existe una correlación empírica que relaciona el valor de  $C_{\gamma}^0$  como una función de la temperatura de austenización y del contenido de silicio dada por Voigt [24]:

$$C_{\gamma}^0 = \frac{T_{\gamma}}{420} - 0.17 \% WT. Si - 0.95 \quad (5.5)$$

dónde  $T_{\gamma}$  es la temperatura de austenización en grados centígrados.

### 5.3.4 Fracción en volumen de la ferrita acicular, $X_{\alpha F}$

Esta fracción en volumen se determina a partir de un moldeo cinético. Utilizando la fracción transformada así como la ecuación 5.3, es posible estimar la variación de carbono en la austenita retenida y el tiempo que tarda en alcanzar su máxima fracción antes de la descomposición de la austenita residual. Para ello se llevan a cabo los siguientes pasos:

La cinética de la transformación de la austenita en ferrita acicular durante el austemperizado puede ser descrita mediante el modelo establecido por Johnson-Mehl-Avrami [23, 24]:

$$X_{\alpha F} = 1 - \exp(-\theta t^n) \quad (5.6)$$

donde  $X_{\alpha F}$  es la fracción en volumen de ferrita acicular transformada,  $t$  es el tiempo de reacción y  $\theta$  y  $n$  son los parámetros cinéticos que describen la rapidez de transformación, las cuales son constantes que dependen de la composición química del hierro y de la temperatura de austemperización. Determinar estos parámetros es posible a partir de los diagramas CCT [28], suponiendo que la fracción en volumen de la ferrita acicular inicial  $X_{\alpha F}^i$  es igual a 0.01 y la fracción final  $X_{\alpha F}^f$  es 0.99 [29], las

ecuaciones para determinar estos parámetros cinéticos de transformación están dadas por:

$$n(T) = \frac{\ln \left[ \frac{\ln(1-X_{\alpha_F}^i)}{\ln(1-X_{\alpha_F}^f)} \right]}{\ln \left[ \frac{t_i}{t_f} \right]} \quad (5.7)$$

$$k(T) = - \frac{\ln(1-X_{\alpha_F}^i)}{t_i^{n(T)}} \quad (5.8)$$

Donde  $t_i$  y  $t_f$  son los tiempos inicial y final de transformación determinados a partir de la lectura de las curvas del diagrama CCT correspondiente al tipo de hierro que se desee tratar térmicamente. (Anexo I)

Para conocer  $\theta_j$  de la ecuación 5.6, tiempo de transformación o tiempo virtual, que es el tiempo para obtener la fracción en volumen de la ferrita acicular transformada a la temperatura de austemperización para cada paso de tiempo  $\Delta t$ , se utiliza la ecuación 5.9:

$$\theta_j = \hat{\theta}_j + \Delta t \quad (5.9)$$

Donde  $\hat{\theta}_j$  es el tiempo necesario para alcanzar la fracción previa transformada y está definido por:

$$\hat{\theta}_j = \left[ \frac{\ln \left( \frac{1}{1-x_{\alpha_F}^{k-1}} \right)}{k(T)} \right]^{\frac{1}{n(T)}} \quad (5.10)$$

### 5.3.5 Fracción en volumen de austenita retenida, $x_{\gamma R}$

Una alta concentración de silicio en hierros dúctiles retarda la presencia de perlita [27], por lo que la fracción residual de austenita se calcula:

$$x_{\gamma R} = 1 - x_{\alpha_F} \quad (5.11)$$

Hasta aquí se tienen las variables  $C_{\gamma}^0$ ,  $X_{\alpha_F}$ ,  $x_{\gamma R}$  y  $C_{\gamma R}$ , por lo que de la ecuación 5.3 se puede despejar  $C_{\alpha_F}$ , teniendo que:

$$C_{\alpha_F} = \frac{C_{\gamma}^0 - x_{\gamma R} C_{\gamma R}}{X_{\alpha_F}} \quad (5.12)$$

Una vez que se conoce la concentración de carbono en la ferrita acicular, es posible estimar su fracción máxima en volumen mediante:

$$X_{\alpha_F}^{max.} = \frac{C_{\gamma} - C_{\gamma}^{\circ}}{C_{\gamma} - C_{\alpha_F}} \quad (5.13)$$

Finalmente se debe calcular la fracción en volumen de austenita retenida máxima, misma que indicará el tiempo óptimo de permanencia a la temperatura de austemperizado:

$$X_{\gamma R}^{máx.} = 1 - X_{\alpha_F}^{máx.} \quad (5.14)$$

# VI. DESARROLLO DEL MODELO MATEMÁTICO

## 6.1 METAS Y OBJETIVOS DEL MODELO

### 6.1.1 Modelo Térmico

Meta: Desarrollar un modelo matemático que calcule el perfil de temperaturas durante las tres etapas del proceso de Austempering

1. Definir las ecuaciones y condiciones a la frontera para los diferentes mecanismos de transferencia de energía durante el calentamiento y enfriamiento de la pieza.
2. A partir de las ecuaciones generar una resolución por diferencias finitas, realizando un código de programación en Pascal, que arroje como resultado un perfil de temperaturas para todas las etapas del proceso.

### 6.1.2 Modelo Microestructural

Meta: Encontrar la relación entre la historia térmica del proceso de austemperizado y las transformaciones de fase en función de la temperatura y el tiempo.

1. A partir del perfil obtenido en la versión basal comparar y analizar el diagrama CCT para obtener los cambios microestructurales en la pieza al ser sometida al tratamiento térmico de austemperizado.
2. Utilizar una ecuación teórica a partir de la concentración de carbono para predecir las transformaciones de fase a lo largo del proceso de austemperizado

## 6.2 Análisis del proceso metalúrgico a modelar

### Esquema del proceso

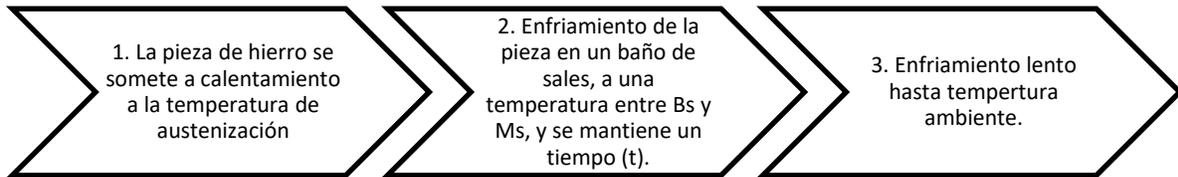


Figura 7. Etapas del proceso

Para llevar a cabo el modelo, se utilizó una alícuota haciendo un corte transversal del cilindro en cuestión, como lo indica la figura 8:

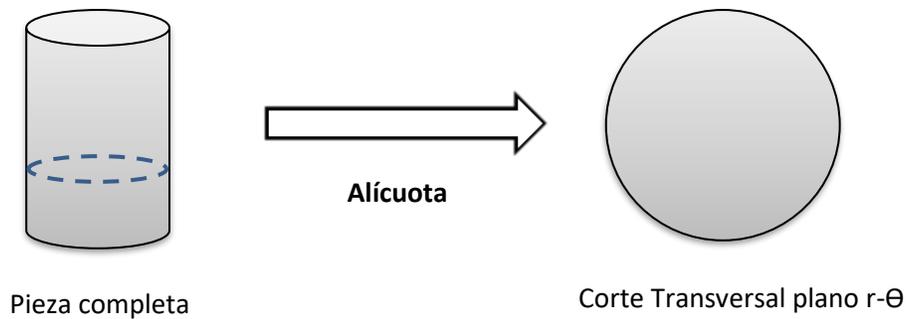


Figura 8. Alícuota

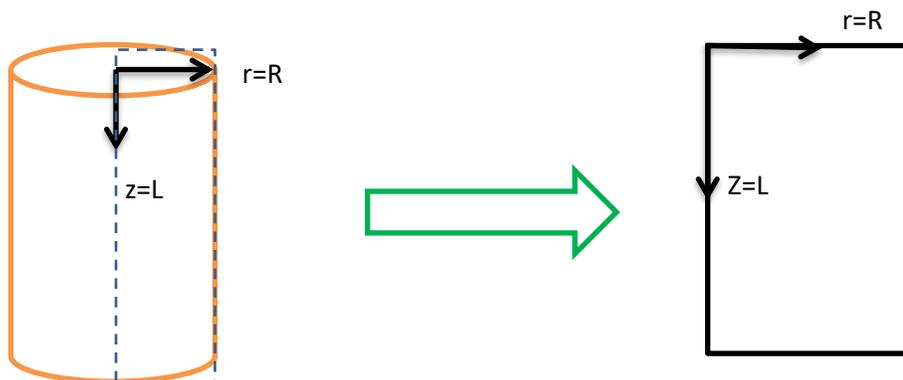


Figura 9. Alícuota del sistema para llevar a cabo método de diferencias finitas.

## 6.3 Modelo Térmico

### 6.3.1 Mecanismos participantes y controlantes

#### Etapa 1: Austenización

*Calentamiento a temperatura de austenización.* La fase ferrítica-perlítica se transforma en austenita. Mantenimiento de la temperatura de austenización a un tiempo (t), el carbono se disuelve en la matriz austenítica.

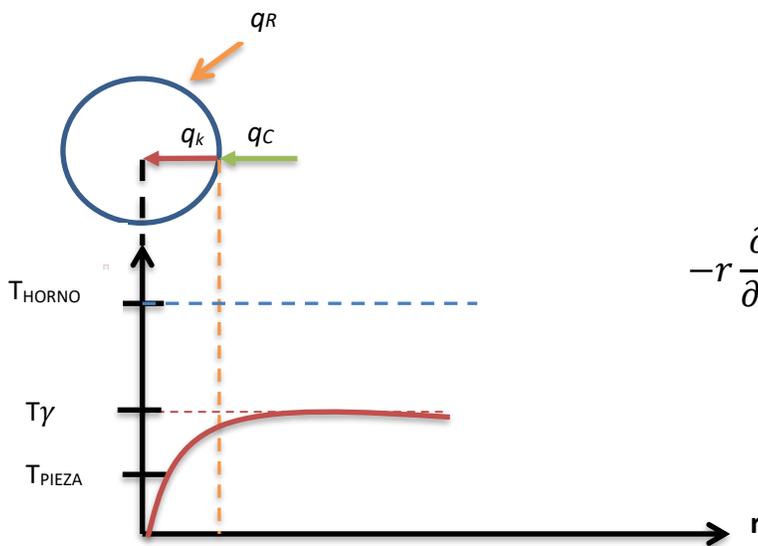


Figura 10. Esquema del perfil de temperaturas en la etapa 1

Conducción dentro de la pieza

$$-r \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \sum g_i = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t}$$

#### Mecanismos en la dirección radial

- Convección del aire dentro del horno a la pieza

$$q_c = -h_c (T_{Horno} - T_{Pieza})$$

- Radiación del horno a la pieza

$$q_{rHorno \rightarrow pieza} = -\sigma F_{1 \rightarrow 2} (T_{Horno}^4 - T_{Pieza}^4)$$

#### Mecanismos en la dirección axial

- Convección del aire dentro del horno a la pieza

$$q_c = -h_c (T_{Horno} - T_{Pieza})$$

- Radiación del horno a la pieza

$$q_{rHorno \rightarrow pieza} = -\sigma F_{1 \rightarrow 2} (T_{Horno}^4 - T_{Pieza}^4)$$

## **Etapa 2: Austemperizado**

*Es un enfriamiento rápido en baño de sales.* La austenita se satura de carbono y se da la formación de la ausferrita. Se utilizan las mismas ecuaciones que para la primera etapa, modificando las condiciones a la frontera. Tomando en cuenta que se tiene un enfriamiento en un metal líquido o baño de sales, se omite la radiación.

## **Etapa 3: Enfriamiento lento**

*Enfriamiento lento hasta temperatura ambiente.* La austenita transformable se convierte en martensita. Nuevamente se utilizan las mismas ecuaciones que para la primera etapa, modificando las condiciones a la frontera. Tomando en cuenta que se tiene un enfriamiento en agua o aire a temperatura ambiente, se omite la radiación.

### **6.3.2 Formulación matemática**

- Ecuación general de conducción:

$$\rho C_p \frac{\delta T_{Pieza}}{\delta t} + \nabla q_k = \sum g_i \quad (6.1)$$

- Ecuación general de convección:

$$q_c = -h_c(T_\infty - T_{Pieza}) \quad (6.2)$$

- Ecuación general de radiación:

$$q_{rHorno \rightarrow Pieza} = -\sigma F_{Horno \rightarrow Pieza}(T_{Horno}^4 - T_{Pieza}^4) \quad (6.3)$$

## CONDICIONES TÉRMICAS

### Condición inicial:

t=0

$$\forall r ; T = T_{PIEZA}$$

$$\forall Z ; T = T_{PIEZA}$$

#### ▪ Radial

#### ❖ C.F. I:

De simetría, aislada:

r=0

$$-k \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0$$

#### C.F. II:

r=R

$$q_{k_r} = q_{C_L} + q_{r_L} + q_{ct_L} + q^*$$

$$-k \frac{dT}{dr} \Big|_{r=R} = -h_{C_L}(T|_{r=R} - T_{C_L}) - h_{r_L}(T|_{r=R} - T_{a_L}) - h_{ct_L}(T|_{r=R} - T_{ct_L}) + q_L^*$$

#### ▪ Axial:

#### ❖ C.F. III:

Arriba (U) Z=0

$$q_{k_z} = q_{C_U} + q_{r_U} + q_{ct_U} + q^*$$

$$-k \frac{dT}{dz} \Big|_{z=0} = -h_{C_U}(T|_{z=0} - T_{C_U}) - h_{r_U}(T|_{z=0} - T_{a_U}) - h_{ct_U}(T|_{z=0} - T_{ct_U}) + q_U^*$$

#### ❖ C.F. IV:

Abajo (D) Z=L

$$q_{k_z} = q_{C_D} + q_{r_D} + q_{ct_D} + q^*$$

$$-k \frac{dT}{dz} \Big|_{z=L} = -h_{C_D}(T|_{z=L} - T_{C_D}) - h_{r_D}(T|_{z=L} - T_{a_D}) - h_{ct_D}(T|_{z=L} - T_{ct_D}) + q_D^*$$

## 6.4 Modelo Microestructural

Una vez obtenidos los perfiles de temperatura, las velocidades de calentamiento y de enfriamiento a través del modelo térmico se podrán utilizar para la predicción de la evolución microestructural, la cual permitirá alcanzar las propiedades deseadas en el hierro. Debido a que un periodo de tiempo óptimo es requerido para obtener dicha evolución, es preciso determinarlo. Una forma de determinar este tiempo, es estimando la fracción volumen de austenita retenida de alto contenido de carbono en función del tiempo mediante un modelo cinético para de esta forma conocer el tiempo para el cual se logre obtener un máximo de dicha fase. Con este modelo termo-estructural se podrá determinar el tiempo que tarda la austenita en enriquecerse con carbono durante la transformación ferrítica. Para lograr el desarrollo del modelo, se aplicó la metodología descrita en la sección 5.3, páginas 33 a 38

## 6.5 Suposiciones y simplificaciones del modelo

Los modelos descritos en la literatura utilizan suposiciones de modo que los mismos queden simplificados. Una de estas simplificaciones es considerar a uno de los mecanismos del proceso como controlante, para evitar resolver las ecuaciones innecesarias de aspectos que no tendrán una gran aportación en el proceso en cuestión. Por lo tanto se llevaron a cabo las siguientes suposiciones:

1. El mecanismo gobernante es la conducción de calor para la etapa de calentamiento o austenización, mientras que para la etapa de enfriamiento o austemperizado, se tomo en cuenta tanto la conducción (dentro de la pieza) como la convección (de la pieza al fluido o baño de sales).
2. La transferencia de calor ocurre en dirección radial y longitudinal
3. El flux de convección ocurre de manera uniforme alrededor de la probeta
4. Existe un término de generación de calor asociado a la transformación de fase
5. El calor liberado al ocurrir una transformación de fase, puede estar relacionado con la velocidad de cambio de la fracción volumínica

6. El modelo se realizó en dos dimensiones ( $r, z$ ), tomando como alícuota un corte transversal en el plano  $r, z$  del cilindro.
7. Las ecuaciones se plantearon en función del tiempo (estado inestable), de las temperaturas correspondientes en cada etapa y de las distancias  $r$  y  $z$  dentro de la pieza.
8. Para la determinación de las condiciones a la frontera, se visualizó a la alícuota como un anillo para tomar en cuenta la dirección  $r$  y  $z$  en los esquemas establecidos.
9. Las condiciones a la frontera a utilizar son del tipo Dirichlet, que se encuentran en función de la posición y del tiempo
10. Se realizó un análisis de la microestructura presente de acuerdo a la historia térmica en cada punto de la pieza, con base en el diagrama CCT.
11. Las transformaciones de fase estarán en función del calor latente liberado en las etapas de enfriamiento.
12. Se estudió la evolución de las transformaciones de fase a partir de la austenita obtenida en la primera etapa.
13. Se consideró que la cinética de transformación así como la homogeneización de la concentración de carbono están controladas por la difusión de carbono y asume lo siguiente:
  - Un equilibrio termodinámico local en los límites de fase.
  - La difusión de Si, Mo, Ni, Mn y Cu se desprecia debido a su baja movilidad.

## 6.6 Selección del método de solución

Se propuso utilizar el método de diferencias finitas para resolver la ecuación diferencial bidimensional establecida anteriormente. Este método está basado en aproximaciones que permiten reemplazar ecuaciones diferenciales por ecuaciones algebraicas. Con el método de diferencias finitas se permite la resolución aproximada de ecuaciones diferenciales, convirtiéndolas en derivadas finitas. Es de una gran sencillez conceptual y constituye un procedimiento muy adecuado para la resolución de una ecuación bidimensional como las planteadas anteriormente.

Este método de resolución tiene la gran ventaja de su planteamiento, aunque también posee limitaciones. La malla debe ser regular, ya que en caso contrario, para cada malla se debería encontrar una fórmula en diferencias finitas.

Teniendo ecuaciones algebraicas de transferencia de calor en dos dimensiones para el caso de este estudio, el método de diferencias finitas resulta el más adecuado para encontrar el perfil de temperaturas en un número finito de nodos, que podrán ser obtenidos mediante la discretización del sistema.

## **6.7 Método de solución**

Para realizar el método de diferencias finitas, se estableció un conjunto finito de puntos interiores y de frontera donde se va a calcular el valor de la función. Para hallar el valor aproximado de la función en dichos puntos llamados nodos, es necesario sustituir las derivadas para cada punto por cocientes de diferencias entre los valores de la solución en diferentes puntos, obteniéndose un sistema algebraico de ecuaciones con el mismo número de ecuaciones que incógnitas.

A las expresiones de transformación de cada operador diferencial en cocientes de diferencias, se le denomina fórmula. Estas aproximaciones de diferencia finita son de forma algebraica y relacionan el valor de la variable dependiente, en un punto dentro de la región de solución, con sus valores en algunos puntos vecinos. En base a esto, la solución por diferencias finitas involucra 3 pasos:

1. Discretización.
2. Aproximación de la Ecuación Diferencial.
3. Solución de las ecuaciones algebraicas.

Hay que tener en cuenta que se pueden llegar a presentar tres distintos tipos de errores al llevar a cabo este método:

1. Error local: Es el que se comete en el paso actual del algoritmo, y puede ser de tipo de error de truncamiento o de redondeo, donde el primero se debe a la aproximación realizada en el instante  $t+1$  y el último es consecuencia de la falta de precisión de la aritmética computacional.
2. Error inicial: Se presenta cuando la condición inicial no se puede calcular con exactitud, debido fundamentalmente a las limitaciones de la aritmética computacional.
3. Error global: Es la diferencia entre el valor aproximado y el valor exacto en el nodo inicial. Los errores locales tienden a acumularse puesto que en general no se parte del valor exacto en el instante  $t=0$ .

## 6.8 Ecuaciones de solución

Se plantearon nueve ecuaciones algebraicas tomando en cuenta lo siguiente:

Partiendo de que el modelo está diseñado para una pieza cilíndrica, se tomó una alícuota del cilindro en forma de rectángulo, para así poder tomar dos dimensiones ( $r$  y  $z$  o radial y axial) con base en este.

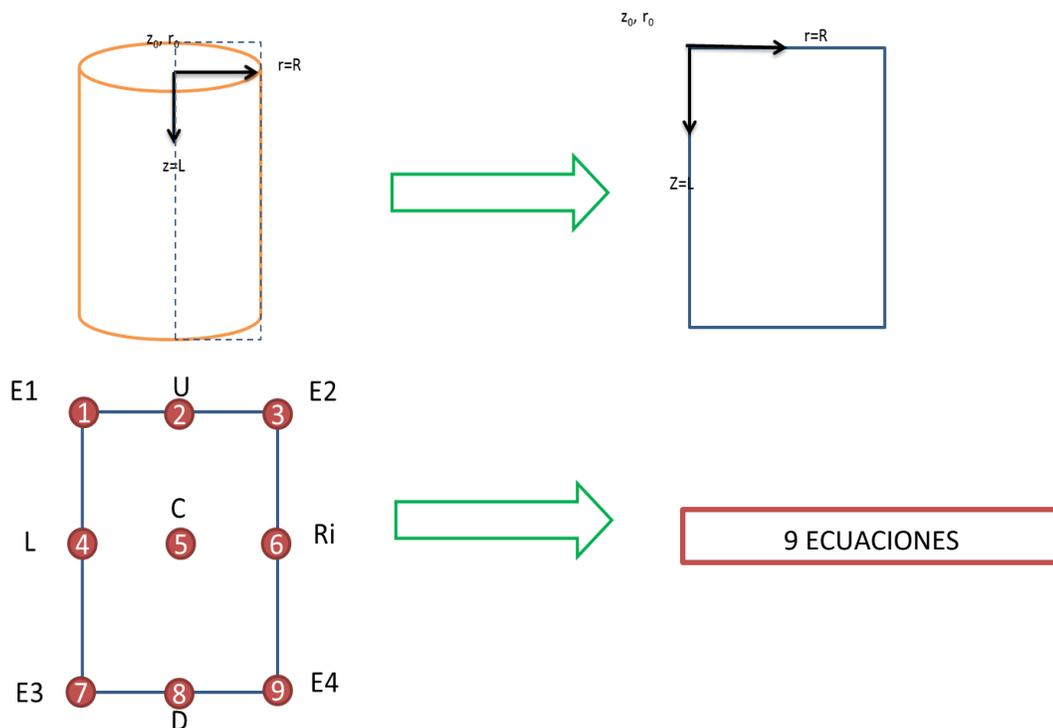


Figura 11. Alícuota y discretización de la pieza a modelar.

Después como se muestra en la figura 16 se dividió en rectángulo tomando como nodos aquellos puntos de interés en el mismo, teniendo como resultado 9 nodos a los que se les llamo E1, E2, E3 y E4 para las esquinas, U y D para los nodos de las aristas horizontales (arriba y abajo) y L y Ri para los nodos de las aristas verticales (izquierda y derecha). De esta forma se pudieron desarrollar las ecuaciones tanto para obtener la áreas y volúmenes de la pieza dadas las dimensiones iniciales de la misma por el usuario, como las ecuaciones de temperatura para cada nodo y tomando en cuenta todas las condiciones a la frontera en el caso del modelo basal. Es así como surgen las ecuaciones algebraicas para cada nodo que se presentan, cada una de ellas desarrollada tomando en cuenta la notación ya descrita para cada nodo en base a un lenguaje de programación.

## **6.9 Algoritmo computacional de solución**

Se desarrollaron las ecuaciones algebraicas de transporte de energía correspondientes considerando las simplificaciones y suposiciones anteriores. Se resolvieron por el método de diferencias finitas y se escribieron en lenguaje Pascal, tomando en cuenta así mismo la geometría de la pieza para el desarrollo de los cálculos de radios, áreas y volúmenes internos y externos.

Para el modelo microestructural se llevó a cabo una investigación bibliográfica de los distintos modelos existentes para este tipo de tratamientos térmicos, eligiendo así el modelo de Avrami para las ecuaciones y parámetros cinéticos del proceso, descrito en la sección 5.3, páginas 33 a 38.

Para llevar a cabo el programa se utilizaron distintos ciclos de cálculo con los que Pascal permite realizar cálculos las veces que sean necesarias según las condiciones dadas por el programador o el mismo usuario. El algoritmo consiste en las ecuaciones para el cálculo de los perfiles de temperatura, así como las ecuaciones de transformaciones de fases inscritas en ciclos de cálculo en función de los tiempos que el usuario introduzca, mismos que pueden ser en cualquier etapa del tratamiento térmico, con lo cual se tiene una visión de los perfiles al calentar y

enfriar, así como de las fracciones en volumen de austenita retenida máxima y ausferrita.

## **6.10 Validación del modelo**

Se verificó el modelo sometiéndolo a diferentes pruebas, tanto a condiciones reales de temperatura, dimensiones y tiempo, como a condiciones extremas para verificar la confiabilidad de los resultados.

## **6.11 Versiones del simulador**

La elaboración del modelo se llevó a cabo en dos etapas mismas que derivaron en dos versiones del modelo:

### **1. Análisis térmico (perfil de temperaturas dentro de la pieza), cuyas características son:**

- Consideración de las etapas del proceso.
- Cuantificación de los mecanismos térmicos participantes en cada etapa.
- Solución de ecuaciones gobernantes para cada mecanismo.
- Se simularon todas las condiciones de frontera en todas las fronteras.
- Es un código en Pascal para resolver numéricamente (por diferencias finitas) las ecuaciones planteadas.
- Predicción del perfil de temperaturas para los tiempos deseados por el usuario.

### **2. Análisis microestructural (perfil de evolución microestructural en la pieza):**

El modelo utiliza el diagrama CCT del Hierro Nodular A536 ASTM para relacionar la microestructura de la pieza con el perfil de temperaturas obtenido anteriormente en función del tiempo y el radio, tomando la composición inicial de la pieza como punto

de partida para obtener la evolución de las transformaciones que ocurran al ser liberado un calor latente durante su enfriamiento en las últimas dos etapas. La historia térmica en cada punto estudiado por diferencias finitas fue la base para predecir la microestructura. Para cada tiempo del ciclo térmico del proceso y conociendo la temperatura de cada nodo, se estima el tiempo inicial y final de transformación ausferrítica; definidos por las narices del diagrama CCT. Si se está en la zona de transformación, se aplican las ecuaciones cinéticas de la sección 5.3. Con esto se obtiene un modelo termo-estructural integrado y consistente, es decir, un simulador del proceso de austemperizado.

# VII. RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

## 7.1 Modelo termo-estructural (Simulador)

1. Se creó un modelo matemático capaz de predecir el comportamiento térmico y microestructural y su evolución durante el proceso austemperizado. El modelo presenta las temperaturas y las fracciones volumínicas de ausferrita y austenita retenida en todos los nodos del sistema a los tiempos deseados por el usuario.
2. El modelo es flexible porque permite tomar en cuenta las condiciones térmicas del tratamiento ya que las temperaturas y los tiempos del ciclo térmico se le pregunta al usuario. Además, el usuario puede modificar el código para definir las funciones de Pascal que toman en cuenta los coeficientes de transferencia de calor, las propiedades térmicas, el diagrama CCT y las cinéticas de transformación. Es más, el modelo es capaz de tomar en cuenta todas las condiciones a la frontera térmicas posibles durante cada etapa del proceso.
3. El modelo termoestructural arroja resultados metalúrgicamente consistentes considerando las condiciones del tratamiento. En una versión posterior del modelo podría implementarse una predicción de la dureza con base en la regla de las fases.
4. Este modelo se puede aplicar con eficacia y precisión para optimizar la producción de piezas cilíndricas de fundiciones de ADI en la práctica.

## 7.2 Implementación del modelo en la computadora

Este simulador o modelo termoestructural completo y funcional está escrito en lenguaje de programación Pascal y la descripción de su interface se encuentra en el Apéndice II (página 63).

## 7.3 Verificación del modelo utilizando condiciones extremas

Para la verificación del modelo, se realizaron corridas utilizando distintos criterios o datos de entrada, con el fin de verificar si los resultados son congruentes con lo que se sabe que sucede experimentalmente. Por ejemplo, si se introducen como datos de entrada dimensiones muy grandes y tiempos pequeños de tratamiento, el perfil de temperaturas indicara que la pieza no se calienta totalmente, mostrando temperaturas menores que la que se introdujo como valor de temperatura de austenización. Por ejemplo, la figura 12 muestra una corrida donde se introdujeron datos para la geometría de la pieza cilíndrica de 50 cm de radio, con 8 nodos radiales y 1 m de longitud con 10 nodos longitudinales. Las temperaturas que se introdujeron son para un caso real, 25°C como temperatura inicial de la pieza, 900°C como temperatura de austenización, 450°C para el baño de sales y 30°C como temperatura del enfriamiento final.

```
Geometria de la pieza
Favor de introducir los siguientes valores en METROS

Introduce el radio del cilindro (r):
0.5
Introduce el numero de nodos en la direccion radial (N):
8
Introduce la altura de la pieza (H):
1
Introduce el numero de nodos en direccion axial (M):
10

Condiciones de temperatura en el sistema
Favor de introducir los siguientes valores en unidades CELSIUS

Introduce la temperatura inicial del sistema:
25
Introduce la temperatura de austenizado:
900
Introduce la temperatura del bano de sales para el austemperizado:
450
Introduce la temperatura del temple:
30

Presiona enter para continuar
```

Figura 12. Datos de entrada de geometría de la pieza en condiciones extremas

En la figura 13 se observa como para la impresión de resultados de delta de tiempo critico ya se tienen datos de tiempos muy elevados, situación que no coincide con la realidad.

Calculo de Dt critico

Dt criticos

95.4135	93.8021	93.8021	93.8021	93.8021	93.8021	93.8021	60.5943
71.3531	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	124.5857
71.3531	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	124.5857
71.3531	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	124.5857
71.3531	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	124.5857
71.3531	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	124.5857
71.3531	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	124.5857
71.3531	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	124.5857
71.3531	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	124.5857
71.3531	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	121.8412	124.5857
95.4135	93.8021	93.8021	93.8021	93.8021	93.8021	93.8021	60.5943

Dt critico minimo es (en segundos): 60.59  
Ubicado en el nodo:8,1

Escribe un valor de Dt un orden menor que el anterior para realizar los calculos:  
10.

Figura 13. Impresión de resultados para deltas de tiempo críticos en cada nodo a condiciones extremas

Se introdujeron valores de tiempos para cada etapa del proceso demasiado cortos para el tamaño de la pieza que se está utilizando en esta corrida (figura 14):

```
Para cuantos tiempo quieres ver resultados:
5

Cual es el tiempo de austenizado en segundos:
2000

Cual es el tiempo neto de austemperizado en segundos:
1000

Cual es el tiempo neto de temple en segundos:
200

Tecllea el tiempo 1 de impresion en segundos:
500
Tecllea el tiempo 2 de impresion en segundos:
1000
Tecllea el tiempo 3 de impresion en segundos:
2050
Tecllea el tiempo 4 de impresion en segundos:
3100
Tecllea el tiempo 5 de impresion en segundos:
3250

Los siguientes resultados se mostraran en CELSIUS
```

Figura 14. Entrada de datos de tiempos para cada etapa del proceso en condiciones extremas

Como resultado (figura 15) lo que se obtiene es que para el tiempo final de austenización que se pidió en esta corrida, la temperatura de la pieza no ha alcanzado ni la mitad de la temperatura de austenización en las caras exteriores, en las tapas y en el centro, de la misma. Con esto se tiene una visión de que el modelo actúa correctamente cuando es sometido a condiciones extremas de tamaño de pieza, temperaturas y tiempos de proceso.



pide un delta critica menor que el valor mas pequeño para utilizarlo en los cálculos de perfiles de temperatura y microestructurales (figura 17):

```

Calculo de Dt critico

                                Dt criticos
-----
1.3706 | 1.3538 | 1.3538 | 1.3538 | 1.3538 | 1.3538 | 1.3538 | 1.0027 |
1.3224 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0447 |
1.3224 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0447 |
1.3224 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0447 |
1.3224 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0447 |
1.3224 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0447 |
1.3224 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0447 |
1.3224 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0447 |
1.3224 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0447 |
1.3224 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0076 | 2.0447 |
1.3706 | 1.3538 | 1.3538 | 1.3538 | 1.3538 | 1.3538 | 1.3538 | 1.0027 |

Dt critico minimo es (en segundos):  1.00
Ubicado en el nodo:8,1

Escribe un valor de Dt un orden menor que el anterior para realizar los calculos:
0
0.5

Para cuantos tiempo quieres ver resultados:

```

Figura 17. Impresión de resultados de deltas de impresión

Posteriormente se introducen los datos de los tiempos netos de cada etapa del proceso, en este caso se introdujo 1 hora para llegar a la temperatura de austenización, 20 minutos para el enfriamiento en baño de sales y 5 minutos de enfriamiento final (figura 18).

```

Para cuantos tiempo quieres ver resultados:
5

Cual es el tiempo de austenizado en segundos:
3600

Cual es el tiempo neto de austemperizado en segundos:
1200

Cual es el tiempo neto de temple en segundos:
300

Tecllea el tiempo 1 de impresion en segundos:
2000
Tecllea el tiempo 2 de impresion en segundos:
3700
Tecllea el tiempo 3 de impresion en segundos:
4500
Tecllea el tiempo 4 de impresion en segundos:
4850
Tecllea el tiempo 5 de impresion en segundos:
5000

Los siguientes resultados se mostraran en CELSIUS
Presiona enter para continuar

```

Figura 18. Entrada de datos de tiempos netos para cada etapa del proceso y tiempos de impresión



Para el tiempo 3700.00 s, las temperaturas (en C) son:							
526.2123	525.0065	521.4318	515.6342	507.8580	498.4453	487.8288	476.5139
557.8940	556.1870	551.1262	542.9186	531.9097	518.5842	503.5544	487.5358
583.3778	581.2675	575.0114	564.8653	551.2562	534.7832	516.2035	496.4015
601.2116	598.8192	591.7266	580.2238	564.7951	546.1196	525.0556	502.6058
610.3867	607.8491	600.3261	588.1254	571.7605	551.9518	529.6097	505.7978
610.3867	607.8491	600.3262	588.1254	571.7605	551.9518	529.6097	505.7978
601.2117	598.8192	591.7267	580.2238	564.7952	546.1196	525.0556	502.6058
583.3778	581.2676	575.0115	564.8653	551.2563	534.7833	516.2035	496.4015
557.8941	556.1870	551.1262	542.9186	531.9098	518.5842	503.5544	487.5358
526.2123	525.0065	521.4318	515.6342	507.8580	498.4453	487.8288	476.5139

Para el tiempo 3700.00 s, la fraccion volumetrica de austenita retenida es:							
0.3513	0.3534	0.3742	0.3855	0.3800	0.3722	0.3623	0.3779
0.4217	0.4206	0.4190	0.4122	0.3951	0.3783	0.3770	0.3621
0.4262	0.4262	0.4256	0.4237	0.4197	0.4017	0.3871	0.3705
0.4275	0.4275	0.4271	0.4259	0.4240	0.4162	0.3774	0.3760
0.4278	0.4278	0.4273	0.4266	0.4251	0.4202	0.3942	0.3787
0.4278	0.4278	0.4273	0.4266	0.4251	0.4202	0.3942	0.3787
0.4275	0.4275	0.4271	0.4259	0.4240	0.4162	0.3774	0.3760
0.4262	0.4262	0.4256	0.4237	0.4197	0.4017	0.3871	0.3705
0.4217	0.4206	0.4190	0.4122	0.3951	0.3783	0.3770	0.3621
0.3513	0.3534	0.3742	0.3855	0.3800	0.3722	0.3623	0.3779

Para el tiempo 3700.00 s, la fraccion volumetrica de ausferrita es:							
0.6487	0.6466	0.6258	0.6145	0.6200	0.6278	0.6377	0.6221
0.5783	0.5794	0.5810	0.5878	0.6049	0.6217	0.6230	0.6379
0.5738	0.5738	0.5744	0.5763	0.5803	0.5983	0.6129	0.6295
0.5725	0.5725	0.5729	0.5741	0.5760	0.5838	0.6226	0.6240
0.5722	0.5722	0.5727	0.5734	0.5749	0.5798	0.6058	0.6213
0.5722	0.5722	0.5727	0.5734	0.5749	0.5798	0.6058	0.6213
0.5725	0.5725	0.5729	0.5741	0.5760	0.5838	0.6226	0.6240
0.5738	0.5738	0.5744	0.5763	0.5803	0.5983	0.6129	0.6295
0.5783	0.5794	0.5810	0.5878	0.6049	0.6217	0.6230	0.6379

Figura 20. Impresión de resultados para el tiempo de impresión solicitado

La figura 20 un ejemplo del resultado de la modelación para un tiempo de impresión de 3700 segundos, tiempo en el que 100 segundos antes la pieza fue sometida instantáneamente al baño de sales a 450°C, por lo que la misma esta siendo enfriada, y en donde ya se pueden apreciar cambios de fase. Nuevamente se ve como en el centro la pieza se encuentra más caliente que en las orillas y las esquinas lo cual comprueba que el modelo esta trabajando correctamente y dando resultados confiables debido a que este fenómeno sucede experimentalmente.

## VIII.CONCLUSIONES

1. A través de la solución numérica por el método de diferencias finitas se pudo resolver la ecuación de conducción. Tomando en cuenta las entradas y salidas de calor a la pieza, en cada superficie, y mediante su discretización, se establecieron nueve nodos representativos para los cuales se pudo conocer la temperatura en función del tiempo para cada etapa: austenizado, austemperizado y temple. Es decir, con este modelo basal se predicen los perfiles de temperatura para cada una de las etapas del proceso de austemperizado de una pieza cilíndrica
2. A diferencia de modelos revisados en la literatura, la versión térmica de este modelo contempla todos los posibles mecanismos de entradas y salidas de calor a la pieza y todas las condiciones a la frontera posibles, teniendo menor número de simplificaciones, mayor precisión; y, por lo tanto, mayor poder de simulación.
3. La versión final del modelo termo-estructural resultó de la integración de las transformaciones microestructurales con el modelo térmico.
4. El simulador es flexible porque permite tomar en cuenta las condiciones térmicas del tratamiento requeridas por el usuario, ya que las temperaturas y los tiempos del ciclo térmico se le preguntan al mismo. Además, puede modificar el código para definir las funciones de Pascal que toman en cuenta los coeficientes de transferencia de calor, las propiedades térmicas, el diagrama CCT y las cinéticas de transformación. Es decir, este simulador puede ser utilizado para las condiciones de tiempo, temperatura, mecanismos controlantes y composición química de hierros o aceros que el usuario requiera.
5. El simulador termo-estructural arroja resultados metalúrgicamente consistentes considerando las condiciones del tratamiento. En trabajos futuros podría implementarse una predicción de la dureza de la aleación con base en la microestructura predicha final y la regla de las fases.

## IX. BIBLIOGRAFÍA

- [1] A. J. Saldivar, Efecto del Austemperizado Sobre la Microestructura y Propiedades Mecánicas del Hierro Dúctil Aleado con Níquel y Cobre, Tesis de Maestría, Instituto Tecnológico de Saltillo, Saltillo, Coah., México, 1994, p. 8- 72
- [2] Wertime, T. A., & Muhly, J. D. (1980). *The coming of the age of iron*. Yale University Press.
- [3] Buchwald, V.F., *Handbook of Iron Meteorites*, Center for Meteorites Studies, Arizona State University, University of California Press, 1975.
- [4] Eliade, M., *Herreros y alquimistas*, Alianza Editorial, Madrid, 1983.
- [5] Goldstein, J.I. y R.E. Ogilvie, *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, vol. 233, 1965.
- [6] Kovacs, B. V. (1987). Development of austempered ductile iron (ADI) for automobile crankshafts. *Journal of Heat Treating*, 5(1), 55-60.
- [7] Vázquez-Gómez, O., Barrera-Godínez, J. A., Hernández-Morales, B., Vergara-Hernández, H. J., & López-Martínez, E. (2012). Mathematical Model of Thermal and Microstructural Evolution during Austempering of Ductile Iron. *Materials Performance and Characterization*, 1(1), 1-14.
- [8] Chang, L.C., "Microstructures and Reaction Kinetics of Bainite Transformation in Si-rich Steels," *Mater. Sci. Eng. A*, Vol. 368, 2004, pp. 175–182.
- [9] Yang, Z.-G. and Fang, H.-S., "An Overview on Bainite Formation in Steels," *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.*, Vol. 9, 2005, pp. 277–286.
- [10] Hepp, E., Hurevich, V., & Schäfer, W. (2012). Integrated modeling and heat treatment simulation of austempered ductile iron. In *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* (Vol. 33, No. 1, p. 012076). IOP Publishing.

[11] American Iron and Steel Institute (AISI). 1995. Steel Processing Flow Lines. Washington: AISI.

[12] International Iron and Steel Institute (IISI). 1992. Environmental Control in the Steel Industry. Documentos preparados para la Conferencia Mundial 1991 ENCOSTEEL, Bruselas.

[13] Organización Internacional del Trabajo (OIT). 1992. Recent Developments in the Iron and Steel Industry. Informe I. Ginebra: OIT.

[14] Asociación Mexicana de la Industria Automotriz, <http://www.amia.com.mx>, (Enero-2000)

[15] J. L. González, J.M. Hallen y M. M. Cisneros, Resistencia Mecánica y a la Fatiga de Hierros Nodulares al Cu-Mo y Ni-Mo Austemperizados, II Congreso Internacional de Materiales, Instituto Tecnológico de Saltillo, Saltillo, Coah., México, (1995) 58-69

[16] Al Demmler, Trends in automotive materials, Automotive Engineering International, Vol. 106, No. 12, The Society of Automotive Engineers Inc, USA, (1998) 26

[17] Chang, L. C., "An Analysis of Retained Austenite in Austempered Ductile Iron," Metall. Mater. Trans. A, Vol. 34A, No. 2, 2003, pp. 211–217.

[18] Bhadeshia, H. K. D. H., Bainite in Steels: Transformations, Microstructure and Properties, IOM Communications Ltd., London, Great Britain, 2001.

[19] Speer, J. G., Edmonds, D. V., Rizzo, F. C., and Matlock, D. K., "Partitioning of Carbon from Supersaturated Plates of Ferrite, with Applications to Steel Processing and Fundamentals of the Bainite Transformation," Curr. Opin. Solid State Mater. Sci., Vol. 8, 2004, pp. 219–237.

[20] Arft, M., & Klocke, F. (2013). High performance turning of austempered ductile iron (ADI) with adapted cutting inserts. *Procedia CIRP*, 8, 129-134.

- [21] Yescas, M. A., Bhadeshia, H. K. D. H., & MacKay, D. J. (2001). Estimation of the amount of retained austenite in austempered ductile irons using neural networks. *Materials Science and Engineering: A*, 311(1), 162-173.
- [22] Bhadeshia, H. K. D. H., & Christian, J. W. (1990). Bainite in steels. *Metallurgical transactions A*, 21(3), 767-797.
- [23] Liu, W., Sun, X., Stephens, E., & Khaleel, M. (1997). Metallurgical and materials transactions A. 1997, 28(8), I.
- [24] Dawson, S., & Schroeder, T. (2004). Practical applications for compacted graphite iron. *AFS Transactions*, 47(5), 1-9.
- [25] Johnson, W. A., & Mehl, R. F. (1939). Trans. AIME.
- [26] JLRM, M. (1995). Información bibliográfica. *Revista de Metalurgia*, 31(4), 256-265.
- [27] Yescas, M. A., & Bhadeshia, H. K. D. H. (2002). Model for the maximum fraction of retained austenite in austempered ductile cast iron. *Materials Science and Engineering: A*, 333(1-2), 60-66.
- [28] E. López, Desarrollo de un nuevo dispositivo para caracterizar la extracción de calor en baños de temple. 2000. Tesis de Licenciatura. UNAM
- [29] Vázquez, O. Simulación de la Evolución Termoestructural en el Austemperizado del Hierro Dúctil. 2009. Tesis de Maestría. UNAM

# APÉNDICE I. DIAGRAMA CCT (Continuous Cooling Transformation).

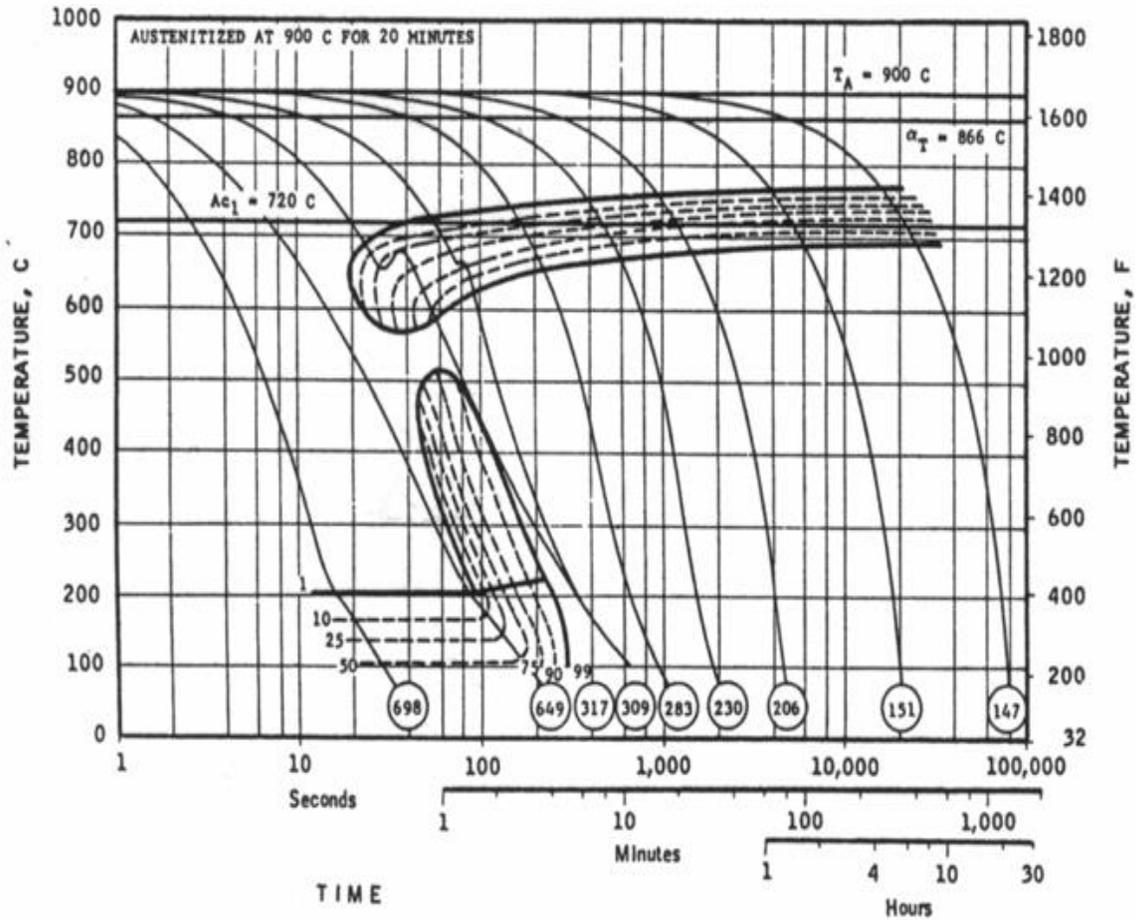


Figura A.I.1: Diagrama CCT para un Hierro Nodular A536 ASTM con 3.37C - 2.62Si - 0.031Mn% wt. Austenizado a 900°C [29].

# APÉNDICE II. INTERFACE DEL MODELO TERMOESTRUCTURAL (SIMULADOR).

## II.1 Portada del simulador

El programa inicia presentando una portada de datos (figura A.II.1):

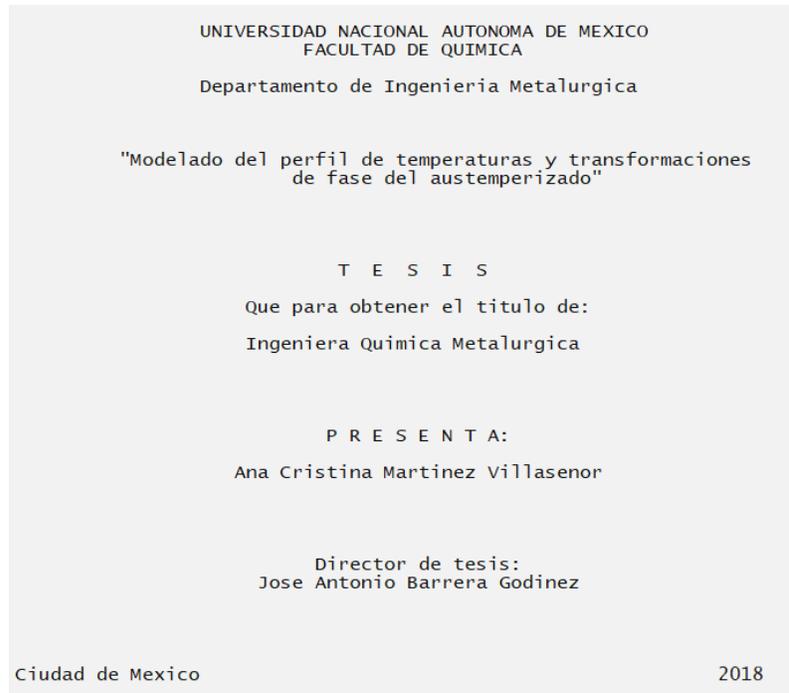


Figura A.II.1. Portada inicial del programa

## II.2 Datos de entrada

El programa pide al usuario primero las condiciones geométricas de la pieza. Se pide que estos valores se den en metros para la altura y radio del cilindro. También en esta sección el usuario puede introducir el número de nodos que desea en cada dirección:

```
Geometria de la pieza
Favor de introducir los siguientes valores en METROS

Introduce el radio del cilindro (r):
0.05
Introduce el numero de nodos en la direccion radial (N):
8
Introduce la altura de la pieza (H):
0.15
Introduce el numero de nodos en direccion axial (M):
10
```

Figura A.II.2. Introducción de datos de dimensiones de la pieza.

Posteriormente se pide que el usuario introduzca los valores de las temperaturas:

```
Geometria de la pieza
Favor de introducir los siguientes valores en METROS

Introduce el radio del cilindro (r):
0.05
Introduce el numero de nodos en la direccion radial (N):
8
Introduce la altura de la pieza (H):
0.15
Introduce el numero de nodos en direccion axial (M):
10

Condiciones de temperatura en el sistema
Favor de introducir los siguientes valores en unidades CELSIUS

Introduce la temperatura inicial del sistema:
25
Introduce la temperatura de austenizado:
900
Introduce la temperatura del bano de sales para el austemperizado:
450
Introduce la temperatura del temple:
30
```

Figura A.II.3. Introducción de datos de temperaturas del proceso

Una vez que el programa tiene estos datos, genera la tabla de deltas de tiempo críticos, indicando el tiempo crítico mínimo así como su posición en la tabla según el nodo donde se encuentre. Posteriormente el programa pide al usuario que introduzca un valor de delta de tiempo para llevar a cabo los cálculos, menor que el indicado por el programa. Si se introduce un número mayor, el programa no lo aceptará y seguirá pidiendo este dato hasta que se cumpla con esta condición:

```

Presiona enter para continuar

Calculo de Dt critico

Dt criticos

```

1.2935	1.2588	1.2588	1.2588	1.2588	1.2588	1.2588	0.7271
0.7886	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.5014
0.7886	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.5014
0.7886	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.5014
0.7886	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.5014
0.7886	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.5014
0.7886	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.5014
0.7886	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.5014
0.7886	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.5014
0.7886	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.4547	1.5014
1.2935	1.2588	1.2588	1.2588	1.2588	1.2588	1.2588	0.7271

```

Dt critico minimo es (en segundos): 0.73
Ubicado en el nodo:8,1

Escribe un valor de Dt un orden menor que el anterior para realizar los calculos:
0.5

```

Figura A.II.4. Tabla de datos de diferencias de tiempo críticas para las dimensiones y condiciones dadas por el usuario

Por último, se piden datos sobre cuantos tiempos se desean conocer, así como los tiempos netos de austenización, Austemperizado y temple, para posteriormente introducir los tiempos a los que se desean ver resultados:

```

Para cuantos tiempo quieres ver resultados:
5

Cual es el tiempo de austenizado en segundos:
3600

Cual es el tiempo neto de austemperizado en segundos:
1200

Cual es el tiempo neto de temple en segundos:
500

Tecllea el tiempo 1 de impresion en segundos:
2000
Tecllea el tiempo 2 de impresion en segundos:
3100
Tecllea el tiempo 3 de impresion en segundos:
3800
Tecllea el tiempo 4 de impresion en segundos:
4800
Tecllea el tiempo 5 de impresion en segundos:
4950_

```

Figura A.II.5. Introducción de tiempos de cada etapa del proceso y de impresión

## II.3 Datos de salida

El programa presenta como resultados o datos de salida tres tablas por cada tiempo de impresión solicitado anteriormente que son de interés para el usuario; tabla de perfiles de temperatura, tabla de fracción volumétrica de austenita retenida y tabla de fracción volumétrica de ausferrita:

Para el tiempo 3800.00 s, las temperaturas (en C) son:							
456.0359	455.9571	455.7235	455.3443	454.8343	454.2133	453.5053	452.7372
459.8469	459.7184	459.3373	458.7187	457.8867	456.8736	455.7185	454.4655
462.9640	462.7948	462.2931	461.4787	460.3833	459.0495	457.5288	455.8792
465.1698	464.9718	464.3847	463.4317	462.1500	460.5893	458.8097	456.8795
466.3118	466.0990	465.4677	464.4429	463.0647	461.3865	459.4730	457.3974
466.3118	466.0990	465.4677	464.4429	463.0647	461.3865	459.4730	457.3974
465.1698	464.9718	464.3848	463.4317	462.1500	460.5893	458.8097	456.8795
462.9640	462.7948	462.2931	461.4787	460.3833	459.0495	457.5288	455.8792
459.8469	459.7184	459.3373	458.7187	457.8867	456.8736	455.7185	454.4655
456.0359	455.9571	455.7235	455.3443	454.8343	454.2133	453.5053	452.7372

Para el tiempo 3800.00 s, la fraccion volumetrica de austenita retenida es:							
0.3695	0.3688	0.3670	0.3641	0.3629	0.3726	0.3801	0.3859
0.3823	0.3790	0.3665	0.3741	0.3831	0.3756	0.3668	0.3695
0.4164	0.4156	0.4153	0.4087	0.3966	0.3695	0.3793	0.3671
0.4223	0.4218	0.4214	0.4175	0.4100	0.3886	0.3865	0.3736
0.4240	0.4236	0.4222	0.4202	0.4165	0.4021	0.3707	0.3765
0.4240	0.4236	0.4222	0.4202	0.4165	0.4021	0.3707	0.3765
0.4223	0.4218	0.4214	0.4175	0.4100	0.3886	0.3865	0.3736
0.4164	0.4156	0.4153	0.4087	0.3966	0.3695	0.3793	0.3671
0.3823	0.3790	0.3665	0.3741	0.3831	0.3756	0.3668	0.3695
0.3695	0.3688	0.3670	0.3641	0.3629	0.3726	0.3801	0.3859

Para el tiempo 3800.00 s, la fraccion volumetrica de ausferrita es:							
0.6305	0.6312	0.6330	0.6359	0.6371	0.6274	0.6199	0.6141
0.6177	0.6210	0.6335	0.6259	0.6169	0.6244	0.6332	0.6305
0.5836	0.5844	0.5847	0.5913	0.6034	0.6305	0.6207	0.6329
0.5777	0.5782	0.5786	0.5825	0.5900	0.6114	0.6135	0.6264
0.5760	0.5764	0.5778	0.5798	0.5835	0.5979	0.6293	0.6235
0.5760	0.5764	0.5778	0.5798	0.5835	0.5979	0.6293	0.6235
0.5777	0.5782	0.5786	0.5825	0.5900	0.6114	0.6135	0.6264
0.5836	0.5844	0.5847	0.5913	0.6034	0.6305	0.6207	0.6329
0.6177	0.6210	0.6335	0.6259	0.6169	0.6244	0.6332	0.6305
0.6305	0.6312	0.6330	0.6359	0.6371	0.6274	0.6199	0.6141

Figura A.II.6. Datos de salida del programa

El modelo está diseñado para que el usuario conozca los perfiles de temperatura durante el tratamiento térmico de Austemperizado de una pieza cilíndrica, así como los perfiles microestructuras en función de dichas temperaturas. El usuario puede dar las dimensiones y condiciones de temperatura para cada etapa. La programación se dividió en etapas ordenadamente que se encuentran identificadas con un comentario, con el fin de que el usuario pueda buscarlas en caso de que tenga alguna duda o requiera de cambiar ciertas condiciones. Es decir, aunque el modelo original está hecho para un Hierro Nodular A536 ASTM, con composición química 3.37C- 2.62Si-0.031Mn%Wt. y ciertas condiciones específicas, si el usuario desea utilizar el modelo para un material distinto puede hacerlo siempre y cuando

cuenta con un diagrama CCT del material que requiera simular y escriba las funciones de las líneas de dicho diagrama en donde corresponde. Así mismo es fácil para el usuario cambiar en el código valores de conductividad, densidades, calores específicos, generación, flux de contacto, etc.

## → VARIABLES

Incluye todas aquellas variables que se ocupan a lo largo del programa en forma de matrices, reales y enteros.

```
VAR
RN,rint, rext,Aint,Aext,At,V,Tp,Tf,DtC: ARRAY [1..11,1..11] OF DOUBLE;
Ca0,CaR,Xa,XaRmax,Xabmax,Cab,Xab,Theta,Theta1,KTpar,nT,Xabl: ARRAY [1..11,1..11] OF REAL;
Arg1, Arg2, Arg3, Arg4, Arg5, Arg6,Arg7,Arg8,Arg9,Arg10,Arg11: ARRAY [1..11,1..11] OF REAL;
R,H: DOUBLE;
N,M:integer;
Dr,Dz,Vt,tiempodeaustenizado,tiempodeaustemperizado,tiempodetemple,tiempofasesi,tiempofasesf:
i,j,imin,jmin,ntiemposimpresion,kt:integer;
pi: DOUBLE;
DFoU,DFoD,DFoI,DFoL,a,Dtcmin,Dtm,tsim: DOUBLE;
T0,Tfi,TBS,TT: DOUBLE;
timp:array [1..20] of real;
```

Figura A.II.7. Variables utilizadas en el programa

## → CONSTANTES

Para el modelo basal se mantuvo constante las propiedades de densidad, calor específico y conductividad del hierro con el que se trabajó, así como su composición química.

```
const
Ro=7500; //densidad
Cp=450;
K=50; //conductividad

//Hierro Nodular
C=3.37;
Mn=0.031;
Si=2.62;
Cr=0.0;
Ni=0.0;
Cu=0.0;
Mo=0.49;
```

Figura A.II.8. Constantes utilizadas en el programa

## → FUNCIONES

Se realizaron distintas funciones: tiempo inicial en función del diagrama CCT (figura A.II.9) así como tiempo, así como generación, convección

(figura A.II.10), conducción, radiación, contacto y flux conocido en todas las direcciones.

```
Function tinicial(temperaturaf:real):real; // (T EN °C)
Begin
if ((temperaturaf>780.0) or (temperaturaf<200.0)) then tinicial:=100000.0 ELSE
Begin
if ((temperaturaf<=780.0) and (temperaturaf>=770.0)) then tinicial:=10.0**((0.0602059993*(temperaturaf-42.756551));
if ((temperaturaf<770.0) and (temperaturaf>=750.0)) then tinicial:=10.0**((0.03239*(temperaturaf))-2138857);
if ((temperaturaf<750.0) and (temperaturaf>=740.0)) then tinicial:=10.0**((0.0352182*(temperaturaf))- .4595);
if ((temperaturaf<740.0) and (temperaturaf>=730.0)) then tinicial:=10.0**((0.0425968*(temperaturaf))- .919618);
if ((temperaturaf<730.0) and (temperaturaf>=722.0)) then tinicial:=10.0**((0.05158*(temperaturaf))-357943271);
if ((temperaturaf<722.0) and (temperaturaf>=695.0)) then tinicial:=10.0**((0.0117137*(temperaturaf))- 693865);
if ((temperaturaf<695.0) and (temperaturaf>=570.0)) then tinicial:=10.0**((-0.000239*(temperaturaf))+ 6142);
if ((temperaturaf<570.0) and (temperaturaf>=470.0)) then tinicial:=10.0**((-0.002038*(temperaturaf))+ 63906);
if ((temperaturaf<470.0) and (temperaturaf>=400.0)) then tinicial:=10.0**((-0.000253*(temperaturaf))+ 80027);
if ((temperaturaf<400.0) and (temperaturaf>=300.0)) then tinicial:=10.0**((-0.00072539*(temperaturaf) 1.995770);
if ((temperaturaf<300.0) and (temperaturaf>=200.0)) then tinicial:=10.0**((-0.00176090*(temperaturaf) 2.306381);
end;
end;
```

Figura A.II.9. Funciones para cálculo del tiempo inicial de transformación según el diagrama CCT

```
//Conveccion
//Arriba
Function hcU(tiempoenlafuncion:real):real;
Begin
if tiempoenlafuncion<timp[1] then hcU:=20.0; //Valor inventado para austenizado
if ((tiempoenlafuncion>=timp[1]) and (tiempoenlafuncion<=timp[2])) then hcU:=2000.0;
if ((tiempoenlafuncion>timp[2]) and (tiempoenlafuncion<=timp[3])) then hcU:=1000.0;
if (tiempoenlafuncion>timp[3]) then hcU:=10.0; //Valor inventado
End;

Function DBicU(tiempoenlafuncion:real):real;
begin
DBicU:=(hcU(tiempoenlafuncion)*Dz)/k;
end;
```

Figura A.II.10. Funciones para la asignación de los coeficientes de convección hacia arriba.

## ➔ CÁLCULOS ALGEBRAICOS

Se realizaron las operaciones aritméticas necesarias para el cálculo de datos como lo son los números adimensionales, el valor exacto del número Pi y las diferencias de distancia en radios y longitudes, como se muestra en la figura A.II.11:

```
// Calculo Dr y Dz
Dr:=(r/(N-1));
Dz:=(H/(M-1));
pi:=4.0*ArcTan(1.0);

//Calculo de alfa
a:=(k/(Ro*Cp));

//Calculo fouriers
DFoU:=(a/(DZ)**2.0)*Dtm;
DFoD:=(a/(Dz)**2.0)*Dtm;
DFori:=(a/(Dr)**2.0)*Dtm;
DFoL:=(a/(Dr)**2.0)*Dtm;
```

Figura A.II.11. Ejemplos de algunos cálculos algebraicos realizados por el programa

## ➔ RADIOS, ÁREAS Y VOLÚMENES

En este apartado se llevó a cabo el procedimiento para el cálculo de áreas internas, externas, áreas de las tapas así como los volúmenes y radios.

```
//Areas internas;

Aint[1,1]:=2.0*pi*rint[1,1]*(Dz/2.0);
Aint[N,1]:=2.0*pi*rint[N,1]*(Dz/2.0);
Aint[1,M]:=2.0*pi*rint[1,M]*(Dz/2.0);
Aint[N,M]:=2.0*pi*rint[N,M]*(Dz/2.0);

//Arista derecha
for j:=2 to (M-1) do
begin
  Aint[N,j]:=2.0*pi*rint[N,j]*Dz;
end;
```

Figura A.II.12. Ejemplos de algunos cálculos para áreas internas

## ➔ ECUACIONES DE DT CRÍTICOS

Se calculan los criterios de estabilidad para saber si las ecuaciones gobernantes cumplen las condiciones adecuadas.

```
//Dt criticos

tiempodeaustenizado:=10.0; //Suponiendo que el tiempo de austenizado vale 10 s para que las funiones
tsim:=1.0;

//Esquinas
DtC[1,1]:=1.0/((a/(Dr)**2.0)*((Aint[N,1]*Dr)/V[N,1])+(a/(Dz)**2.0)*
((At[N,1]*Dz)/V[N,1])+(a/(Dz)**2.0)*((At[N,1]*Dz)/V[N,M])*
(1.0+DBicU(tsim)+DBiRU(tsim)+DBictU(tsim))*(1.0+DBicri(tsim)+DBiRri(tsim)+DBictri(tsim)));
DtC[N,M]:=1.0/((a/(Dr)**2.0)*((Aext[1,M]*Dr)/V[1,M])+(a/(Dz)**2.0)*
((At[1,M]*Dz)/V[1,M])+(a/(Dz)**2.0)*((At[1,M]*Dz)/V[1,M])*
(1.0+DBicD(tsim)+DBiRD(tsim)+DBictD(tsim))*(1.0+DBicri(tsim)+DBiRri(tsim)+
DBictri(tsim)));
DtC[N,1]:=1.0/((a/(Dr)**2.0)*((Aext[1,1]*Dr)/V[1,1])+(a/(Dz)**2.0)*
((At[1,1]*Dz)/V[1,1])+(a/(Dz)**2.0)*((At[1,1]*Dz)/V[1,1])*
(1.0+DBicU(tsim)+DBiRU(tsim)+DBictU(tsim)+
DBiRD(tsim)+DBiRD(tsim)+DBictD(tsim))*(1.0+DBicri(tsim)+DBiRri(tsim)+DBictri(tsim)));
DtC[1,M]:=1.0/((a/(Dr)**2.0)*((Aint[N,M]*Dr)/V[N,M])+(a/(Dz)**2.0)*
((At[N,M]*Dz)/V[N,M])+(a/(Dz)**2.0)*((At[N,M]*Dz)/V[N,M])*
(1.0+DBicD(tsim)+DBiRD(tsim)+DBictD(tsim))*(1.0+DBicri(tsim)+DBiRri(tsim)+DBictri(tsim)));
```

Figura A.II.13. Ejemplos de cálculos para deltas de tiempo críticos en los nodos de las esquinas

## → ECUACIONES DE TEMPERATURA

Se muestran las ecuaciones gobernantes de los nueve nodos acomodadas en horizontales, verticales y nodos centrales.

```
//Esquina 1
Tf[1,1]:= Tp[1,1]*(1.0
- ((DFori*Aext[1,1]*Dr)/V[1,1])
- ((DFoD*At[1,1]*Dz)/V[1,1])
- ((DBicU(tsim)*DFoU*At[1,1]*Dz)/V[1,1])
- ((DBiRU(tsim)*DFoU*At[1,1]*Dz)/V[1,1])
- ((DBictU(tsim)*DFoU*At[1,1]*Dz)/V[1,1])) ;
Tf[1,1]:=Tf[1,1]+(((DFori*Aext[1,1]*Dr)/V[1,1])*Tp[2,1]);
Tf[1,1]:=Tf[1,1]+(((DFoD*At[1,1]*Dz)/V[1,1])*Tp[1,2]);
Tf[1,1]:=Tf[1,1]+(((DBicU(tsim)*DFoU*At[1,1]*Dz)/V[1,1])*Tc(tsim));
Tf[1,1]:=Tf[1,1]+(((DBiRU(tsim)*DFoU*At[1,1]*Dz)/V[1,1])*Ta(tsim));
Tf[1,1]:=Tf[1,1]+(((DBictU(tsim)*DFoU*At[1,1]*Dz)/V[1,1])*Tct(tsim));
Tf[1,1]:=Tf[1,1]+((qU(tsim)/(Ro*Cp))*(At[1,1]/V[1,1])*Dtm);
Tf[1,1]:=Tf[1,1]+((G(tsim)/(Ro*Cp))* At[1,1]*Dtm);
```

Figura A.II.14. Ejemplo de cálculos para el perfil de temperaturas en la esquina superior izquierda

## → INTERCAMBIO DE TEMPERATURA

Se declara al cambio de temperatura presente a temperatura futura y se obtiene el perfil de temperaturas en función del tiempo.

```
//Intercambio de temperaturas
for j:=1 to M do
begin
  for i:=1 to N do
    Tp[i,j]:=Tf[i,j];
  end;
```

Figura A.II.15. Subrutina para el intercambio de temperaturas

## → ECUACIONES DE TRANSFORMACIONES DE FASE

Las cuales fueron escritas para cada nodo y en función de temperaturas de austenización, temperaturas futuras (se toman del perfil térmico calculado) y tiempos de tratamiento, así como de la composición del hierro trabajado.

```

/**Tranformaciones de fase Esquina 1

if ((Tp[1,1]>=Tfi)and (tsim>=tiempodeaustenizado+tinicial(Tp[1,1]))
and (tsim<=tiempodeaustemperizado+tiempodeaustenizado+tfinal(Tp[1,1]))) then
Begin

//Concentración inicial de carbono en la austenita (TfiC es la T de austenización)

if (Tp[1,1]<=420.0) then Ca0[1,1]:=C ELSE
Ca0[1,1]:=(Tp[1,1]/420.0)-(0.17*Si)-(0.95);
writeln ('Ca0= ',Ca0[1,1]);
readkey;

//Carbono en la autenita retenida (TBS= Temperatura del baño de sales)
CaR[1,1]:=3.072-(0.0016*Tp[1,1])-(0.24*Si)-(0.161*Mn)-(0.115*Ni)+(0.25*Cu)+(0.06*Mo)+(2.69*Cr);
writeln ('CaR= ',CaR[1,1]);

//Fracción en volumen de austenita

//Fraccion en volumen de asutenita residual

Xa[1,1]:= (Ca0[1,1]-0.03)/(CaR[1,1]-0.03);
writeln ('Xa= ',Xa[1,1]);
readkey;

//Despeje de Fracción volumetrica de ausferrita

Xabl[1,1]:=1.0-Xa[1,1];
writeln ('Xabl= ',Xabl[1,1]);
readkey;

//Parámetros (Declarar variables ti y tf)

nT[1,1]:=-6.1273/(ln(tinicial(Tp[1,1])/tfinal(Tp[1,1])));
writeln ('nT= ', nT[1,1]);
writeln;
readkey;
writeln ('tinicial= ', tinicial(Tp[1,1]));
writeln ('tfinal= ', tfinal(Tp[1,1]));
writeln;
readkey;

kTpar[1,1]:=-ln(0.99)/((tinicial(Tp[1,1]))**(nT[1,1]));
writeln ('kTpar= ',kTpar[1,1]); //Debe ser mas grande para que no haya error
readkey;

```

Figura A.II.16. Ejemplo de cálculos para del perfil microestructural en la esquina superior izquierda

## ➔ IMPRESIÓN DE RESULTADOS

Se muestran las tablas o datos de salida mencionados anteriormente tomando en cuenta los tiempos dados por el usuario para imprimir resultados.

Para el tiempo 2100.00 s, las temperaturas (en C) son:							
888.6628	888.6763	888.7167	888.7838	888.8775	888.9974	889.1431	889.3140
888.3928	888.4066	888.4479	888.5167	888.6126	888.7354	888.8845	889.0594
888.1889	888.2030	888.2450	888.3150	888.4126	888.5375	888.6892	888.8673
888.0524	888.0666	888.1091	888.1799	888.2786	888.4050	888.5585	888.7386
887.9839	887.9982	888.0410	888.1122	888.2114	888.3385	888.4929	888.6740
887.9839	887.9982	888.0410	888.1122	888.2114	888.3385	888.4929	888.6740
888.0524	888.0666	888.1091	888.1799	888.2786	888.4050	888.5585	888.7386
888.1889	888.2030	888.2450	888.3150	888.4126	888.5375	888.6892	888.8673
888.3928	888.4066	888.4479	888.5167	888.6126	888.7354	888.8845	889.0594
888.6628	888.6763	888.7167	888.7838	888.8775	888.9974	889.1431	889.3140

Para el tiempo 2100.00 s, la fraccion volumetrica de austenita retenida es:							
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Para el tiempo 2100.00 s, la fraccion volumetrica de ausferrita es:							
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Figura A.II.17. Ejemplo de impresión de resultados. La primera tabla indica el perfil de temperaturas, la segunda la fracción volumétrica de austenita retenida y la tercera la fracción volumétrica de ausferrita. Para el tiempo de 2100 segundos no se ha llegado a la temperatura de austenización requerida y aun no ocurre ningún cambio de fase, como lo muestran las dos últimas tablas.

## II.4 Rutinas, subrutinas y procedimientos

La rutina principal consiste en llevar a cabo todos los cálculos de perfiles de temperatura y de transformaciones de fase en un rango de tiempo establecido por el usuario y haciendo los cálculos cada  $\Delta t$ . La instrucción consiste en un *REPEAT*, como se muestra en la figura 32, seguido de los cálculos de temperatura y transformaciones de fase y un *UNTIL* para cerrar la instrucción o rutina.

```

Repeat //Abarca todas las ecuaciones e impresiones
BEGIN
tsim:=tsim+Dtm; //Aumento del tiempo

```

Figura A.II.18. Inicio de subrutina principal

```

until tsim> timp[ntiemposimpresion];
//Aqui acaba repeat de tsim:=tsim+Dtm; (aumento del tiempo)

```

Figura A.II.19. Fin de subrutina principal

Las subrutinas se basan en el intercambio de temperatura presente a temperatura futura, logrando obtener un perfil de temperaturas futuras en función del tiempo.

Para las impresiones de resultados se utilizaron rutinas de calculo que llamaban a procedimientos escritos al inicio del programa (figura A.II.22 ) como se muestra en las figuras A.II.20-21.

```

//Impresiones de temperatura

for kt:=1 to ntiemposimpresion do
begin
if ((timp[kt]>(tsim-(Dtm/2.0))) and (timp[kt]<(tsim+(Dtm/2.0)))) then
impresiondetemperaturas;
end;

```

Figura A.II.20. Rutina para la impresión de temperaturas que llama al procedimiento con esta instrucción

```

//Impresiones de fases

for kt:=1 to ntiemposimpresion do
begin
if ((timp[kt]>(tsim-(Dtm/2.0))) and (timp[kt]<(tsim+(Dtm/2.0)))) then
impresiondefases;
end;

```

Figura A.II.21. Rutina para la impresión de fases que llama al procedimiento con esta instrucción

```

Procedure impresiondetemperaturas;
begin
    textcolor(black);
    writeln;
    writeln;
    Writeln('          |Para el tiempo ',tsim:8:2,' s, las temperaturas (en C) son:');
    writeln('_____');

    for j:=1 to M do
    begin
        for i:=1 to N do
            write((TP[i,j]-273.15):10:4,' | ');
            writeln;
        end;
    end;
end;

```

Figura A.II.22. Procedimiento para la impresión de temperaturas escrito al inicio del programa y el cual es llamado para la subrutina de impresión de resultados.