



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

**POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES
FACULTAD DE QUÍMICA**

**MODELADO DEL EFECTO DE LA RAPIDEZ DE ENFRIAMIENTO DURANTE EL
TEMPLE EN EL PROCESO DE ENDURECIMIENTO POR PRECIPITACIÓN DE
LA ALEACIÓN AA6061**

TESIS

**QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES**

PRESENTA:

IQM. LUIS ÁNGEL PÉREZ ESPINOSA

TUTOR PRINCIPAL

**DR. JOSÉ BERNARDO HERNÁNDEZ MORALES
FACULTAD DE QUÍMICA**

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR

**DR. JOSÉ ANTONIO BARERA GODÍNEZ
FACULTAD DE QUÍMICA**

**DR. OCTAVIO VÁZQUEZ GÓMEZ
INSTITUTO TECNOLÓGICO DE MORELIA**

CIUDAD DE MÉXICO

ENERO 2024



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.

**Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales – UNAM
Acuerdo del Comité Académico del 28 de junio de 2023**

Declaración de Autoría

Yo, Luis Ángel Pérez Espinosa, hago constar que esta tesis titulada, "*Modelado del efecto de la rapidez de enfriamiento durante el temple en el proceso de endurecimiento por precipitación de la aleación AA6061*" y el trabajo presentado en ella son de mi autoría, asimismo,

Yo confirmo que:

Este trabajo fue hecho totalmente durante el periodo de mis estudios de Maestría en el Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales (PCeIM) de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM).

Ninguna parte del presente trabajo ha sido usada para algún tipo de grado o certificación en la UNAM, ni en alguna otra Institución.

Cuando se ha citado el trabajo de otros autores, siempre se ha dado la fuente de origen. Con la excepción de dichas citas, la totalidad de la información contenida en el presente trabajo es de mi autoría.

He reconocido todas las fuentes de ayuda usadas en este trabajo.

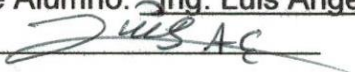
Cuando el trabajo fue hecho en colaboración con otros, he especificado cuáles fueron sus contribuciones.

Afirmo que el material presentado no se encuentra protegido por derechos de autor y me hago responsable de cualquier reclamo relacionado con la violación de derechos de autor.

Hago constar que el trabajo que presento es de mi autoría y que todas las ideas, citas textuales, datos, ilustraciones, gráficas, etc., sacados de cualquier obra o debidas al trabajo de terceros, han sido debidamente identificados y citados en el cuerpo del texto y en la bibliografía.

Acepto que, en caso de no respetar lo anterior puedo ser sujeto de sanciones universitarias.

Nombre Alumno: Ing. Luis Ángel Pérez Espinosa

Firma: 

Nombre del Tutor: Dr. José Bernardo Hernández Morales

Firma: 

Fecha: 11 de octubre 2023

Agradecimientos

Al CONAHCYT por brindarme le apoyo necesario para realizar mis estudios de maestría No. De Becario 1182947

A la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) por la formación académica que me ha dado.

Agradezco en gran medida a mi tutor principal el Dr. José Bernardo Hernández Morales por su grandioso compromiso con este trabajo y conmigo.

Agradezco a mi comité tutor Dr. José Antonio Barrera Godínez y Dr. Octavio Vázquez Gómez por sus consejos y recomendaciones para la elaboración de este trabajo.

Agradezco al Dr. Enrique Salas por su apoyo que me ha brindado.

Agradezco al pasante de IQM Eduardo Hernández por su apoyo durante toda la parte experimental.

Dedicatorias

A mi madre Elia Espinosa por todo el amor, paciencia y apoyo durante toda mi formación académica, gracias por cada acto de amor en mis momentos más difíciles.

A mi padre Ángel Pérez, mis hermanos Sandy y Sergio por estar conmigo siempre y brindarme todo su apoyo.

A ti Jesús T. gracias por todas las bonitas experiencias, por el gran apoyo que me has brindado y por nunca dejarme solo, ILY.

A mis amigos de la carrera de IQM, Mel, Daniela, Ulises, Ayauitl, Sebastián y amigos de medicina Ángel y Omar por su grandiosa amistad y apoyo en malos momentos, los quiero amigos.

Y a ti Luis, por no darte por vencido nunca, lo has logrado, sigue creyendo en ti.

Contenido

Pág.

Lista de símbolos.....	i
Índice de Figuras	iii
Índice de Tablas	v
1. Introducción	1
1.1 Hipótesis	3
1.2 Objetivos	3
1.2.1 Objetivos principales	3
1.2.2 Objetivos secundarios.....	3
2. Antecedentes	5
2.1 El aluminio y sus aleaciones.....	5
2.2 Endurecimiento por precipitación.....	6
2.3 Modelos para la evolución de los precipitados	9
2.4 Modelos para predecir el endurecimiento por precipitación	9
2.5 Modelo matemático determinístico de Myhr para la evolución de los precipitados en el proceso de endurecimiento por precipitación.....	11
2.5.1 Modelo de nucleación	12
2.5.2 Ley de rapidez del crecimiento o disolución de las partículas	13
2.5.3 Distribución del tamaño de partículas	13
2.5.4 Discretización de las ecuaciones	14
2.6 Modelo matemático determinístico de Myhr para evaluar el aumento del límite elástico debido al endurecimiento por precipitación	17
2.6.1 Contribución al límite elástico de los precipitados.....	17
2.6.2 Contribución al límite elástico por solución sólida.....	18
2.6.3 Dureza global y límite elástico.....	19
3. Metodología.....	20
3.1 Experimental	20
3.2 Computacional	23
3.2.1 Modelo térmico.....	23
3.2.2 Rapidez de enfriamiento.....	25
3.2.3 Modelo empírico	26
3.2.4 Modificación del modelo determinístico	26
4. Resultados y discusión.....	28

4.1	Modelo empírico	28
4.2	Modelo matemático determinístico	40
4.2.1	Cálculo del número de densidad de partículas.....	40
4.2.2	Análisis de independencia de malla	41
4.2.2.1	Número de nodos	42
4.2.2.2	Paso de tiempo	44
4.3	Cálculo de la dureza	47
4.4	Análisis de sensibilidad del modelo de dureza	49
4.4.1.1	Constante β	49
4.4.1.2	Factor de Taylor	50
4.4.1.3	Radio crítico de cizallamiento	51
4.5	Modelo empírico y modelo determinístico	53
5.	Conclusiones	62
6.	Referencias	64

Lista de símbolos

A_0	Parámetro relacionado con la barrera energética de la nucleación [J/mol]
a_p, a_p^0, a_w, a_e	Coefficientes en ecuaciones discretizadas
b	Magnitud del vector de Burgers [m]
C	Concentración [wt%]
\bar{C}	Concentración promedio [wt%]
C_e	Concentración de equilibrio del soluto en la interfase partícula/matriz [wt%]
C_i	Concentración del soluto en la interfase partícula/matriz [wt%]
C_0	Concentración inicial del soluto en la aleación [wt%]
C_p	Concentración del soluto en el precipitado [wt%]
C_s	Término pre-exponencial en la expresión del límite de solubilidad [wt%]
D	Coefficiente de difusión [m ² /s]
D_0	Término pre-exponencial en la expresión del coeficiente de difusión [m ² /s]
f	Fracción volumétrica de las partículas
\bar{F}	Promedio de la fuerza de interacción entre las dislocaciones y partículas [N]
F_i	Fuerza de interacción entre las dislocaciones y las partículas dentro del tamaño de clase r_i [N]
G	Módulo de corte [N/m ²]
ΔG_{het}^*	Barrera energética para la nucleación [J/mol]
HV	Dureza Vickers
HB	Dureza Brinell
i_{max}	Número de volúmenes de control
J	Flux de partículas a través del volumen de control [# / m ² s]
j	Rapidez de nucleación [# / m ³ s]
j_0	Constante numérica en la expresión de la rapidez de nucleación [# / m ³ s]
k_i	Factor de escala del elemento de aleación en el modelo de endurecimiento por solución sólida [Pa / wt% ^{2/3}]
l	Espaciado efectivo medio de partículas en el plano de deslizamiento
M	Factor de Taylor
N	Número de partículas en el volumen de control [# / m ³]
N_p, N_w, N_E	Número de partículas en la discretización al tiempo $t + \Delta t$ [# / m ³]
N_p^0	Número de partículas en la discretización en el punto P al tiempo t [# / m ³]
Q_d	Energía de activación para la difusión [J/mol]
Q_s	Entalpía del límite de solubilidad aparente [J/mol]
r	Radio de partícula [m]
\bar{r}	Radio de partícula promedio [m]
r_c	Radio crítico de cizallamiento [m]
r^*	Radio de partícula crítico [m]
R	Constante universal de los gases [8.314 J/K mol]
S	Término de generación [# / m ³ s]
T	Temperatura [K]
t	Tiempo [s]
V_m	Volumen molar del precipitado [m ³ /mol]
v	Rapidez de crecimiento o disolución de los precipitados [m/s]

v_e, v_w Rapidez de crecimiento o disolución de los precipitados en los límites del volumen de control [m/s]

Símbolos griegos

β	Constante en la expresión para la tensión de la línea de dislocación
γ	Energía interfacial partícula/matriz [J/m ²]
σ_i	Límite elástico intrínseco del aluminio puro [MPa]
σ_p	Contribución al límite elástico general de todos los precipitados del endurecimiento por precipitación [MPa]
σ_{ss}	Contribución al límite elástico general de los elementos de aleación en la solución sólida [MPa]
σ_y	Límite elástico general [MPa]
φ	Función de distribución de tamaño [# / m ⁴]

Índice de Figuras

FIGURA 2.1. DIAGRAMA DE LA RUTA DEL TRATAMIENTO TÉRMICO DE ENDURECIMIENTO POR PRECIPITACIÓN DE ALEACIONES DE ALUMINIO, EJEMPLIFICADO CON EL SISTEMA AL-CU [20].	7
FIGURA 3.1. ESQUEMA DE LAS PROBETAS JOMINY DE TAMAÑO REDUCIDO UTILIZADAS. VISTA SUPERIOR (IZQUIERDA) Y VISTA FRONTAL (DERECHA). LAS COTAS ESTÁN EN MM.	20
FIGURA 3.2. ESQUEMA DE LAS POSICIONES DE LOS BARRENOS EN LAS PROBETAS JOMINY DE TAMAÑO REDUCIDO. LOS BARRENOS ESTÁN A 45° SOBRE EL LADO REDONDO Y SON DE 1/16" DE DIÁMETRO. LAS COTAS ESTÁN EN MM.	21
FIGURA 3.3. ESQUEMA DEL DISPOSITIVO PARA REALIZAR ENSAYOS JOMINY.	22
FIGURA 3.4. ESQUEMA DEL MODELO GEOMÉTRICO. SE CONSIDERÓ EL ORIGEN EN EL CENTRO DE LA SUPERFICIE SUPERIOR; LOS NODOS EN LA DIRECCIÓN J (ALTURA DEL CILINDRO) SE NUMERARON DEL 1 HASTA NZ (20) Y EN LA DIRECCIÓN I (RADIO DEL CILINDRO) DE 1 HASTA NR (3).	25
FIGURA 3.5 . DIAGRAMA DE FLUJO DEL MODELO MATEMÁTICO DETERMINÍSTICO REPORTADO EN LA LITERATURA [33,37].	27
FIGURA 4.1. CURVAS DE ENFRIAMIENTO DURANTE EL TEMPLE DESDE 530 °C: CALCULADA A 18.41 MM DE LA BASE TEMPLADA (GUIONES AZULES), MEDIDA A 20 MM DE LA BASE TEMPLADA (LÍNEA SÓLIDA ROSA) Y MEDIDA CERCANA A LA BASE TEMPLADA PARA USARSE COMO CONDICIÓN A LA FRONTERA (LÍNEA SÓLIDA VERDE).	28
FIGURA 4.2. CURVAS DE ENFRIAMIENTO LOCAL (CALCULADAS) DURANTE EL TEMPLE DESDE 530 °C EN CINCO NODOS.	29
FIGURA 4.3. CURVAS DE RAPIDEZ DE ENFRIAMIENTO LOCAL DURANTE EL TEMPLE DESDE 530 °C EN FUNCIÓN DEL TIEMPO EN CINCO NODOS.	29
FIGURA 4.4. CURVAS DE RAPIDEZ DE ENFRIAMIENTO LOCAL EN FUNCIÓN DE LA TEMPERATURA LOCAL EN CINCO NODOS.	30
FIGURA 4.5. RAPIDEZ DE ENFRIAMIENTO LOCAL MÁXIMA DURANTE EL TEMPLE EN FUNCIÓN DE LA POSICIÓN.	30
FIGURA 4.6. PERFIL DE DUREZA DE UNA PROBETA DESPUÉS DE T ₀ (CÍRCULOS AZULES), DESPUÉS DEL TEMPLE (CÍRCULOS NARANJAS) Y DESPUÉS DE ENVEJECIMIENTO ARTIFICIAL DE 30 MIN (CÍRCULOS GRISES).	33
FIGURA 4.7. PERFIL DE DUREZA DE UNA PROBETA DESPUÉS DE T ₀ (CÍRCULOS AZULES), DESPUÉS DEL TEMPLE (CÍRCULOS NARANJAS) Y DESPUÉS DE ENVEJECIMIENTO ARTIFICIAL DE 120 MIN (CÍRCULOS GRISES) [55].	33
FIGURA 4.8. PERFIL DE DUREZA DE UNA PROBETA DESPUÉS DE ENVEJECIMIENTO ARTIFICIAL DE 120 MIN (CÍRCULOS NARANJAS) Y LA RAPIDEZ DE ENFRIAMIENTO MÁXIMA DURANTE EL TEMPLE (CÍRCULOS AZULES).	34
FIGURA 4.9. DUREZA DESPUÉS DEL ENVEJECIMIENTO ARTIFICIAL EN FUNCIÓN DE LA RAPIDEZ DE ENFRIAMIENTO DURANTE EL TEMPLE MODIFICADA Y EL TIEMPO DE ENVEJECIMIENTO.	36
FIGURA 4.10. DUREZA DESPUÉS DEL ENVEJECIMIENTO ARTIFICIAL DURANTE 30 MINUTOS EN FUNCIÓN DE LA RAPIDEZ DE ENFRIAMIENTO DURANTE EL TEMPLE MODIFICADA: MEDIDA EXPERIMENTALMENTE (ESTRELLAS) Y CALCULADA CON EL MODELO EMPÍRICO (LÍNEA).	37
FIGURA 4.11. DUREZA DESPUÉS DEL ENVEJECIMIENTO ARTIFICIAL DURANTE 60 MINUTOS EN FUNCIÓN DE LA RAPIDEZ DE ENFRIAMIENTO DURANTE EL TEMPLE MODIFICADA: MEDIDA EXPERIMENTALMENTE (ESTRELLAS) Y CALCULADA CON EL MODELO EMPÍRICO (LÍNEA).	37
FIGURA 4.12. DUREZA DESPUÉS DEL ENVEJECIMIENTO ARTIFICIAL DURANTE 120 MINUTOS EN FUNCIÓN DE LA RAPIDEZ DE ENFRIAMIENTO DURANTE EL TEMPLE MODIFICADA: MEDIDA EXPERIMENTALMENTE (ESTRELLAS) Y CALCULADA CON EL MODELO EMPÍRICO (LÍNEA).	38

FIGURA 4.13. DUREZA DESPUÉS DEL ENVEJECIMIENTO ARTIFICIAL DURANTE 240 MINUTOS EN FUNCIÓN DE LA RAPIDEZ DE ENFRIAMIENTO DURANTE EL TEMPLE MODIFICADA: MEDIDA EXPERIMENTALMENTE (ESTRELLAS) Y CALCULADA CON EL MODELO EMPÍRICO (LÍNEA).....	38
FIGURA 4.14. FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO EN FUNCIÓN DEL RADIO PARA DISTINTOS VALORES DE TIEMPO DE ENVEJECIMIENTO ARTIFICIAL: MODELO DE MYHR [33] (LÍNEAS SÓLIDAS Y SÍMBOLOS) Y CÁLCULOS DE ESTE TRABAJO (LÍNEAS SÓLIDAS).	41
FIGURA 4.15. FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO EN FUNCIÓN DEL RADIO DE PARTÍCULA PARA DIVERSOS VALORES DEL NÚMERO DE NODOS EN LA ZONA DE INICIO DE LA CURVA.	42
FIGURA 4.16. FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO EN FUNCIÓN DEL RADIO DE PARTÍCULA PARA DIVERSOS VALORES DEL NÚMERO DE NODOS EN LA ZONA ALREDEDOR DEL MÁXIMO DE LA CURVA.	43
FIGURA 4.17. FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO EN FUNCIÓN DEL RADIO DE PARTÍCULA PARA DIVERSOS VALORES DEL NÚMERO DE NODOS EN LA PARTE FINAL DE LA CURVA.	44
FIGURA 4.18. FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO EN FUNCIÓN DEL RADIO DE PARTÍCULA PARA DIVERSOS VALORES DEL PASO DE CÁLCULO EN LA ZONA DE INICIO DE LA CURVA.	45
FIGURA 4.19. FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO EN FUNCIÓN DEL RADIO DE PARTÍCULA PARA DIVERSOS VALORES DEL PASO DE CÁLCULO EN LA ZONA ALREDEDOR DEL MÁXIMO DE LA CURVA.	46
FIGURA 4.20. FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO EN FUNCIÓN DEL RADIO DE PARTÍCULA PARA DIVERSOS VALORES DEL PASO DE CÁLCULO EN LA PARTE FINAL DE LA CURVA.	47
FIGURA 4.21. VARIACIÓN DE LA DUREZA CON EL TIEMPO DE ENVEJECIMIENTO A 190 °C. LA LÍNEA NARANJA ES LA GRÁFICA QUE PRESENTA MYHR [37] EN SU ARTÍCULO Y LA LÍNEA AZUL SON LOS CÁLCULOS DE ESTE TRABAJO.	49
FIGURA 4.22. VARIACIÓN DEL LÍMITE ELÁSTICO EN FUNCIÓN DEL TIEMPO DE ENVEJECIMIENTO PARA DIVERSOS VALORES DE LA CONSTANTE β	50
FIGURA 4.23. VARIACIÓN DEL LÍMITE ELÁSTICO EN FUNCIÓN DEL TIEMPO DE ENVEJECIMIENTO PARA DIVERSOS VALORES DEL FACTOR DE TAYLOR.	51
FIGURA 4.24. VARIACIÓN DEL LÍMITE ELÁSTICO EN FUNCIÓN DEL TIEMPO DE ENVEJECIMIENTO PARA DIVERSOS VALORES DEL RADIO CRÍTICO DE CIZALLAMIENTO.	52
FIGURA 4.25. DUREZA DESPUÉS DE ENVEJECIMIENTO DURANTE 30 MINUTOS EN FUNCIÓN DE LA RAPIDEZ DE ENFRIAMIENTO DURANTE EL TEMPLE MODIFICADA: PREDICHA POR EL MODELO EMPÍRICO (LÍNEA VERDE), MEDIDA EXPERIMENTALMENTE (ESTRELLA DORADA) Y CALCULADA CON EL MODELO DETERMINÍSTICO (ESTRELLA NEGRA).	55
FIGURA 4.26. DUREZA DESPUÉS DE ENVEJECIMIENTO DURANTE 60 MINUTOS EN FUNCIÓN DE LA RAPIDEZ DE ENFRIAMIENTO DURANTE EL TEMPLE MODIFICADA: PREDICHA POR EL MODELO EMPÍRICO (LÍNEA AZUL), MEDIDA EXPERIMENTALMENTE (ESTRELLA ROJA) Y CALCULADA CON EL MODELO DETERMINÍSTICO (ESTRELLA VERDE).	56
FIGURA 4.27. DUREZA DESPUÉS DE ENVEJECIMIENTO DURANTE 120 MINUTOS EN FUNCIÓN DE LA RAPIDEZ DE ENFRIAMIENTO DURANTE EL TEMPLE MODIFICADA: PREDICHA POR EL MODELO EMPÍRICO (LÍNEA VERDE), MEDIDA EXPERIMENTALMENTE (ESTRELLA ROSA) Y CALCULADA CON EL MODELO DETERMINÍSTICO (ESTRELLA GRIS).	56
FIGURA 4.28. DUREZA DESPUÉS DE ENVEJECIMIENTO DURANTE 240 MINUTOS EN FUNCIÓN DE LA RAPIDEZ DE ENFRIAMIENTO DURANTE EL TEMPLE MODIFICADA: PREDICHA POR EL MODELO EMPÍRICO (LÍNEA ROJA), MEDIDA EXPERIMENTALMENTE (ESTRELLA VIOLETA) Y CALCULADA CON EL MODELO DETERMINÍSTICO (ESTRELLA NEGRA).	57
FIGURA 4.29. DENSIDAD DE NÚMERO DE PARTÍCULAS EN FUNCIÓN DEL RADIO DE PARTÍCULA PARA DIFERENTES REM PARA UN TIEMPO DE ENVEJECIMIENTO DE 30 MINUTOS.	58
FIGURA 4.30. DENSIDAD DE NÚMERO DE PARTÍCULAS EN FUNCIÓN DEL RADIO DE PARTÍCULA PARA DIFERENTES REM PARA UN TIEMPO DE ENVEJECIMIENTO DE 240 MINUTOS.	59
FIGURA 4.31. DENSIDAD DE NÚMERO DE PARTÍCULAS EN FUNCIÓN DEL RADIO DE PARTÍCULA A LOS CUATRO TIEMPOS DE ENVEJECIMIENTO PARA LA REM DE 80 °C/S (COLORES FRÍOS) Y PARA REM DE 1 °C/S (COLORES CÁLIDOS).	60

Índice de Tablas

TABLA 2.1. PRINCIPALES ELEMENTOS DE ALEACIÓN EN EL SISTEMA DE DESIGNACIÓN DE LAS ALEACIONES TRABAJADAS MECÁNICAMENTE [15,16].	5
TABLA 2.2. PRINCIPALES ELEMENTOS DE ALEACIÓN EN EL SISTEMA DE DESIGNACIÓN DE LAS ALEACIONES FUNDIDAS [15].	6
TABLA 2.3. VALORES DE LOS COEFICIENTES EN LA ECUACIÓN 2.18 [33].	16
TABLA 4.1. VALORES PROMEDIO EN CADA POSICIÓN DE LA MEDICIÓN DE DUREZA Y SU DESVIACIÓN ESTÁNDAR.....	32
TABLA 4.2. DUREZA DESPUÉS DEL TRATAMIENTO COMPLETO DE ENVEJECIMIENTO ARTIFICIAL (PREDICHA POR EL MODELO MATEMÁTICO EMPÍRICO, MEDIDA EXPERIMENTALMENTE) Y VALOR DEL RSEM PARA CUATRO TIEMPOS DE PROCESO.....	39
TABLA 4.3. VALORES UTILIZADOS POR MYHR [37] PARA EL MODELO MICROESTRUCTURAL Y DE DUREZA....	48
TABLA 4.4. RELACIÓN ENTRE j_0 Y LA RAPIDEZ DE ENFRIAMIENTO DURANTE EL TEMPLE MODIFICADA (REM).	54

1. Introducción

El aluminio es el tercer elemento más abundante en la corteza terrestre, comprendiendo aproximadamente el 8% de ésta y es el segundo metal más utilizado en el mundo solo por debajo del acero [1,2]. Extraído desde el mineral de bauxita [1-3], se convierte en óxido de aluminio (alúmina) a través del proceso Bayer que se ha mantenido sin cambios desde que lo patentó Karl Josef Bayer en 1888 [1]. La totalidad de la producción de aluminio primario, que es el aluminio metálico obtenido desde la alúmina, se lleva a cabo por medio del proceso Hall-Heroult patentado en 1886 por el francés Paul L.T. Heroult y el estadounidense Charles M. Hall [1].

Las aleaciones de aluminio tienen buena maquinabilidad, relación resistencia/peso, conductividad térmica y eléctrica, conformabilidad, soldabilidad, resistencia a la corrosión, apariencia atractiva en su acabado natural y una baja densidad (2.7 g/cm^3) que es aproximadamente un tercio de la del acero [1-7]; encontrando un amplio campo de aplicaciones dentro de la industria marítima, aeroespacial, automovilística, arquitectura, material estructural por mencionar algunos ejemplos [1,3,4,7].

La crisis climática global ha impulsado el desarrollo de nuevas tecnologías en la fabricación del aluminio, con el fin de disminuir la huella de carbono. El avance en el proceso de fabricación de aluminio ha reducido la energía requerida para el proceso de manera significativa; en la producción de aluminio primario (desde alúmina hasta aluminio fundido) se ha reducido la energía en un 27% desde 1991 y la huella de carbono ha disminuido en un 49%. Mientras que en la producción de aluminio secundario (reciclaje de aluminio) ha disminuido la energía en un 49% y la reducción de la huella de carbono ha sido de un 60% desde 1991 [8]. En la producción de aluminio primario la reducción de energía se debe a la implementación de controles computarizados que ha permitido un menor consumo de energía durante la electrólisis, la eliminación gradual de antigua tecnología y el aumento del uso de energías renovables [8]. En el reciclaje de aluminio esta disminución se ha debido a la mejora de los procesos, hornos más eficientes, instalaciones más grandes, mejor clasificación y pretratamiento de la materia prima [8]. Además, el aluminio secundario ahorra un 93% de energía y disminuye la huella de carbono un 94% comparada con el aluminio primario [8], lo que ha ido aumentando la tasa de reciclaje, brindándole el título de “metal verde” [6].

En los últimos 15 años, el contenido de aluminio en los automóviles ha aumentado de 5% a 13% tanto en volumen como en peso, esto con el fin de ahorrar combustible y disminuir peso para reducir los efectos del calentamiento global [9]. Además de reducir las emisiones contaminantes, también se ha buscado economizar costos como sucede en la industria aeronáutica, donde además de reducir el peso de la aeronave se buscan materiales con mayor durabilidad, ya que se ha estimado que el costo de servicio y mantenimiento durante toda la vida útil de la aeronave excede el precio de compra original [10].

El aluminio puro no puede cumplir con todos estos requerimientos por lo que se ha tenido que alejar, principalmente con cobre, magnesio, manganeso, silicio, estaño y zinc [2,11]. Sin embargo, aún aleado no es suficiente para cumplir con las propiedades requeridas, para lo cual se ha tenido que realizar tratamientos térmicos, entre los cuales destaca uno: el endurecimiento por precipitación o envejecimiento [1,4,5]. Este tratamiento consiste en tres etapas: solubilización, temple (enfriamiento rápido desde temperatura de solubilización) y envejecido [11]. Por tanto, el término “temple” en tratamiento térmico de aleaciones de aluminio es distinto al usado para aceros.

La investigación industrial sobre las aleaciones Al-Mg-Si endurecidas por precipitación se ha estado desarrollando durante 90 años y puede considerarse relativamente abundante. Existe una creciente demanda de un mejor control de las propiedades, por lo cual, se requiere un mayor conocimiento y comprensión de la secuencia de precipitación [12].

Se han elaborado varios modelos ya sean empíricos o matemáticos determinísticos para predecir la dureza después del envejecimiento; sin embargo, estos modelos solo simulan el efecto de dos parámetros de la fase final del envejecido (tiempo de envejecimiento y temperatura de envejecimiento) [5]; no se ha incorporado el efecto de la rapidez de enfriamiento durante el temple, a pesar de que hay varios estudios que comprueban una relación entre la rapidez de enfriamiento durante el temple y la dureza final después del tratamiento de envejecimiento [11,13,14].

En este trabajo se desarrolló un modelo que predice la dureza final del envejecimiento artificial de la aleación AA6061, variando dos parámetros: la rapidez de enfriamiento durante el temple y el tiempo de envejecimiento, ya que la temperatura de envejecimiento y temperatura de solubilización se mantuvieron constantes. Además, se modificó un modelo matemático determinístico reportado en la literatura para incorporar el efecto de la rapidez

de enfriamiento durante el temple, trabajo que representa una gran aportación al creciente campo del estudio de las aleaciones de aluminio endurecibles por tratamiento térmico.

1.1 Hipótesis

Mediante el uso de un modelo matemático empírico, tomando en cuenta los parámetros de tiempo de envejecimiento y rapidez de enfriamiento durante el temple, se podrá simular correctamente la dureza producida por el proceso de endurecimiento por precipitación de la aleación AA6061. Se espera que bajo las mismas condiciones (dureza inicial y temperatura de envejecimiento), un aumento de la rapidez de enfriamiento durante el temple o del tiempo de envejecimiento aumentará la dureza, hasta un posible punto de sobre-envejecimiento.

1.2 Objetivos

1.2.1 Objetivos principales

Predecir la dureza después del proceso de endurecimiento por precipitación de probetas de tamaño reducido para ensayo Jominy de la aleación AA6061 incluyendo el efecto de la rapidez de enfriamiento durante el temple mediante un modelo empírico.

Incorporar a la rapidez de enfriamiento durante el temple en un modelo matemático determinístico reportado en la literatura.

1.2.2 Objetivos secundarios

Medir la respuesta térmica durante el temple.

Calcular el perfil de rapidez de enfriamiento durante el temple.

Medir perfiles de dureza después del temple y después del envejecido artificial.

Desarrollar un modelo empírico para predecir la dureza después del envejecido artificial, incluyendo a la rapidez de enfriamiento durante el temple.

Modificar un modelo matemático determinístico de endurecimiento por precipitación en aleaciones de aluminio reportado en la literatura para incorporar el efecto de la rapidez de enfriamiento durante el temple.

Implementar el modelo matemático modificado en *Wolfram Mathematica* con una interfaz amigable con el usuario.

Realizar un análisis de sensibilidad del modelo matemático determinístico.

2. Antecedentes

2.1 El aluminio y sus aleaciones

Hoy en día, la fundición es el proceso más utilizado para fabricar aluminio, destacando la fundición a presión, fundición en moldes permanentes y fundición en moldes de arena [7]. Las aleaciones de aluminio se clasifican como aleaciones de aluminio forjado y fundido que a su vez se clasifican como endurecibles por tratamiento térmico y no endurecibles por tratamiento térmico [2]. La clasificación de las aleaciones de aluminio que es globalmente aceptada es la designación de la Asociación del Aluminio (AA) de Estados Unidos, en donde las aleaciones de aluminio forjado reciben un código consistente de cuatro números, algunas veces incluyen letras antes o después de los números. El primer dígito define la serie del elemento mayoritario en la aleación; el segundo dígito define las variaciones en la aleación original; el tercer y cuarto dígito designan a una aleación específica dentro de la serie [1,15,16]. La Tabla 2.1 muestra el significado del primer número de la clasificación para las aleaciones de aluminio forjado.

Tabla 2.1. Principales elementos de aleación en el sistema de designación de las aleaciones trabajadas mecánicamente [15,16].

Aleación	Principales elementos de aleación
1xxx	Principalmente aluminio puro
2xxx	Cobre
3xxx	Manganeso
4xxx	Silicio
5xxx	Magnesio
6xxx	Magnesio y silicio
7xxx	Zinc
8xxx	Otros elementos (por ejemplo, estaño o litio)
9xxx	Sin asignar

Para las aleaciones de aluminio fundidas el sistema de clasificación también tiene cuatro dígitos, y el primer dígito especifica los principales componentes de aleación como se

muestra en la Tabla 2.2; sin embargo, entre el tercer y cuarto dígito se utiliza un punto decimal para dejar claro que se trata de una designación para piezas fundidas o lingotes de fundición [15].

Tabla 2.2. Principales elementos de aleación en el sistema de designación de las aleaciones fundidas [15].

Aleación	Principales elementos de aleación
1xx.x	Aluminio puro, 99.00% mínimo
2xx.x	Cobre
3xx.x	Silicio con adiciones de cobre y/o magnesio
4xx.x	Silicio
5xx.x	Magnesio
6xx.x	Serie no utilizada
7xx.x	Zinc
8xx.x	Estaño
9xx.x	Otros elementos

2.2 Endurecimiento por precipitación

Con el propósito de poder mejorar propiedades mecánicas como el límite elástico y la dureza de las aleaciones, se ha utilizado el proceso de endurecimiento por precipitación o también conocido como envejecimiento [1,2,11,17]. Para que este endurecimiento suceda es necesario que la aleación sea endurecible por tratamiento térmico; entre las aleaciones de aluminio que pueden ser endurecidas por tratamiento térmico se encuentran las series 2xxx, 6xxx, 7xxx y algunas aleaciones de la serie 8xxx [3,18].

El tratamiento térmico de endurecimiento por precipitación consiste en tres operaciones básicas:

Solubilización: En esta primera etapa la aleación se calienta por encima de la temperatura de *solvus* y se mantiene ahí hasta que se obtiene una solución sólida homogénea [1,11,17].

Temple: En esta etapa el sólido se enfría rápidamente, por lo general hasta temperatura ambiente, para suprimir cualquier precipitación o nucleación en los posibles sitios de nucleación, dando como resultado una solución sólida sobresaturada (SSSS) [1,2,11,18].

Envejecimiento: Después del temple, la solución sólida sobresaturada es inestable, por lo tanto, se descompondrá gradualmente a temperatura ambiente (natural) o a una temperatura por debajo de la temperatura de *solvus* (artificial) dando como resultado un precipitado finamente distribuido [1,11,17].

En la Figura 2.1, se presentan estas tres operaciones en un diagrama para una aleación de Al-Cu [20].

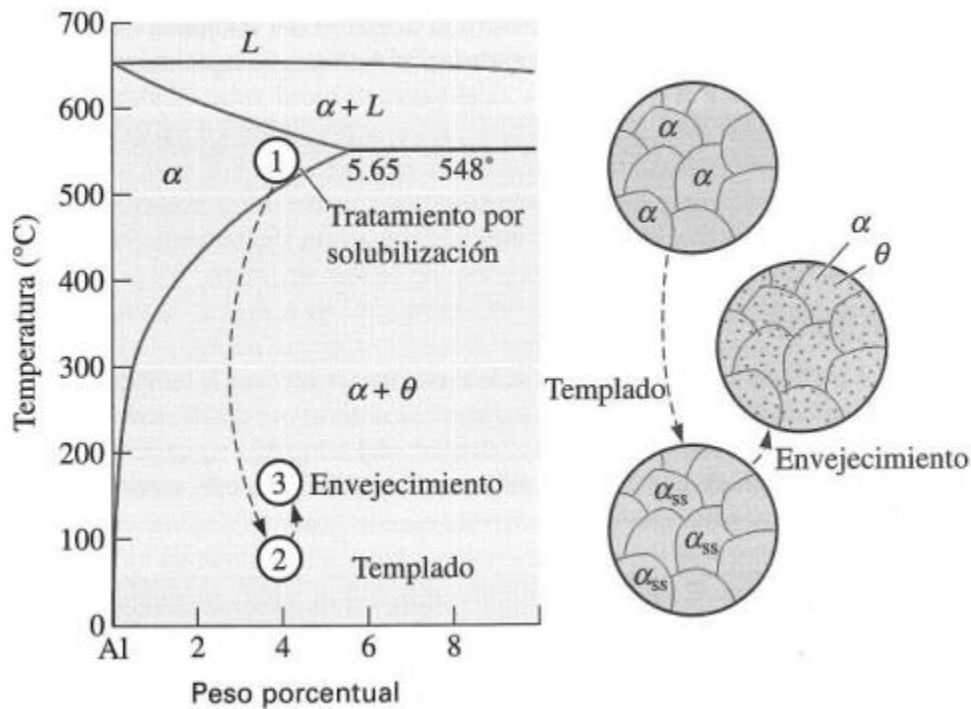


Figura 2.1. Diagrama de la ruta del tratamiento térmico de endurecimiento por precipitación de aleaciones de aluminio, ejemplificado con el sistema Al-Cu [20].

La precipitación de las fases que provocan el endurecimiento en las aleaciones de aluminio es un proceso controlado por difusión [17]. El aumento significativo de la dureza durante el tratamiento térmico de envejecimiento es causado por la formación de una alta densidad de precipitados semicoherentes metaestables en la matriz de aluminio que impiden el movimiento de las dislocaciones [12,17]; la dureza máxima se alcanza cuando el tamaño y

distancia entre los precipitados dificultan el movimiento de la dislocación de la manera más eficiente [14].

Para lograr el endurecimiento por precipitación se requiere de sitios vacantes para la formación de precipitados [2], esto es debido a que la solución sólida sobresaturada se descompone a través de transporte difusivo por medio de los sitios vacantes retenidos por el temple [2,21]. Se ha encontrado que un aumento de la rapidez de enfriamiento durante el temple provoca una precipitación más fina y una mayor fracción volumétrica de precipitados dando una dureza más alta [10,21].

Convencionalmente, la respuesta de endurecimiento por envejecimiento de las aleaciones se representa gráficamente en formas de “curvas de envejecimiento”. Estas curvas de envejecimiento representan el comportamiento del tiempo de envejecimiento con alguna propiedad mecánica del material a una temperatura de envejecimiento constante y tienden a seguir un perfil sesgado en forma de campana. Estas curvas indican una mejora inicial y una disminución posterior de las propiedades mecánicas que es consistente con la precipitación de partículas finas uniformemente dispersas y su posterior engrosamiento con el aumento del tiempo de envejecimiento [22].

El endurecimiento por precipitación se debe a la formación de partículas (precipitados), que actúan como obstáculos puntuales que inhiben el movimiento de las dislocaciones. Cuando las partículas son muy pequeñas, espaciadas y coherentes, las dislocaciones se pueden mover cortando los precipitados, en consecuencia, el límite elástico aumenta con el aumento de la fracción de volumen y el tamaño de los precipitados. Cuando los precipitados crecen, estos se vuelven no cortables y la dislocación los evita a través del llamado mecanismo de Orowan. En presencia de precipitados gruesos y no cortables, las dislocaciones se acumulan en los espacios entre los precipitados y los evitan; en este caso, el límite elástico disminuye con el aumento del radio del precipitado [17].

Para mejorar las propiedades mecánicas de las aleaciones de aluminio es importante comprender y seguir los pasos de procesamiento adecuados y también su mecanismo detrás del endurecimiento por precipitación [2]; sin embargo, los fenómenos metalúrgicos relevantes y los mecanismos físicos del proceso de envejecimiento aún no se comprenden a detalle [23].

2.3 Modelos para la evolución de los precipitados

La mayoría de los modelos disponibles se basan en la teoría clásica de nucleación y crecimiento (GNC). Se ha sugerido que este enfoque es adecuado para el envejecimiento artificial; sin embargo, la teoría GNC es limitada cuando se trata del modelado de secuencias de precipitación complejas o a temperatura ambiente (envejecimiento natural) [23].

Los enfoques de valor medio y de valor discreto se utilizan para realizar modelos capaces de predecir el tamaño y la fracción de volumen de las partículas precipitadas durante el envejecimiento. El método de valor medio no considera la distribución del tamaño de partícula, tomando a todas las partículas como del mismo tamaño; sin embargo, el enfoque de valor discreto considera la distribución del tamaño de partícula basada en las clases de radio seleccionadas [5].

En el enfoque de valor medio, en cada período de tiempo durante el envejecimiento la fracción de volumen y el radio medio de las partículas siguen diferentes cinéticas de crecimiento. Los núcleos permanecen en el radio crítico en la etapa de nucleación y la rapidez de nucleación cae a cero cuando no queda ningún elemento de soluto adicional dentro de la solución sólida. El período de crecimiento corresponde con un drástico incremento del radio promedio de los precipitados, además de un aumento de la fracción volumétrica. En el período de engrosamiento, el radio aumenta lentamente y la fracción de volumen permanece cercana al valor máximo [5].

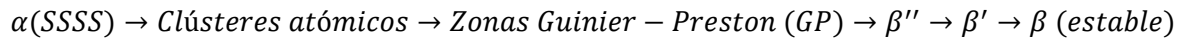
En el enfoque de valor discreto los núcleos recién formados en cada paso de tiempo se agrupan y se sigue la evolución de cada grupo, con la distribución de densidad de cada tamaño de radio; la densidad total en cada paso de tiempo y el radio medio se pueden calcular sumando todos los grupos, por lo que la fracción de volumen se puede derivar basándose en la suposición de partículas precipitadas esféricas [5].

2.4 Modelos para predecir el endurecimiento por precipitación

Al comienzo del proceso de envejecimiento, las partículas son pequeñas y coherentes con la matriz; la dislocación puede cortar estas partículas, mientras que en condiciones de envejecimiento máximo y sobre-envejecimiento, los precipitados son grandes e

incoherentes con la matriz y el mecanismo que domina es el arqueo de dislocaciones por las partículas, comúnmente llamado mecanismo de Orowan [5].

La secuencia de precipitación que siguen las aleaciones de Al-Mg-Si (serie 6xxx) es la siguiente [24-26]:



La solución sólida sobresaturada (SSSS) obtenida tras el enfriamiento rápido comienza a descomponerse a medida que los átomos de Si y Mg se atraen entre sí formando los clústeres atómicos para posteriormente formar las zonas Guinier-Preston (GP) que son totalmente coherentes y se han reportado en forma esférica o de aguja de 1-2 nm; posteriormente se forma β'' que son precipitados coherentes en forma de aguja de aproximadamente 4×4×50 nm; continuando con el envejecimiento se forma β' que es semicoherente con forma de varillas con largo en escala micrométrica y radio de 10 nm aproximadamente; finalmente se llega a la fase de equilibrio Mg_2Si que es totalmente incoherente con cubos o placas de 10 a 20 μm [25,27]. El aumento de la resistencia mecánica está relacionado con la presencia de la fase β'' y las zonas GP, mientras que la disminución (es decir el sobrevejecimiento) se ha relacionado con la fase β' y β [26]. Un punto importante es que las zonas GP se forman durante el envejecimiento natural y en las primeras etapas del envejecimiento artificial; por encima de 100 °C la rapidez con la que se disuelven estas zonas es muy alta [28]. Posteriormente se explicará porque a pesar de que los precipitados tienen forma de aguja se puede simplificar a una geometría esférica.

El primer intento de realizar un modelo que prediga la dureza o resistencia mecánica de una aleación después del envejecimiento fue realizado por Shercliff y Ashby [29] utilizando curvas de envejecimiento para desarrollar un modelo que considera los siguientes componentes: a) el crecimiento la fracción de volumen del precipitado y la disminución de la concentración de soluto con el tiempo durante las etapas iniciales de la precipitación; b) la dependencia de la fracción volumétrica de equilibrio del precipitado con la temperatura de envejecimiento; c) el engrosamiento del precipitado mediante el crecimiento competitivo; d) la contribución de la solución sólida a la resistencia; e) la contribución de precipitados cortables a la resistencia; y f) la contribución de precipitados no cortables a la resistencia [29].

Basándose en los enfoques para la evolución de los precipitados mencionados en la Sección 2.3, se han realizado varios estudios utilizando el enfoque de valor medio, entre

los que se encuentra el trabajo de Deschamps y Bréchet [30] mientras que con el enfoque de valor discreto o también conocido como modelos de clase se encuentran los trabajos realizados por Kampmann y Wagner (KWN) [31] y Langer y Schwartz [32], estos modelos han sido la base de otros trabajos como son los realizados por Myhr y Grong [33], Maugis y Gouné [34]. Los modelos de clase, aunque simples en principio, requieren mayor tiempo computacional que los enfoques de radio medio, aunque con las computadoras actuales esto no es un problema tan grande como hace unos años [35].

El modelo de Kampmann y Wagner (KWM) es uno de los modelos de precipitación más realista actualmente ya que trata a la nucleación, el crecimiento y el engrosamiento como tres procesos concurrentes, que tienen lugar simultáneamente, pero este supone que los precipitados son esféricos [28,36]. Aunque en las aleaciones de la serie 6XXX el precipitado más importante para el endurecimiento tiene forma similar a una aguja [35], Myhr [37] menciona que la consideración de partículas esféricas no es crítica para el análisis del endurecimiento por precipitación ya que utilizando varillas se obtuvieron resultados bastante similares, por lo que no hay una mejora general de la predicción de la dureza utilizando geometrías no esféricas. Varios autores han realizado modificaciones al modelo de KWM para considerar precipitados no esféricos. Anjabin [36] en su trabajo realiza un resumen del trabajo realizado para precipitados no esféricos y lo aplica en su trabajo para precipitados en forma de prolata/oblata.

Varios autores [28,35,36,38-40] han utilizado alguno de estos modelos para realizar estudios sobre el endurecimiento por precipitación de aleaciones de aluminio endurecibles por tratamiento térmico.

Este trabajo está basado en el modelo publicado por Myhr [33] que será descrito a continuación.

2.5 Modelo matemático determinístico de Myhr para la evolución de los precipitados en el proceso de endurecimiento por precipitación

Para modelar matemáticamente el proceso de envejecimiento por precipitación se utilizó el modelo determinístico propuesto por Myhr [33] que se basa en los estudios realizados por Kampmann [31]. La idea básica es dividir la distribución de partículas en una serie de distribuciones de tamaños de clase, representados por volúmenes de control. En estadística, una clase es un subconjunto de valores, es decir el intervalo total de muestras o mediciones se divide en subintervalos para realizar una distribución de frecuencia,

mientras que el tamaño o intervalo de clase es la diferencia entre el límite superior e inferior de la clase [41-43]. Una consideración importante es que solo se considera un solo tipo de precipitado, que es el β'' que es coherente.

El modelo matemático [33] considera tres componentes:

- Modelo de nucleación. Permite predecir el número de núcleos estables a cada paso de tiempo.
- Ley de rapidez. Permite calcular la disolución o crecimiento de cada tamaño de clase de la distribución de partículas.
- Ecuación de continuidad. Permite calcular la cantidad de soluto absorbido por los precipitados.

2.5.1 Modelo de nucleación

El modelo de nucleación tiene tres importantes consideraciones: se ignora el periodo de incubación y con esta suposición se pueden ignorar los efectos de la deformación elástica alrededor de las partículas nucleadas en la aportación para la energía libre de Gibbs, la rapidez de nucleación es en estado estable y utiliza la teoría clásica de nucleación. Con estas consideraciones la rapidez de nucleación puede expresarse de acuerdo con la Ec. 2.1 [33].

$$j = j_0 \exp\left[-\frac{\Delta G_{het}^*}{RT}\right] \exp\left[-\frac{Q_d}{RT}\right] \quad (2.1)$$

Donde R es la constante universal de los gases, T es la temperatura, Q_d es la energía de activación de la difusión, j_0 es el factor preexponencial de la rapidez de nucleación y ΔG_{het}^* es la barrera energética para la nucleación heterogénea [33].

Con la consideración de que se puede ignorar la aportación a la energía libre de Gibbs de la deformación elástica alrededor de las partículas nucleadas al ignorar el periodo de incubación, se obtiene la Ec. 2.2 [33].

$$\Delta G_{het}^* = \frac{A_0^3}{(RT)^2 \left(\ln\left[\frac{\bar{C}}{C_e}\right]\right)^2} \quad (2.2)$$

Donde \bar{C} es la concentración promedio del soluto en la matriz, C_e es la concentración al equilibrio del soluto en la matriz, A_0 esta relacionado con los sitios de nucleación heterogénea en la matriz [33].

Combinando las ecuaciones 2.1 y 2.2 se obtiene la Ec 2.3 [33].

$$j = j_0 \text{Exp} \left[- \left(\frac{A_0}{RT} \right)^3 \frac{1}{\left(\ln \left[\frac{\bar{C}}{C_e} \right] \right)^2} - \frac{Q_d}{RT} \right] \quad (2.3)$$

La ecuación 2.3 muestra que conforme la cantidad de soluto en la matriz se aproxime a la concentración de equilibrio, la rapidez de nucleación comienza a detenerse (es decir se acerca a 0) [33].

2.5.2 Ley de rapidez del crecimiento o disolución de las partículas

Dependiendo de la concentración de la superficie en la interfase partícula/matriz, un precipitado puede disolverse o crecer siguiendo la expresión dada por la Ec. 2.4 [33]:

$$v = \frac{dr}{dt} = \frac{\bar{C} - C_i}{C_p - C_i} \left(\frac{D}{r} \right) \quad (2.4)$$

El valor de la concentración en la interfase está relacionado con la concentración al equilibrio mediante la ecuación de Gibbs-Thomson [33]:

$$C_i = C_e \text{Exp} \left[\frac{2\sigma V_m}{rRT} \right] \quad (2.5)$$

Donde σ es la energía interfacial de la interfaz partícula/matriz y V_m es el volumen molar del precipitado. Con las ecuaciones 2.4 y 2.5 es posible obtener una expresión para el radio crítico donde la partícula no crece ni se disuelve ($v = 0$), Ec 2.6 [33].

$$r^* = \frac{2\sigma V_m}{RT} \ln \left[\frac{C_e}{\bar{C}} \right] \quad (2.6)$$

2.5.3 Distribución del tamaño de partículas

La distribución de tamaño de partícula se divide dentro de series de elementos de tamaño Δr . En el sentido matemático, estos elementos pueden ser tratados como volúmenes de control, de acuerdo con la definición y terminología de Pantakar [44]. Denotando J como el

flux de partículas, mientras N es la densidad del número de partículas dentro de Δr , un balance de materia da la Ec 2.7 [33].

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial r} + S \quad (2.7)$$

El término S describe la formación de las nuevas partículas a cada paso de tiempo. Esta expresión es análoga al problema de la difusión en estado no estacionario, donde el crecimiento o disolución puede ocurrir durante un pequeño incremento de tiempo, que puede ser considerado como un flujo de materia dentro o fuera de los elementos. Dentro del contexto de las transformaciones difusionales el término S es igual a la rapidez de nucleación [33].

El *flux* de partículas del elemento de volumen puede entonces ser considerado como [33]:

$$J = Nv \quad (2.8)$$

Donde v es la rapidez de disolución o crecimiento definida por la ecuación 2.4. Sustituyendo la ecuación 2.8 en la 2.7 se obtiene la Ec. 2.9 [33].

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{\partial(Nv)}{\partial r} + S \quad (2.9)$$

La Ec. 2.9 es la ecuación de continuidad del soluto absorbido por el precipitado [33].

Si la distribución de tamaño de partícula es continua con respecto a la concentración promedio de soluto en la matriz se obtiene la concentración promedio (Ec. 2.10) [33].

$$\bar{C} = C_0 - (C_p - \bar{C}) \int_0^{\infty} \frac{4}{3} \pi r^3 \varphi dr \quad (2.10)$$

Donde φ es la función de distribución de tamaño [33].

2.5.4 Discretización de las ecuaciones

Si se divide la distribución de tamaño de partícula en pequeños intervalos $[r_i, r_{i+1}]$, la Ec. 2.10 puede escribirse como [33]:

$$\bar{C} = C_0 - (C_p - \bar{C}) \sum_i \frac{4}{3} \pi r_i^3 N_i \quad (11)$$

Donde $N_i = \varphi_i \Delta r_i$. De la Ec. 2.11 se obtiene la expresión de la fracción volumétrica de partículas (Ec. 2.12) [33].

$$f = \frac{C_0 - \bar{C}}{C_p - \bar{C}} = \sum_i \frac{4}{3} \pi r_i^3 N_i \quad (2.12)$$

$$\bar{C} = \frac{C_0 - C_p f}{1 - f} \quad (2.13)$$

En la ecuación 2.13 se observa claramente que conforme la fracción de volumen sea mayor, la concentración promedio en la matriz irá disminuyendo, lo cual es lógico ya que el soluto pasa de la matriz al precipitado [33].

Ignorando el término S de la ecuación 9 y resolviendo por el método de volumen finito [45] se obtiene la Ec. 2.14 [33].

$$\int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial N}{\partial t} dt dr = - \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial(Nv)}{\partial r} dr dt \quad (2.14)$$

La integral del lado izquierdo es:

$$\int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial N}{\partial t} dt dr = (N_p - N_p^0) \Delta r \quad (2.15)$$

Y la del lado derecho es:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial(Nv)}{\partial r} dr dt = ((Nv)_e - (Nv)_w) \Delta t \quad (2.16)$$

Ahora se tiene que considerar la dirección de la velocidad. Para eso se utiliza el esquema corriente arriba (*upwind scheme*) [45], suponiendo que las rapidezces están definidas en cada límite de los volúmenes de control se tienen los siguientes valores [33]:

$$(Nv)_e = N_p v_e \quad \text{con } v_e > 0 \quad (2.17a)$$

$$(Nv)_e = N_E v_e \quad \text{con } v_e < 0 \quad (2.17b)$$

$$(Nv)_w = N_p v_w \quad \text{con } v_w < 0 \quad (2.17c)$$

$$(Nv)_w = N_W v_w \quad \text{con } v_w > 0 \quad (2.17d)$$

Las ecuaciones discretizadas pueden ser representadas de la forma estándar:

$$a_p N_p = a_E N_E + a_W N_W + a_p^0 N_p^0 \quad (2.18)$$

Combinando las ecuaciones 2.14 a 2.18 se obtienen los coeficientes, que dependen del valor de las rapidezces [33].

A continuación, se presenta un ejemplo de cómo se obtienen dichos coeficientes con $v_e > 0$ y $v_w < 0$.

Con los valores de las rapidezces se tiene de las ecuaciones 2.17a y 2.17c el valor de $(Nv)_e$ y $(Nv)_w$ que se introducen a la ecuación 2.16, para posteriormente igualar las ecuaciones 2.14, 2.15 y 2.16, obteniendo:

$$(N_p - N_p^0)\Delta r = (N_p v_e - N_p v_w)\Delta t \quad (2.19)$$

Si la Ec. 2.19 se re-arregla de la forma estándar

$$\left(\frac{\Delta r}{\Delta t} - v_e + v_w\right)N_p = \frac{\Delta r}{\Delta t}N_p^0 \quad (2.20)$$

Comparando con la ecuación 2.18, se obtiene la forma de los coeficientes:

$$a_p = \frac{\Delta r}{\Delta t} - v_e + v_w \quad (2.21)$$

$$a_E = 0 \quad (2.22)$$

$$a_W = 0 \quad (2.23)$$

$$a_p^0 = \frac{\Delta r}{\Delta t} \quad (2.24)$$

Seguindo este método con las otras tres combinaciones posibles se produce la Tabla 2.3

Tabla 2.3. Valores de los coeficientes en la ecuación 2.18 [33].

	$v_e > 0$ y $v_w > 0$	$v_e > 0$ y $v_w < 0$	$v_e < 0$ y $v_w > 0$	$v_e < 0$ y $v_w < 0$
a_E	0	0	$-v_e$	$-v_e$
a_W	v_w	0	v_w	0
a_p^0	$\Delta r/\Delta t$	$\Delta r/\Delta t$	$\Delta r/\Delta t$	$\Delta r/\Delta t$
a_p	$(\Delta r/\Delta t) + v_e$	$(\Delta r/\Delta t) + v_e - v_w$	$\Delta r/\Delta t$	$(\Delta r/\Delta t) - v_w$

Posteriormente, Myhr publicó otro artículo [37] en donde utilizando su trabajo anterior [33], desarrolló un modelo de dureza que se detalla a continuación.

2.6 Modelo matemático determinístico de Myhr para evaluar el aumento del límite elástico debido al endurecimiento por precipitación

En aleaciones reales, diferentes mecanismos de endurecimiento funcionan a temperatura ambiente [46]. Para las aleaciones de aluminio endurecidas por envejecimiento, las siguientes contribuciones son importantes: el endurecimiento por precipitación debido al cizallamiento y obstaculización de la dislocación por las partículas y los efectos de endurecimiento por solución sólida [29,30,47,48].

2.6.1 Contribución al límite elástico de los precipitados

Se supone a los precipitados como partículas esféricas monodispersadas, lo que implica que las ecuaciones constituyentes se pueden derivar de los principios de las soluciones analíticas clásicas para la interacción dislocación-partícula. Se establece que la suposición de partículas esféricas no es crítica en el resultado del análisis; en su artículo [37] Myhr establece que bajo un tratamiento más riguroso considerando la forma de barra, los resultados conducen a un resultado similar. Sea \bar{F} la resistencia media del obstáculo y σ_p el aumento del límite elástico resultante, de acuerdo con Deschamps y Brechet [30] la relación entre \bar{F} y σ_p se da como [37]:

$$\sigma_p = \frac{M\bar{F}}{bl} \quad (2.25)$$

Donde M es el factor de Taylor, b es la magnitud del vector de Burgers y l es el espaciado efectivo medio de partículas en el plano de deslizamiento. Además, si l se expresa en términos del tamaño medio de partícula \bar{r} y la fracción de volumen f , usando el formalismo de Friedel [49], la Ec. 2.25 se convierte en [37]:

$$\sigma_p = \frac{M}{b\bar{r}} (2\beta G b^2)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{3f}{2\pi}\right)^{1/2} \bar{F}^{3/2} \quad (2.26)$$

Donde G es el módulo de corte de la matriz de aluminio y β es una constante cercana a 0.5. En el caso general, donde la aleación contiene una mezcla de partículas débiles (cortables) y partículas fuertes (no cortables), la resistencia media al obstáculo se define convenientemente como [37]:

$$\bar{F} = \frac{\sum_i N_i F_i}{\sum_i N_i} \quad (2.27)$$

Donde N_i es la densidad numérica de partículas que pertenece a un tamaño de radio dado r_i , y F_i es la resistencia al obstáculo correspondiente [37].

El parámetro F_i , en la práctica, es una función del radio de partícula r_i , donde una buena aproximación para partículas cortables (débiles) es suponer que F_i es proporcional al radio de partícula siempre que r sea menor que el radio crítico para el cizallamiento r_c [30,50]

$$r_i \leq r_c$$

$$\bar{F}_i = 2\beta G b^2 \left(\frac{r_i}{r_c} \right) \quad (2.28)$$

Mientras que para partículas no cortables (fuertes) se puede suponer una independencia de r

$$r_i > r_c$$

$$\bar{F}_i = 2\beta G b^2 \quad (2.29)$$

En el caso límite donde la aleación contiene una distribución uniforme de partículas cortables o no cortables, las ecuaciones 2.26 a 2.29 producen resultados que están en buen acuerdo con los modelos clásicos de Friedel [49] y Kocks [51,52], respectivamente. Esto muestra que las suposiciones para derivar las relaciones de endurecimiento son físicamente razonables y, por lo tanto, aceptables en el contexto del modelo que se está desarrollando [37].

2.6.2 Contribución al límite elástico por solución sólida

En el endurecimiento por envejecimiento, los elementos de aleaciones de aluminio como Mg, Si y Cu dan lugar a un considerable fortalecimiento de la solución sólida. Siempre que la contribución de cada elemento sea aditiva, el aumento del límite elástico debido a la solución sólida de la aleación σ_{ss} puede expresarse como [50,53]:

$$\sigma_{ss} = \sum_j k_j C_j^{2/3} \quad (2.30)$$

Donde C_j es la concentración de un elemento de aleación específico en solución sólida y k_j es el factor de escala correspondiente.

2.6.3 Dureza global y límite elástico

En aleaciones donde varios mecanismos de endurecimiento están presentes a temperatura ambiente, es razonable suponer que las contribuciones de resistencia individuales se pueden agregar linealmente. Por lo tanto, tomando σ_i igual al límite elástico intrínseco del aluminio puro, la expresión resultante para el límite elástico macroscópico global σ_y se convierte en:

$$\sigma_y = \sigma_i + \sigma_{ss} + \sigma_p \quad (2.31)$$

La conversión de límite elástico (en MPa) a dureza HV (en VPN) se puede realizar por medio de la Ec. 2.32 [54], que se ha aplicado al endurecimiento por precipitación de aleaciones Al-Mg-Si y se ha validado para un amplio rango de composiciones, entre ellas la de la aleación 6061.

$$HV = 0.33\sigma_y + 16.0 \quad (2.32)$$

3. Metodología

3.1 Experimental

Los datos para el modelo matemático empírico se obtuvieron del trabajo realizado por Hernández [55]; se revisó su trabajo y en algunos casos se repitieron algunas pruebas experimentales, por lo que el modelo empírico es una extensión del trabajo experimental realizado por Hernández [55]. Enseguida se describen las probetas utilizadas, el equipo y la metodología.

Las muestras utilizadas fueron probetas de tamaño reducido (a escala 3:4 con respecto a la estándar, cuyas dimensiones son 101.6 mm de alto y diámetro de 25.4 mm) para ensayo Jominy como se muestra en la Figura 3.1, maquinadas con dos barrenos para embeber termopares tipo K de 1/16" de diámetro esquematizado en la Figura 3.2. Los termopares se conectaron a un adquisidor de datos de la marca *Data Translation* modelo DT 98 28 controlado con el *software QuickDAQ* que se ejecuta en una computadora, con una frecuencia de adquisición de datos de 15 Hz.

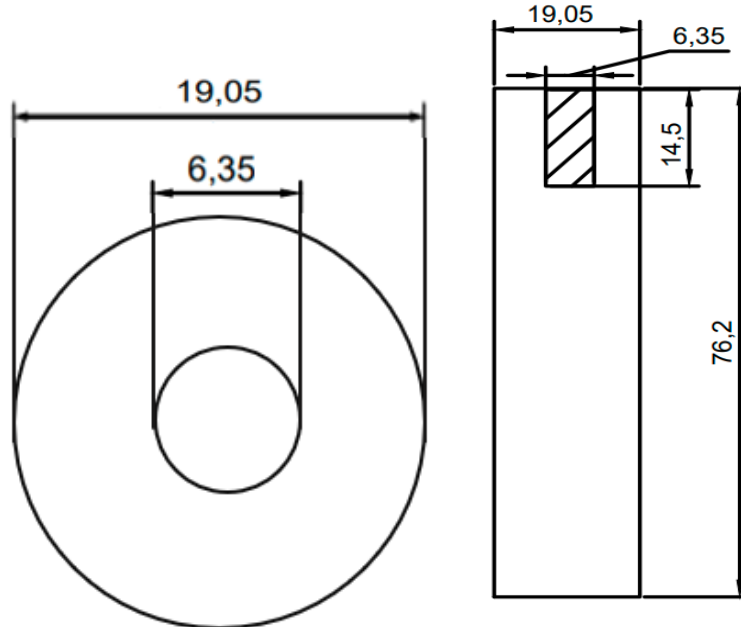


Figura 3.1. Esquema de las probetas Jominy de tamaño reducido utilizadas. Vista superior (izquierda) y vista frontal (derecha). Las cotas están en mm.

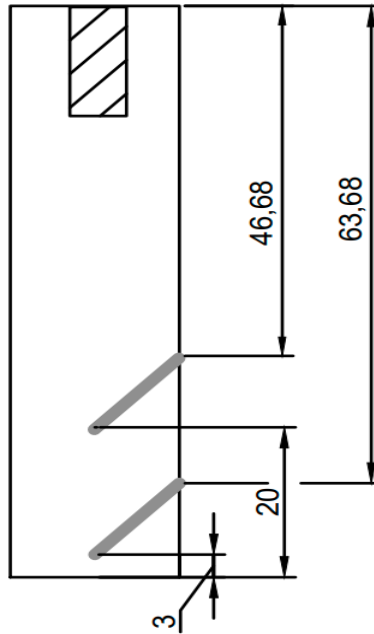


Figura 3.2. Esquema de las posiciones de los barrenos en las *probetas Jominy de tamaño reducido*. Los barrenos están a 45° sobre el lado redondo y son de 1/16" de diámetro. Las cotas están en mm.

El dispositivo utilizado para realizar los experimentos, que se muestra en la Figura 3.3, consiste en una estructura metálica en arreglo rectangular, en la cual se coloca un contenedor de acrílico que tiene una tubería de PVC en forma de "L" que produce la columna de agua. La tubería se conecta a un medidor de flujo (rotámetro de marca Blue White con capacidad de hasta 5 GPM) alimentada por una bomba sumergible dentro de un tanque colocado en la parte exterior de la estructura. Además de esta tubería en forma de "L", se tiene otra bomba que permite sacar el exceso de agua del tanque de acrílico al tanque exterior. Para poder ajustar la distancia entre la parte superior de la tubería "L" y la base de la probeta, se tiene una plataforma deslizante sujeta a una cuerda con manivela, localizada en la parte superior de la estructura.

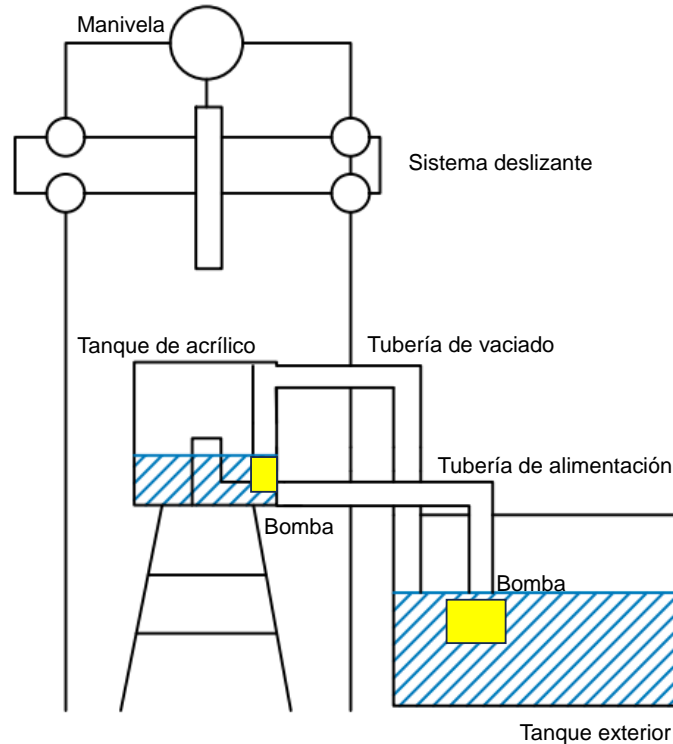


Figura 3.3. Esquema del dispositivo para realizar ensayos Jominy.

Se trabajó con una barra de aleación comercial AA6061, que se maquinó de acuerdo con las Figuras 3.1 y 3.2. Antes de comenzar los experimentos, las piezas de llegada se sometieron a un tratamiento T0, para eliminar el tratamiento térmico previo (posiblemente T6). El tratamiento T0 se realizó calentando las piezas durante 1 hora a 450 °C dejándolas luego enfriar por 90 minutos dentro de la mufla apagada. Para verificar la condición de las probetas después del tratamiento T0 (que la dureza fuera cercana a la condición de colada y que fuera homogénea en toda la pieza), se realizaron ensayos de dureza Brinell en un durómetro marca *Time*, modelo THB-3000E, con una carga de 125 Kg_f, por un tiempo de 20 segundos y un indentador de bola de acero de 5 mm de diámetro.

Después de la medición de dureza, cada probeta instrumentada con termopares se montó en una guía de acero inoxidable sujeta al sistema deslizante, para posteriormente calentarla en un horno de resistencias eléctricas tipo libro, hasta alcanzar una temperatura de 530 °C (con un rango de error de ± 5 °C). Luego se mantuvo a esa temperatura por 2 horas, para posteriormente realizar el temple. Un corto tiempo antes de realizar el temple (2-3 minutos) se inició la grabación con el *software QuickDAQ* para poder registrar la historia térmica en las posiciones en donde se localizaban los termopares; esta información se usó posteriormente para calcular la historia de la rapidez de enfriamiento. El temple se realizó

abriendo el horno y retirándolo, bajando rápidamente el sistema deslizante hasta la posición de temple (previamente calibrada de acuerdo con la norma ASTM A255). En cuanto la probeta llegaba a esta posición, se retiraba rápidamente la placa de acero que cubría a la columna de agua para permitir el contacto de la columna de agua con la base de la probeta. Al pasar el tiempo requerido de temple (10 minutos) se detuvo la función de grabar y en mismo *software* se exportaron los datos de las historias térmicas a una hoja de Excel.

El envejecimiento se realizó 3 horas después del temple. En ese tiempo se medía el perfil de durezas resultante del temple. La primera medición se tomó a 3 mm de la base templada (que es la posición del termopar más cercano a la base); entre cada medición se dejó una distancia de 4/16". Después de medir el perfil de dureza, cada superficie se desbastó con lija de SiC para eliminar las huellas del indentador con lo que se podía volver a medir la dureza en esas posiciones.

Para el envejecimiento, cada probeta se montó nuevamente en el sistema y se calentó a una temperatura de 200 °C (± 5 °C). Al momento de alcanzar esa temperatura se mantuvo la probeta durante el periodo de tiempo establecido (30, 60, 120 y 240 min); posteriormente se dejó enfriar la probeta al aire durante 15-20 minutos y se midió el perfil de dureza después del tratamiento de envejecido.

3.2 Computacional

Para poder introducir la información de la rapidez de enfriamiento durante el temple al modelo empírico, primero se tuvo que realizar un modelo térmico para conocer la historia térmica durante el temple en toda la probeta, para así poder relacionar la rapidez de enfriamiento local durante el temple con la dureza local. El procedimiento para obtener las curvas de enfriamiento y la rapidez de enfriamiento durante el temple se explica a continuación.

3.2.1 Modelo térmico

Debido a que solo se conocía el perfil de temperatura en dos puntos (donde se localiza la punta caliente de los termopares, ver Figura 3.2), se desarrolló un modelo matemático térmico, que permite calcular la evolución del perfil de temperatura y, a partir de esta información, la rapidez de enfriamiento. Se tomaron los datos de respuesta térmica en la

posición del termopar cercano a la base templada como una de las condiciones a la frontera y se validaron los resultados con los datos del segundo termopar.

El modelo matemático térmico consideró flujo de calor en 2D, por conducción, en estado no estacionario, sin generación en coordenadas cilíndricas. Considerando las propiedades físicas constantes (cuyos valores se tomaron de la literatura [56]), la ecuación gobernante es la Ec. 3.1.

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.1)$$

Para la superficie de la base templada se consideró la siguiente condición de frontera:

$$T_{nz} = \text{Temperatura conocida (dada por el termopar cercano a la base)}$$

Para la superficie envolvente ($r = \text{radio de cilindro}$) y la superficie superior ($z = 0$) se consideraron 3 diferentes combinaciones de condiciones de frontera:

1. Superficie aislada $\left(\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \text{ y } \frac{\partial T}{\partial z} = 0 \right)$
2. Transferencia de calor por convección, con coeficiente de transferencia de calor por convección constante (se tomó el valor de convección natural en aire quieto a 25 °C, el cuál es de $25 \frac{W}{m^2 \cdot ^\circ C}$ [56])
3. La superficie superior aislada y la superficie envolvente con un coeficiente de convección constante $\left(\frac{\partial T}{\partial z} = 0 \text{ y } h_{c,r} = 25 \frac{W}{m^2 \cdot ^\circ C} \right)$

Al probar estas diferentes combinaciones de condiciones de frontera se observó que la diferencia entre los resultados era muy pequeña, razón por la que se decidió realizar todas las simulaciones con la condición de aislamiento tanto en la superficie lateral como en la tapa superior.

La condición inicial fue:

$$T_0 = 530 \text{ } ^\circ C$$

La ecuación gobernante (Ec 3.1) se resolvió por el método de diferencias finitas explícito para lo que se usaron 20 nodos en la dirección z y 3 en la dirección r.

En la Figura 3.4 se muestra un dibujo esquemático de cómo se malló el cilindro para la solución numérica del modelo matemático térmico.

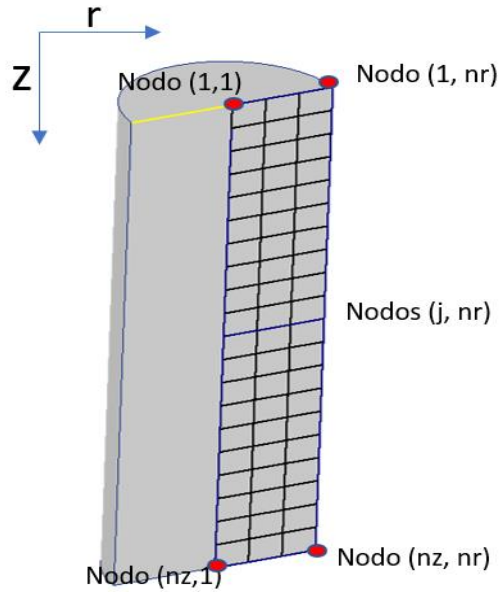


Figura 3.4. Esquema del modelo geométrico. Se consideró el origen en el centro de la superficie superior; los nodos en la dirección j (altura del cilindro) se numeraron del 1 hasta nz (20) y en la dirección i (radio del cilindro) de 1 hasta nr (3).

El paso de tiempo considerado fue de $\frac{1}{15}$ s, para coincidir con la frecuencia de la lectura de la temperatura de los termopares durante los experimentos.

Como los nodos no coincidían con la posición de las huellas de dureza, se aplicó una función de interpolación de la rapidez de enfriamiento para que se pudiera conocer esta rapidez de enfriamiento en las posiciones de la medición de la dureza.

3.2.2 Rapidez de enfriamiento

Con las curvas de enfriamiento locales obtenidas con el modelo térmico se procedió a calcular la rapidez de enfriamiento durante el temple a través de la Ec. 3.2.

$$\text{Rapidez de enfriamiento} = \frac{\Delta T}{\Delta t} = \frac{(T_2 - T_1)}{(t_2 - t_1)} \quad (3.2)$$

Δt es un valor constante, debido a que es el paso de tiempo correspondiente a la frecuencia de la lectura de la temperatura de los termopares.

Posteriormente se graficaron estos valores de la rapidez de enfriamiento local en función del tiempo y se obtuvo la rapidez de enfriamiento máxima de ese nodo.

3.2.3 Modelo empírico

Con los datos experimentales (rapidez de enfriamiento durante el temple y perfil de durezas después del temple y del envejecido) se realizó un modelo empírico que consistió en definir una función que describa la dureza después del envejecimiento con dos variables independientes: la rapidez de enfriamiento local y el tiempo de envejecimiento (dado que la temperatura de solubilización y la temperatura de envejecimiento se mantuvieron constantes).

Posteriormente se graficó la dureza después del tratamiento de envejecimiento en función de la rapidez de enfriamiento durante el temple. Como se trata de un modelo empírico, se probaron diferentes escalas y tipos de gráfico, buscando el que tuviera el mejor ajuste. Después de realizar este tratamiento de datos, se generó una gráfica 3D teniendo como ejes la dureza, la rapidez de enfriamiento y el tiempo de envejecimiento, buscando una función que replique los datos experimentales.

3.2.4 Modificación del modelo determinístico

A la vez que se realizaban estos experimentos y el modelo empírico, se implementó el modelo de Myhr [37] en el *software Wolfram Mathematica*, para posteriormente buscar una manera de que este modelo considerará el efecto de la rapidez de enfriamiento durante el temple, para que se logrará conectar ambos modelos por medio de la rapidez de enfriamiento durante el temple. Los datos de dureza final de Hernández [55] se utilizaron para validar la modificación del modelo de Myhr.

Para poder obtener esta relación entre la rapidez de enfriamiento durante el temple y una variable del modelo de Myhr, se analizó cada una de estas variables y su sentido físico para escoger la que tuviera alguna relación con el efecto de la rapidez de enfriamiento durante el temple, siendo esta j_0 . Para relacionar esta variable con los datos del modelo empírico y con los datos experimentales, se realizaron una serie de simulaciones cambiando el valor de j_0 hasta encontrar la que mejor correspondiera a un valor de la rapidez de enfriamiento durante el temple.

En la Figura 3.5 se muestra un diagrama de flujo del modelo matemático determinístico.

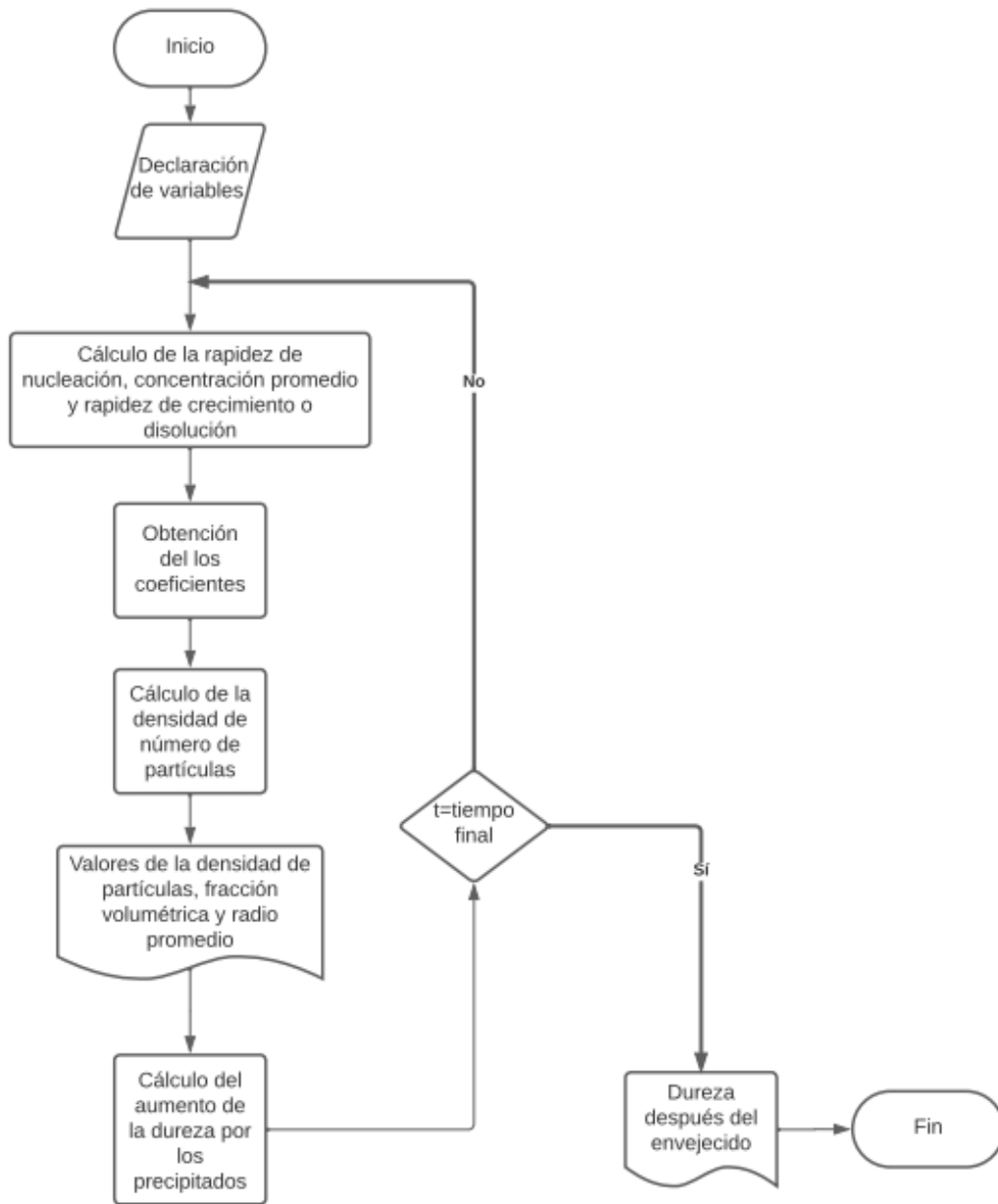


Figura 3.5 . Diagrama de flujo del modelo matemático determinístico reportado en la literatura [33,37].

4. Resultados y discusión

Utilizando los datos obtenidos por Hernández [55], se desarrolló el modelo empírico a la par que se modificaba el modelo matemático determinístico publicado por Myhr; cuando se terminaron ambos modelos se buscó algún parámetro que lograría conectarlos. Como se mencionó en la metodología, los datos experimentales pertenecen al trabajo realizado por Hernández; sin embargo, se realizaron pruebas adicionales, utilizando las mismas condiciones, para descartar algún error experimental.

4.1 Modelo empírico

Como se estableció en la metodología, se desarrolló un modelo térmico determinístico que permite calcular la evolución de la temperatura en toda la probeta utilizando las curvas de enfriamiento registradas con los termopares. Se utilizó la curva de enfriamiento del que está cercano a la base templada como condición de frontera y la otra curva para validar el modelo. Para el segundo caso la punta de este termopar se localiza a 20 mm de la base templada, por lo que se buscó el nodo más cercano a dicho valor, siendo el nodo 16, localizado a 18.41 mm con respecto a la superficie templada. En la Figura 4.1 se muestran las curvas de enfriamiento medidas y calculadas con el modelo térmico.

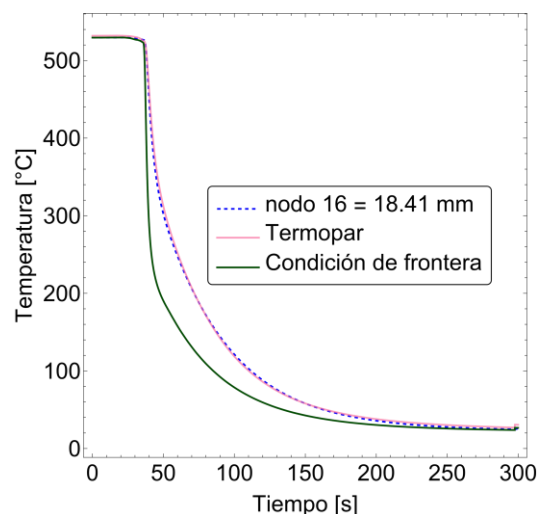


Figura 4.1. Curvas de enfriamiento durante el temple desde 530 °C: calculada a 18.41 mm de la base templada (guiones azules), medida a 20 mm de la base templada (línea sólida rosa) y medida cercana a la base templada para usarse como condición a la frontera (línea sólida verde).

Se observa que los resultados obtenidos con el modelo térmico y los datos medidos con el termopar no presentan una diferencia significativa, por lo que el modelo térmico es capaz de representar el enfriamiento en toda la probeta como se presenta en la Figura 4.2 donde se muestran las curvas de enfriamiento locales de algunos nodos.

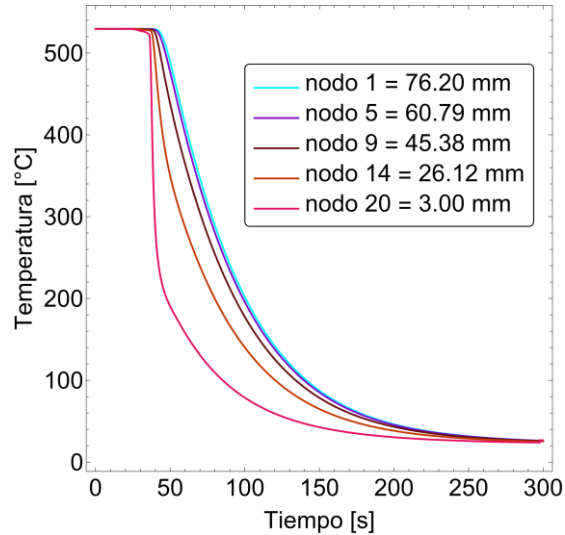


Figura 4.2. Curvas de enfriamiento local (calculadas) durante el temple desde 530 °C en cinco nodos.

Teniendo las curvas de enfriamiento local (Figura 4.2), se calculó la rapidez de enfriamiento de estas curvas obteniendo las curvas de rapidez de enfriamiento locales durante el temple en función del tiempo que se presentan en la Figura 4.3.

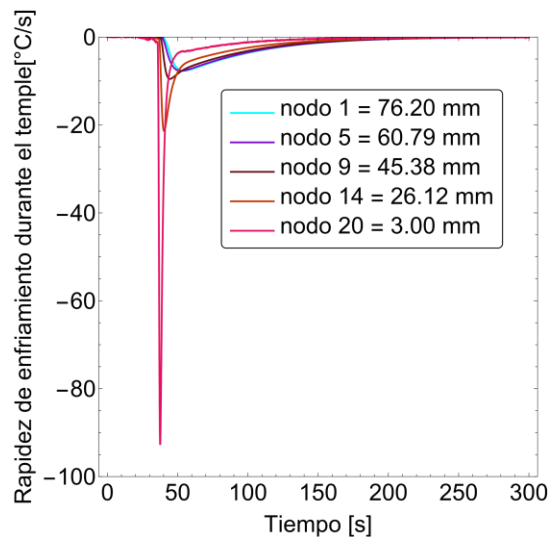


Figura 4.3. Curvas de rapidez de enfriamiento local durante el temple desde 530 °C en función del tiempo en cinco nodos.

Como la temperatura está relacionada con el tiempo, es posible realizar una gráfica similar a la de la Figura 4.3 cambiando el tiempo por la temperatura como variable independiente; esta curva se muestra en la Figura 4.4.

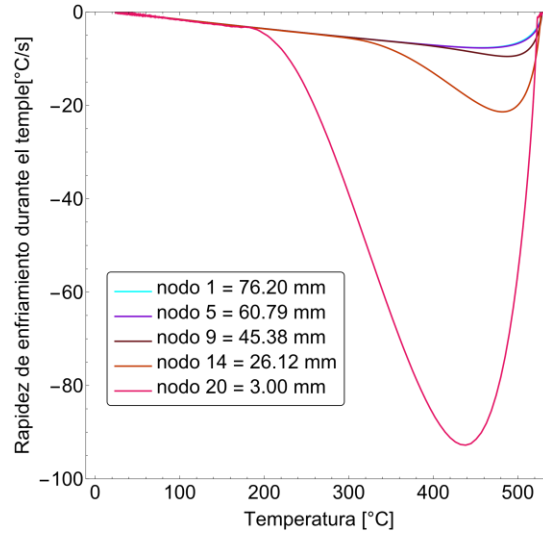


Figura 4.4. Curvas de rapidez de enfriamiento local en función de la temperatura local en cinco nodos.

Como se observa en las Figuras 4.3 y 4.4 hay un máximo de la rapidez de enfriamiento local durante el temple; para obtener este valor se utilizó la función *Mínimo* de *Wolfram Mathematica* [57], la cual permite encontrar el valor mínimo de una serie de datos. Aplicando la función *Mínimo* a cada una de las curvas de la rapidez de enfriamiento local se obtuvo el valor más bajo de la rapidez de enfriamiento durante el temple de cada nodo; al ser negativo el valor de la rapidez de enfriamiento, el valor más bajo de la curva es la máxima rapidez de enfriamiento durante el temple. En la Figura 4.5 se muestran los valores de la rapidez de enfriamiento local máxima con respecto a la posición de cada nodo.

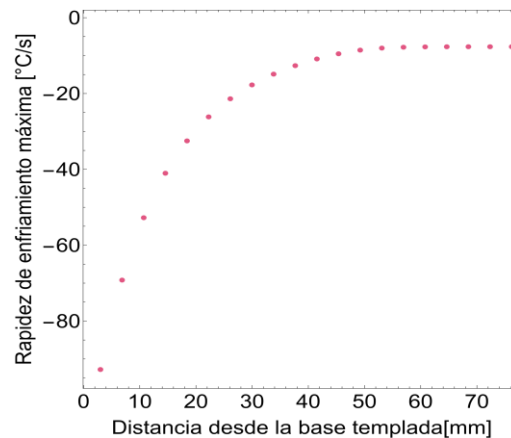


Figura 4.5. Rapidez de enfriamiento local máxima durante el temple en función de la posición.

A partir de la información mostrada de las Figuras 4.3 a 4.5, se puede notar que cerca de la superficie superior de la probeta la rapidez de enfriamiento máxima no varía mucho, lo que es un reflejo del enfriamiento al aire quieto de esa frontera, debido a que el coeficiente de transferencia de calor por convección del aire quieto es un valor mucho menor comparado con el valor del coeficiente en la superficie de temple debido a que el enfriamiento es con un flujo de agua (convección forzada) en esta frontera. La transferencia de calor por convección del aire quieto también ocurre en la superficie envolvente de la probeta; sin embargo, como se mencionó en la metodología, la diferencia entre los valores considerando esta transferencia y suponiendo una superficie aislada es baja. Al ser pequeño el valor de la transferencia de calor por convección del aire quieto, permite que en el ensayo Jominy se obtengan perfiles térmicos unidimensionales a pesar de que realmente existe un flujo de energía 2D.

Teniendo estos valores de las rapidezces de enfriamiento durante el temple, se utilizó una función de interpolación en *Wolfram Mathematica* [58] para obtener la rapidez de enfriamiento máxima en las posiciones de las mediciones de dureza.

En las Figuras 4.6 y 4.7 se muestran los perfiles de dureza después del tratamiento T0, después del temple y después del envejecimiento para dos valores de tiempo de envejecimiento (30 y 120 min). Como el tratamiento T0 solo tiene la finalidad de eliminar el tratamiento térmico previo, se tomaron solamente tres mediciones (en los extremos y el centro de la probeta). Es importante mencionar que al analizar los datos reportados por Hernández [55] se observó que la dureza después del temple de las probetas sometidas a envejecimiento por 30 minutos mostraban una diferencia con respecto a las otras condiciones de procesamiento después del temple. Esta diferencia no debería de existir, debido a que las probetas se trataron bajo la mismas condiciones (flujo de agua, dispositivo, horno utilizado), por lo que se tuvieron que repetir estos experimentos, obteniendo en esta repetición durezas después del temple consistentes con las otras condiciones experimentales. Cabe mencionar que al tomar las durezas después del envejecido de las probetas sometidas a envejecimiento por 30 minutos se obtuvieron los mismos resultados reportados por Hernández [55].

Para las barras de error de las mediciones de dureza se consideró la desviación estándar después del temple, debido a que el valor de dureza en la misma posición debe de ser igual para cada probeta, ya que se realizó el mismo tratamiento en el mismo dispositivo, la diferencia entre los valores de dureza se debe a los errores en la medición de dureza y en

las pequeñas diferencias que pudo haber al bajar la probeta desde el horno a la posición de temple. Otra opción contemplada era utilizar los valores reportados en la literatura [59,60], pero era una barra de error bastante grande (± 4 HB). Los valores promedio de la dureza en cada posición después del temple y su desviación estándar se muestran en la Tabla 4.1

Tabla 4.1. Valores promedio en cada posición de la medición de dureza y su desviación estándar.

Distancia desde la base templada [mm]	Dureza promedio [HB]	Desviación estándar [HB]
3	52.65	1.39
9.35	51.79	1.71
15.7	50.29	1.95
22.05	49.09	1.60
28.4	48.21	1.81
34.75	47.43	1.64
41.1	45.92	1.34
47.45	44.88	1.29
53.8	43.86	0.80
60.15	43.19	1.20
66.5	42.01	0.81

La barra de error elegida para todas las pruebas experimentales es de ± 2 , ya que el valor más alto de desviación estándar fue de 1.95, que es menor al reportado en la literatura que es de ± 4 [59, 60].

En las Figuras 4.6 y 4.7 se grafican los perfiles de dureza después del tratamiento T0, después del temple y después del envejecimiento artificial a 200 °C durante 30 y 120 minutos, respectivamente.

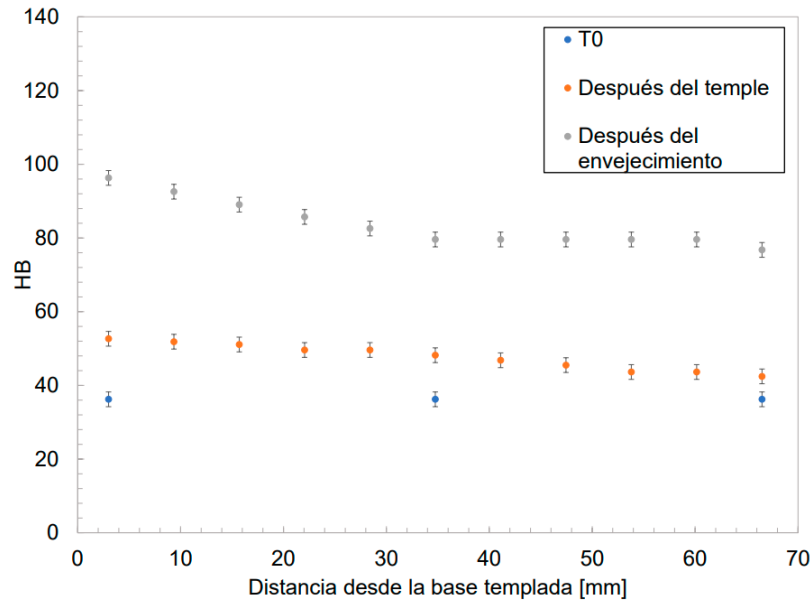


Figura 4.6. Perfil de dureza de una probeta después de T0 (círculos azules), después del temple (círculos naranjas) y después de envejecimiento artificial de 30 min (círculos grises).

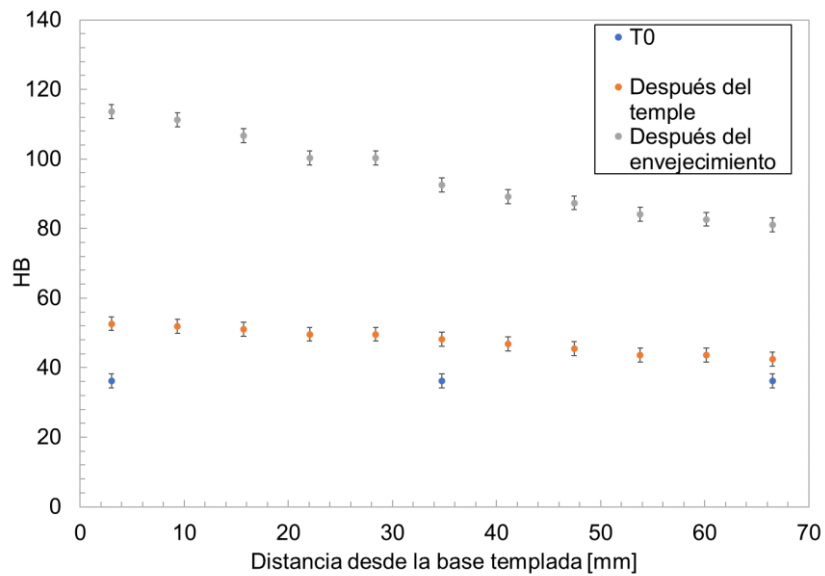


Figura 4.7. Perfil de dureza de una probeta después de T0 (círculos azules), después del temple (círculos naranjas) y después de envejecimiento artificial de 120 min (círculos grises) [55].

En las Figuras 4.6 y 4.7 se observa que el tratamiento T0 produce una dureza homogénea en la pieza. En los perfiles de dureza después del temple existe un pequeño cambio de la dureza conforme se aleja del extremo templado, lo que está relacionado con una menor rapidez de enfriamiento máxima durante el temple, como se ve en la Figura 4.5. Este efecto de una disminución de la dureza conforme aumenta la distancia desde el extremo templado

es más evidente en los perfiles de dureza después del tratamiento de envejecimiento. En la Figura 4.8 se observa con mayor claridad el efecto de la rapidez de enfriamiento durante el temple en la dureza obtenida después del envejecimiento. Así mismo, se observa como al alejarse de la base templada, la rapidez de enfriamiento máxima va disminuyendo. Después del envejecimiento se nota como esta disminución de la rapidez de enfriamiento produce una menor dureza al final del tratamiento. En la Figura 4.7 se muestran las durezas después del T0, que resultaron iguales en toda la probeta. Dado que esto asegura que la condición inicial era la misma, entonces, la única variable que cambió fue la rapidez de enfriamiento durante el temple, dando como resultado que a una menor rapidez de enfriamiento durante el temple la dureza disminuye. Este comportamiento ya lo habían notado otros autores [11,13,14,21]; sin embargo, hasta el momento no se ha intentado establecer un modelo matemático o empírico para predecir la dureza que tome en cuenta esta variable.

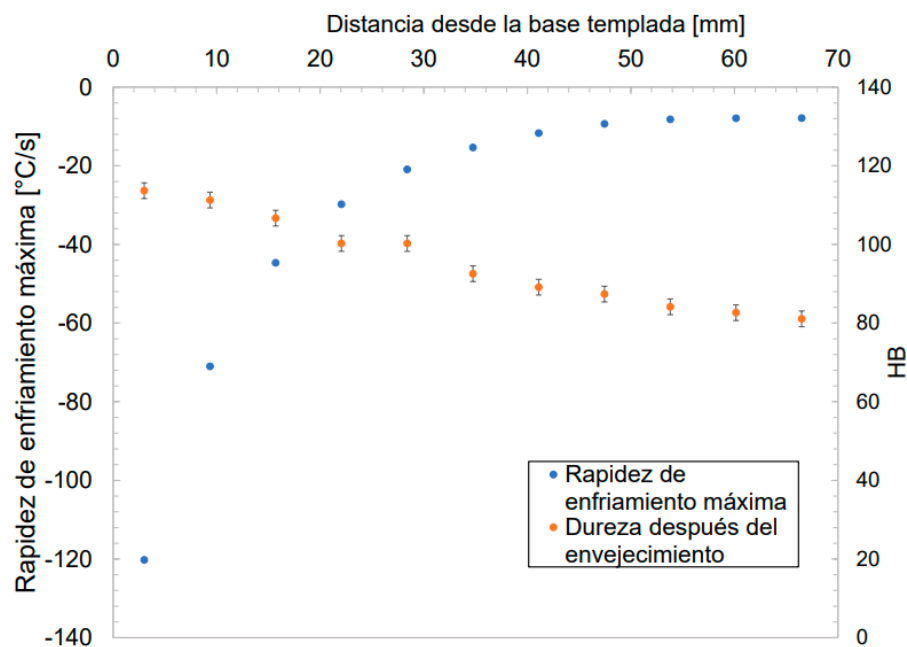


Figura 4.8. Perfil de dureza de una probeta después de envejecimiento artificial de 120 min (círculos naranjas) y la rapidez de enfriamiento máxima durante el temple (círculos azules).

Al tratarse de un modelo empírico, se necesitó realizar varios tipos de gráficos, cambios de escalas y tipo de regresión para tener una función que pudiera reproducir los datos experimentales. Para encontrar la mejor regresión se probaron varios tipos (lineal, logarítmica, exponencial, cuadrática, por mencionar algunos). A estos modelos también se

les cambió el valor del eje de las abscisas, es decir se probaron diferentes formas de usar el valor de la rapidez de enfriamiento (cuadrado, logaritmo, raíz cuadrada, inverso, etc.), obteniéndose que la mejor gráfica es la resultante de la dureza vs. rapidez de enfriamiento durante el temple modificada con un ajuste logarítmico. La rapidez de enfriamiento durante el temple modificada (REM) se obtiene como la rapidez de enfriamiento durante el temple (RE) menos el máximo valor de la rapidez de enfriamiento durante el temple en la superficie superior (MRES) de todos los experimentos más 1 (ver Ec. 4.1). De esta forma, las rapidezces de enfriamiento durante el temple modificadas calculadas en las posiciones cercanas a la superficie superior se aproximan al valor de 1.

$$REM = RE - MRES + 1 \quad (4.1)$$

Analizando la forma de la Figura 4.8 se sospechaba que el ajuste logarítmico era el más adecuado; sin embargo, el modelo aún no estaba concluido. Había funciones logarítmicas que se ajustaban a los datos experimentales, pero eran solo para los datos de un tiempo de envejecimiento, por lo que se procedió a analizar el parámetro faltante, es decir, el tiempo de envejecimiento.

Para analizar este parámetro se optó por realizar un corte a una misma rapidez de enfriamiento durante el temple modificada (REM), ya que se disponía de las ecuaciones del ajuste de la dureza con la REM, las cuales predicen la dureza a cualquier REM. Se escogieron algunas rapidezces de enfriamiento (10, 30, 60, 90 °C/s) y se graficaron estos valores de dureza contra el tiempo de envejecimiento. A pesar de que se realizó el mismo procedimiento de cambiar el tipo de ajuste y el valor del tiempo de envejecimiento (elevarlo al cuadrado, raíz cuadrada, logaritmo por mencionar algunos), no se logró obtener un ajuste tan bueno como el anterior, pero se consiguió encontrar algunos parámetros que ayudarían en el ajuste de la superficie en 3D.

Conociendo los ajustes realizados a dos cortes (tiempo de envejecimiento constante y rapidez de enfriamiento modificada constante), se procedió a realizar una gráfica 3D, con la rapidez y el tiempo como variables independientes y la dureza como variable dependiente. A esta superficie se le realizó un ajuste en *Wolfram Mathematica* mediante el comando *NonlinearModelFit* [61]. Como ya se conoce el mejor ajuste a un corte de esta superficie, se mezclaron y multiplicaron los ajustes anteriores para poder obtener los términos que se introdujeron al comando para obtener el modelo descrito por la Ec. 4.2.

$$HB = 88.84 - \frac{303.99}{\sqrt{x}} + 67.048 \ln[y] - \frac{19835.57 \ln[y]}{x} - 19.405 \sqrt{\ln[x]} \ln[y] \quad (4.2)$$

Donde:

$x = \text{Tiempo de envejecimiento [s]}$

$y = \text{Rapidez de enfriamiento durante el temple modificada } \left[\frac{^{\circ}\text{C}}{\text{s}} \right]$

La Ec. 4.2 se grafica en la Figura 4.9. En la figura se observa la forma clásica de las curvas de envejecimiento [21], por lo que el modelo descrito con la Ec. 4.2, es capaz de representar la mejora inicial y posterior disminución de la dureza causada por sobre-envejecimiento.

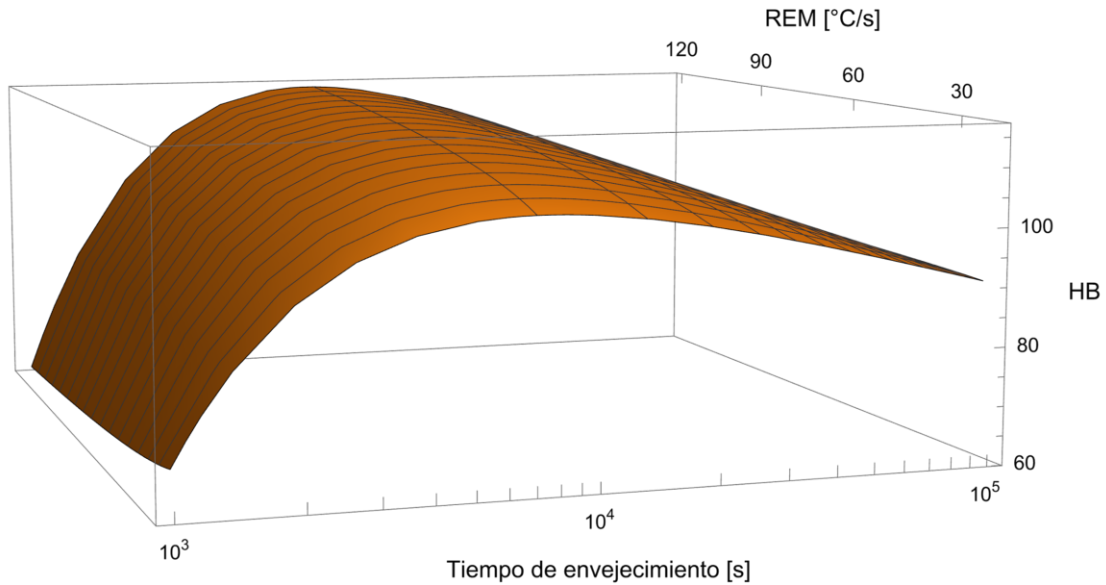


Figura 4.9. Dureza después del envejecimiento artificial en función de la rapidez de enfriamiento durante el temple modificada y el tiempo de envejecimiento.

Para validar este modelo se procedió a graficar los resultados experimentales y los valores obtenidos por el modelo empírico (Ec.4.2) a cada tiempo de envejecimiento. Las Figuras 4.10 a 4.13 muestran los resultados para 30, 60, 120 y 240 minutos de envejecimiento, respectivamente.

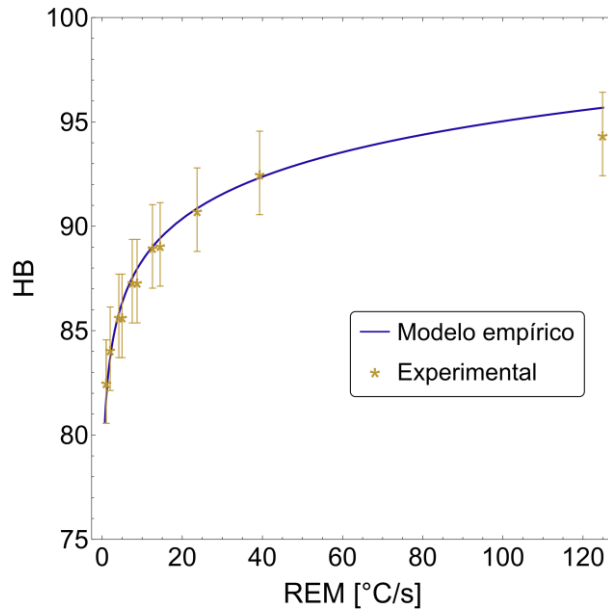


Figura 4.10. Dureza después del envejecimiento artificial durante 30 minutos en función de la rapidez de enfriamiento durante el temple modificada: medida experimentalmente (estrellas) y calculada con el modelo empírico (línea).

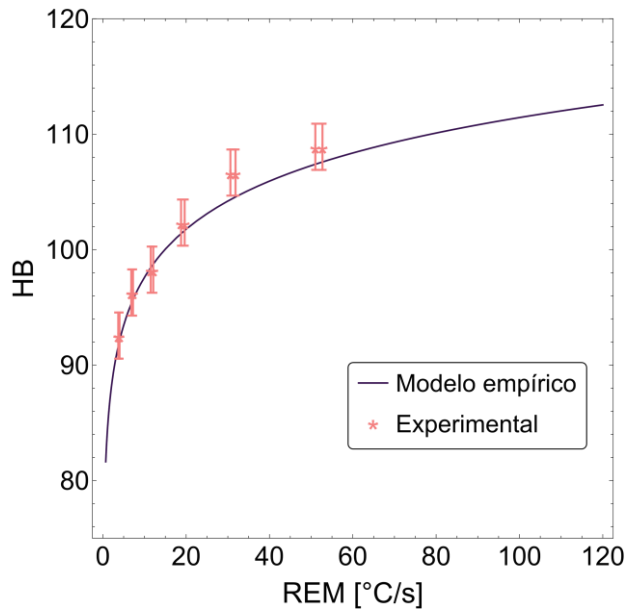


Figura 4.11. Dureza después del envejecimiento artificial durante 60 minutos en función de la rapidez de enfriamiento durante el temple modificada: medida experimentalmente (estrellas) y calculada con el modelo empírico (línea).

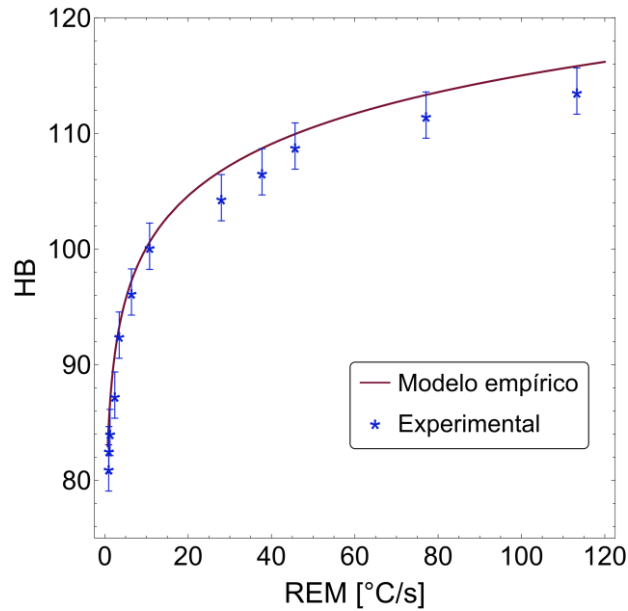


Figura 4.12. Dureza después del envejecimiento artificial durante 120 minutos en función de la rapidez de enfriamiento durante el temple modificada: medida experimentalmente (estrellas) y calculada con el modelo empírico (línea).

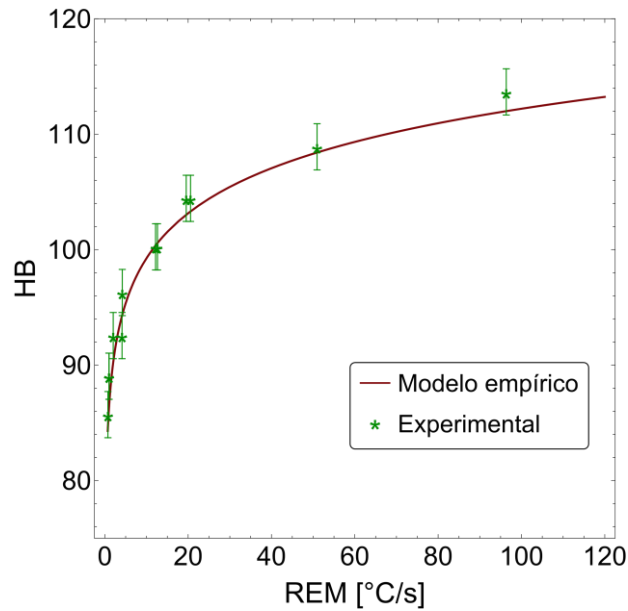


Figura 4.13. Dureza después del envejecimiento artificial durante 240 minutos en función de la rapidez de enfriamiento durante el temple modificada: medida experimentalmente (estrellas) y calculada con el modelo empírico (línea).

Como se puede observar en las Figuras 4.10 a 4.13, la diferencia entre la dureza predicha por el modelo y los valores experimentales es pequeña, quedando las predicciones dentro de la barra de error de la medición de dureza, coincidiendo con el valor preciso de algunos

puntos experimentales, por lo que este modelo es capaz de reproducir correctamente la dureza después del envejecimiento de la aleación AA6061 en función de la REM.

Para comparar mejor las predicciones del modelo empírico y los datos experimentales se calculó el error cuadrático medio (RMSE) que indica que tan dispersos están los datos con respecto a una regresión [62], en este caso, al modelo. Los resultados se muestran en la Tabla 4.2.

Tabla 4.2. Dureza después del tratamiento completo de envejecimiento artificial (predicha por el modelo matemático empírico, medida experimentalmente) y valor del RSEM para cuatro tiempos de proceso.

30 min			60 min			120 min			240 min		
Pred.	Exp.	RSEM	Pred.	Exp.	RSEM	Pred.	Exp.	RSEM	Pred.	Exp.	RSEM
95.7	94.4	1.3	107.6	108.9	1.3	115.8	113.7	2.2	112.0	113.7	1.7
92.3	92.6	0.2	107.4	108.9	1.5	113.3	111.6	1.7	108.4	108.9	0.5
90.9	90.8	0.1	104.6	106.7	2.1	110.0	108.9	1.0	103.3	104.4	1.1
89.4	89.1	0.3	104.3	106.7	2.4	108.7	106.7	2.0	103.0	104.4	1.4
89.0	89.0	0.0	101.7	102.3	0.7	106.8	104.4	2.3	100.6	100.2	0.3
88.0	87.4	0.6	101.4	102.3	1.0	100.6	100.2	0.4	100.4	100.2	0.1
87.5	87.4	0.2	98.8	98.3	0.5	97.2	96.3	1.0	94.4	96.3	1.9
86.3	85.7	0.6	98.5	98.3	0.2	93.2	92.6	0.7	94.3	92.6	1.7
85.8	85.7	0.1	95.7	96.3	0.6	90.9	87.4	3.5	90.2	92.6	2.3
83.7	84.1	0.4	95.3	96.3	1.0	86.8	84.1	2.6	86.5	89.0	2.6
81.8	82.6	0.7	92.1	92.6	0.5	85.1	82.6	2.5	86.2	89.0	2.8
81.7	82.6	0.9	91.6	92.6	0.9	84.8	81.1	3.7	84.7	85.7	1.1

El RSEM promedio del modelo empírico con respecto a todos los datos experimentales es de 1.6; analizando la Tabla 4.2 se observa que este valor es cercano a la desviación estándar de la medición de dureza después del temple. Para tener una mejor reproducibilidad en los experimentos y con esto poder obtener un mejor modelo empírico se requiere de una mejora del dispositivo que garantice que la bajada de la probeta sea igual en todos los ensayos ya que fue uno de los factores que fue más difícil de controlar durante la fase experimental. Con el valor de 1.6 de RSEM se puede afirmar que el modelo brinda una buena aproximación de la dureza después del envejecimiento, además de tener la ventaja de que puede ser fácilmente implementado en una hoja de cálculo de Excel.

4.2 Modelo matemático determinístico

4.2.1 Cálculo del número de densidad de partículas

Como se mencionó en la metodología, se reprodujo el modelo matemático determinístico microestructural, publicado por Myhr [33], para la aleación 6082. A pesar de no tratarse de la misma aleación diversos estudios presentados en la misma serie de aleaciones de aluminio (6XXX) han usado este modelo modificando los parámetros necesarios.

En la Sección 1.3.1 se describe detalladamente el modelo de Myhr [33]; el primer paso para predecir la dureza después del endurecimiento por precipitación es calcular el número de densidad de partículas, para poder introducirlo en el modelo de predicción de la dureza [37]. El modelo de Myhr [33] es un modelo de clases, por lo que habrá una distribución de los tamaños de partícula, recordando que el objetivo del endurecimiento por precipitación es obtener una distribución de finos precipitados que impidan el paso de las dislocaciones de forma eficiente. Al calcular la cantidad de partículas dentro de cada rango de tamaño de radio es posible predecir la dureza obtenida después del envejecido ya que, dependiendo del tamaño del precipitado y la cantidad de precipitados con ese tamaño, la dureza aumentará o disminuirá.

En la Figura 4.14 se presentan los resultados publicados por Myhr y los valores calculados en este proyecto. Para los cálculos de esa gráfica se usó un paso de tiempo de 10 segundos y un mallado de 500 nodos (equiespaciados). Como este modelo publicado por Myhr [33] ha sido verificado de forma experimental en el mismo artículo, solo se comparan los resultados de su simulación con los datos replicados en este proyecto para verificar si fue posible replicar su modelo de cálculo de densidad de partículas.

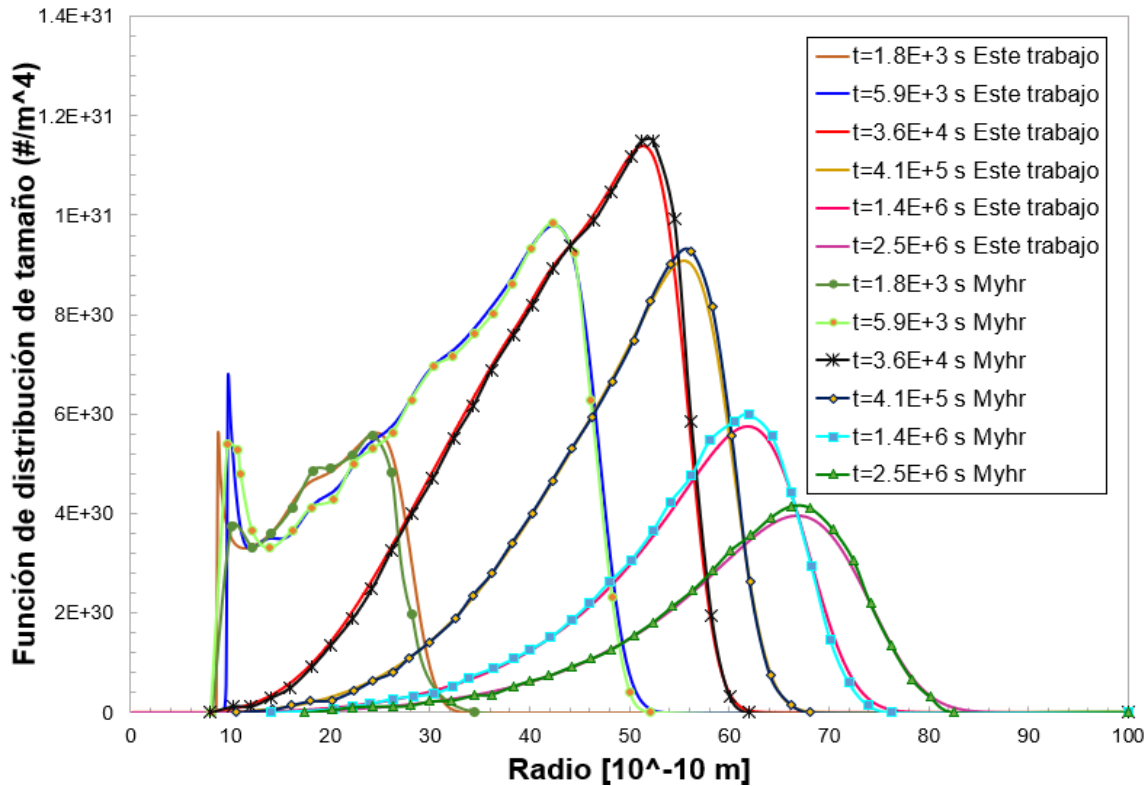


Figura 4.14. Función de distribución de tamaño en función del radio para distintos valores de tiempo de envejecimiento artificial: modelo de Myhr [33] (líneas sólidas y símbolos) y cálculos de este trabajo (líneas sólidas).

Se observa que los valores del modelo de Myhr y los cálculos de este trabajo, son muy similares. La forma y los valores están muy cercanos; solamente al inicio de la curva (para tiempos bajos) se presenta una diferencia notable, pero después la curva se acopla muy bien. La diferencia se debe a que las gráficas que presentaron los autores son solo algunos valores (las marcas de las gráficas) mientras los resultados calculados en este trabajo son continuos. Se puede decir que los cálculos de este trabajo replican muy bien los publicados por Myhr [33].

4.2.2 Análisis de independencia de malla

En su artículo Myhr [33], no presenta un análisis de independencia de malla, en este trabajo se desarrolló este análisis.

4.2.2.1 Número de nodos

A continuación, se presentan resultados de cómo afecta el número de nodos a la respuesta de la función de distribución de tamaño de partícula, utilizando un paso de tiempo de 10 segundos. Para observar mejor el comportamiento se decidió tomar tres zonas: el inicio de la curva, alrededor del máximo de la curva y la parte final de la curva. En todos los casos, el tiempo de simulación fue 7200 segundos. Se utilizaron seis diferentes valores del número de nodos (50, 100, 300, 500, 1000 y 1500).

En la Figura 4.15 se muestran los resultados para la zona de inicio de la curva. Se aprecia que con una menor cantidad de nodos (50, 100), la respuesta varía mucho, por ejemplo, cercano al valor de $1.7 \times 10^{-9} \text{ m}$ la función de distribución está cercana al valor de 4×10^{30} , mientras que con las otras cantidades de nodos están cercanas a 3.5×10^{30} , que es una notable diferencia. Con 1000 y 1500 nodos las curvas son similares, mientras que con un menor número de nodos (500 y 300) se nota ya una diferencia entre los valores de la función de distribución, esta diferencia es mayor con 300 nodos, en cuyo caso se observa que hay partes de esta curva que ya no coincide con las curvas con una mayor cantidad de nodos.

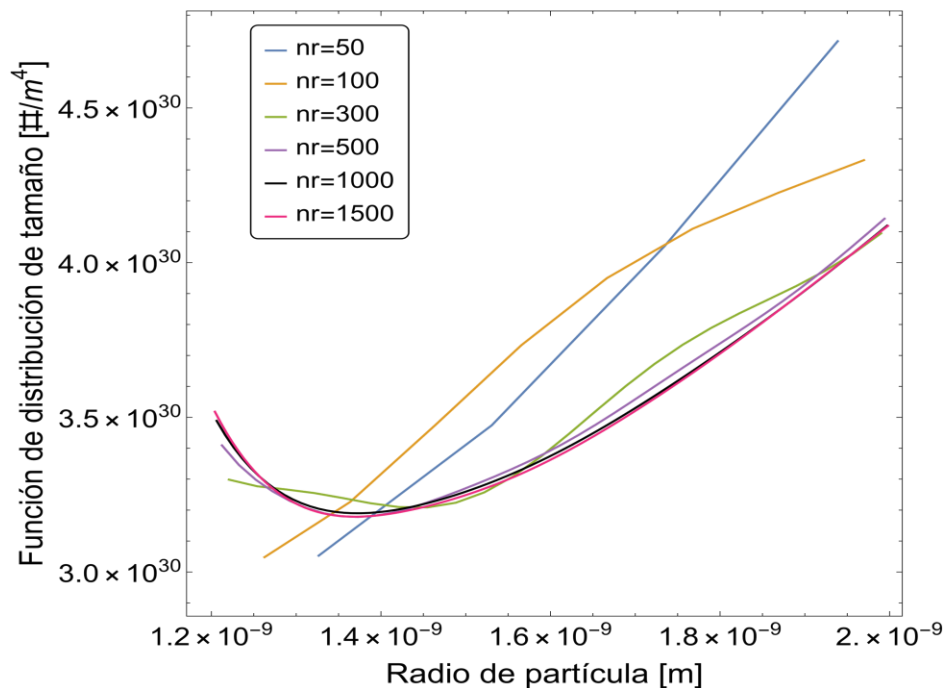


Figura 4.15. Función de distribución de tamaño en función del radio de partícula para diversos valores del número de nodos en la zona de inicio de la curva.

En la Figura 4.16 se grafican los valores en una región alrededor del máximo de la curva. Se observa que existe una mayor diferencia entre los valores de la función de distribución de tamaño con diferentes números de nodos. La diferencia entre la respuesta con 1000 nodos y la dada por 1500 se hace mayor, de la misma manera que con 500, que se separa más de los valores con mayor cantidad de nodos. Además de la diferencia en el valor de la función de distribución de tamaño, se aprecia otra gran diferencia, que es el radio en donde se encuentra el máximo. Con una menor cantidad de nodos, el máximo de la curva se encuentra a valores de radios de partícula menores; por lo tanto, a una menor cantidad de nodos el máximo de la curva se desplaza hacia abajo y a la izquierda.

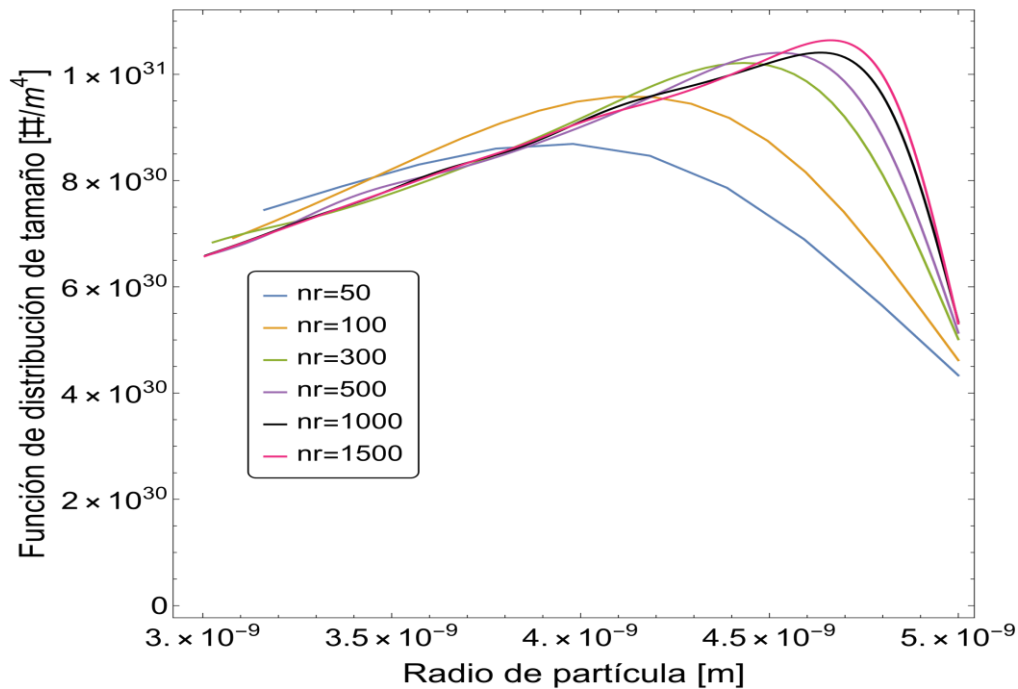


Figura 4.16. Función de distribución de tamaño en función del radio de partícula para diversos valores del número de nodos en la zona alrededor del máximo de la curva.

En la Figura 4.17 se muestran los resultados de la parte final de la curva. Se aprecia de nuevo una clara diferencia entre los valores de la función de distribución con el número de nodos. Aquí la otra diferencia importante es que, al contrario de como sucedió con el máximo de la Figura 4.16 (que se desplazaba hacia abajo y a la izquierda con un menor número de nodos) en esta gráfica una menor cantidad de nodos desplaza la curva hacia arriba y hacia la derecha, tendiendo a mayores valores de radio de partícula y valores de la función de distribución del orden de 10^{30} .

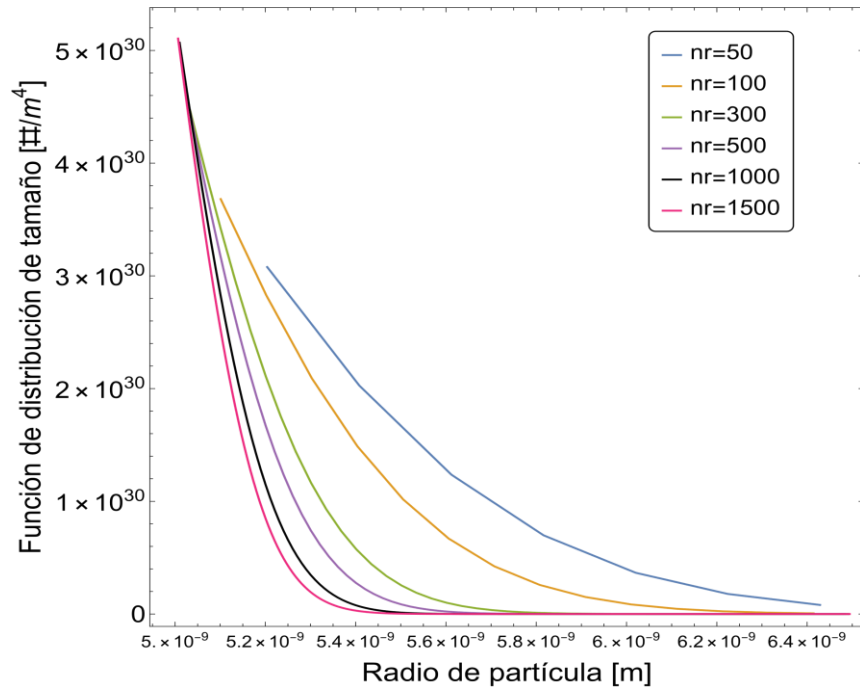


Figura 4.17. Función de distribución de tamaño en función del radio de partícula para diversos valores del número de nodos en la parte final de la curva.

4.2.2.2 Paso de tiempo

Para analizar el efecto del paso de cálculo se decidió realizar las simulaciones con 100 nodos; el tiempo final de simulación fue 7200 segundos. De igual forma, se tomaron tres zonas de la curva: inicio, máximo y final. Se consideraron ocho diferentes valores de paso de cálculo (1, 2, 5, 10, 20, 50, 100 y 200 s).

En la Figura 4.18 se muestran los resultados del efecto del paso de cálculo en la zona del inicio de la curva. La diferencia en los resultados entre 1 o 2 segundos es insignificante, mientras que para 5, 10 o 20 segundos de paso de cálculo sí se alcanza a observar una diferencia. A partir de un paso de cálculo de 50 segundos se observa una diferencia significativa entre los valores de la función de distribución de este paso con respecto a un paso de tiempo menor.

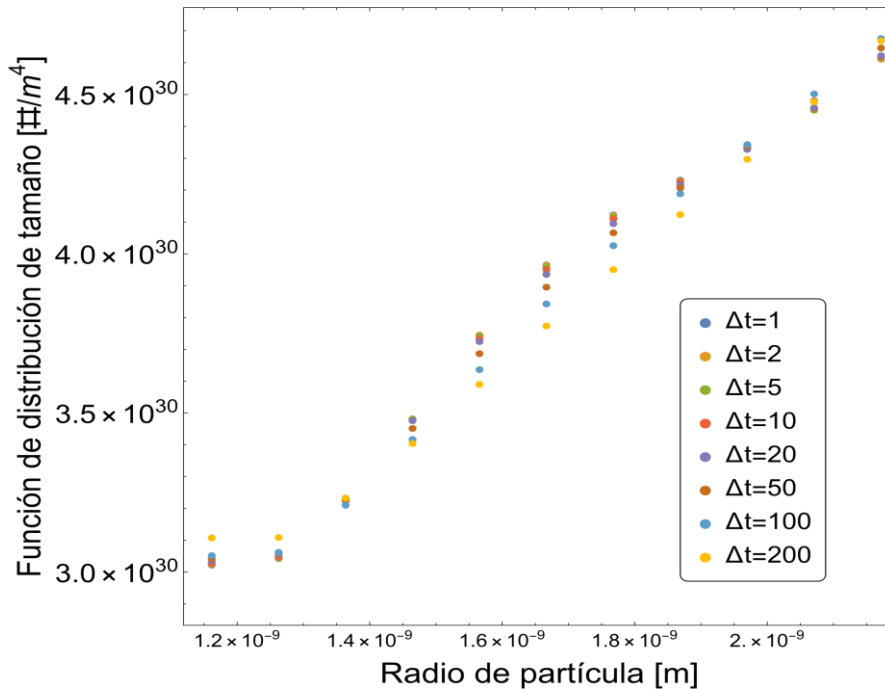


Figura 4.18. Función de distribución de tamaño en función del radio de partícula para diversos valores del paso de cálculo en la zona de inicio de la curva.

En la Figura 4.19 se graficaron los valores en la zona cercana al máximo de la curva. De igual forma que en la Figura 4.16, en el máximo de la curva las diferencias entre los valores de la función de distribución se hacen más notables. Se observa en la Figura 4.19 que la respuesta dada por el paso de cálculo de 5 y 10 segundos tiene una diferencia pequeña con respecto a la dada con 1 y 2 segundos. La diferencia de la respuesta dada por 20 segundos, que en la Figura 4.18 era imperceptible, con respecto a los pasos de cálculo más pequeños, en esta figura se hace notable. De igual forma para pasos de cálculo mayores a 50 segundos la diferencia se hace más grande, teniendo en el paso de tiempo de 200 segundos una diferencia de aproximadamente 1×10^{30} con respecto a la respuesta de un paso de tiempo pequeño (1 o 2 segundos). Otra importante diferencia en esta figura es que al igual que con la variación de número de nodos, un paso de cálculo grande desplaza al máximo de la curva hacia abajo y a la izquierda.

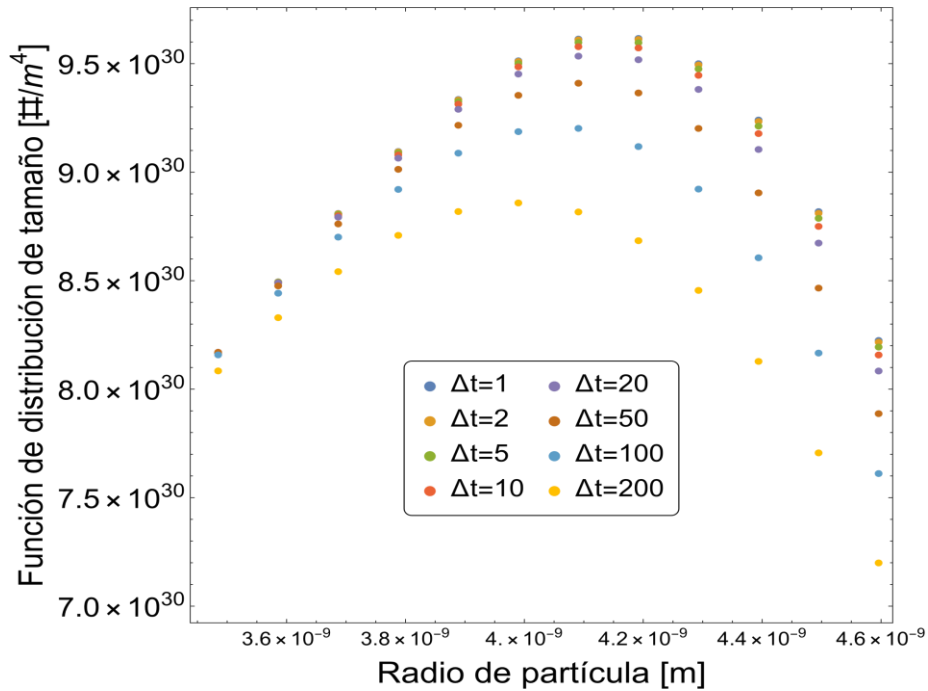


Figura 4.19. Función de distribución de tamaño en función del radio de partícula para diversos valores del paso de cálculo en la zona alrededor del máximo de la curva.

En la Figura 4.20 se presenta la respuesta en la parte final de la curva. Se aprecia una diferencia entre los valores similar a la presentada en la Figura 4.18. Lo notable de esta gráfica es que sigue manteniendo una tendencia similar a lo sucedido con el número de nodos, donde un paso de cálculo mayor desplaza la curva hacia arriba y a la derecha. Esto se puede notar en el valor de la función de distribución cercano a un radio de partícula de $5 \times 10^{-9} m$, donde las curvas se cruzan y las de pequeño paso de cálculo pasan a estar por debajo de las curvas con un paso de cálculo mayor.

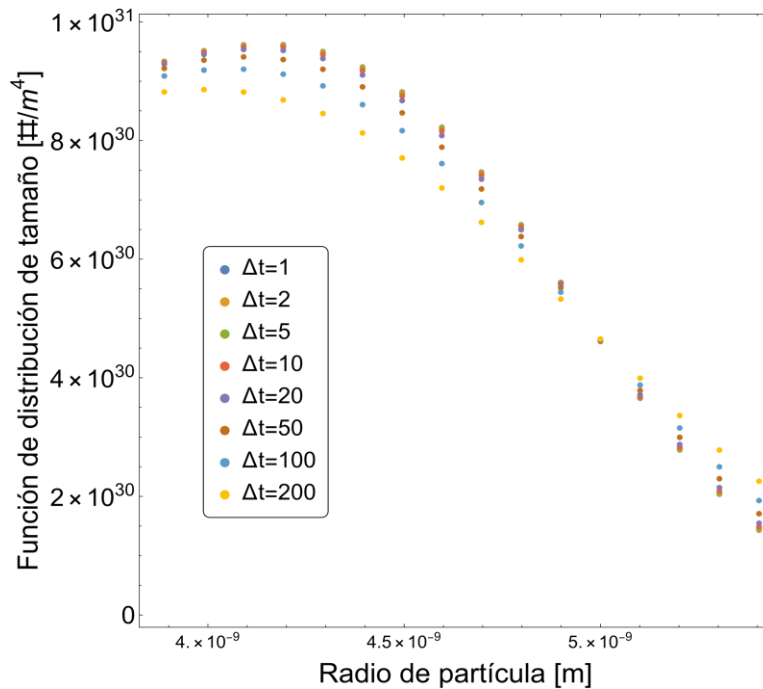


Figura 4.20. Función de distribución de tamaño en función del radio de partícula para diversos valores del paso de cálculo en la parte final de la curva.

En resumen, el número de nodos y el paso de cálculo adecuados para una correcta simulación son 500 nodos y 10 segundos, respectivamente.

4.3 Cálculo de la dureza

La dureza se calculó usando el modelo de dureza desarrollado por Myhr [37], con los valores que se muestran en la Tabla 4.3.

La comparación de los valores de este trabajo y el realizado por Myhr [37] se muestra en la Figura 4.21. Después de aproximadamente 2×10^4 s la diferencia entre los datos de Myhr [37] y los obtenidos en este trabajo aumenta. Sin embargo, la diferencia no es mucha; esto se puede deber a que en el trabajo de Myhr no se menciona explícitamente la cantidad de nodos y el paso de tiempo utilizado (para la simulación de este trabajo se realizó con 500 nodos y un paso de tiempo de 10). Como se mostró en el análisis de independencia de malla, si la cantidad de nodos difiere la respuesta cambia de manera considerable; esta variación va creciendo conforme se aumenta el tiempo de simulación, lo que brinda la respuesta de porque a tiempos cortos los resultados entre este trabajo y el presentado por Myhr no presentan una diferencia significativa.

Tabla 4.3. Valores utilizados por Myhr [37] para el modelo microestructural y de dureza.

Parámetro	Valor
$C_0^{Mg} (wt\%)$	0.82
$C_0^{Si} (wt\%)$	0.55
$C_0^{Cu} (wt\%)$	0.016
$C_p (wt\%)$	59
$D_0 (m^2/s)$	2.2×10^{-4}
$Q_d (KJ/mol)$	130
$\Delta H_0 (KJ/mol)$	95.9
$\Delta S_0 (KJ/mol K)$	112
$Q_s (KJ/mol)$	45.35
$A_0 (KJ/mol)$	18
$j_0 (\#/m^3 s)$	3.07×10^{36}
$V_m (m^3/mol)$	7.62×10^{-5}
$\gamma (J/m^2)$	0.26
$r_c (m)$	5×10^{-9}
M	3.1
β	0.36
$b (m)$	2.84×10^{-10}
$G (N/m^2)$	2.7×10^{10}
$\sigma_i (MPa)$	10
$k_{Si} (MPa/wt\%^{2/3})$	66.3
$k_{Mg} (MPa/wt\%^{2/3})$	29.0
$k_{Cu} (MPa/wt\%^{2/3})$	46.4

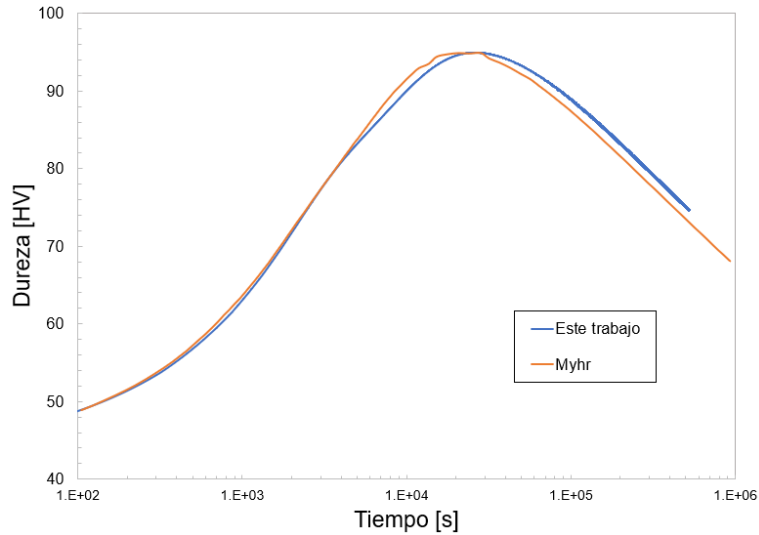


Figura 4.21. Variación de la dureza con el tiempo de envejecimiento a 190 °C. La línea naranja es la gráfica que presenta Myhr [37] en su artículo y la línea azul son los cálculos de este trabajo.

4.4 Análisis de sensibilidad del modelo de dureza

Para conocer la sensibilidad de los parámetros del modelo de dureza se consideraron 500 nodos y un paso de tiempo de 10 segundos y se conservó la temperatura de 190 °C del trabajo de Myhr [37]. El tiempo total de simulación fue de 10^5 segundos. Los valores del vector de Burgers y del módulo de corte se mantuvieron constantes ($b = 2.84 \times 10^{-10}$, $G = 2.7 \times 10^{10}$).

4.4.1.1 Constante β

El primer parámetro analizado fue la constante β . Se ha encontrado en diferentes trabajos [28,37,40] que esta constante puede tener valores entre 0.3 y 0.5, lo que motiva a analizarlo en este rango. Los resultados de la Figura 4.22 se obtuvieron con un radio crítico para el cizallamiento de 4.5 nm y un factor de Taylor de 2.6.

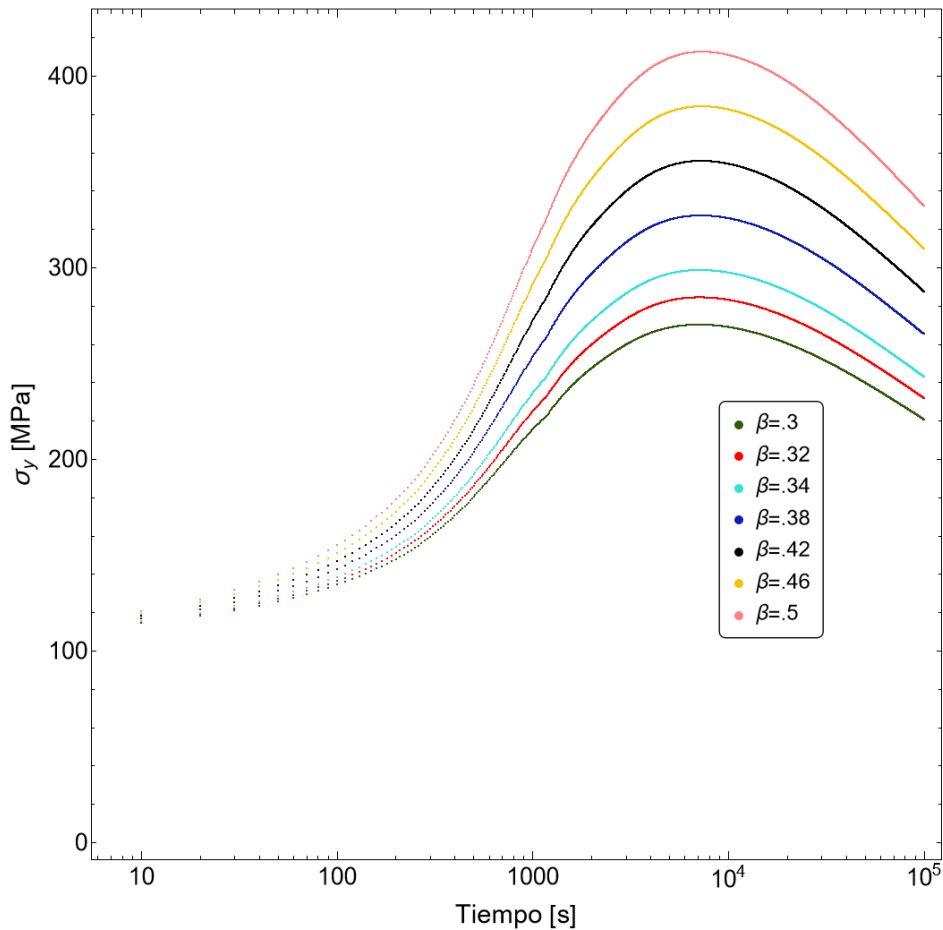


Figura 4.22. Variación del límite elástico en función del tiempo de envejecimiento para diversos valores de la constante β .

Al aumentar el valor de la constante β , el valor del límite elástico aumenta; sin embargo, se observa que no cambia la forma general de la gráfica.

4.4.1.2 Factor de Taylor

El siguiente parámetro analizado fue el factor de Taylor (M). Algunos autores [28,37,40] han utilizado valores de 2.6 o 3.1, por lo que se analizará este intervalo; se mantuvo el radio crítico para el cizallamiento de 4.5 nm y se tomó el valor de la constante β igual a 0.3. Los resultados de la simulación se muestran en la Figura 4.23.

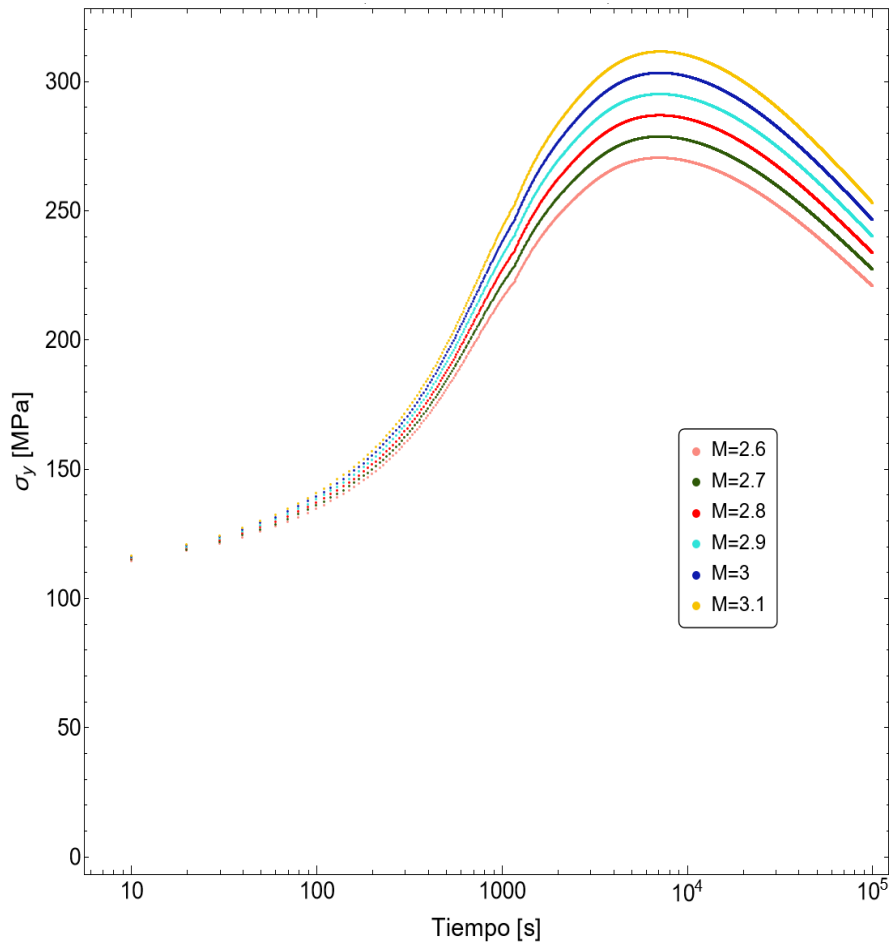


Figura 4.23. Variación del límite elástico en función del tiempo de envejecimiento para diversos valores del factor de Taylor.

De manera similar a lo que sucedió con la variación del parámetro β , una variación del factor de Taylor desplaza la función del límite elástico hacia arriba o hacia abajo, pero no cambia la forma general de la curva. Una diferencia notable entre las Figuras 4.22 y 4.23 es que, en el intervalo establecido que han utilizado algunos autores [28,37,40], la diferencia entre el límite elástico máximo y mínimo es de 50 MPa, mientras que en el intervalo de la constante β la diferencia es casi de 200 MPa, una cantidad mucho mayor.

4.4.1.3 Radio crítico de cizallamiento

El último parámetro analizado fue el radio crítico de cizallamiento. De igual forma varios autores [28,37,40] le han dado diferentes valores; Myhr [37] establece que este parámetro es crítico pero que no tiene un valor exacto, aunque se ha encontrado que es de 15 a 25 veces mayor que el vector de Burgers, por lo que en su trabajo considera el valor de 5 nm.

Para observar el efecto que tiene este parámetro se consideró un factor de Taylor de 2.6 y una constante β de 0.3, los resultados de esta simulación se muestran en la Figura 4.24.

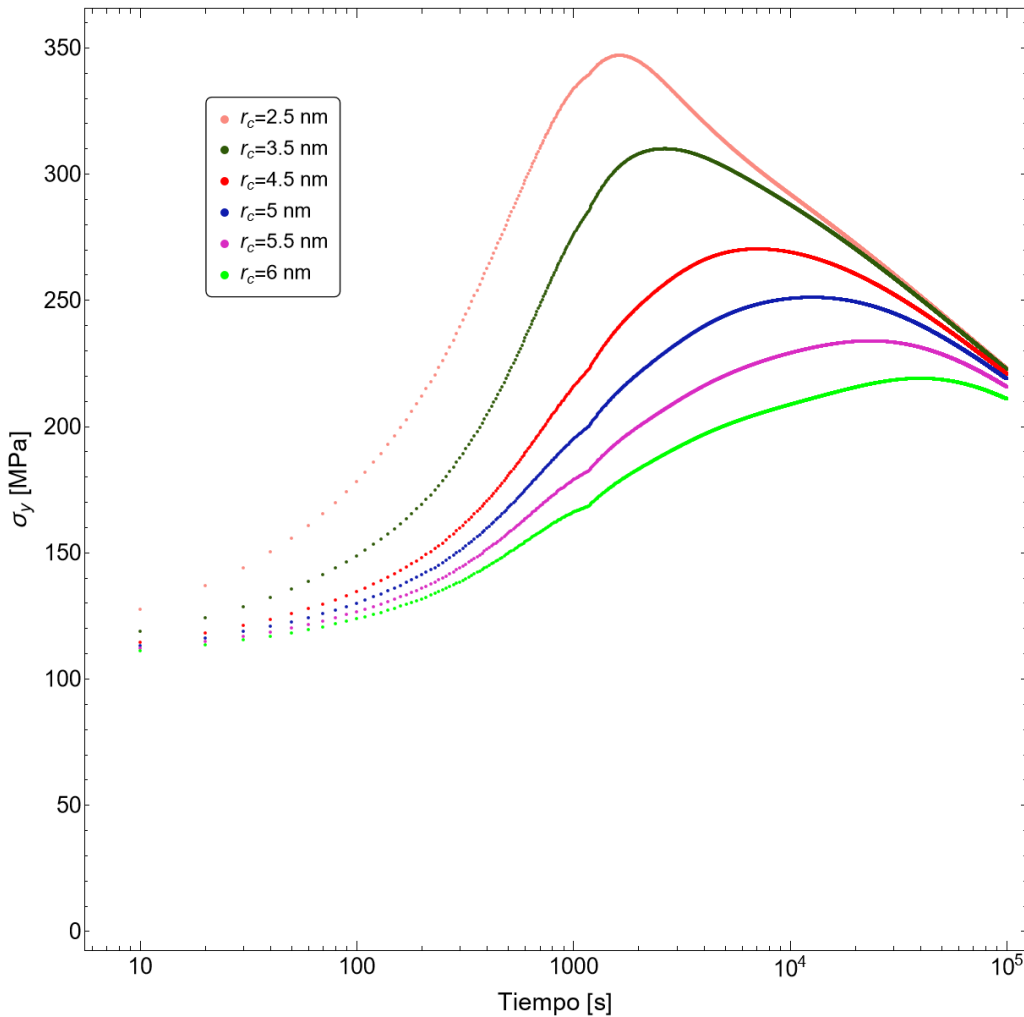


Figura 4.24. Variación del límite elástico en función del tiempo de envejecimiento para diversos valores del radio crítico de cizallamiento.

Los resultados de la Figura 4.24 indican que, al cambiar el radio de crítico de cizallamiento, la forma general de la curva es más sensible, a diferencia de lo que sucedía con los otros dos parámetros. Se observa que, con un radio de cizallamiento menor, la curva se desplaza a la izquierda y hacia arriba, además de tener la curva más pronunciada cercana al máximo, mientras que, con un radio mayor, el límite elástico disminuye su valor y la curva es más suave, al grado de que no es tan fácil localizar un máximo. Mientras que con la curva a altos valores del radio de cizallamiento el límite elástico no sufre variaciones tan drásticas como con radios menores, por ejemplo, con un radio de 2.5 nm a los 100 s tiene un valor cercano a 150 MPa, a 2000 s es cercano a 350 MPa y a 10000 s está por debajo de 300 MPa,

comparado con el radio de cizallamiento de 5 nm a los mismos valores de tiempo de envejecimiento tiene valores cercanos a 110, 160 y 200 MPa, que es una mucho menor diferencia entre los valores.

4.5 Modelo empírico y modelo determinístico

En la Figura 4.14 se mostró que se lograron replicar los resultados de la función de distribución de partícula, que es información necesaria para poder realizar una predicción de la dureza después del tratamiento de envejecimiento. Además, en la Figura 4.21 se observa que se pudieron replicar los datos publicados por Myhr [37], tomando los mismos valores de las constantes, del modelo de dureza. Ambos modelos fueron validados con datos experimentales que se publicaron en esos trabajos [33, 37]. Por lo que se dispone de la implementación en computadora de un modelo matemático determinístico reportado en la literatura que es capaz de predecir la dureza después del endurecimiento por precipitación y que ha sido validado para aleaciones de aluminio serie 6XXX. Con este modelo matemático determinístico implementado con el *software Wolfram Mathematica* se procedió a buscar una forma de incluir el efecto de la rapidez de enfriamiento durante el temple.

Si se analiza la Ec. 2.3, se observa que j_0 es una constante numérica (factor preexponencial de la rapidez de nucleación) que puede relacionarse con la rapidez de enfriamiento durante el temple modificada (REM), ya que el resto de la ecuación contiene parámetros con un significado físico bien establecido, de las cuáles ninguna se relaciona con la rapidez de enfriamiento. Antes no se había pensado en darle este significado a j_0 , porque no se había estudiado de una forma detallada el efecto de la rapidez de enfriamiento durante el temple. Se conocía que tenía un efecto [11, 13, 14, 21] pero no se había considerado este parámetro en un modelo predictivo, además de que usualmente se consideraba un temple con agua de piezas pequeñas, por lo que el gradiente térmico en estas piezas no era significativo y, por lo tanto, no se consideraba ninguna variación con la rapidez de enfriamiento, con lo cual no era necesario buscar una variable que tomará en cuenta este efecto. Esta idea de que j_0 tiene que ver con los sitios de nucleación ya se había considerado antes en otro trabajo de Myhr [40]; sin embargo, no se había realizado el enfoque hacia la rapidez de enfriamiento durante el temple; se había realizado este cambio para evaluar el efecto del trabajado en frío, dando buenos resultados.

Para encontrar los valores de j_0 que describieran de mejor manera una rapidez de enfriamiento determinada, se realizaron numerosas simulaciones de prueba y error, obteniéndose los valores reportados en la Tabla 4.4.

Tabla 4.4. Relación entre j_0 y la rapidez de enfriamiento durante el temple modificada (REM).

REM [°C/s]	j_0 [10^{34} #/(m^3s)]
1	0.12
10	0.45
20	0.7
30	0.85
40	1
50	1.07
60	1.2
70	1.3
80	1.4

Como se mencionó en el análisis de sensibilidad, estos valores no son fijos en el modelo de predicción de dureza, sino que se encuentran dentro de un rango de validez. Revisando los valores que han utilizados otros autores [28, 37, 40] se probaron diferentes combinaciones buscando los valores que mejor se acoplaran a las mediciones experimentales. Estos valores fueron: radio crítico de cizallamiento de 5 nm, factor de Taylor de 3.1 y constante β de 0.485. Los primeros 2 son exactamente los valores que utilizó Myhr [37] en su trabajo y, como se observa en la Figura 4.22, la constante β solo aumenta o disminuye el valor de la dureza.

En la Ec. 2.32 se relaciona el límite elástico con la dureza; sin embargo, esta ecuación es para la dureza Vickers y experimentalmente se midió dureza Brinell, por lo que se tuvo que usar una función de equivalencia para relacionar los valores de la dureza Vickers con los de la dureza Brinell, para lo cual se tomaron los valores de las tablas de equivalencias entre estas dos escalas de dureza.

En las Figuras 4.25 a 4.28 se muestran los resultados de las predicciones del modelo matemático determinístico usando la relación entre la constante j_0 y la rapidez de enfriamiento durante el temple modificada (REM) mostrada en la Tabla 4.4 con el modelo empírico y los datos experimentales.

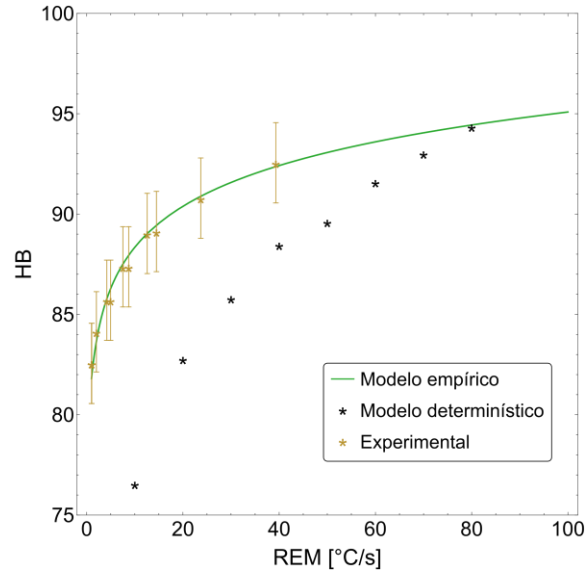


Figura 4.25. Dureza después de envejecimiento durante 30 minutos en función de la rapidez de enfriamiento durante el temple modificada: predicha por el modelo empírico (línea verde), medida experimentalmente (estrella dorada) y calculada con el modelo determinístico (estrella negra).

Los cálculos realizados con el modelo matemático determinístico para envejecimiento durante 30 minutos son muy distintos de los del modelo empírico y de los datos experimentales a bajas rapidezces de enfriamiento, mientras que a una mayor REM el modelo matemático determinístico coincide con las predicciones del modelo empírico. Al respecto, cabe mencionar que en varios trabajos reportados [28, 37, 40] los valores predichos por el modelo de Myhr son distintos de los valores experimentales para tiempos cortos de envejecimiento (30 y 60 minutos); inclusive, otros autores [28, 35-40] han utilizado otros modelos y sus predicciones también discrepan mucho de los valores experimentales a tiempos cortos de envejecimiento. En la Figura 4.25 se observa que, para altos valores de la REM, las predicciones del modelo matemático determinístico se acercan a las durezas predichas por el modelo empírico, por lo que se podría decir que, si solo se considera un temple severo (para el que la REM es alta), el modelo matemático determinístico sí puede producir una buena aproximación de la dureza.

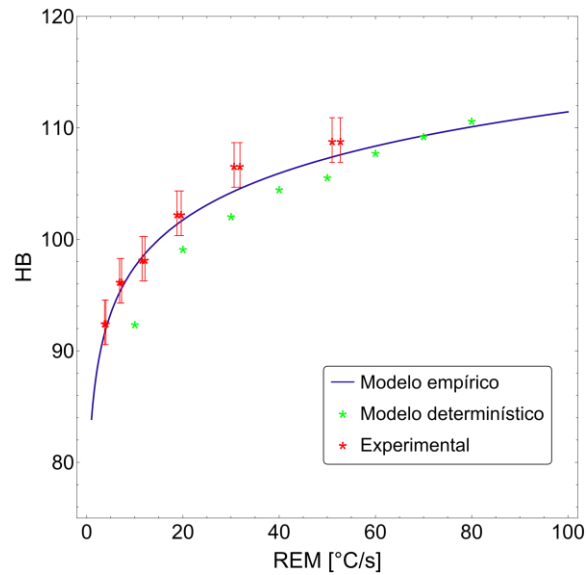


Figura 4.26. Dureza después de envejecimiento durante 60 minutos en función de la rapidez de enfriamiento durante el temple modificada: predicha por el modelo empírico (línea azul), medida experimentalmente (estrella roja) y calculada con el modelo determinístico (estrella verde).

En la Figura 4.26 ya la diferencia entre las predicciones de los modelos es menor. Al igual que para el tratamiento de 30 minutos, se observa que a altas rapideces de enfriamiento el modelo matemático determinístico se aproxima mejor al modelo empírico y a los valores experimentales.

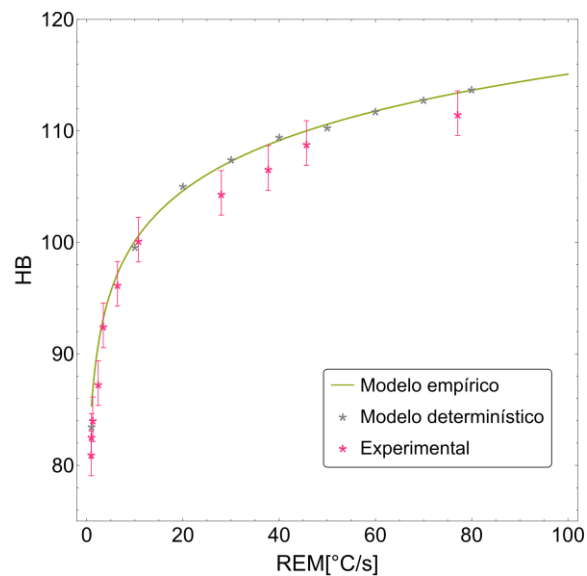


Figura 4.27. Dureza después de envejecimiento durante 120 minutos en función de la rapidez de enfriamiento durante el temple modificada: predicha por el modelo empírico (línea verde), medida experimentalmente (estrella rosa) y calculada con el modelo determinístico (estrella gris).

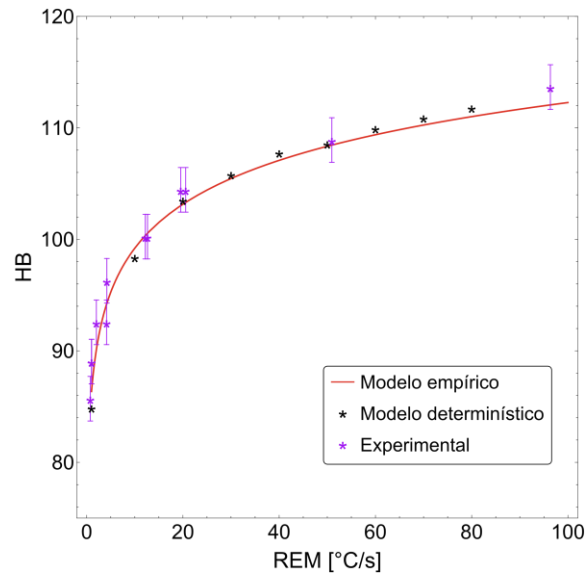


Figura 4.28. Dureza después de envejecimiento durante 240 minutos en función de la rapidez de enfriamiento durante el temple modificada: predicha por el modelo empírico (línea roja), medida experimentalmente (estrella violeta) y calculada con el modelo determinístico (estrella negra).

En las Figuras 4.27 y 4.28 se puede notar que la dureza predicha por los modelos matemáticos empírico y determinista se localiza dentro del rango de error de las mediciones de dureza, además de presentar una menor diferencia entre las predicciones de ambos modelos. Esta observación es más clara en la Figura 4.28, donde incluso hay algunos puntos donde prácticamente no hay una diferencia entre los valores experimentales y los predichos por los modelos. Esta buena predicción de la dureza a tiempos de 120 min y 240 minutos se ha observado también en otros artículos [28, 35-40], donde los valores de dureza o de límite elástico cercanos a 10^4 segundos son los que mejor se acercan a las mediciones experimentales.

Realizar esta comparación entre distintos tipos de modelos matemáticos y estudiar en qué condiciones ambos pueden resultar en la misma predicción de dureza, permite combinar las ventajas que cada uno posee. Mientras que el modelo matemático empírico es fácil de manipular y variar los parámetros de operación porque solo depende de dos variables (tiempo de envejecimiento y rapidez de enfriamiento durante el temple), no brinda otro tipo de información, que sí brinda un modelo matemático determinístico, como es la distribución de número de partículas. Al relacionar el parámetro j_0 con la rapidez de enfriamiento durante el temple modificada, se pueden combinar los modelos de la siguiente manera: se puede predecir fácilmente la dureza con el modelo matemático empírico usando solamente tiempo de envejecimiento y rapidez de enfriamiento del temple y al estar relacionados la

rapidez de enfriamiento y el parámetro j_0 , es posible estimar una distribución de número de partículas. Es decir, con solo un parámetro medido (rapidez de enfriamiento durante el temple modificada) es posible obtener dos valores: la dureza y la densidad de número de partículas al final del tratamiento de envejecimiento.

Las curvas de densidad de número de partículas obtenidas al tiempo más corto y al más largo de envejecimiento (30 y 240 min respectivamente) se muestran en las Figuras 4.29 y 4.30.

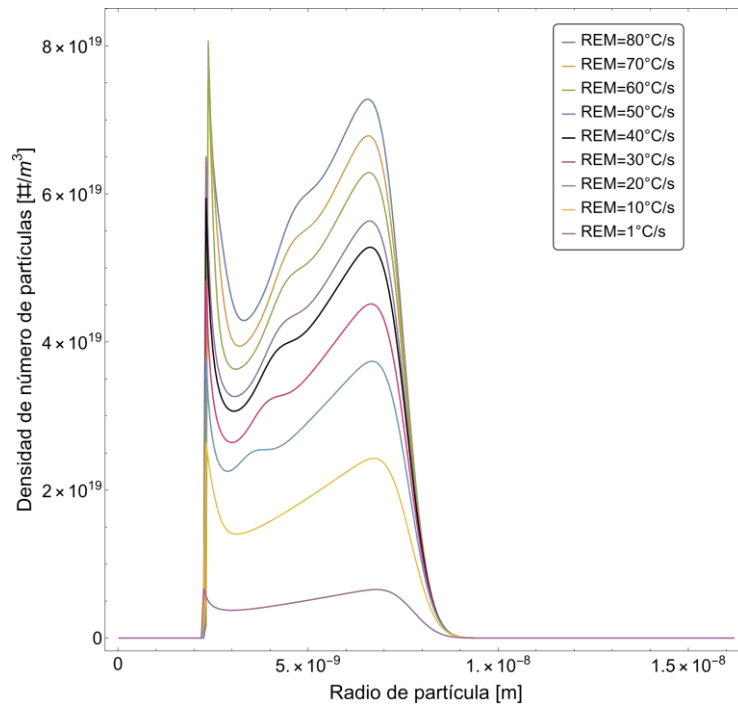


Figura 4.29. Densidad de número de partículas en función del radio de partícula para diferentes REM para un tiempo de envejecimiento de 30 minutos.

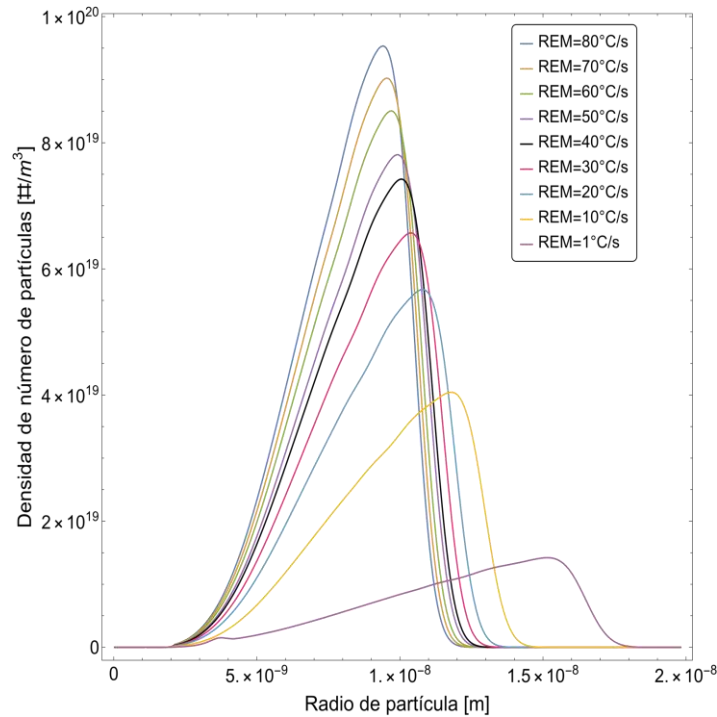


Figura 4.30. Densidad de número de partículas en función del radio de partícula para diferentes REM para un tiempo de envejecimiento de 240 minutos.

En las Figuras 4.29 y 4.30 se puede observar cómo al disminuir la rapidez de enfriamiento durante el temple modificada la densidad de partículas disminuye, manteniendo la misma forma general de la curva. A bajos tiempos de envejecimiento (30 y 60 minutos) el máximo de la curva es aproximadamente al mismo radio de partícula, mientras que a tiempos de envejecimiento más largos (120 y 240 minutos) el máximo de la curva se desplaza a la derecha conforme la REM disminuye, teniéndose que el máximo se encuentra a valores de radios de partícula mayores. Esta observación se visualiza muy bien en la Figura 4.30, en la que se puede observar claramente como el pico de la densidad de número de partículas para 80 °C/s se encuentra cercana a 9 nm, mientras que a la REM de 1 °C/s se encuentra después de 14 nm.

Estas gráficas permiten ver como al disminuir la rapidez de enfriamiento durante el temple modificada no se va a obtener la dureza máxima del envejecimiento. Esta disminución de la dureza se puede explicar claramente con la Figura 4.30 en la que, a bajas rapidezces de enfriamiento, hay una menor cantidad de partículas y, por lo tanto, una menor cantidad de obstáculos que impidan el paso de las dislocaciones y por ende una menor dureza. Una de las características que debe tener la precipitación para lograr un aumento de la dureza es que haya una gran cantidad de precipitados con un tamaño pequeño; se observa como a

mayores rapidezces de enfriamiento hay una mayor cantidad de precipitados y la mayoría (pico de la curva) tienen un tamaño menor comparado con la función de distribución de partícula a bajos valores de REM. Se observa mejor este efecto en la Figura 4.31 donde se presentan las curvas de densidad de partículas de la rapidez mayor y menor (REM = 80 °C/s y REM = 1 °C/s, respectivamente) a los cuatro tiempos de envejecimiento.

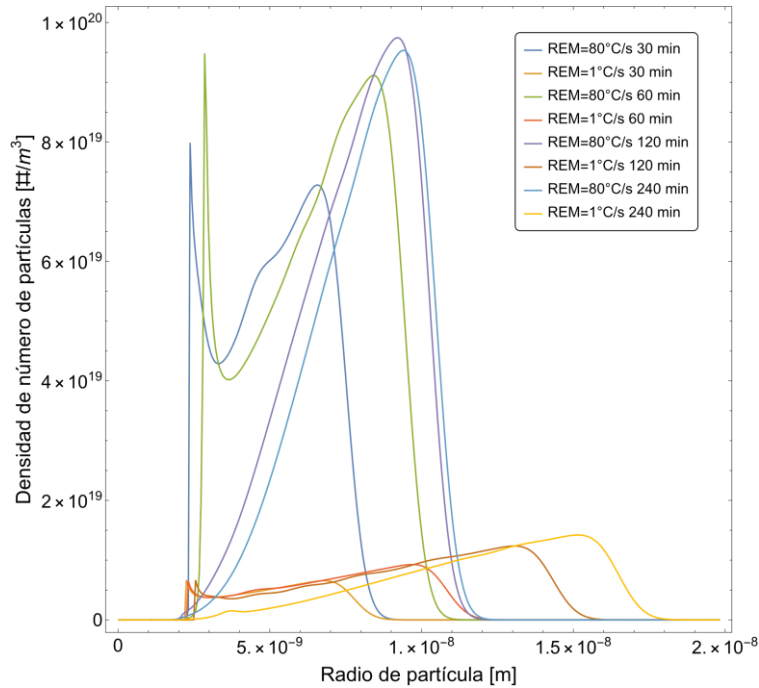


Figura 4.31. Densidad de número de partículas en función del radio de partícula a los cuatro tiempos de envejecimiento para la REM de 80 °C/s (colores fríos) y para REM de 1 °C/s (colores cálidos).

Se observa en la Figura 4.31 como al aumentar el tiempo de envejecimiento, el máximo de la densidad de número de partículas se desplaza a la derecha, es decir, a valores de radio de partícula mayores, esto también sugiere que, si se continúa el envejecimiento artificial, se llegará un punto donde las partículas crezcan tanto que comiencen a comportarse como una segunda fase, produciendo el comportamiento conocido como sobre-envejecimiento, disminuyendo la dureza y provocando una posible falla. También se observa una considerable diferencia entre el valor máximo de la densidad de partículas de una REM alta (80 °C/s) y una baja (1 °C/s), por lo que habrá menos precipitados y, por ende, una menor dureza, lo cual concuerda con los valores experimentales.

El modelo matemático determinístico brinda una buena aproximación de la dureza considerando a los precipitados como partículas esféricas. Como se ha mencionado, otros

autores [36] que han realizado estudios considerando partículas no esféricas han concluido que esa consideración no es significativa para la predicción de la dureza.

Este modelo determinístico solo considera un tipo de precipitado que son los β'' (Mg_5Si_3) [37], razón por la cual es preciso en la zona del pico del envejecimiento. Antes de llegar a este pico, el modelo determinístico falla ya que puede haber zonas de GP que no se han disuelto para formar los precipitados β'' ; este comportamiento se observa en la Figura 4.25. Dado que es el tiempo de envejecimiento más corto, se puede suponer que hay zonas de GP aún presentes y como el modelo no considera a otro tipo de precipitados que no sea β'' , resulta en una mala predicción. En el otro extremo de tiempo de proceso, el modelo no predice de forma adecuada un sobre-envejecimiento, lo que se atribuye a la formación del precipitado β' , que es incoherente por lo que la energía superficial es diferente y esto afecta a la simulación. En conclusión, este modelo reproduce mejor el comportamiento del sistema en la zona del pico del envejecimiento, fallando a tiempos cortos y a tiempos largos.

5. Conclusiones

Se desarrolló un modelo empírico que predice la dureza después del proceso de endurecimiento por precipitación de la aleación de aluminio AA6061, a una temperatura de envejecimiento fija (200 °C), que tiene como variables independientes a la rapidez de enfriamiento durante el temple y el tiempo de envejecimiento.

Se modificó un modelo matemático determinístico que predice la densidad del número de partículas y la dureza reportado en la literatura para incluir el efecto de la rapidez de enfriamiento durante el temple.

Del trabajo desarrollado se concluye que:

1. La rapidez de enfriamiento durante el temple es un factor determinante en la dureza al final del tratamiento de endurecimiento por precipitación de la aleación de aluminio AA6061: a mayor rapidez de enfriamiento durante el temple se produce una mayor dureza final.
2. Se desarrolló un modelo empírico que es capaz de predecir la dureza después del endurecimiento por precipitación de la aleación AA6061, que es descrito por la siguiente ecuación:

$$HB = 88.84 - \frac{303.99}{\sqrt{x}} + 67.048 \ln[y] - \frac{19835.57 \ln[y]}{x} - 19.405 \sqrt{\ln[x]} \ln[y]$$

donde x es el tiempo en segundos, y es la rapidez de enfriamiento durante el temple modificada (REM) – ver texto para su definición.

3. Es posible incorporar el efecto de la rapidez de enfriamiento durante el temple en los modelos matemáticos determinísticos de predicción de la densidad de número de partículas y la dureza reportados en la literatura mediante el cambio de la variable j_0 (factor pre-exponencial para la nucleación), a la que en este trabajo se le dio un sentido más allá de una simple constante como se había estado utilizando.
4. A valores mayores del factor de Taylor (M) y de la constante β , el valor máximo del límite elástico predicho por el modelo de Myhr [37] aumenta.
5. El modelo para predecir la dureza después del envejecimiento artificial desarrollado por Myhr [37] es más sensible al radio de cizallamiento que a cualquier otro parámetro; conforme aumenta el valor del radio de cizallamiento, el máximo valor del límite elástico disminuye.

6. La densidad de número de partículas es mayor a rapidezces de enfriamiento durante el temple mayores, además de que conforme aumenta el tiempo de envejecimiento, el máximo de la densidad se desplaza a valores de radio de partícula mayores.

6. Referencias

1. Alam, T., y Ansari, A. H. (2017). Review on Aluminium and Its Alloys for automotive applications. *Int. J. Adv. Technol. Eng. Sci*, 5(5), 278-294.
2. Baruah, M., y Borah, A. (2020). Processing and precipitation strengthening of 6xxx series aluminium alloys: A review. *Int. J. Mater. Sci*, 1(1), 40-48
3. Kumar, N. S., Pramod, G. K., Samrat, P., y Sadashiva, M. (2022). A critical review on heat treatment of aluminium alloys. *Materials Today: Proceedings*, 58, 71-79.
4. Chen, Y., Lu, B. Q., y Zhang, H. A. (2020, February). Hardening and precipitation of a commercial 6061 Al alloy during natural and artificial ageing. En *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* (Vol. 770, No. 1, p. 012065). IOP Publishing.
5. Guo, G., Wang, Q., Wang, G., y Rong, Y. (2016). A brief review of precipitation hardening models for aluminum alloys. In *Proceedings of the 2nd World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME)* (pp. 249-254). Springer International Publishing.
6. Georgantzia, E., Gkantou, M., y Kamaris, G. S. (2021). Aluminium alloys as structural material: A review of research. *Engineering Structures*, 227, 111372.
7. Singh, G., Goyal S., Sharma N., Sharma P. (2017). A comprehensive study on aluminium alloy series-a review. *Recent Advances in Mechanical Engineering*, 1, 11-27
8. Wang, M. J. (2022). The Environmental footprint of semi-fabricated aluminium products in North America. The aluminium association. Recuperado de: https://www.aluminum.org/sites/default/files/2022-01/2022_Semi-Fab_LCA_Report.pdf
9. Smallman, R. E., y Ngan, A. H. W. (2014). *Selected Alloys. Modern Physical Metallurgy*, 529–569.
10. Raj, R. J., Selvam, P. P., y Pughalendi, M. (2021). A Review of Aluminum Alloys in Aircraft and Aerospace Industry. *Journal of Huazhong University of Science and Technology ISSN*, 1671, 4512.
11. Akande, S., Ajaiyeoba, O. E., Azeez, T. M., Ikumapayi, O. M., Akinlabi, S. A., y Akinlabi, E. T. (2022). Investigating the precipitation hardening of 2024 aluminium alloy under different quenching media. *Materials Today: Proceedings*, 62, 4271-4274.

12. Holmestad, R., Marioara, C. D., Ehlers, F. J., Torsæter, M., Bjørge, R., Røyset, J., y Andersen, S. J. (2010, September). Precipitation in 6XXX aluminum alloys. En *Proc. 12th Int. Conf. on Aluminum Alloys* (pp. 30-39).
13. Wimmer, A., Hämmerle, A., y Marioara, C. D. (2022). Precipitation Hardening in Innovative Processing of 6xxx Aluminum Alloys. In *Light Metals 2022* (pp. 245-250). Cham: Springer International Publishing.
14. Milkereit, B., Kessler, O., y Schick, C. (2010). Determination of critical cooling rate for hardening aluminum alloys using HyperDSC. *Application Note-Differential Scanning Calorimetry application*.
15. J. G. Kaufman. (2000). Aluminum Alloy and Temper Designation Systems of the Aluminum Association. Introduction to Aluminum Alloys and Tempers. ASM international. Ohio. USA. pp. 9-22.
16. Campos, R.F. (2012). Efecto de la dispersión de partículas nanométricas de plata en una aleación de aluminio 7075. Tesis de doctorado. Centro de Investigaciones en Materiales Avanzados, S.C.
17. Ji, K., Li, G., Sun, Y., Xu, J., Chen, H., Chen, K., y Li, Y. (2020). A constitutive model for yield strength and work hardening behaviour of aluminium alloys during artificial ageing. *Metals*, 10(8), 1094.
18. E. A. Starke Jr. (2005), "Alloys: Aluminum", Encyclopedia of Condensed Matter Physics, Materials Science and Materials Engineering, pp. 18-24.
19. Ridhwan, J., Noor, J. A., Zakaria, M. S., Zulfattah, Z., y Hafidzal, M. H. M. (2014). Effect of heat treatment on microstructure and mechanical properties of 6061 aluminum alloy. *Journal of Engineering and Technology (JET)*, 5(1), 89-98.
20. Askeland, D. R., y Phulé, P. P. (2004). *Ciencia e ingeniería de los materiales*. Cengage Learning editores.
21. Lang, P., Falahati, A., Ahmadi, M. R., Warczok, P., Povoden-Karadeniz, E., Radis, R., y Kozeschnik, E. (2011). Modeling the influence of cooling rate on the precipitate evolution in Al-Mg-Si (Cu) alloys. In *Materials Science and Technology 2011* (pp. 284-291). Materials Science and Technology 2011
22. Qureshi, F. S., Sheikh, A. K., y Rashid, M. (1999). A mathematical model to predict the strength of aluminum alloys subjected to precipitation hardening. *Journal of materials engineering and performance*, 8, 353-360.

23. Wagner, F., Bollmann, C., Brüggemann, T., Hojda, S., Teller, M., y Hirt, G. (2020). Model framework for the simulation of microstructure and yield stress during aging of industrial Al-Mg-Si aluminum alloys. *Procedia Manufacturing*, 50, 368-375
24. Edwards, G. A., Stiller, K., Dunlop, G. L., y Couper, M. J. (1998). The precipitation sequence in Al-Mg-Si alloys. *Acta materialia*, 46(11), 3893-3904.
25. Vissers, R., van Huis, M. V., Jansen, J., Zandbergen, H. W., Marioara, C. D., y Andersen, S. J. (2007). The crystal structure of the β' phase in Al-Mg-Si alloys. *Acta Materialia*, 55(11), 3815-3823.
26. Baruah, M., y Borah, A. (2020). Processing and precipitation strengthening of 6xxx series aluminium alloys: A review. *Int. J. Mater. Sci*, 1(1), 40-48.
27. Andersen, S. J., Zandbergen, H. W., Jansen, J., TrÆholt, C., Tundal, U., y Reiso, O. (1998). The crystal structure of the β "phase in Al-Mg-Si alloys. *Acta Materialia*, 46(9), 3283-3298.
28. Bahrami, A. (2010). Modeling of Precipitation Sequence and Ageing Kinetics in Al-Mg-Si Alloys. Tesis doctoral, Delft University of Technology, Delft, Poland.
29. Shercliff, H. R., y Ashby, M. F. (1990). A process model for age hardening of aluminium alloys—I. The model. *Acta Metallurgica et Materialia*, 38(10), 1798.
30. Deschamps A and Bréchet Y (1999), Influence of predeformation and ageing of an Al-Zn-Mg alloy – II. Modeling of precipitation kinetics and yield stress, *Acta Materialia*, 47, 293.
31. Kampmann, R., y Wagner, R. (1984). Kinetics of precipitation in metastable binary alloys-theory and application to Cu-1.9 at% Ti and Ni-14 at% Al. *Decomposition of alloys: the early stages*, 91-103.
32. Langer, J. S., y Schwartz, K. (1980). Kinetics of nucleation in near-critical fluids. *Physical Review A*, 21(3), 948.
33. Myhr, O. R., y Grong, Ø. (2000). Modelling of non-isothermal transformations in alloys containing a particle distribution. *Acta Materialia*, 48(7), 1605-1615.
34. Maugis, P., y Gouné, M. (2005). Kinetics of vanadium carbonitride precipitation in steel: A computer model. *Acta materialia*, 53(12), 3359-3367.
35. Hutchinson, C. R. (2011). Modeling the kinetics of precipitation in aluminium alloys. In *Fundamentals of Aluminium Metallurgy* (pp. 422-467). Woodhead Publishing.
36. Anjabin, N. (2021). Modeling the age-hardening process of aluminum alloys containing the prolate/oblate shape precipitates. *Metals and Materials International*, 27, 1620-1630.

37. Myhr, O. R., Grong, Ø., y Andersen, S. J. (2001). Modelling of the age hardening behaviour of Al–Mg–Si alloys. *Acta Materialia*, 49(1), 65-75.
38. Martinez, R., Larouche, D., Cailletaud, G., Guillot, I., y Massinon, D. (2015). Simulation of the concomitant process of nucleation-growth-coarsening of Al₂Cu particles in a 319 foundry aluminum alloy. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 23(4), 045012.
39. Priya, P., Johnson, D. R., y Krane, M. J. (2017). Precipitation during cooling of 7XXX aluminum alloys. *Computational Materials Science*, 139, 273-284
40. Myhr, O. R., Grong, Ø., y Schäfer, C. (2015). An extended age-hardening model for Al-Mg-Si alloys incorporating the room-temperature storage and cold deformation process stages. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 46, 6018-6039.
41. Walpole R. (2007). Probabilidad y Estadística para ingeniería y ciencias. (8ª edición pp.22). Pearson Educación.
42. Devore J. (2008). Probabilidad y estadística para ingeniería y ciencias. (7ª edición pp.15). Cengage learning.
43. Mendenhall W. (2015). Introducción a la probabilidad y estadística. (14ª edición pp.24). Cengage learning.
44. Suhas V. Patankar. (1980). *Numerical heat transfer and fluid flow*. Hemisphere Publishing Corporation.
45. Versteeg, H. K., y Malalasekera, W. (2007). *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Pearson education.
46. Dieter, G. E., y Bacon, D. (1976). *Mechanical metallurgy* (Vol. 3, pp. 43-53). New York: McGraw-hill
47. Shercliff, H. R., y Ashby, M. F. (1990). A process model for age hardening of aluminium alloys—II. Applications of the model. *Acta Metallurgica et materialia*, 38(10), 1803.
48. Deschamps, A., Livet, F., y Brechet, Y. (1998). Influence of predeformation on ageing in an Al–Zn–Mg alloy—I. Microstructure evolution and mechanical properties. *Acta materialia*, 47(1), 281.
49. Friedel, J. (1964). Dislocations. Oxford: Pergamon. *S. Amelincks: The Direct Observation of Dislocations. Solid State Physics (F. Seitz and D. Turnbull, eds.) Suppl. 6*, 1964
50. V. Gerold. (1979). Precipitation hardening, in: Dislocations in Solids, (Vol. 4), North-Holland Publishing Company, Amsterdam/New York/Oxford.

51. Kocks, U. F. (1966). A statistical theory of flow stress and work-hardening. *Philosophical Magazine*, 13(123), 541
52. Kocks, U. F. (1967). Statistical treatment of penetrable obstacles. *Canadian Journal of Physics*, 45(2), 737.
53. Nabarro, F. R. N. (1967). Theory of crystal dislocations.
54. Grong, O. (1997). Metallurgical Modelling of Welding, (2ª edición, pp 552), *Institute of Materials, London, UK*
55. Hernández, E. (2022). Respuesta metalúrgica de una probeta Jominy de aleación de aluminio de tamaño reducido. Informe de la asignatura Proyecto (clave 1909). Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México.
56. Welty, J. R., Wicks, C. E., Wilson, R. E., y Franchini, C. S. (1999). *Fundamentos de transferencia de momento, calor y masa*. Limusa.
57. Wolfram Language. (1988). Min. Wolfram Language System Documentation Center. Retrieved de <https://reference.wolfram.com/language/ref/Min.html>
58. Wolfram Language. (1991). Interpolation. Wolfram Language System Documentation Center. Recuperado de <https://reference.wolfram.com/language/ref/Interpolation.html>, 2 de septiembre.
59. Trevisan, L., y Fabricio, D. A. K. (2018). Measurement uncertainty evaluation of Brinell hardness test: Gum and Monte Carlo Method. *Periodic Tche Quimica*, 15(30), 252-258.
60. En ISO 6506-1. (2014). Metallic Materials – Brinell Hardness Test – Part1: Test Method.
61. Wolfram Language. (2008). NonlinearModelFit. Wolfram Language System Documentation Center. Recuperado de <https://reference.wolfram.com/language/ref/NonlinearModelFit.html>, 3 de septiembre 2023.
62. Glen. S. "RMSE: Root Mean Square Error" De StatisticsHowTo.com: Elementary Statistics for the rest of us Recuperado de <https://www.statisticshowto.com/probability-and-statistics/regression-analysis/rmse-root-mean-square-error/>, 10 de septiembre 2023.