



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

**MODELADO MATEMÁTICO DEL TRATAMIENTO
TÉRMICO DE PROBETAS DE ACERO EN UN
REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO**

TESIS

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
INGENIERO QUÍMICO METALÚRGICO**

PRESENTA:

AYAUITL ANATSO'OK MARTÍNEZ OBREGÓN

CIUDAD DE MÉXICO 2022





Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Jurado asignado:

Presidente: Prof. JOSÉ BERNARDO HERNÁNDEZ MORALES

Vocal: Prof. BALBINA OJEDA RAMÍREZ

Secretario: Prof. GERARDO SANJUAN SANJUAN

1er Suplente: Prof. VICTOR ANTONIO ARANDA VILLADA

2do Suplente: Prof. DIEGO ENRIQUE GONZÁLEZ GONZÁLEZ

Sitio donde se desarrolló el tema:

Departamento de Ingeniería Metalúrgica
Facultad de Química, U.N.A.M., Edificio D

Asesor del tema:

Dr. José Bernardo Hernández Morales

Sustentante:

Ayauitl Anatso'ok Martínez Obregón

AGRADECIMIENTOS

A la Universidad Nacional Autónoma de México (*UNAM*) por brindarme una de las mejores experiencias desde mi formación media superior hasta el término de la licenciatura, por la facilidad del acceso a varias plataformas, información, actividades extracurriculares y de formación no solo académica sino personal.

Al programa *PUIC* (Programa universitario de estudios de la diversidad y la interculturalidad) que me apoyó desde mis estudios de la media superior hasta la conclusión de mis estudios de licenciatura.

A mi asesor el Dr. José Bernardo Hernández Morales por su paciencia, sus conocimientos y constancia brindados para hacer posible este trabajo en medio de una crisis en la que todos estábamos a la expectativa de regresar a una vida “normal”.

A las amistades formadas a lo largo de mi estancia en esta gran institución, que hicieron de esta una gran experiencia; Ulises Calleja, Melissa Quintanar, Luis Ángel Espinoza, Daniela Cuevas, Jorge Islas, Landy Alpizar, Arturo Benjamín, por apoyarme en los días mas grises y estar en los mas alegres.

A José Luis López Toledo, Flor Danae; por no dejarme solo en los días donde mas necesite de alguien para apoyarme, compartiendo alegres experiencias y de crecimiento personal.

A Carina Vázquez por su amistad incondicional, por apoyarme con sus consejos, animarme cuando todo iba mal y por nunca dudar de mí.

A mi hermana Mixtli Qualnexoani y familia por siempre estar a mi lado en este trayecto de mi vida, apoyándome y dándome aliento.

DEDICATORIAS

A la memoria de mi abuelo Rodolfo Martinez Galván, por enseñarme el valor del trabajo duro, siendo constante y responsable de cada decisión que he tomado para poder llegar a este logro y nunca desistir.

Índice de contenido

Resumen.....	1
1. Introducción.....	2
1.1 Hipótesis.....	3
1.2 Objetivo	3
1.3 Metas.....	3
Antecedentes	4
1.4 Tratamiento térmico de aceros.....	4
1.5 Tipos de tratamientos térmicos	4
1.6 Tipos de temple.....	5
1.7 Diagramas de transformaciones de fase.....	6
1.8 Diagrama TTT	6
1.9 Diagramas CCT.....	7
1.10 Martensita.....	9
1.11 Bainita	10
1.12 Lecho fluidizado	11
1.13 Número de fluidización.....	13
1.14 Mecanismo de transferencia de calor en lechos fluidizados	13
2. Método de diferencias finitas	15
3. Metodología	16
3.1 Formulación matemática	17
I. Etapa 1.....	22
II. Etapa 2.....	22
III. Etapa 3.....	23
IV. Etapa 4.....	23
V. Etapa 5.....	24
VI. Etapa 6.....	25

3.2	Diagramas de flujo	29
3.3	Datos de simulación	33
4.	Resultados y discusión	40
4.1	Independencia de malla	40
4.2	Verificación.....	41
4.3	Validación.....	42
4.4	Influencia del tamaño del paso de tiempo.....	45
4.5	Rapidez de enfriamiento local	46
4.6	Análisis de sensibilidad	49
4.7	Aplicación.....	58
4.8	Interfaz gráfica del usuario	62
5.	Conclusiones	65
6.	Bibliografía.....	66
7.	Apéndice A.....	69
	Áreas y volúmenes	69
	Etapas 1	70
	Etapas 2	71
	Etapas 3	72
	Etapas 4	73
	Etapas 5	74
	Etapas 6	75
8.	Apéndice B.....	77

Índice de figuras

Figura 1.1. Diagrama TTT de transformación de fase del acero AISI 4140 [8].	7
Figura 1.2. Relación de los diagramas CCT (líneas gruesas) e IT o TTT (líneas discontinuas) de un acero de medio carbono. Curvas de enfriamiento locales en una probeta sujeta al ensayo Jominy se superponen en el diagrama CCT [2].	8
Figura 1.3. Microestructura martensítica acicular [5].	9
Figura 1.4. Ilustración esquemática de la formación de bainita superior e inferior [10].	10
Figura 1.5. A) Bainita superior (obtenida isotérmicamente a 450 °C) y B) bainita inferior (obtenida isotérmicamente a 260 °C), correspondiente a un acero eutectoide [10].	10
Figura 1.6. Diferentes modelos de contacto entre el lecho de partículas y el fluido. A) Lecho fijo; B) Fluidización mínima o incipiente; C) Fluidización homogénea; D) Fluidización heterogénea o agregativa; E) Borboteo axial; F) Borboteo deslizante; G) Fluidización turbulenta; H) Fluidización en fase dispersa con transporte neumático de partículas [14].	12
Figura 3.1. Diagrama de fase TTT del acero AISI 4140, denotando la temperatura de inicio (Ms) de transformación martensítica [22].	19
Figura 3.2. Aplicación de la regla de adición. Tiempo de incubación de la transformación no isotérmica [19].	20
Figura 3.3. Representación esquemática de la discretización espacial para realizar un balance alrededor del nodo P.	26
Figura 3.5. Diagrama de flujo del código empleado para el caso de enfriamiento sin generación.	30
Figura 3.6. Diagrama de flujo del código empleado para el caso de enfriamiento con generación debido a la transformación martensítica.	31
Figura 3.7. Diagrama de flujo del código empleado para el caso de enfriamiento con generación debido a la transformación consecutiva martensítica y bainítica.	32
Figura 3.8. Flux de calor en la superficie vs. temperatura en la superficie, para un flujo de aire de 100 LPM ($N_f=1.8$) [7].	35
Figura 3.9. Curva CCT para un acero AISI 4140 [2].	36
Figura 3.10. Flux de calor en la superficie vs. temperatura en la superficie, con un flujo de aire de 56 LPM ($N_f=1$) [7].	37

Figura 3.11. Flux de calor en la superficie vs. temperatura en la superficie, con un flujo de aire de 62 LPM ($N_f=1.1$) [7].	38
Figura 3.12. Parámetro cinético b obtenido del diagrama TTT del acero AISI 4140 [8].	39
Figura 3.13. Parámetro cinético n obtenido del diagrama TTT del acero AISI 4140 [8].	39
Figura 4.1. Curva de enfriamiento en el centro, a mitad de radio y en la superficie de la probeta para dos distintos valores de nodos empleados en la simulación.....	40
Figura 4.2. Respuesta térmica en el centro y en la superficie de la probeta calculada con: la solución analítica dada por la gráfica de Heisler (símbolos) y la solución numérica (líneas).	41
Figura 4.3. Curva de enfriamiento en el centro de la probeta: solución numérica (línea) y valores medidos (símbolos) [7] para $N_f=1.8$	42
Figura 4.4. Curva de enfriamiento en el centro de la probeta: solución numérica (línea) y valores medidos (símbolos) [7] para $N_f = 1$	43
Figura 4.5. Curva de enfriamiento en el centro de la probeta: solución numérica (línea) y valores medidos (símbolos) [7] para $N_f = 1.1$	44
Figura 4.6. Curva de enfriamiento en el centro de la probeta para una transformación consecutiva (etapa 6) con diferentes valores de paso de tiempo para $N_f = 1.1$	45
Figura 4.7. Curva de rapidez de enfriamiento local en función del tiempo en el centro de la probeta con un flujo de aire de 100 LPM para $N_f=1.8$	46
Figura 4.8. Curva de rapidez de enfriamiento local en función del tiempo en el centro de la probeta con un flujo de aire de 56 LPM para $N_f=1$	47
Figura 4.9. Curva de rapidez de enfriamiento local en función del tiempo en el centro de la probeta con un flujo de aire de 62 LPM para $N_f=1.1$	48
Figura 4.10. Curvas de rapidez de enfriamiento local en función del tiempo en el centro de la probeta para los 3 valores de N_f	49
Figura 4.11. Efecto del radio sobre la respuesta térmica en el centro de la probeta ($N_f = 1.8$).	50
Figura 4.12. Efecto del radio sobre la evolución de la fracción transformada en el centro de la probeta ($N_f = 1.8$).	51

Figura 4.13. Efecto de M_s sobre la evolución de la fracción transformada de martensita en el centro de la probeta ($N_f = 1.8$).52

Figura 4.14. Efecto de variar el radio sobre la respuesta térmica en el centro de la probeta ($N_f = 1$). La línea punteada es la curva de inicio de transformación bainítica.53

Figura 4.15. Efecto de variar el radio sobre la evolución de la fracción transformada de bainita en el centro de la probeta ($N_f = 1$).54

Figura 4.16. Efecto de variar el radio sobre la respuesta térmica en el centro de la probeta ($N_f = 1.1$). La línea punteada representa al inicio de la transformación bainítica.55

Figura 4.17. Efecto de variar el radio sobre la evolución de la fracción transformada de bainita y martensita en el centro de la probeta ($N_f = 1.1$).56

Figura 4.18. Efecto de M_s sobre la evolución de la fracción transformada de bainita y martensita en el centro de la probeta ($N_f = 1.1$).57

Figura 4.19. Evolución de la fracción transformada (línea punteada) y de la rapidez de transformación (línea sólida), en el centro de la probeta, para $N_f=1.8$59

Figura 4.20. Evolución de la fracción transformada (línea punteada) y de la rapidez de transformación (línea sólida), en el centro de la probeta, para $N_f=1$60

Figura 4.21. Evolución de la fracción transformada (líneas punteadas) y de la rapidez de transformación (líneas sólidas), en el centro de la probeta, para $N_f=1.1$61

Figura 4.22. Captura de pantalla de la interfaz gráfica para el usuario (etapa 1 del código).62

Figura 4.23. Captura de pantalla de la interfaz gráfica para el usuario (etapa 1 del código).63

Figura 4.24. Captura de pantalla de la interfaz gráfica para el usuario (etapa 4 del código).63

Figura 4.25. Captura de pantalla de la interfaz gráfica para el usuario (etapa 5 del código).64

Figura 4.26. Interfaz gráfica para el usuario (etapa 6 del código).64

Figura 8.1. Interpolación del flux de calor en la superficie en función de la temperatura superficial con diferentes ordenes de interpolación dentro de Mathematica para la etapa 4. A) Orden 0, B) orden 1, C) orden 2 y D) orden 3.77

Figura 8.2. Respuesta térmica de los diferentes ordenes de interpolación de la condición de frontera activa dentro de Mathematica para la etapa 4. A) Orden 0, B) orden 1, C) orden 2 y D) orden 3.78

Índice de tablas

Tabla 3.1. Datos geométricos.....	33
Tabla 3.2. Propiedades termofísicas del acero AISI 4140 [7].....	33
Tabla 3.3. Datos del método numérico en el modelado de enfriamiento de la probeta para todas las etapas.....	33
Tabla 3.4. Parámetros del modelo utilizados en la verificación del cálculo del perfil térmico (etapa 1).	34
Tabla 3.5. Parámetros del modelo utilizados en la simulación del enfriamiento (etapa 2). 34	
Tabla 3.6. Parámetro del modelo utilizado en la simulación del enfriamiento (etapa 3). ...	34
Tabla 3.7. Temperatura inicial del modelo utilizado en la simulación del enfriamiento (etapa 4).....	35
Tabla 3.8. Temperatura inicial utilizado en la simulación del enfriamiento (etapa 5).	37
Tabla 3.9. Temperatura inicial utilizado en la simulación del enfriamiento (etapa 6).	38
Tabla 4.1. Parámetros para el análisis de sensibilidad de la etapa 4 (transformación martensítica).	50
Tabla 4.2. Parámetros para el análisis de sensibilidad de la etapa 4 (transformación bainítica).	52
Tabla 4.3. Parámetros para el análisis de sensibilidad de la etapa 6 (transformación consecutiva de martensita y bainita).	54

Lista de símbolos

Símbolo	Descripción	Unidades
N_f	Número de fluidización	Adimensional
v	Velocidad superficial del gas	m/s
v_{mf}	Velocidad superficial del gas para fluidización mínima	m/s
Q	Flujo volumétrico	LPM
Q_{mf}	Flujo volumétrico para fluidización mínima	LPM
S_H	Rapidez de generación volumétrica	J/ (m ³ s)
ρ	Densidad	kg/m ³
C_p	Calor específico	J/ (kg °C)
r	Coordenada radial	m
z	Coordenada en z	m
θ	Coordenada angular	rad
α	Difusividad térmica	m ² /s
T_0	Temperatura inicial	°C
F_i^{j+1}	Fracción transformada de austenita en un tiempo futuro	Adimensional
F_i^{j-1}	Fracción transformada de austenita en un tiempo previo	Adimensional
ΔF_i	Variación de la fracción transformada	Adimensional
T_i^{j-1}	Temperatura calculada en el nodo de interés en un tiempo previo	°C
β	Constante de la ecuación de Koistinen-Marburger	°C ⁻¹
M_s	Temperatura de inicio de la transformación martensítica	°C
M_f	Temperatura final de la transformación martensítica	°C
b	Parámetro cinético	Adimensional
n	Parámetro cinético	Adimensional
F_i	Fracción transformada al 0.01	Adimensional
F_f	Fracción transformada al 0.99	Adimensional
t_i	Tiempo inicial de la transformación a bainita	s
t_f	Tiempo final de la transformación a bainita	s
t_j	Tiempo total de permanencia	s

Δt_j	Duración del paso de tiempo	s
$t_{j, fict}(T^j)$	Tiempo ficticio en el principio de aditividad	s
\bar{h}	Coficiente de transferencia de calor	W/ (m ² °C)
T_f	Temperatura del fluido	°C
T_{sup}	Temperatura de la superficie	°C
k	Conductividad térmica	W/ (m°C)
ΔH	Cambio de entalpía de transformación	kJ/ g-mol
Δr	Delta de radio	m
Δt	Paso de tiempo	s
$q_{sup\ cte}$	<i>Flux</i> de calor constante en la superficie	W/m ²
$q_{sup}(T_{sup})$	<i>Flux</i> de calor dependiente de la temperatura de superficie	W/m ²
B_s	Temperatura de Inicio de transformación bainítica	°C
T_w	Temperatura al oeste del nodo de interés	°C
T_e	Temperatura al este del nodo de interés	°C
T_p	Temperatura del nodo de interés	°C
A_w	Área al oeste del nodo de interés	m ²
A_e	Área al este del nodo de interés	m ²
T_{old}	Temperatura a un tiempo pasado	°C
T_{new}	Temperatura a un tiempo futuro	°C
a	Diagonal a la izquierda de la diagonal principal de la matriz bandeada	Adimensional
b	Diagonal principal de la matriz bandeada	Adimensional
c	Diagonal a la derecha de la diagonal principal de la matriz bandeada	Adimensional
d	Vector de términos independientes	°C
Bs_CCT	Inicio de la transformación bainítica de acuerdo con el diagrama CCT para el acero AISI 4140	Adimensional

Resumen

Un lecho fluidizado se genera pasando una corriente de gas o líquido a través de una cama de partículas hasta conseguir que el lecho se comporte de manera similar a la de un fluido, es decir, que se deforme con facilidad. Para temple de piezas metálicas se ha reportado el uso de partículas de carburo de silicio o de alúmina y aire como gas. La transferencia de calor en lechos fluidizados se caracteriza por ser uniforme y poco severa (en comparación con otros medios de temple).

Aunque aún es común que los tratamientos térmicos se diseñen en base a procedimientos aproximados, cada vez aparecen más trabajos de modelado matemático, debido a las ventajas que éste ofrece. En el caso de temple en un lecho fluidizado, es necesario desarrollar un modelo termo-estructural, de tal manera que se simule la evolución tanto del campo térmico como del campo de microestructuras simultáneamente; debido a que el enfriamiento es relativamente “suave” no es necesario modelar la distorsión del material.

El objetivo del trabajo es predecir, con ayuda de un modelo matemático determinístico, la evolución de los campos térmico y microestructural durante el tratamiento térmico de probetas de acero *AISI 4140* en un reactor de lecho fluidizado a escala laboratorio.

Se realizó un análisis de independencia de malla para validar que es posible discretizar el sistema solo usando cinco nodos y se obtuvo datos favorables para los demás análisis. La verificación se realizó con las soluciones numéricas y analíticas con las propiedades termofísicas constantes y la validación se realizó con datos experimentales para las tres transformaciones de fase (martensita, bainita y transformación consecutiva de martensita con bainita). Con el análisis de sensibilidad se encontró que con las simulaciones el modelo es más sensible a los cambios en el número de fluidización que a cambios del radio en la probeta.

1. Introducción

Los tratamientos térmicos suelen utilizarse en operaciones con el acero y el metal, con la finalidad de calentarlo o enfriarlo en condiciones totalmente bajo control (de temperatura, tiempo, presión o velocidad) para modificar las propiedades mecánicas. Existen diferentes tipos de tratamientos térmicos (temple, revenido, recocido) al igual que diferentes medios de temple (agua, aceite, sales fundidas). Sin embargo, se ha estado incursionando en otros métodos de tratamientos térmicos para mejorar las propiedades mecánicas y viendo una viabilidad de reducir el impacto ambiental.

Una alternativa es el lecho fluidizado ya que nos ofrece ventajas como una rápida y homogénea transferencia de calor en el interior del lecho en la cual proporciona un beneficio que se refleja en una reducción de costos; un control más sencillo y seguro de las operaciones isotérmicas ya que el mezclado rápido de las partículas permite alcanzar iguales condiciones de temperatura en el lecho. El lecho fluidizado se da a entender como un volumen de partículas suspendido en un flujo ascendente de gas, teniendo un comportamiento similar al de un fluido.

La modelación matemática y simulación son herramientas que nos permiten optimizar procesos metalúrgicos. Para poder modelar y simular el proceso de temple se necesita de conocer las condiciones de frontera. En este caso particular las condiciones de frontera están dadas por un *flux* de calor en la superficie la cuales se obtuvieron experimentalmente en otro trabajo [7]; las cuales este modelo matemático se apoya en los datos previamente mencionados, donde se simula la evolución del campo térmico y microestructural desarrollado en el lenguaje de programación *Wolfram Mathematica*. Este modelo matemático también es amigable con el usuario ya que se desarrolló una interfaz gráfica para cada una de las etapas, la cual permite al usuario modificar las variables y visualizar los cambios en la evolución térmica y microestructural en las diferentes versiones, teniendo la opción de importar los datos obtenidos en cada simulación en un archivo .CSV.

1.1 Hipótesis

La respuesta termo-estructural simulada de una probeta de acero *AISI 4140*, sometida a un enfriamiento continuo en un reactor de lecho fluidizado, será más sensible al número de fluidización que al diámetro de la probeta.

1.2 Objetivo

Predecir, con ayuda de un modelo matemático determinístico, la evolución de los campos térmico y microestructural durante el tratamiento térmico de probetas de acero *AISI 4140*, en un reactor de lecho fluidizado a escala laboratorio.

1.3 Metas

- I. Implementar la solución analítica de la evolución del campo térmico, sin incluir transformaciones de fase, para verificar el componente térmico del modelo matemático
- II. Diseñar diagramas de flujo para la solución numérica, mediante el método de diferencias finitas implícito, del problema termo-microestructural considerando por separado cada posible transformación de fase (a martensita o a bainita).
- III. Diseñar diagramas de flujo para la solución numérica, mediante el método de diferencias finitas implícito, del problema termo-microestructural considerando transformación de fase consecutiva (martensita y bainita).
- IV. Implementar los diagramas de flujo en códigos elaborados con *Wolfram Mathematica*
- V. Validar y aplicar los modelos termo-estructurales
- VI. Desarrollar una interfase de usuario con *Wolfram Mathematica*

Antecedentes

1.4 Tratamiento térmico de aceros

La manera más versátil para modificar las propiedades mecánicas de los aceros se basa en un conjunto de operaciones de calentamiento, mantenimiento a temperatura y enfriamiento, que reciben el nombre de tratamientos térmicos [1].

Estas modificaciones de las propiedades amplían, día a día, las posibilidades de aplicación de estos materiales metálicos. Los avances conseguidos en el ámbito de los tratamientos térmicos son cada día más espectaculares: la aparición de nuevos y sofisticados sistemas de calentamiento y de enfriamiento, el control cada vez más preciso y fiable de la atmósfera en los hornos de tratamientos térmicos y el continuo progreso en la generación de conocimiento de la metalurgia física de los metales y de las aleaciones hacen posible esta realidad [1].

1.5 Tipos de tratamientos térmicos

Los procesos de tratamiento térmico de acero se basan en la transformación o descomposición de la austenita. Los principales tratamientos térmicos que se aplican a los aceros son: recocido, temple y revenido [2].

Recocido: tratamiento que se aplica a piezas previamente trabajadas en frío o a piezas de colada. La pieza se lleva a una temperatura de austenización para después enfriarla lentamente (dentro del horno). El recocido se emplea para reducir defectos producidos durante el conformado en frío, eliminando tensiones internas; por el contenido de carbono o las aleaciones los aceros son difíciles de mecanizar, por lo cual se realiza un recocido de ablandamiento, reduciendo su dureza para facilitar el mecanizado [2].

Temple: tratamiento que tiene por objetivo aumentar las propiedades mecánicas (dureza, resistencia mecánica) transformando la austenita en martensita; esto se logra calentando la pieza hasta una temperatura mayor a la temperatura crítica de la austenita, se mantiene a esta temperatura y se realiza un enfriamiento severo en un medio de temple, con esto aseguramos un cambio microestructural dentro del acero endureciendo la pieza [3].

Revenido: después del tratamiento de temple los aceros adoptan propiedades donde son frágiles y duros, sin embargo, se pueden corregir con un tratamiento complementario. El acero templado se calienta a temperaturas inferiores a las de transformación eutectoide, seguido de un enfriamiento controlado, con este proceso se eliminan las tensiones generadas durante la transformación martensítica devolviendo tenacidad al material [3].

1.6 Tipos de temple

Existen variantes del proceso de temple, tales como:

Temple ordinario o directo: Se realiza calentando el acero hasta austenizarlo, para enfriarlo a una rapidez mayor que la crítica de temple, de modo que se produzca un endurecimiento notable, el cual se debe a la formación de martensita y puede suceder en la superficie solamente o en toda la pieza, dependiendo de la capacidad de temple del acero [3]. Se utiliza un solo medio de enfriamiento y la estructura resultante es martensita.

Temple escalonado: Se calienta el material por encima de la temperatura crítica y, durante el enfriamiento, la rapidez de enfriamiento de la pieza se cambia abruptamente en un momento dado, es decir, se utilizan dos o más medios de enfriamiento, logrando una microestructura de martensita menos tensionada y austenita retenida [4].

Martempering: proceso que consiste en enfriar rápidamente desde la temperatura de austenización e interrumpir dicho enfriamiento encima de la temperatura M_s (inicio de la transformación martensítica), hasta que la distribución de temperaturas al interior de la pieza sea uniforme, entonces la pieza es enfriada al aire. De este modo la formación de martensita ocurre en una forma uniforme en toda la masa del acero, evitando la formación de excesivas tensiones residuales reduciendo el riesgo de agrietamientos y deformaciones en la pieza [2,3].

Austempering: Luego de calentar hasta la temperatura de austenización, la pieza se enfría en un baño que se mantiene a una temperatura constante, generalmente entre 260°C y 400°C. Luego se deja enfriar hasta la temperatura ambiente, generalmente al aire [3]. Este tratamiento térmico propicia alta resistencia junto a buenas condiciones de ductilidad, gracias a la estructura de bainita inferior que se obtiene.

1.7 Diagramas de transformaciones de fase

La clave en el control de los tratamientos térmicos está en predecir las transformaciones de fase que se producen durante el proceso de calentamiento y enfriamiento de las piezas. Los resultados deseados se consiguen al calentar la pieza en los rangos de temperatura donde la fase austenita es estable, seguido de un enfriamiento entre los rangos de temperatura donde las diferentes fases que se busca conseguir son estables, produciendo de este modo la transformación de fase requerida [6,7].

1.8 Diagrama TTT

Son diagramas que representan el tiempo necesario a una temperatura específica para que inicie y termine una transformación de fase bajo condiciones isotérmicas; las siglas provienen de: tiempo-temperatura-transformación. Se construyen a partir de las curvas de transformación isotérmicas, representando los puntos de inicio,

50% y fin de transformación para cada temperatura. Para su obtención se realizan ensayos con distintas probetas, que se someten a tratamientos isotérmicos; al terminar, se mide su dureza y se analiza su microestructura. En el diagrama de la Figura 1.1 se aprecia que, entre la línea crítica superior (C_s) y la línea de inicio de transformación, la austenita es estable. Una vez que se cruza la curva de inicio de transformación, la austenita se descompone, de forma isotérmica, en agregados de ferrita y cementita (parte superior del diagrama TTT) [8]. La imagen superior de la figura muestra la cinética de la transformación isotérmica, a una temperatura específica. La curva sigue un comportamiento sigmoide, que puede modelarse con la ecuación de Avrami.

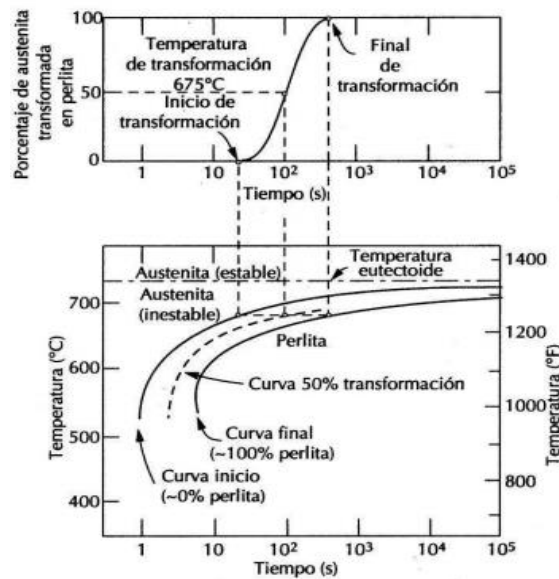


Figura 1.1. Diagrama TTT de transformación de fase del acero AISI 4140 [8].

1.9 Diagramas CCT

En la práctica, la mayoría de los tratamientos térmicos ocurren bajo condiciones de enfriamiento continuo. El uso de una rapidez de enfriamiento constante es muy común en la práctica experimental; sin embargo, este régimen rara vez ocurre en planta. También se pueden encontrar curvas para las llamadas rapidezces de enfriamiento “naturales”, calculadas con la ley de enfriamiento de Newton.

Estas curvas simulan el comportamiento en el interior de una pieza de relativamente gran tamaño, como la rapidez de enfriamiento de una barra Jominy a cierta distancia desde el extremo templado. Cerca de la superficie, las características de la rapidez de enfriamiento pueden ser muy complejas. En la parte inferior de la Figura 1.2 se muestra un diagrama CCT (líneas completamente dibujadas) para un acero de medio carbono; se indican las regiones de perlita y martensita, así como la temperatura de inicio de la transformación martensítica, M_s . La temperatura M_s no es constante cuando la formación de martensita está precedida por la formación de bainita [8].

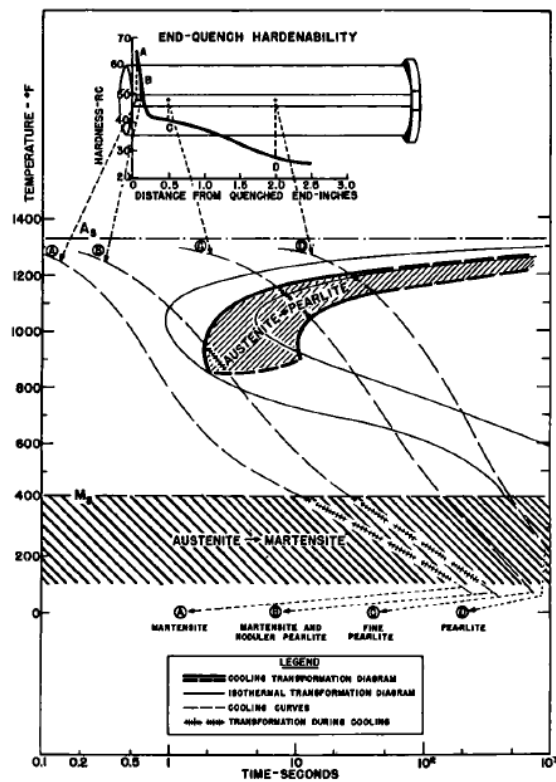


Figura 1.2. Relación de los diagramas CCT (líneas gruesas) e IT o TTT (líneas discontinuas) de un acero de medio carbono. Curvas de enfriamiento locales en una probeta sujeta al ensayo Jominy se superponen en el diagrama CCT [2].

1.10 Martensita

El término “martensita” se debe al investigador Adolfo Martens, quien fue uno de los primeros en estudiar las estructuras de los aceros después del temple. La transformación martensítica en los aceros comienza cuando el metal se enfría suficientemente rápido desde el campo austenítico, no dando tiempo para que exista una transformación difusional. La martensita es una solución sólida supersaturada de átomos de carbono con una estructura tetragonal de cuerpo centrado (*BCT*) [5].

La Figura 1.3 muestra una martensita cuya morfología, vista al microscopio óptico, aparece como agujas, por lo que se conoce como estructura acicular [9]. La morfología particular de una pieza depende del contenido de carbono del acero.

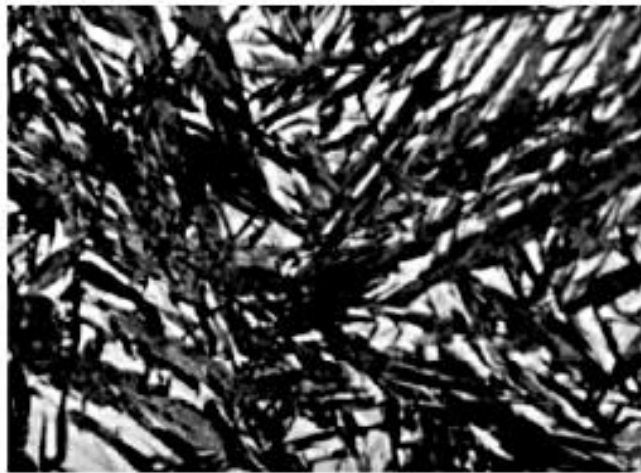


Figura 1.3. Microestructura martensítica acicular [5].

1.11 Bainita

La microestructura bainítica se caracteriza por la formación de placas o listones de ferrita supersaturada con carbono; este elemento (dependiendo de la temperatura de transformación) se difunde hacia la austenita residual promoviendo la precipitación de carburos (bainita superior), o precipita como carburos dentro de la placa de ferrita (bainita inferior).

Esto se muestra esquemáticamente en la Figura 1.4; en la Figura 1.5 se observa la morfología de ambos tipos de bainita, para un acero eutectoide [10].

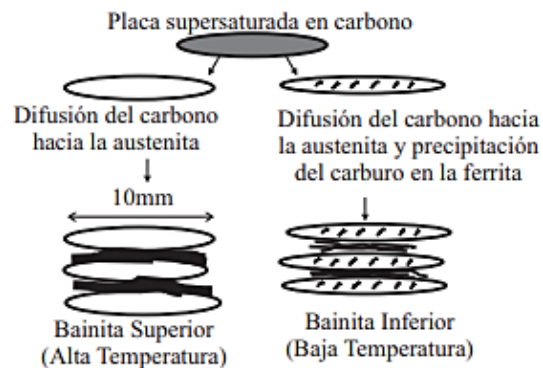


Figura 1.4. Ilustración esquemática de la formación de bainita superior e inferior [10].

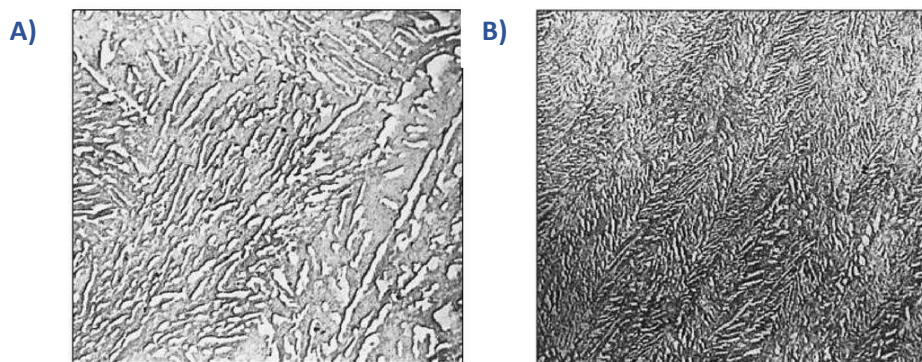


Figura 1.5. A) Bainita superior (obtenida isotérmicamente a 450 °C) y B) bainita inferior (obtenida isotérmicamente a 260 °C), correspondiente a un acero eutectoide [10].

1.12 Lecho fluidizado

La fluidización sucede cuando se coloca una cantidad de partículas en el flujo ascendente de un gas, comportándose como un líquido.

Consta de un lecho de partículas sólidas que se calientan haciéndose pasar un fluido o gas caliente a través de ellas, la energía es almacenada en las partículas y posteriormente se cede o extrae, la energía se cede en forma de calor a través del lecho de partículas hacia una pieza sumergida en él [11-13].

La principal característica de los lechos fluidizados es la velocidad del flujo o velocidad superficial del gas, esta velocidad es la que se presenta en el lecho como si no existieran partículas; esta velocidad determina el régimen de fluidización que se presenta en el lecho, indicando el tipo de partículas y gases en los que ocurre o no la fluidización.

La velocidad del gas determina qué tipo de lecho se obtiene dentro del reactor, al aumentar la velocidad se alcanza el equilibrio entre el peso de las partículas con la fuerza ejercida por el flujo, a esto se le llama “lecho de mínima fluidización”. En la Figura 1.6 se puede apreciar que cuando se excede la velocidad por encima de la velocidad mínima de fluidización se presentan burbujas de gas y la altura del lecho se encuentra por debajo de la altura del lecho suave, cuando esto ocurre se presenta un lecho burbujeante, los cuales son propicios para los tratamientos térmicos por la alta transferencia de calor. Por otro lado, la velocidad del fluido debe ser lo suficientemente alta como para suspender las partículas, pero a la vez no tan elevada como para expulsarlas fuera del recipiente que las contiene, por lo cual a este régimen se denomina lecho fluidizado turbulento [11-13].

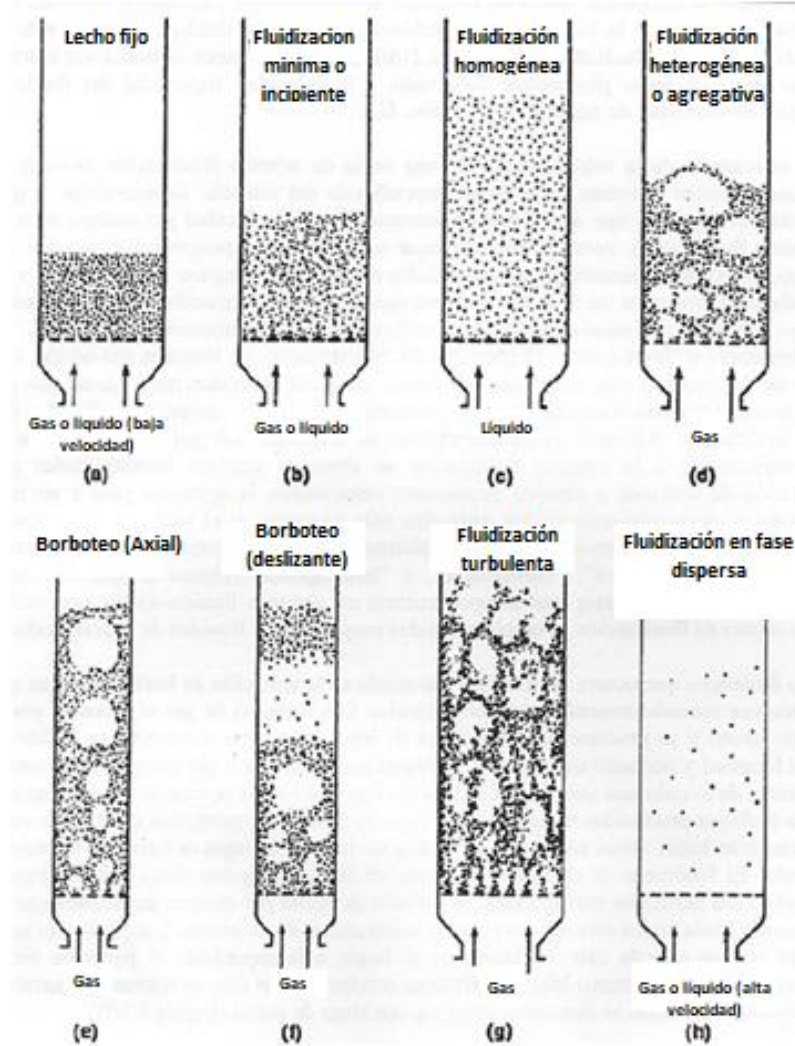


Figura 1.6. Diferentes modelos de contacto entre el lecho de partículas y el fluido. A) Lecho fijo; B) Fluidización mínima o incipiente; C) Fluidización homogénea; D) Fluidización heterogénea o agregativa; E) Borboteo axial; F) Borboteo deslizante; G) Fluidización turbulenta; H) Fluidización en fase dispersa con transporte neumático de partículas [14].

1.13 Número de fluidización

Para comparar el comportamiento de lechos fluidizados que consisten en diferentes combinaciones de partículas (tamaño, material) y gas (tipo, velocidad superficial), se utiliza el número de fluidización, que es un número adimensional. El número de fluidización, N_f , se define como la relación de la velocidad superficial del gas en el reactor dividido entre la velocidad mínima de fluidización [14].

$$N_f = \frac{v}{v_{mf}} \equiv \frac{Q}{Q_{mf}} \quad (1.1)$$

Donde:

N_f : Número de fluidización

v : velocidad superficial del gas

v_{mf} : velocidad superficial del gas para fluidización mínima

Q : Flujo volumétrico alimentado al reactor del lecho fluidizado

Q_{mf} : Flujo volumétrico para producir fluidización mínima o incipiente

1.14 Mecanismo de transferencia de calor en lechos fluidizados

La rapidez de transferencia de calor de lechos fluidizados en condiciones de trabajo se encuentra en el rango de 120-1200 W/ (m² °C) [11], siendo sólo comparable con los baños de sales, pero son mucho más rápidos que los hornos de convección/radiación (4 a 25 veces más rápida). Esto se debe al movimiento turbulento, la rápida circulación de las partículas y la enorme área interfacial y superficie de contacto gas-sólido, los cual implica una excelente transferencia de calor [14].

Esta rapidez de transferencia de calor depende principalmente de cuatro factores [11,14]:

- 1) Tamaño de partícula
- 2) Material del lecho
- 3) Velocidad de fluidización
- 4) Diseño del lecho

Cabe mencionar que la transferencia de calor en las superficies sumergidas en un lecho fluidizado está asociada con tres mecanismos de transferencia de calor:

- 1) Conducción debido al tamaño de las partículas
- 2) Convección debido al movimiento del gas
- 3) Radiación debido al gradiente de temperatura del seno a la superficie de transferencia.

La relevancia de cada uno de ellos depende de las características del proceso y su comportamiento de las condiciones de flujo, temperatura y propiedades de las partículas. Todos los modos de transferencia de calor pueden ser considerados independientes y sus efectos se pueden agregar para dar un coeficiente de transferencia de calor total [11,14].

2. Método de diferencias finitas

Los métodos numéricos constituyen técnicas mediante las cuales es posible formular problemas matemáticos, de tal forma que puedan resolverse utilizando operaciones aritméticas. Aunque existen muchos tipos de métodos numéricos, éstos comparten una característica común: invariablemente requieren de muchos cálculos aritméticos. No es raro que con el desarrollo de computadoras digitales eficientes y rápidas, el papel de los métodos numéricos en la solución de problemas en ingeniería haya aumentado de forma considerable en los últimos años [15].

Las aproximaciones en diferencias finitas son indispensables para resolver problemas que involucran transporte multidimensional, condiciones de contorno no homogéneas o no lineales, o propiedades variables. Al configurar los problemas más complejos que utilizan aproximaciones en diferencias finitas, las soluciones analíticas a menudo proporcionan una verificación conveniente de los cálculos [16].

Entre los métodos numéricos más comunes podemos citar los métodos de diferencias finitas, elementos finitos e integral de contorno. Siendo el primero de estos el más popular por sus facilidades que presenta durante su deducción. Para aplicar el método de diferencias finitas existen muchas variantes, siendo el más popular el construir una ecuación de diferencias aplicando el principio de conservación de la energía a un elemento de volumen alrededor de un nodo de la red [16,17].

Debe mencionarse que existen diversos programas por computadora que simulan procesos de transferencia de calor, dentro de los cuales podemos citar: SINDA, MITAS, PHOENICS, ANSYS [15-17], sin embargo, para este trabajo se construyó el código de desarrollo propio mediante el lenguaje de programación *Wolfram Mathematica*.

3. Metodología

A partir del modelo matemático que describe al proceso se desarrolló un programa de cómputo que calcula simultáneamente la respuesta térmica y microestructural de probetas de acero durante el enfriamiento en un reactor de lecho fluidizado. La geometría que se utilizó en las probetas fue la de un cilindro largo, por lo cual solo se consideró que el flujo de calor ocurre en dirección radial ya que los gradientes de temperatura en el sentido axial son despreciables. La ecuación de conducción de calor en el sólido se resolvió mediante el método implícito de diferencias finitas. La evolución de la transformación a martensita se calculó con la ecuación de Koistinen-Marburger; por otra parte, la evolución de la transformación a bainita se calculó con la ecuación de Avrami y considerando el principio de aditividad. Los parámetros cinéticos se tomaron de la literatura. La condición de frontera activa está definida en términos de *flux* de calor en la superficie en función de la temperatura superficial y se tomó de una tesis previa [7]. Tanto el modelo matemático como el programa de cómputo se desarrollaron en varias etapas.

La descripción de cada etapa, hasta llegar al código final se describe a continuación:

- I. Etapa 1: Solución numérica para una geometría cilíndrica, con propiedades termofísicas constantes, sin generación, con coeficiente de transferencia de calor constante, con la cual se verificará el código.
- II. Etapa 2: Solución numérica para una geometría cilíndrica, con propiedades termofísicas constantes, con generación (debido a la transformación martensítica) y coeficiente de transferencia de calor constante.
- III. Etapa 3: Solución numérica para una geometría cilíndrica, con propiedades termofísicas constantes, con generación (debido a la transformación martensítica) y un *flux* de calor en la superficie constante.
- IV. Etapa 4: Solución numérica para una geometría cilíndrica, con propiedades termofísicas constantes, con generación (debido a la transformación martensítica) y un *flux* de calor en la superficie variable, que depende de la temperatura de la superficie, con la cual se validará el código.

- V. Etapa 5: Solución numérica para una geometría cilíndrica, con propiedades termofísicas constantes, con generación (debido a la transformación bainítica) y un *flux* de calor en la superficie variable, que depende de la temperatura de la superficie, con la cual se validará el código.
- VI. Etapa 6: Solución numérica para una geometría cilíndrica, con propiedades termofísicas constantes, con generación (debido a la transformación bainítica y martensítica) y un *flux* de calor en la superficie variable, que depende de la temperatura de la superficie, con la cual se validará el código.

Para cada etapa, la formulación matemática específica se detalla a continuación.

3.1 Formulación matemática

La formulación matemática incluye a la ecuación gobernante del sistema, la condición inicial y las condiciones de frontera. Considerando estado no estacionario, geometría cilíndrica, generación (debido a la transformación de fase) y propiedades termofísicas constantes, la ecuación gobernante está dada por la Ec. 3.1 (al inicio de este documento está la lista de símbolos).

$$\alpha \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + \frac{S_H}{\rho C_p} = \frac{\partial T}{\partial t}, \quad 0 \leq r \leq R, t > 0 \quad (3.1)$$

Considerando que el flujo de calor solo ocurre en la dirección radial, la Ec. 3.1 se reduce a la Ec. 3.2.

$$\alpha \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial T}{\partial r} \right] + \frac{S_H}{\rho C_p} = \frac{\partial T}{\partial t}, \quad 0 \leq r \leq R, t > 0 \quad (3.2)$$

La condición inicial, para todas las etapas del desarrollo del código, está dado por la Ec. 3.3 (distribución uniforme de temperatura).

$$T(r, 0) = T_0 \quad (3.3)$$

Para poder simular las transformaciones de fase, en el caso de la martensita, se ha utilizado el modelo de Koistinen-Marburger. Donde el superíndice indica el tiempo (j-1 es tiempo pasado, j+1 es tiempo futuro) mientras que el subíndice se refiere a la posición nodal (i)

En este modelo la fracción de austenita transformado a martensita en un tiempo futuro (F_i^{j+1}) depende únicamente del grado de subenfriamiento a partir de la temperatura de inicio de la transformación martensítica (M_s) [18,19].

$$F_i^{j+1} = 1 - \exp\left(-\beta (M_s - T_i^j)\right) \quad (3.4)$$

Donde β es una constante ($0.011 \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$) que indica la velocidad de generación de martensita, M_s es la temperatura de inicio de transformación martensítica, la cual disminuye con el incremento en el contenido de carbono, T_i^j será la temperatura calculada en este instante en el nodo de interés.

$$\Delta F_i = F_i^{j+1} - F_i^j \quad (3.5)$$

Para determinar el ΔF_i de la variación de la fracción transformada en el nodo de interés se hará la diferencia de la fracción transformada a un tiempo futuro (F_i^{j+1}) menos la fracción transformada en ese instante en el nodo de interés (F_i^j) [18,19].

Para las transformaciones consecutivas se debe de considerar un término adicional, en donde las fracciones de fase transformadas a partir de la austenita (perlita, bainita o ferrita) se consideran multiplicando por el termino $(1 - \sum F_i^j)$ donde F_i^j representa la fracción transformada (perlita, bainita o ferrita) en ese instante en el nodo de interés.

$$F_i^{j+1} = 1 - \exp\left(-\beta (M_s - T_i^j)\right) \left(1 - \sum F_i^j\right) \quad (3.6)$$

Chromium-Molybdenum Steels: 4140

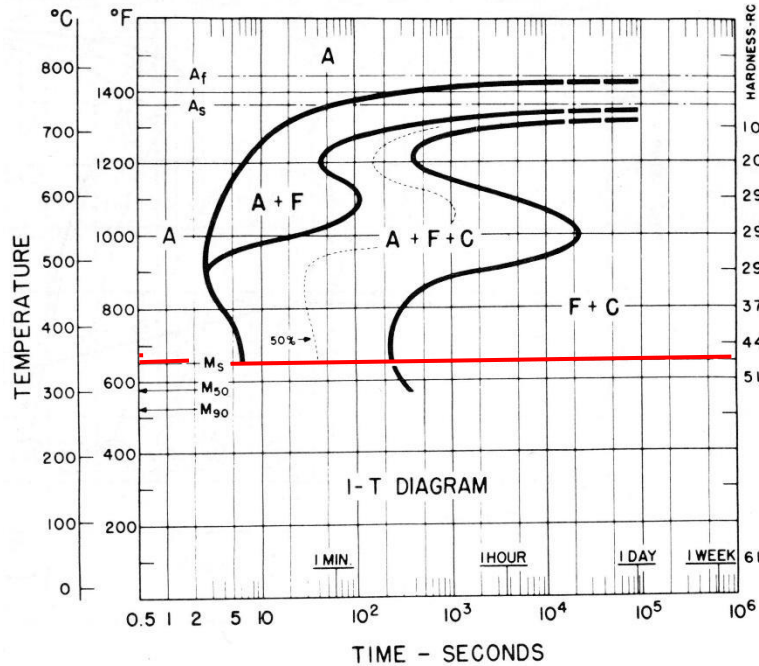


Figura 3.1. Diagrama de fase TTT del acero AISI 4140, denotando la temperatura de inicio (M_s) de transformación martensítica [22].

Para poder estimar la fracción de fase transformada F_i^j (bainita), en la reacción de precipitación difusional durante la descomposición isotérmica de la austenita se utilizó la ecuación tipo JMAK (Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov) la cual describe la evolución de la fracción transformada en función del tiempo de acuerdo con la siguiente ecuación [20,21]:

$$F_i^j = 1 - \exp\left(-n(T_j) t_j^{b(T_j)}\right) \quad (3.7)$$

Donde $b[T]$ y $n[T]$ son parámetros que deben de determinarse empíricamente a través del diagrama de fase TTT del acero. Conocido el diagrama TTT del acero (ver Figura 3.1) y operando con la ecuación JMAK se obtienen los parámetros $b[T]$ y $n[T]$ para cada temperatura dados por la Ec. 3.8 y 3.9.

$$b = -\frac{\ln(1 - F_i)}{(t_i)^n} \quad (3.8)$$

$$n = \frac{\ln \left[\frac{\ln(1 - F_i)}{\ln(1 - F_f)} \right]}{\ln \left(\frac{t_i}{t_f} \right)} \quad (3.9)$$

Donde F_i y F_f son las fracciones de transformación al tiempo t_i y al tiempo final t_f consideradas como 0.01 y 0.99 de transformación que ha alcanzado respectivamente [20,21].

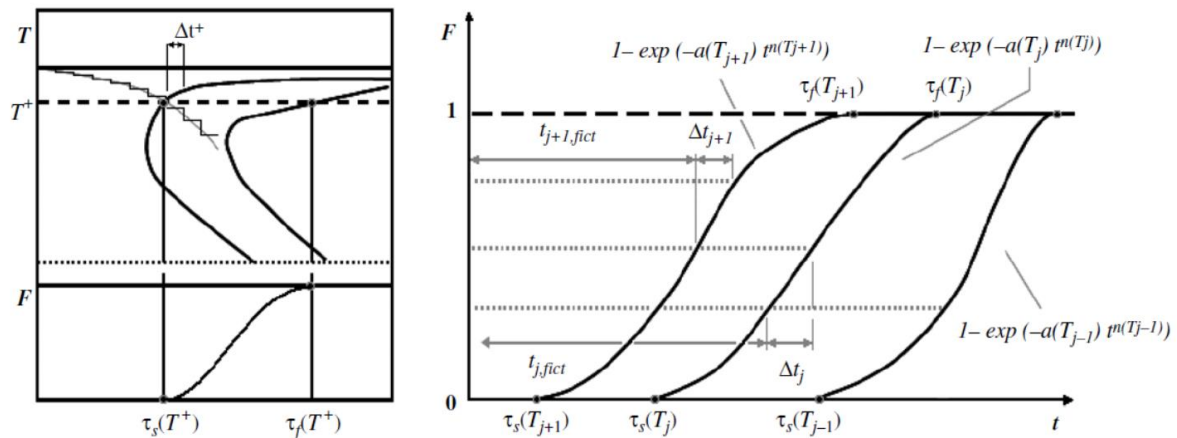


Figura 3.2. Aplicación de la regla de adición. Tiempo de incubación de la transformación no isotérmica [19].

La curva de enfriamiento puede ser dividida en pequeños intervalos de tiempo Δt , típicamente de 0.1 s para determinar los parámetros $b[T]$ y $n[T]$ (ver Figura 3.2).

Según el modelo JMAK modificado, para cada paso de tiempo j corresponde a una T^j , la fracción del volumen acumulado de la fase específica i , indicada como F_i^{j-1} , transformada hasta el último paso de tiempo $j - 1$ da como resultado un tiempo ficticio $t_{j,fict}$, que representa el tiempo necesario a la temperatura T^j para obtener

la misma cantidad de fase transformada acumulada. La siguiente ecuación nos permite hacer el cálculo del tiempo ficticio $t_{j, fict}$:

$$t_{j, fict}(T^j) = \left[\frac{-\ln(1 - F_i^j)}{n(T^j)} \right]^{\frac{1}{b(T^j)}} \quad (3.10)$$

En consecuencia, el tiempo total de permanencia t_j a la temperatura T^j se puede escribir como la suma del tiempo ficticio $t_{j, fict}$ y la duración Δt_j del paso de tiempo j dado por [20,21]:

$$t_j = \Delta t_j + t_{j, fict} = \Delta t_j \left[\frac{-\ln(1 - F_i^j)}{n(T^j)} \right]^{\frac{1}{b(T^j)}} \quad (3.11)$$

El cálculo de las transformaciones de fase también viene dividido en dos etapas: etapa de nucleación o incubación (Figura 3.2) y etapa de crecimiento. Durante la etapa de nucleación se calcula el tiempo de incubación de cada una de las fases y en la etapa de crecimiento el volumen transformado [20,21].

Para determinar el ΔF_i^j de la variación de la fracción transformada en el nodo de interés se hará la diferencia de la fracción transformada en ese instante en el nodo de interés (F_i^j) menos la fracción transformada a un tiempo pasado (F_i^{j-1}) [20,21], dado por la Ec. 3.12.

$$\Delta F_i^j = F_i^j - F_i^{j-1} \quad (3.12)$$

I. Etapa 1

La ecuación gobernante está dada por la Ec. 3.13 y las condiciones a la frontera por las Ecs. 3.14 y 3.15.

$$\alpha \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial T}{\partial r} \right] = \frac{\partial T}{\partial t}, \quad 0 \leq r \leq R, t > 0 \quad (3.13)$$

$$C.F.1 \quad r = 0 \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (3.14)$$

$$C.F.2 \quad r = R \quad -k \frac{\partial T}{\partial r} = -\bar{h}(T_f - T_{sup}) \quad (3.15)$$

II. Etapa 2

La generación se presenta cuando la temperatura de alguna parte de la probeta llega a la temperatura de inicio de la transformación y se detiene cuando termina la transformación; el término que se añade a la ecuación cuando ocurre generación está definido por la Ec. 3.16.

$$S_H = \Delta H \frac{\Delta F}{\Delta t} \quad (3.16)$$

Rescribiendo la Ec. 3.13 y sustituyendo con la Ec. 3.16, la ecuación gobernante está dada por la Ec. 3.17 y las condiciones a la frontera por las Ecs. 3.18 y 3.19.

$$\alpha \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial T}{\partial r} \right] + \Delta H \frac{\Delta F}{\Delta t \rho C_p} = \frac{\partial T}{\partial t}, \quad 0 \leq r \leq R, t > 0 \quad (3.17)$$

$$C.F.1 \quad r = 0 \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (3.18)$$

$$C.F.2 \quad r = R \quad -k \frac{\partial T}{\partial r} = -\bar{h}(T_f - T_{sup}) \quad (3.19)$$

Para modelar la evolución de la transformación martensítica se utilizó la ecuación de Koistinen-Marburger, que se aplica en la solución numérica mediante las antes mencionadas Ecs. 3.4 y 3.5.

$$F_i^{j+1} = 1 - \exp(-\beta (Ms - T_i^j)) \quad (3.4)$$

$$\Delta F_i = F_i^{j+1} - F_i^j \quad (3.5)$$

III. Etapa 3

La formulación matemática con las simplificaciones antes descritas considerando generación está dada por la Ec. 3.17. Las condiciones de frontera que se emplearon en esta etapa están dadas por las Ec. 3.20 y 3.21.

$$C.F.1 \quad r = 0 \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (3.20)$$

$$C.F.2 \quad r = R \quad -k \frac{\partial T}{\partial r} = q_{sup\ cte} \quad (3.21)$$

Para la evolución de la transformación martensítica se utilizó la ecuación de Koistinen-Marburger dadas por la Ec. 3.4 y 3.5.

IV. Etapa 4

La ecuación gobernante está dada por la Ec. 3.17 y las condiciones a la frontera por las Ecs. 3.22 y 3.23.

$$C.F.1 \quad r = 0 \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (3.22)$$

$$C.F.2 \quad r = R \quad -k \frac{\partial T}{\partial r} = q_{sup}(T_{sup}) \quad (3.23)$$

Para la evolución de la transformación martensítica se utilizó la ecuación de Koistinen-Marburger dadas por la Ec. 3.4 y 3.5.

V. Etapa 5

La ecuación gobernante está dada por la Ec. 3.17 y las condiciones a la frontera por las Ecs. 3.24 y 3.25.

$$C.F.1 \quad r = 0 \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (3.24)$$

$$C.F.2 \quad r = R \quad -k \frac{\partial T}{\partial r} = q_{sup}(T_{sup}) \quad (3.25)$$

Para la evolución de la transformación bainítica se utilizó la ecuación de Avrami y el principio de aditividad, que se implementaron mediante las Ec. 3.7-3.12.

$$F_i^j = 1 - \exp\left(-n(T^j) t_j^{b(T^j)}\right) \quad (3.7)$$

$$b = -\frac{\ln(1 - F_i)}{(t_i)^n} \quad (3.8)$$

$$n = \frac{\ln\left[\frac{\ln(1 - F_i)}{\ln(1 - F_f)}\right]}{\ln\left(\frac{t_i}{t_f}\right)} \quad (3.9)$$

$$t_{j,fict}(T^j) = \left[\frac{-\ln(1 - F_i^j)}{n(T^j)}\right]^{\frac{1}{b(T^j)}} \quad (3.10)$$

$$t_j = \Delta t_j + t_{j,fict} = \Delta t_j \left[\frac{-\ln(1 - F_i^j)}{n(T^j)}\right]^{\frac{1}{b(T^j)}} \quad (3.11)$$

$$\Delta F_i^j = F_i^j - F_i^{j-1} \quad (3.12)$$

VI. Etapa 6

La ecuación gobernante está dada por la Ec. 3.17 y las condiciones a la frontera por las Ecs. 3.26 y 3.27.

$$C.F.1 \quad r = 0 \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (3.26)$$

$$C.F.2 \quad r = R \quad -k \frac{\partial T}{\partial r} = q_{sup}(T_{sup}) \quad (3.27)$$

A diferencia de la etapa 4 y 5, la transformación de fase será consecutiva, por lo cual se considerarán ambas transformaciones (primero la bainítica y luego la martensítica).

Para la evolución de la transformación martensítica se utilizó la ecuación de Koistinen-Marburger dadas por la Ec. 3.5 y 3.6, en donde la Ec. 3.6 se consideran multiplicando por el termino $(1 - \sum F_i^j)$ considerando la transformación de fase consecutiva.

$$F_i^{j+1} = 1 - \exp(-\beta (Ms - T_i^j)) (1 - \sum F_i^j) \quad (3.6)$$

Para la evolución de la transformación bainítica se utilizó la ecuación de Avrami y el principio de aditividad, que se implementaron mediante las Ec. 3.7-3.12 descritas en la etapa anterior.

La solución numérica se desarrolló utilizando el método implícito de diferencias finitas, para lo cual el dominio temporal se discretizó con pasos de tiempo constantes y el dominio espacial se discretizó como se muestra en la Figura 3.3, utilizando la nomenclatura señalada en los nodos para realizar un balance alrededor del nodo P.

Se utiliza una nomenclatura con los puntos cardinales teniendo como referencia el nodo de interés **P** (W: oeste & E: este) por su facilidad al agrupar términos para los pasos posteriores a la resolución de las ecuaciones finales. La misma nomenclatura se aplica para las radios y áreas a la izquierda y derecha del nodo de interés.

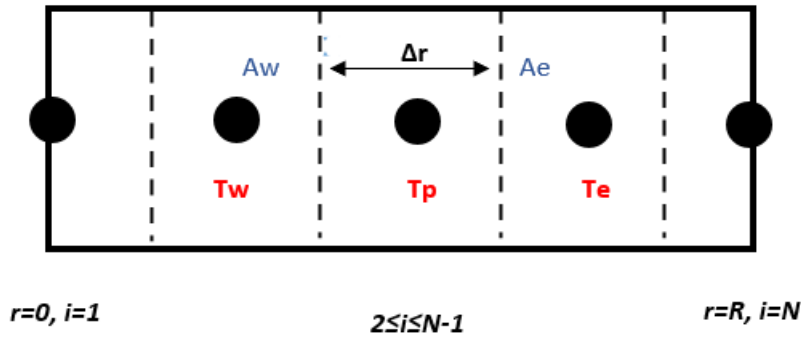


Figura 3.3. Representación esquemática de la discretización espacial para realizar un balance alrededor del nodo P.

Para la obtención de las ecuaciones de diferencias finitas implícitas se obtuvieron de la siguiente manera. Esta ecuación nodal pertenece al nodo en la frontera de la superficie del cilindro en contacto con el medio para la etapa 1.

Utilizando la ecuación de balance general:

$$\sum E + G = \sum S + Ac \quad (3.28)$$

Se realiza un balance en las entradas y salidas del nodo de interés (P). Por ejemplo, para el nodo en la frontera expuesta al medio de enfriamiento se tiene:

$$-\bar{h}(T_P^{j+1} - T_f)A_E = -k \left(\frac{T_W^{j+1} - T_P^{j+1}}{\Delta r} \right) A_W + \rho C_p V_P \left(\frac{T_P^{j+1} - T_P^j}{\Delta t} \right) \quad (3.29)$$

Se multiplica por Δt y se divide entre $\rho C_p V_p$, agrupando términos queda de la siguiente manera:

$$T_P^j = T_W^{j+1} \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + T_P^{j+1} \left[1 + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} + \frac{\bar{h} A_E \Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + T_f \left[-\frac{\bar{h} A_E \Delta t}{\rho C_p V_p} \right] \quad (3.30)$$

Agrupando la Ec. 3.30 por la 3.31 en donde se separan los términos de las temperaturas en los diferentes nodos tomando la misma nomenclatura con los puntos cardinales.

$$\mathbf{a}_p T_W^{j+1} + \mathbf{b}_p T_P^{j+1} + \mathbf{c}_p T_E^{j+1} = \mathbf{d}_p \quad (3.31)$$

La Ec. 3.30 queda finalmente dada por la Ec. 3.32 con los parámetros \mathbf{a}_p , \mathbf{b}_p , \mathbf{c}_p y \mathbf{d}_p .

$$\mathbf{a}_p = \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad \mathbf{b}_p = \left[1 + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} + \frac{\bar{h} A_E \Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad \mathbf{c}_p = 0, \\ \mathbf{d}_p = T_P^j - T_f \left[-\frac{\bar{h} A_E \Delta t}{\rho C_p V_p} \right] \quad (3.32)$$

Una vez desarrolladas todas las ecuaciones nodales, el resultado es un sistema de ecuaciones algebraicas simultaneas que tiene la característica de formar una matriz tridiagonal que se resolverá mediante el método de Thomas.

En varios métodos numéricos para la solución de ecuaciones diferenciales parciales se generan sistemas de ecuaciones algebraicas simultaneas (SEAS) que solo contienen un número limitado de incógnitas en cada ecuación y que dan lugar a una matriz bandeda. Una matriz bandeda es una matriz cuadrada cuyos elementos son cero, excepto las diagonales arriba y debajo de la diagonal principal. En particular, una matriz tridiagonal es aquella cuyos elementos distintos de cero son la diagonal principal y las dos diagonales adyacentes, tal como se muestra en la Ec. 3.33 [15,23].

3.2 Diagramas de flujo

Para implementar la formulación matemática de cada etapa junto con su correspondiente solución numérica en el código computacional, se desarrollaron diagramas de flujo.

En este trabajo se presentan tres diagramas de flujo principales:

- a) para los casos sin generación (Figura 3.5): en donde no existe generación (transformación de fase), únicamente el perfil térmico.
- b) para el caso con generación martensítica (Figura 3.6): implementando el modelo de Koistinen-Marburger (Ecs 3.4 – 3.5) donde nuestra transformación de fase estará limitada a M_s (Temperatura de inicio de la transformación martensítica) y M_f (Temperatura final de la transformación martensítica).
- c) para el caso con generación consecutiva a bainita y luego a martensita (Figura 3.7): implementando la ecuación tipo JMAK (Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov Ecs 3.7 – 3.12) donde la transformación de fase estará limitada a Bs_{CCT} (Inicio de la transformación bainítica de acuerdo al diagrama CCT del acero *AISI 4140*) y M_s ; y el modelo de Koistinen-Marburger (Ecs 3.5 – 3.6) donde nuestra transformación de fase estará limitada a M_s (Temperatura de inicio de la transformación martensítica) y M_f (Temperatura final de la transformación martensítica).

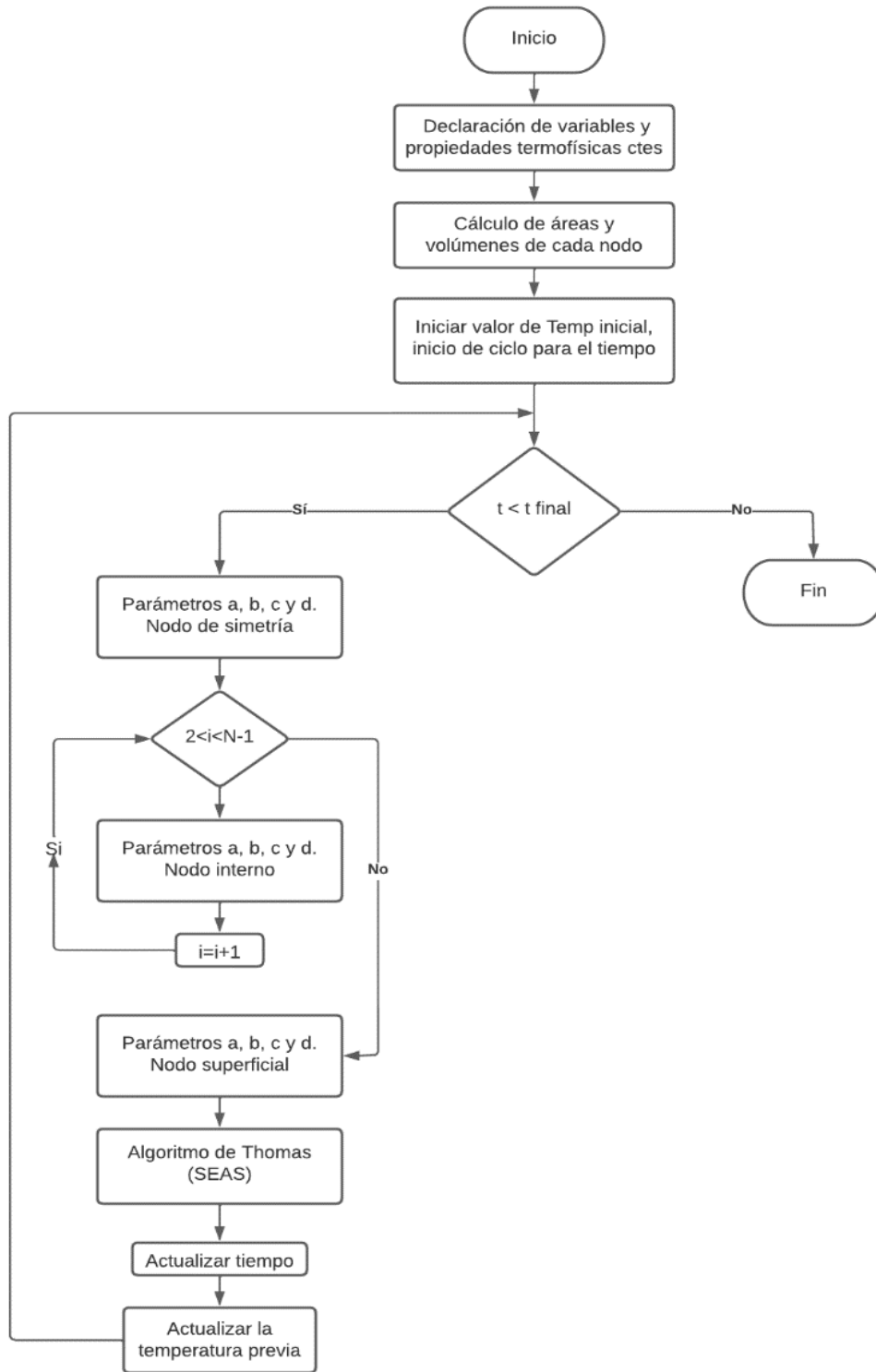


Figura 3.5. Diagrama de flujo del código empleado para el caso de enfriamiento sin generación.

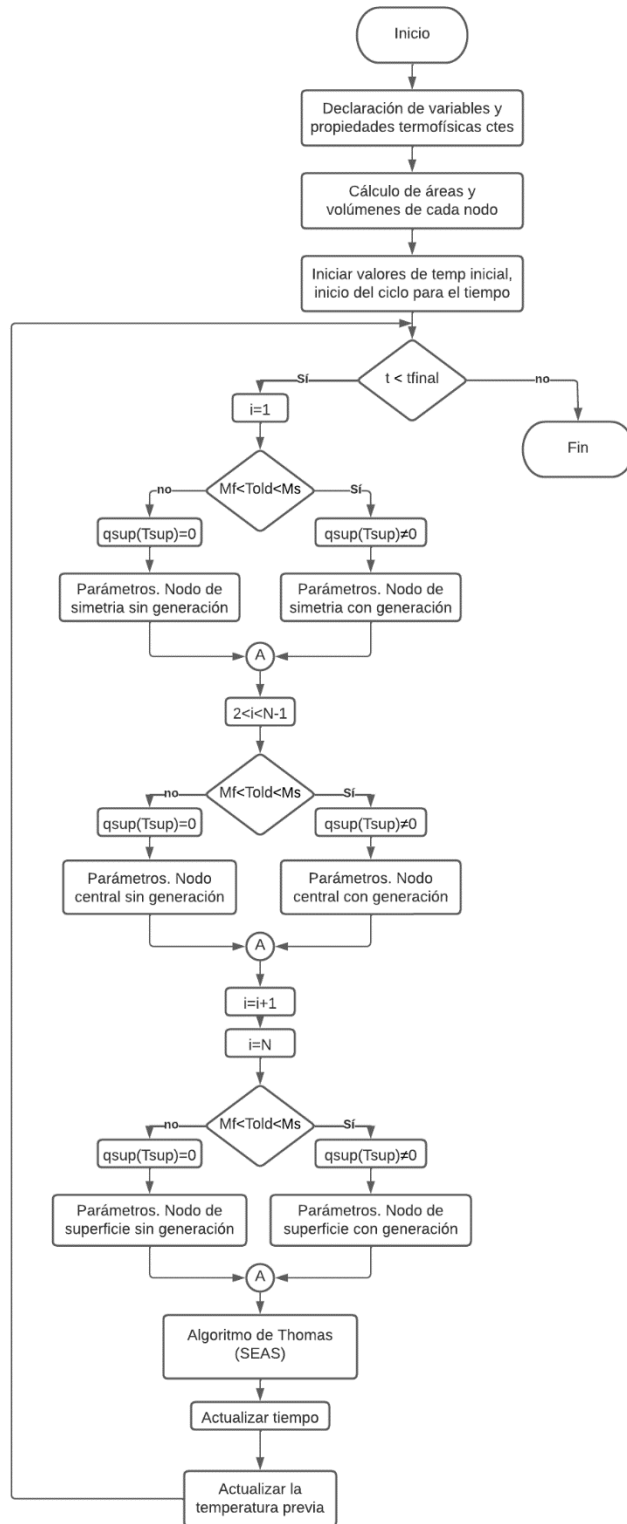


Figura 3.6. Diagrama de flujo del código empleado para el caso de enfriamiento con generación debido a la transformación martensítica.

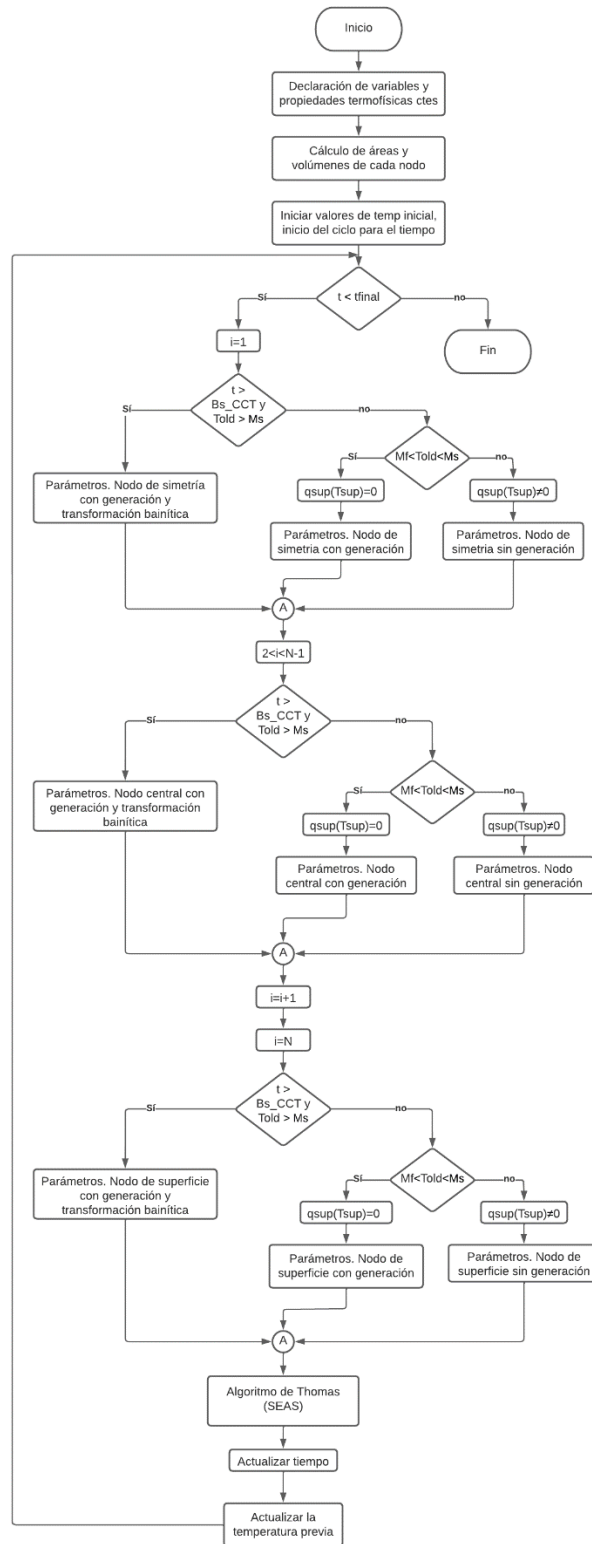


Figura 3.7. Diagrama de flujo del código empleado para el caso de enfriamiento con generación debido a la transformación consecutiva martensítica y bainítica.

3.3 Datos de simulación

Los datos utilizados en las distintas etapas de desarrollo del modelo matemático se presentan en las Tablas 3.1 a 3.9. Los datos de la Tabla 3.1. corresponden al de la probeta que se utilizó en los experimentos de un trabajo previo [7].

Tabla 3.1. Datos geométricos.

Cantidad	Unidad	Valor
Radio de la probeta	m	0.00635
Altura de la probeta	m	0.07

Tabla 3.2. Propiedades termofísicas del acero AISI 4140 [7].

Cantidad	Unidad	Valor
Conductividad térmica	W/ (m °C)	38.9
Calor específico	J/ (Kg °C)	517.7
Densidad	Kg/m ³	7865

En la Tabla 3.3 se muestran los datos para las simulaciones numéricas; el paso de tiempo y el número de nodos se estimaron con respecto a la independencia de malla y la influencia del paso de tiempo que se mencionan en los siguientes capítulos (Figura 4.1 y 4.6).

Tabla 3.3. Datos del método numérico en el modelado de enfriamiento de la probeta para todas las etapas.

Cantidad	Unidad	Valor
Paso de tiempo	s	0.1
Nodos	---	5

En la Etapa 1 se considera un coeficiente de transferencia de calor \bar{h} a partir de un número de Biot de $Bi = 2$ para un sistema cilíndrico, lo que facilita el uso de las gráficas de Heisler.

Tabla 3.4. Parámetros del modelo utilizados en la verificación del cálculo del perfil térmico (etapa 1).

Cantidad	Unidad	Valor
Radio de la probeta	m	0.014
Coefficiente de transferencia de calor	W/ (°C m ²)	5557.14
Temperatura inicial	°C	900
Temperatura del fluido	°C	30

En la Etapa 2 se incluye la generación relacionada por la transformación martensítica. El coeficiente de transferencia de calor \bar{h} se mantiene constante en esta etapa y se agrega el valor de la entalpia volumétrica de transformación austenita-martensita dados en la Tabla 3.5.

Tabla 3.5. Parámetros del modelo utilizados en la simulación del enfriamiento (etapa 2).

Cantidad	Unidad	Valor
Coefficiente de transferencia de calor (constante) [7]	W/ (°C m ²)	150
Entalpia volumétrica de transformación austenita-martensita [24]	J/m ³	6.4x10 ⁷
Ms [25]	°C	340
Mf [25]	°C	130

En la Etapa 3 el modelo matemático se va tornando más complejo, por lo cual se sustituye el valor constante del coeficiente de transferencia de calor \bar{h} de la etapa anterior por un *flux* de calor constante dado por la Tabla 3.6 que produce una respuesta térmica similar.

Tabla 3.6. Parámetro del modelo utilizado en la simulación del enfriamiento (etapa 3).

Cantidad	Unidad	Valor
<i>Flux</i> de calor (constante)	W/m ²	50000

Para la Etapa 4, los datos de *flux* de calor de la superficie en función de la temperatura de la superficie (ver Figura 3.8) se tomaron de la literatura [7]. Se leyeron en el código como archivo tipo .CSV y se interpolaron internamente para tener las condiciones de enfriamiento de un lecho fluidizado que produzca una microestructura martensítica. En el apéndice A se muestra a detalle el efecto del orden de interpolación utilizado dentro de *Mathematica*.

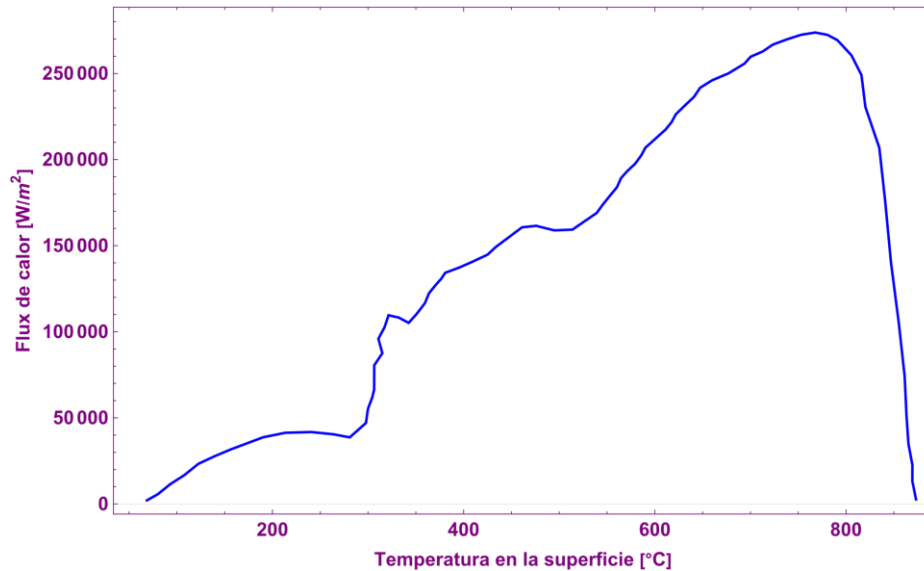


Figura 3.8. Flux de calor en la superficie vs. temperatura en la superficie, para un flujo de aire de 100 LPM ($Nf=1.8$) [7].

La temperatura inicial para esta etapa cambia debido a los datos experimentales que se tienen [7], los demás parámetros termofísicos se mantienen de la etapa anterior (etapa 3).

Tabla 3.7. Temperatura inicial del modelo utilizado en la simulación del enfriamiento (etapa 4).

Cantidad	Unidad	Valor
Temperatura inicial	°C	869

La simulación de transformación bainítica requiere de un diagrama CCT del acero de interés (ver Figura 3.9) para determinar cuándo inicia la transformación (B_s). Para la etapa 5, los datos de *flux* de calor de la superficie en función de la temperatura de la superficie (ver Figura 3.10) se tomaron de la misma fuente que para la etapa 4 [7]. Se leyeron en el código como archivo tipo .CSV y se interpolaron internamente para tener las condiciones de enfriamiento de un lecho fluidizado que produzca una microestructura bainítica.

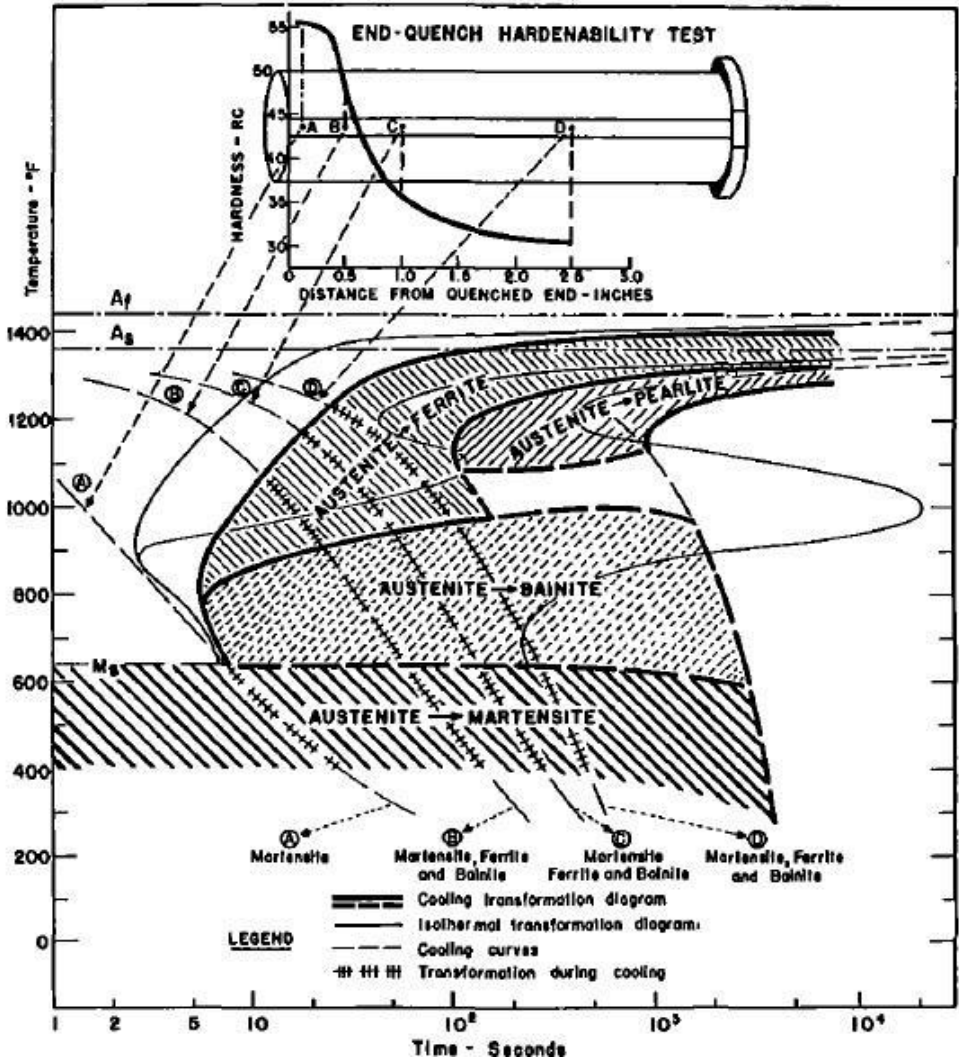


Figura 3.9. Curva CCT para un acero AISI 4140 [2].

Para esta etapa la temperatura inicial cambia (ver Tabla 3.8) debido a los datos experimentales tomados de la literatura para la transformación bainítica [7].

Tabla 3.8. Temperatura inicial utilizado en la simulación del enfriamiento (etapa 5).

Cantidad	Unidad	Valor
Temperatura inicial	°C	800

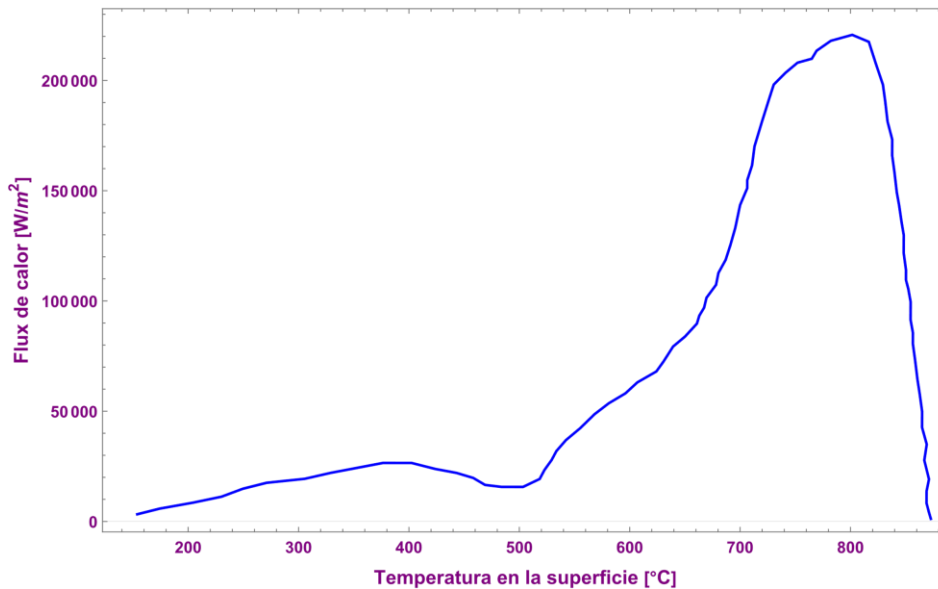


Figura 3.10. Flux de calor en la superficie vs. temperatura en la superficie, con un flujo de aire de 56 LPM ($Nf=1$) [7].

Para la simulación de transformación consecutiva de martensita y bainita se requiere de un diagrama CCT del acero de interés (ver Figura 3.9) para determinar cuándo inicia la transformación bainítica (B_s). Para la etapa 6, los datos de *flux* de calor de la superficie en función de la temperatura de la superficie (ver Figura 3.11) se tomaron de la misma fuente que para la etapa 4 y 5 [7]. Se leyeron en el código como archivo tipo .CSV y se interpolaron internamente para tener las condiciones de enfriamiento de un lecho fluidizado que produzca una microestructura consecutiva (martensítica y bainítica).

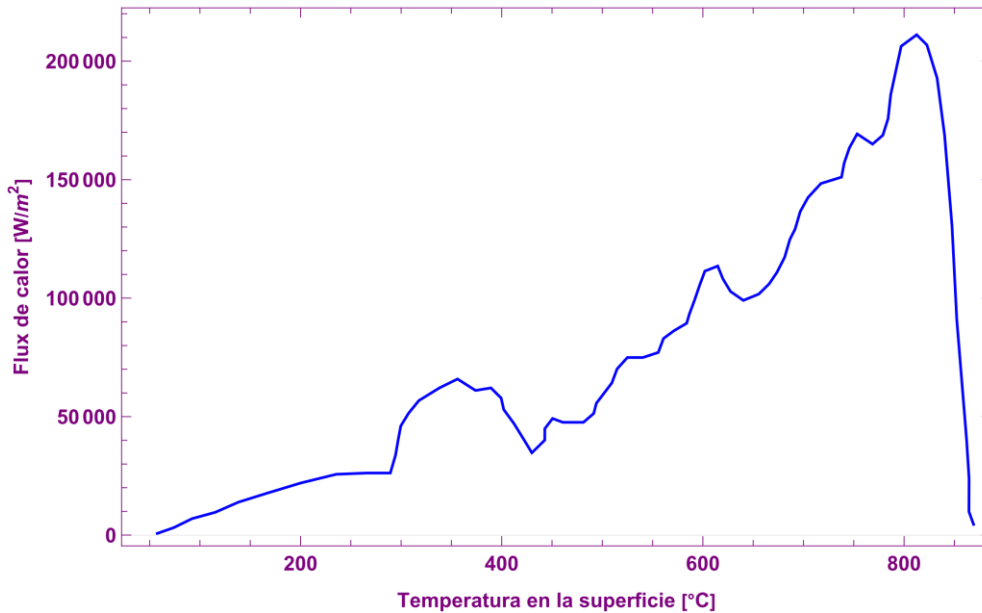


Figura 3.11. Flux de calor en la superficie vs. temperatura en la superficie, con un flujo de aire de 62 LPM ($N_f=1.1$) [7].

Al igual que los *flux* de calor para cada transformación, los parámetros cinéticos *b* (Figura 3.12) y *n* (figura 3.13) se leyeron en el código como archivo tipo .CSV y se interpolaron internamente para simular la transformación bainítica, que se obtuvieron de forma gráfica mediante el uso del diagrama TTT correspondiente al acero AISI 4140 (Figura 3.1). Para esta etapa la temperatura inicial cambia debido a los datos experimentales tomados de la literatura [7] (Tabla 3.9).

Tabla 3.9. Temperatura inicial utilizado en la simulación del enfriamiento (etapa 6).

Cantidad	Unidad	Valor
Temperatura inicial	°C	865

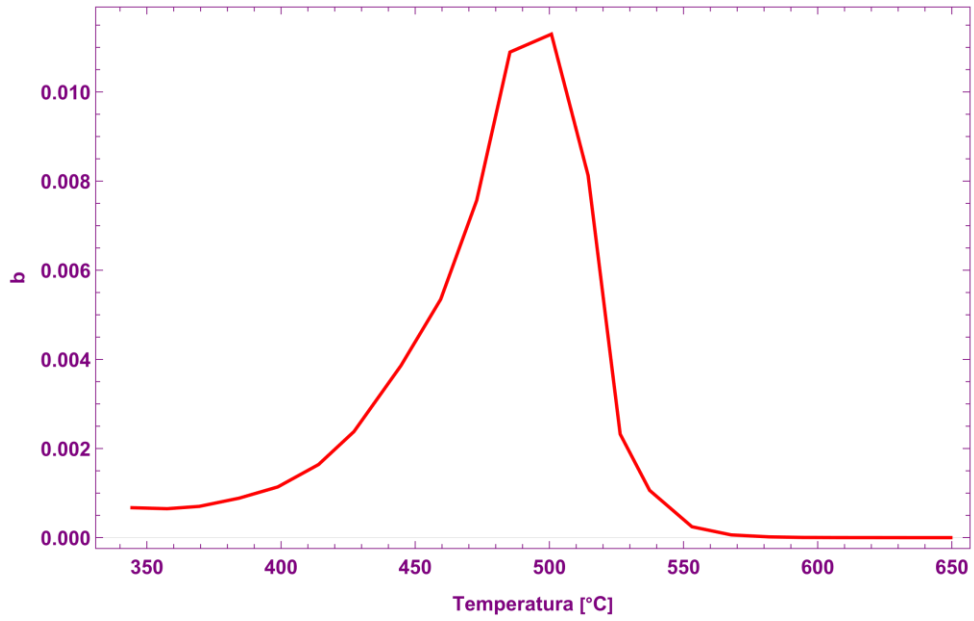


Figura 3.12. Parámetro cinético b obtenido del diagrama TTT del acero AISI 4140 [8].

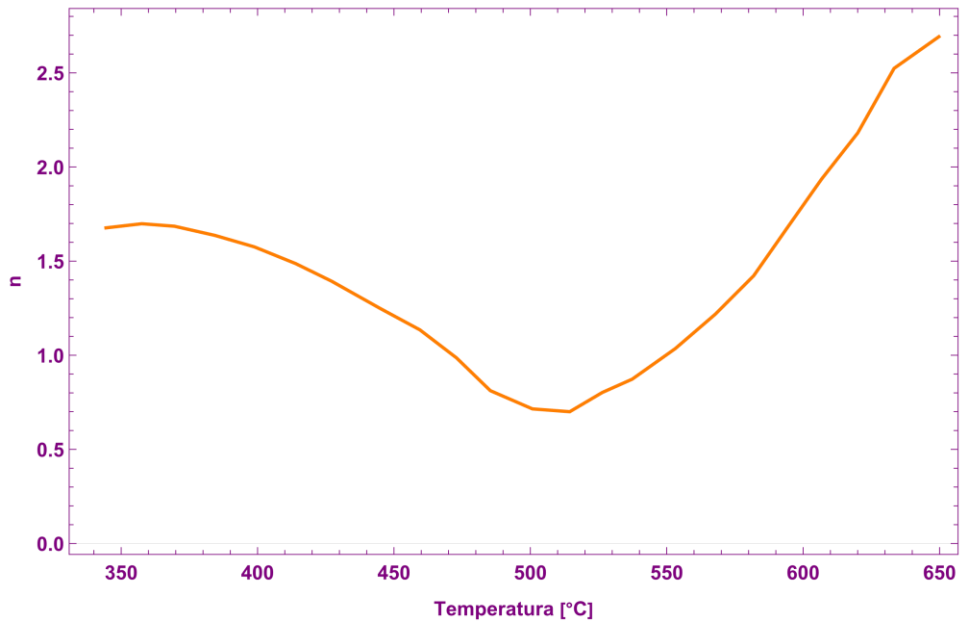


Figura 3.13. Parámetro cinético n obtenido del diagrama TTT del acero AISI 4140 [8].

4. Resultados y discusión

En esta sección se muestran los resultados de: prueba de independencia de malla, verificación, validación, influencia del tamaño del paso de tiempo, rapidez de enfriamiento local, análisis de sensibilidad, aplicación e interfaz gráfica del usuario.

4.1 Independencia de malla

La Figura 4.1 muestra la respuesta térmica en el centro de la probeta, a mitad del radio y en la superficie, calculada con la solución numérica desarrollada en este trabajo durante la etapa 1. Se varió el número de nodos para así determinar cuál es el mínimo número de nodos que se pueden emplear sin que la respuesta térmica varíe significativamente, lo que se conoce como “independencia de malla”. De la figura 4.1 se observa que las respuestas térmicas en las tres posiciones estudiadas no cambian significativamente cuando se usan 5 nodos (5 N) y 50 nodos (50 N), por lo que se considera que emplear 5 nodos es adecuado para las etapas siguientes. Cabe mencionar que este comportamiento se debe al tamaño de la probeta y a la condición de enfriamiento, que resultan en un enfriamiento relativamente suave.

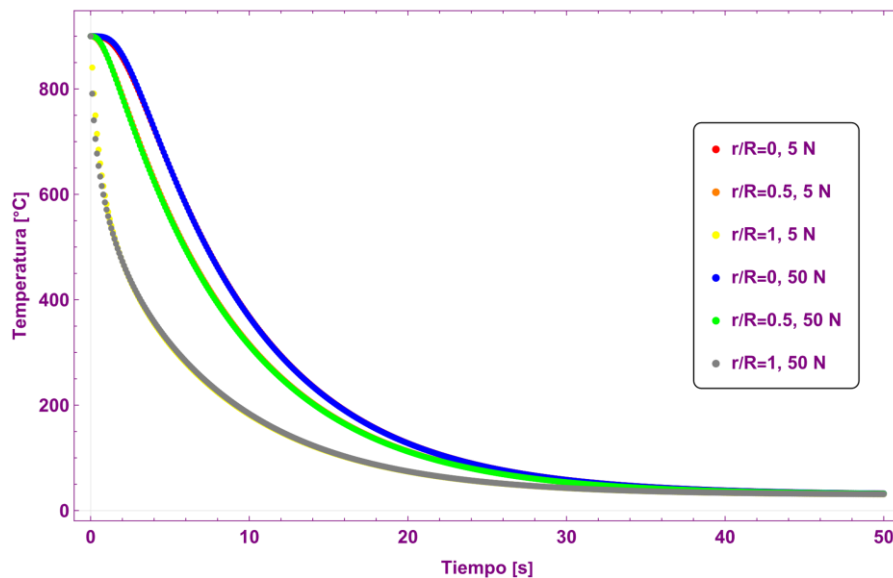


Figura 4.1. Curva de enfriamiento en el centro, a mitad de radio y en la superficie de la probeta para dos distintos valores de nodos empleados en la simulación.

4.2 Verificación

La Figura 4.2 muestra la respuesta térmica en el centro de la probeta y en la superficie, calculada con la solución analítica (puntos) y con la solución numérica (líneas) desarrollada en este trabajo. Para que el sistema cumpla con las condiciones de la solución analítica se requiere que las propiedades sean constantes, que no exista generación de calor y que la condición a la frontera esté definida por un coeficiente de transferencia de calor (constante) y una temperatura del medio (constante).

La formulación matemática corresponde a las Ecs. 3.13 – 3.15 de la etapa 1. Bajo estas condiciones antes mencionadas (coeficiente de transferencia de calor constante \bar{h} , distribución inicial de temperatura uniforme y propiedades constantes) se pueden utilizar las gráficas de Heisler [16], que representan a la solución analítica del problema simplificado. Como puede observarse, los valores son muy parecidos, por lo que se considera que el código está verificado para la parte térmica.

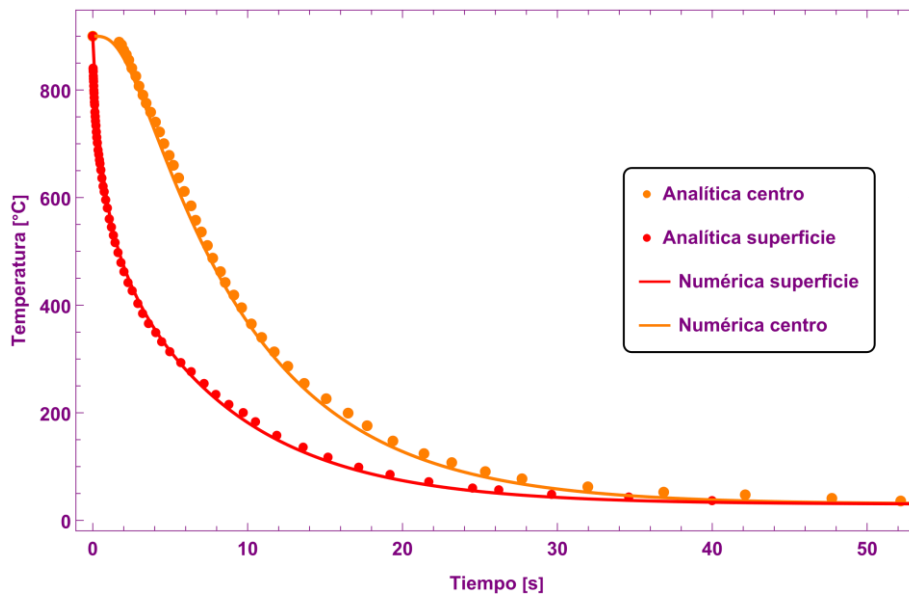


Figura 4.2. Respuesta térmica en el centro y en la superficie de la probeta calculada con: la solución analítica dada por la gráfica de Heisler (símbolos) y la solución numérica (líneas).

4.3 Validación

Para validar al código se comparó la respuesta experimental [7] con la calculada en las etapas 4, 5 y 6. Como se mencionó en la Metodología, se tomó información de la literatura para interpolar valores de *flux* de calor que dependen de la temperatura superficial para tres números de fluidización: N_f de 1.8, 1 y 1.1, que se produjeron en los experimentos reportados en [7]: solo transformación martensítica, solo bainítica y transformación consecutiva, respectivamente. En la Figura 4.3 se muestra la respuesta térmica en el centro de la probeta calculada con la curva de *flux* de calor en la superficie de la Figura 3.8 (etapa 4), junto con los valores medidos experimentalmente. En esta curva de enfriamiento se presenta solo transformación martensítica, debido a esto se aprecia recalescencia alrededor de los 340°C, que corresponde aproximadamente a la temperatura M_s . Se observa que los valores calculados con respecto a los experimentales son muy similares, por lo que se considera que el código funciona correctamente para esta etapa y se considera válido.

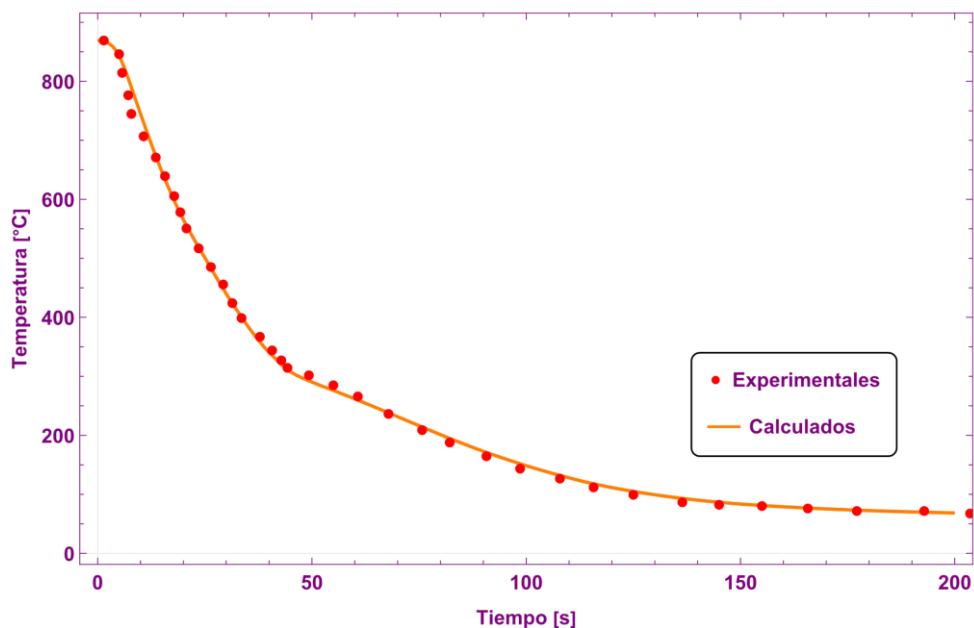


Figura 4.3. Curva de enfriamiento en el centro de la probeta: solución numérica (línea) y valores medidos (símbolos) [7] para $N_f=1.8$.

En la Figura 4.4 se presenta la respuesta térmica experimental y calculada para la etapa 5 (con transformación bainítica) utilizando la curva de *flux* de calor en la superficie de la Figura 3.10. En esta curva de enfriamiento se presenta solo transformación bainítica, por lo que hay recalcancia a 520°C aproximadamente, entrando en la zona de comienzo de esa transformación en el diagrama CCT para un acero AISI 4140 (línea discontinua gris). Se observa que los valores calculados con respecto a los experimentales son muy similares, por lo que se considera que el código funciona correctamente para este caso y se considera como válido.

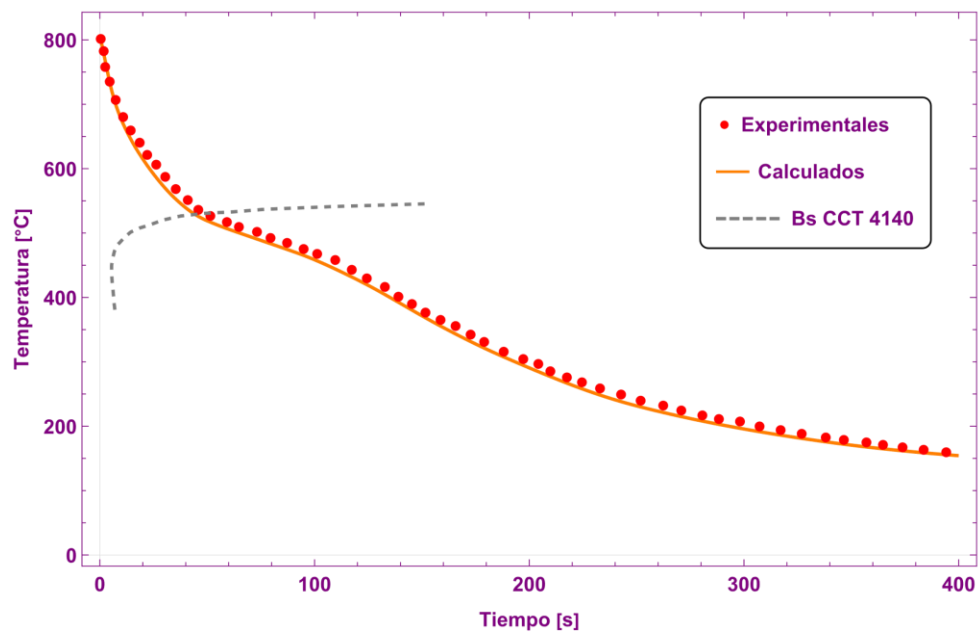


Figura 4.4. Curva de enfriamiento en el centro de la probeta: solución numérica (línea) y valores medidos (símbolos) [7] para $Nf = 1$.

En la Figura 4.5 se presenta la respuesta térmica experimental y calculada para la etapa 6 utilizando la curva de *flux* de calor en la superficie de la Figura 3.11. En esta curva de enfriamiento se presenta una transformación consecutiva la cual empieza por una transformación bainítica seguida de la transformación martensítica, es por esta razón que se presenta una primera recalcancia aproximadamente a los 540°C, entrando en la zona de comienzo de esa transformación (bainítica) en el diagrama CCT para un acero AISI 4140 y deteniéndose al inicio de M_s para dar paso a la transformación martensítica con una segunda recalcancia en la curva de enfriamiento hasta llegar al final. Se observa que los valores calculados con respecto a los experimentales son muy similares, por lo que se considera que el código funciona correctamente para este caso y se considera como válido.

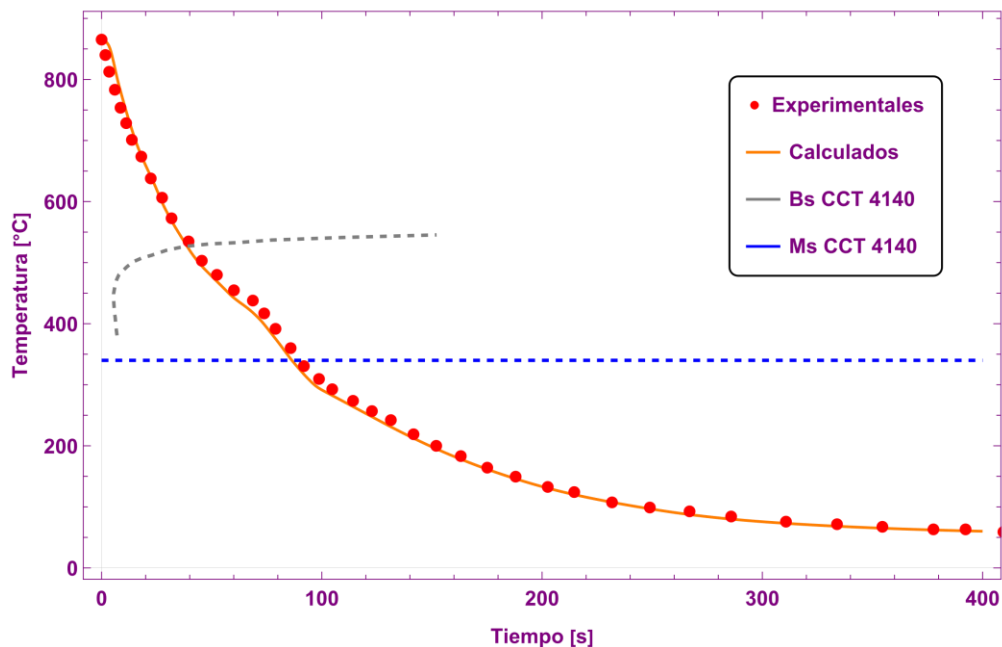


Figura 4.5. Curva de enfriamiento en el centro de la probeta: solución numérica (línea) y valores medidos (símbolos) [7] para $Nf = 1.1$.

4.4 Influencia del tamaño del paso de tiempo

La influencia del tamaño del paso de tiempo es importante ya que a valores menores se obtiene una mejor aproximación y convergencia. En la Figura 4.6 se muestran las respuestas térmicas calculadas con tres diferentes valores de paso de tiempo para la etapa 6. El de mayor paso de tiempo (dt) pertenece a la curva de enfriamiento de color rojo, es por esta razón que no se ve con una buena precisión, presentando varias regiones rectas con respecto al $dt = 0.1$; al disminuir el efecto de paso de tiempo, las curvas de enfriamiento tienden a tener un comportamiento más apegado a los datos experimentales, por lo cual se optó por utilizar un dt de 0.1 s en cada simulación para tener una mayor precisión con respecto a los datos experimentales.

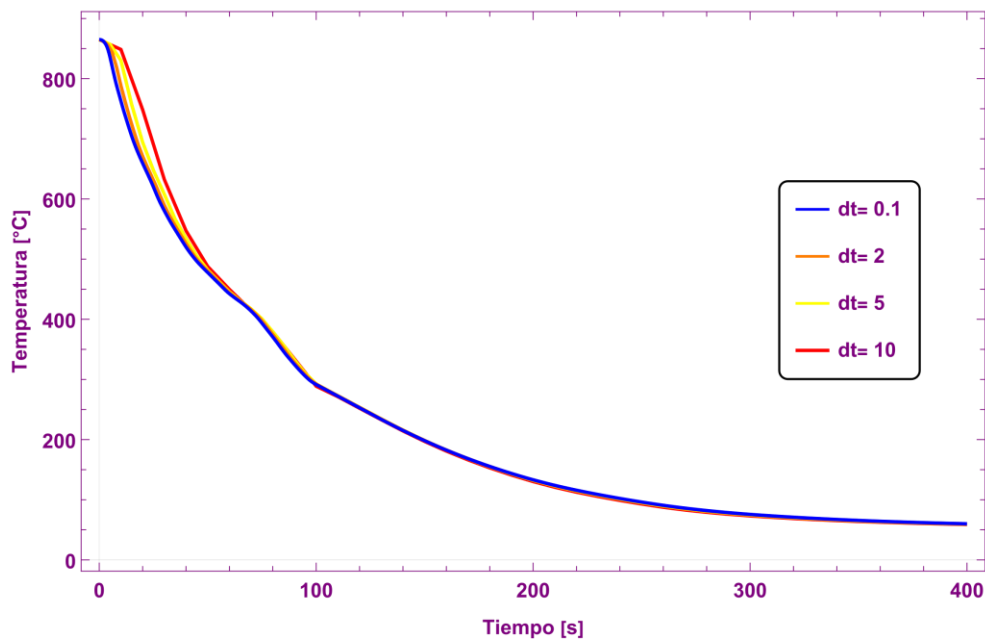


Figura 4.6. Curva de enfriamiento en el centro de la probeta para una transformación consecutiva (etapa 6) con diferentes valores de paso de tiempo para $Nf = 1.1$.

4.5 Rapidez de enfriamiento local

En la Figura 4.7 se muestra una curva de rapidez de enfriamiento local con respecto al tiempo para un $Nf=1.8$, que está asociada a una transformación martensítica. Debido a esto se ve un cambio en su comportamiento: en primer lugar, la rapidez de enfriamiento disminuye a un máximo (en valor absoluto) de $-21.87\text{ }^{\circ}\text{C/s}$, posteriormente empieza a aumentar hasta que aproximadamente a los 26 s se nota un ligero cambio en el comportamiento de la curva que se asocia al inicio de transformación de M_s hasta llegar a una meseta, a los 200 s es donde la transformación martensítica se completa.

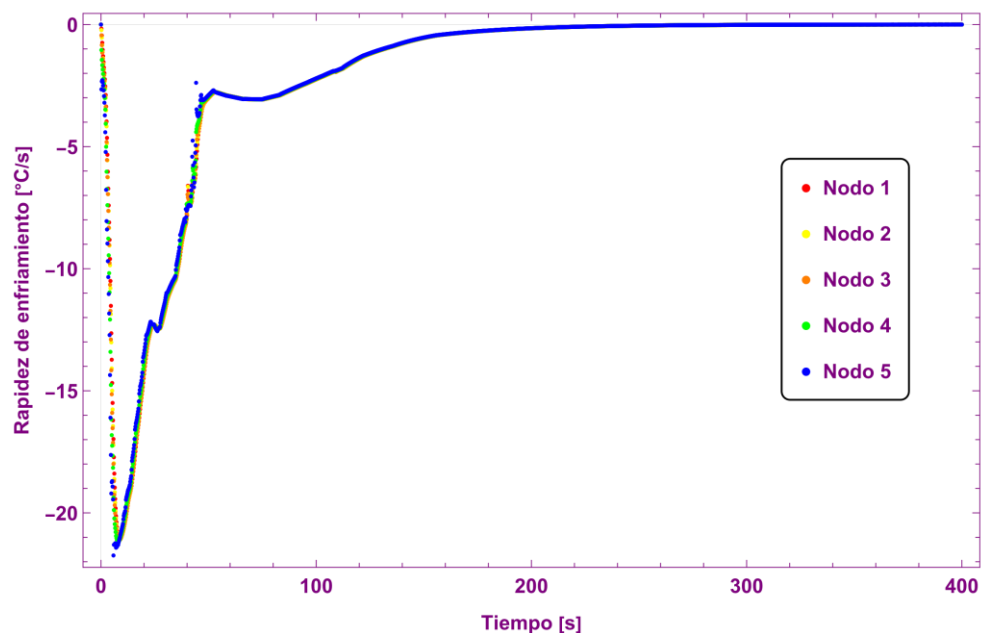


Figura 4.7. Curva de rapidez de enfriamiento local en función del tiempo en el centro de la probeta con un flujo de aire de 100 LPM para $Nf=1.8$.

En la Figura 4.8 se muestra una curva de rapidez de enfriamiento local con respecto al tiempo para $Nf=1$, que está asociada a una transformación bainítica. De la misma forma que la anterior, cuenta con un punto máximo (en valor absoluto) de rapidez de enfriamiento alrededor de los -17°C ; posteriormente empieza a aumentar ligeramente hasta llegar a los 25 s aproximadamente en donde se presenta un cambio de comportamiento en la curva, que se puede asociar al cruce de la línea de transformación B_s del AISI 4140.

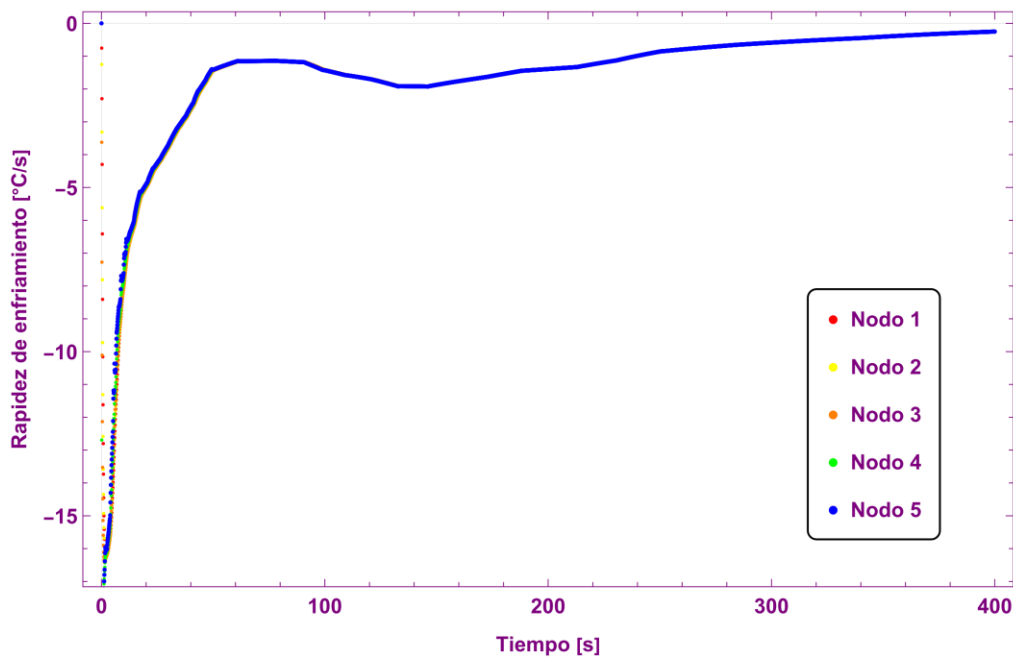


Figura 4.8. Curva de rapidez de enfriamiento local en función del tiempo en el centro de la probeta con un flujo de aire de 56 LPM para $Nf=1$.

En la Figura 4.9 se grafica una curva de rapidez de enfriamiento local con respecto al tiempo para un $Nf=1.1$ que está asociada a una transformación consecutiva de martensita y bainita. Cuenta con un punto máximo (en valor absoluto) de rapidez de enfriamiento alrededor de los -17°C ; después empieza a aumentar hasta llegar aproximadamente a los 25 s en donde cruza la línea B_s de la primera transformación asociada a la bainita, posteriormente aproximadamente a los 70 s se detiene la transformación bainítica para iniciar la transformación martensítica y siguiendo hasta alcanzar la temperatura del medio de enfriamiento.

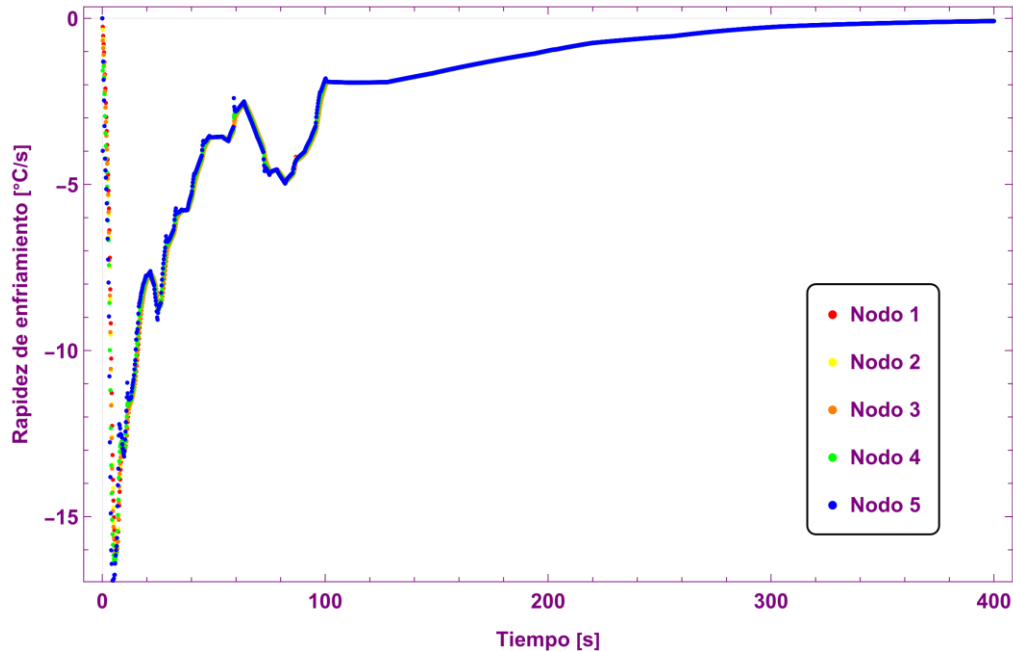


Figura 4.9. Curva de rapidez de enfriamiento local en función del tiempo en el centro de la probeta con un flujo de aire de 62 LPM para $Nf=1.1$.

En la Figura 4.10 se muestra la rapidez de enfriamiento local con respecto al tiempo de los 3 números de fluidización utilizados en la simulación. Se puede notar que al inicio de las curvas el punto máximo de rapidez de enfriamiento es similar en cuanto al tiempo, posteriormente cada una toma un comportamiento diferente debido a la transformación que se está llevando a cabo, ya sea más severa (N_f 1.8), más suave (N_f 1) o intermedia entre ambas (N_f 1.1).

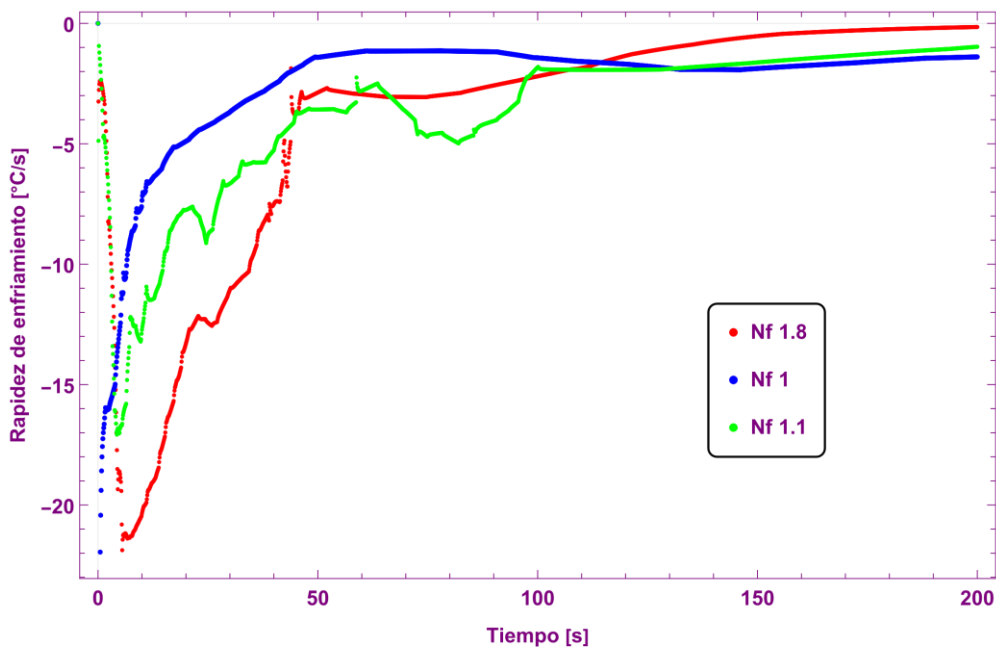


Figura 4.10. Curvas de rapidez de enfriamiento local en función del tiempo en el centro de la probeta para los 3 valores de N_f .

4.6 Análisis de sensibilidad

Para realizar el análisis de sensibilidad del modelo se varió un parámetro a la vez (manteniendo a las demás constantes) para las etapas 4, 5 y 6. Para la etapa 4 (transformación martensítica) se seleccionó el radio y el valor de M_s , que se alimentaron al modelo en su valor base, 75% del valor base y 125% del valor base. Los valores de estos parámetros se muestran en la Tabla 4.1.

Tabla 4.1. Parámetros para el análisis de sensibilidad de la etapa 4 (transformación martensítica).

Variación	Radio [m]	Ms [°C]
75%	0.0047625	255
100%	0.00635	340
125%	0.0079375	425

En la Figura 4.11 se grafica la variación de la respuesta térmica en el centro de la probeta cilíndrica al variar el radio. Conforme este disminuye, la probeta se enfría más rápidamente, debido a que hay menor masa y, por lo tanto, menor contenido energético al inicio del enfriamiento. Por otra parte, cuando el radio es mayor la extracción de calor es más lenta (la respuesta térmica es más “suave”), debido a un mayor contenido energético al inicio del enfriamiento, a pesar de que hay mayor área de transferencia de calor.

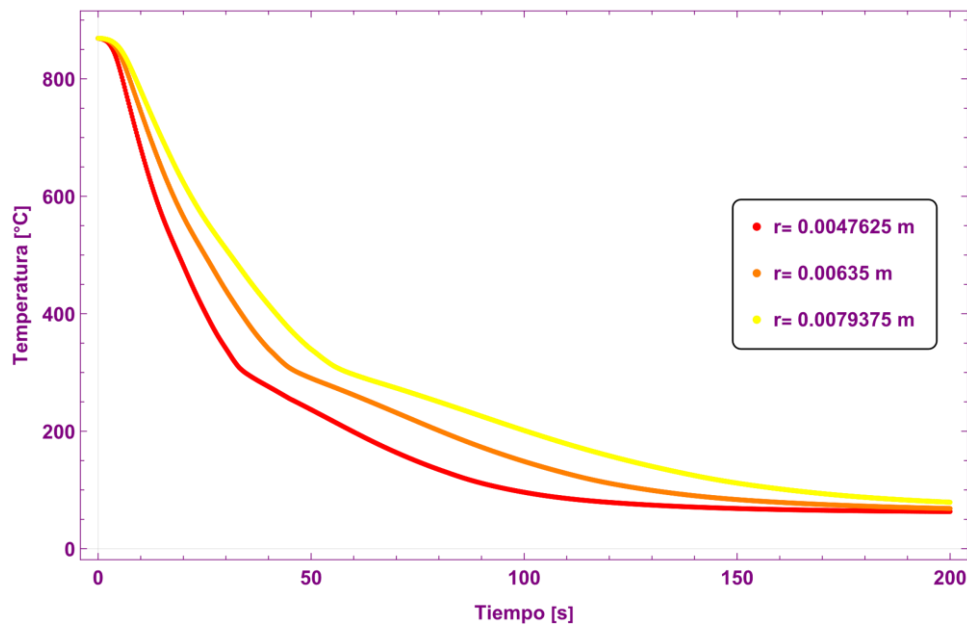


Figura 4.11. Efecto del radio sobre la respuesta térmica en el centro de la probeta ($Nf = 1.8$).

En la Figura 4.12 se muestra la respuesta de la fracción transformada en el centro de la probeta cilíndrica al variar el valor del radio, manteniendo el resto de los parámetros en su valor base. A menor radio, la respuesta de la fracción transformada se presenta antes, es decir, a menor radio se llega más rápido al inicio de transformación (M_s); esto está relacionado con la mayor rapidez de extracción de calor para probetas de menor diámetro. Cuando el radio es mayor al valor base, la transformación inicia a un tiempo mayor, debido a que la extracción de calor es más lenta, por el aumento de masa.

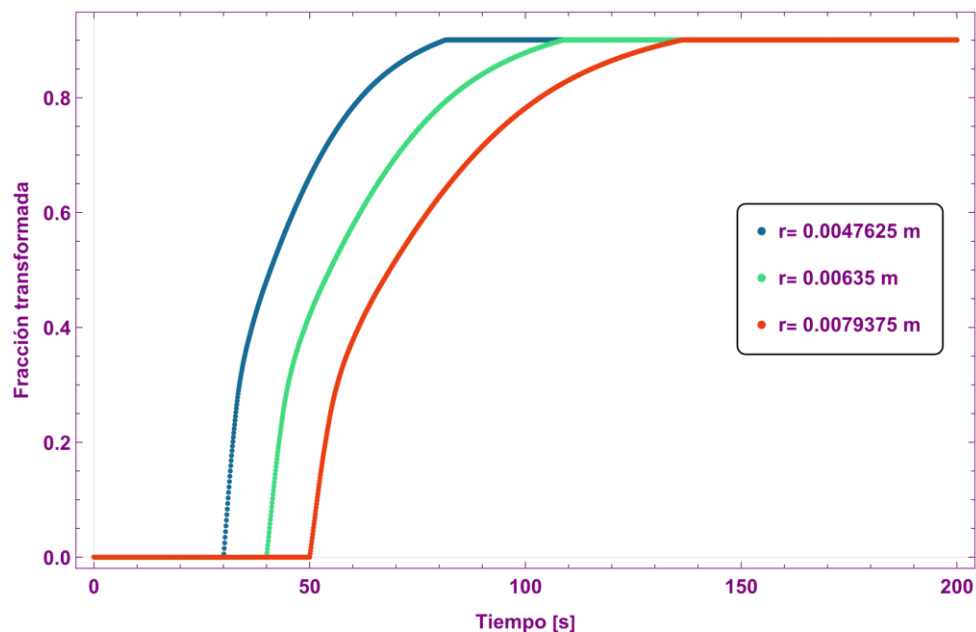


Figura 4.12. Efecto del radio sobre la evolución de la fracción transformada en el centro de la probeta ($N_f = 1.8$).

En la Figura 4.13 se grafica la respuesta de la fracción transformada en el centro de la probeta cilíndrica al variar el valor de M_s , manteniendo el resto de los parámetros en su valor base. Conforme el valor de M_s disminuye, el máximo valor de la fracción transformada es menor, debido a que el rango de temperatura de transformación (ya que M_f se mantiene en su valor base) es menor.

Por otro lado, cuando el valor de M_s es mayor al valor base hay un mayor rango de temperatura para la transformación, llegando casi a transformar por completo.

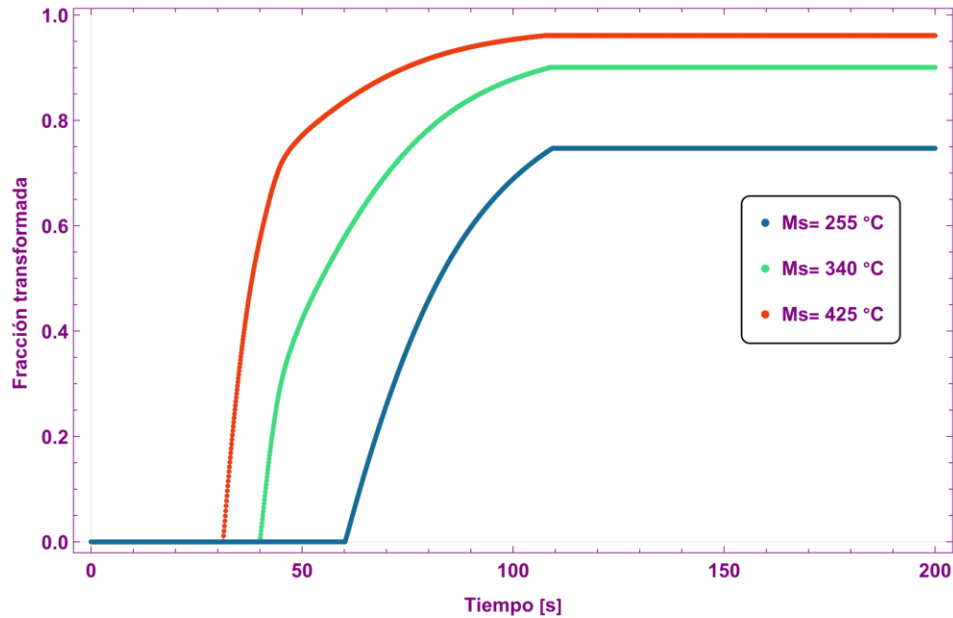


Figura 4.13. Efecto de M_s sobre la evolución de la fracción transformada de martensita en el centro de la probeta ($N_f = 1.8$).

Para estudiar la sensibilidad del modelo matemático de la etapa 5 (transformación bainítica) se seleccionó el radio, tomándose en su valor base, 75% del valor base y 125% del valor base, manteniendo los demás parámetros constantes; los valores se presentan en la Tabla 4.2.

Tabla 4.2. Parámetros para el análisis de sensibilidad de la etapa 4 (transformación bainítica).

Variación	Radio [m]
75%	0.0047625
100%	0.00635
125%	0.0079375

En la Figura 4.14 se grafica la respuesta térmica en el centro de la probeta cilíndrica al variar el radio. Conforme este disminuye, la probeta se enfría más rápidamente; esto se debe al menor contenido energético de la pieza al inicio del enfriamiento.

Como consecuencia, la recalcencia inicia a tiempos menores y temperaturas ligeramente menores a medida que disminuye el radio. Por otro lado, cuando el radio aumenta, la respuesta térmica es más lenta en comparación con los otros dos casos, debido a que el contenido energético inicial de la pieza es mayor, resultando que la recalcencia inicia a un tiempo mayor y a una temperatura ligeramente mayor.

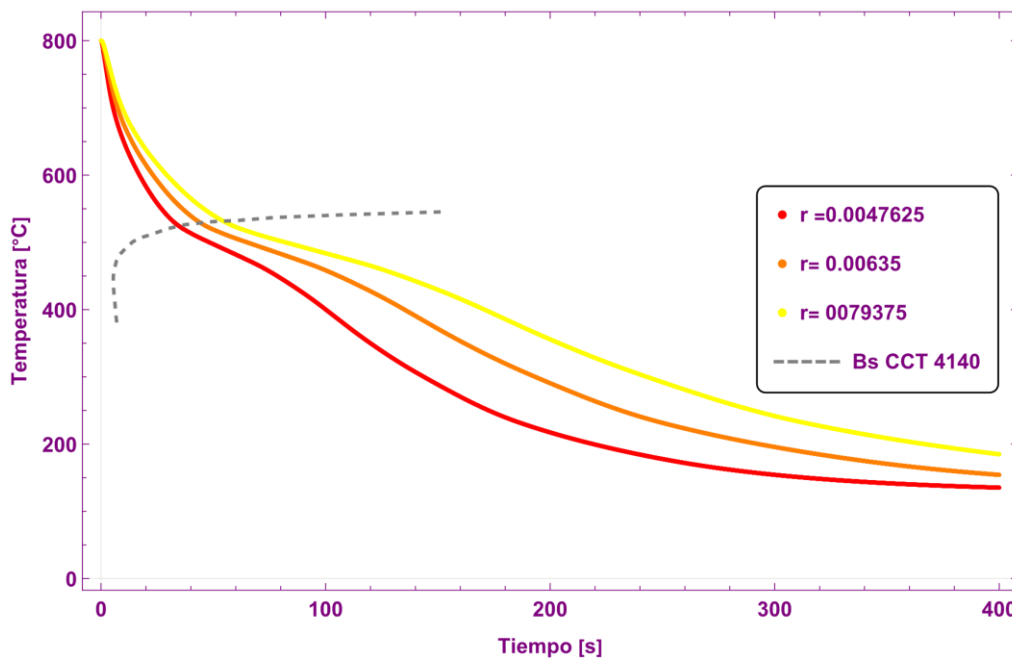


Figura 4.14. Efecto de variar el radio sobre la respuesta térmica en el centro de la probeta ($N_f = 1$). La línea punteada es la curva de inicio de transformación bainítica.

En la Figura 4.15 se muestra la respuesta de la fracción transformada de bainita en el centro de la probeta cilíndrica al variar el valor del radio, manteniendo el resto de los parámetros en sus valores base. Conforme el radio disminuye la respuesta de la fracción transformada de bainita se presenta antes, debido a la mayor rapidez de extracción de calor para probetas de menor diámetro.

Cuando el radio es mayor al valor base, la transformación ocurre a un tiempo mayor debido a que la extracción de calor es más lenta por el aumento de masa.

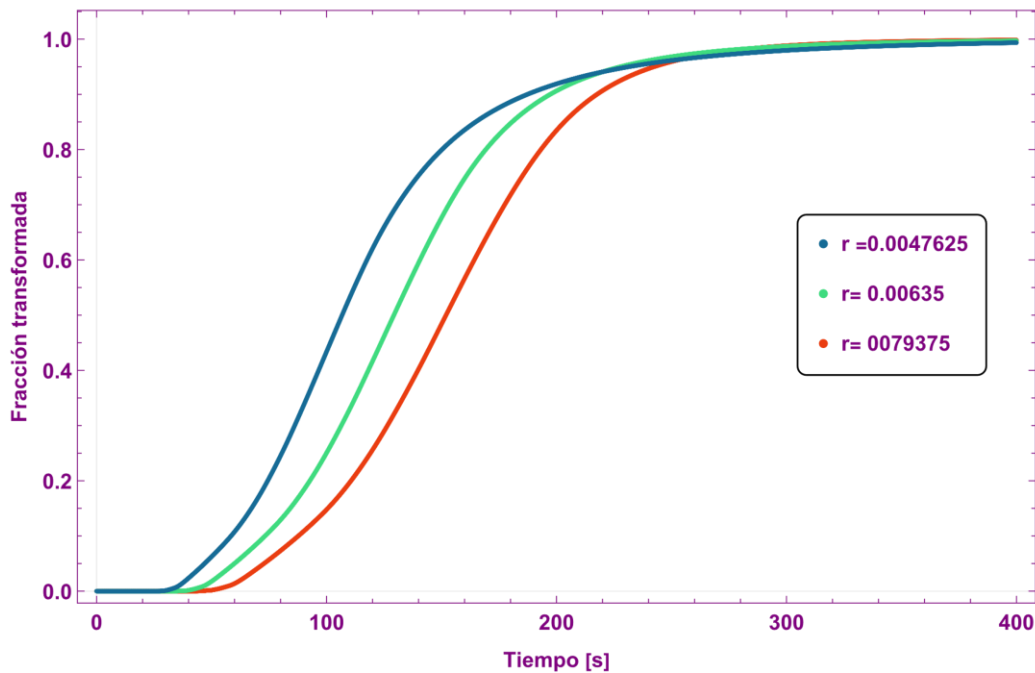


Figura 4.15. Efecto de variar el radio sobre la evolución de la fracción transformada de bainita en el centro de la probeta ($N_f = 1$).

Para estudiar la sensibilidad del modelo matemático de la etapa 6 (transformación consecutiva de martensita y bainita) se seleccionó el radio y el valor de M_s , tomándose en su valor base, 75% del valor base y 125% del valor base, los valores se muestran en la Tabla 4.3.

Tabla 4.3. Parámetros para el análisis de sensibilidad de la etapa 6 (transformación consecutiva de martensita y bainita).

Variación	Radio [m]	M_s [°C]
75%	0.0047625	255
100%	0.00635	340
125%	0.0079375	425

En la Figura 4.16 se grafica la respuesta térmica en el centro de la probeta cilíndrica al variar el radio, manteniendo el resto de los parámetros en su valor base.

Al disminuir el radio en la probeta la respuesta térmica es más rápida, como consecuencia del menor contenido energético de la pieza al inicio del enfriamiento. Al tener una respuesta térmica más rápida, la recalescencia se presenta a tiempos menores con respecto al valor base y con temperaturas ligeramente menores; una vez llegando a la temperatura de M_s la transformación martensítica inicia. Debido a esto se presentan dos recalescencias asociadas a las dos transformaciones de fase (martensita y bainita respectivamente) que se presentan para estas condiciones de enfriamiento.

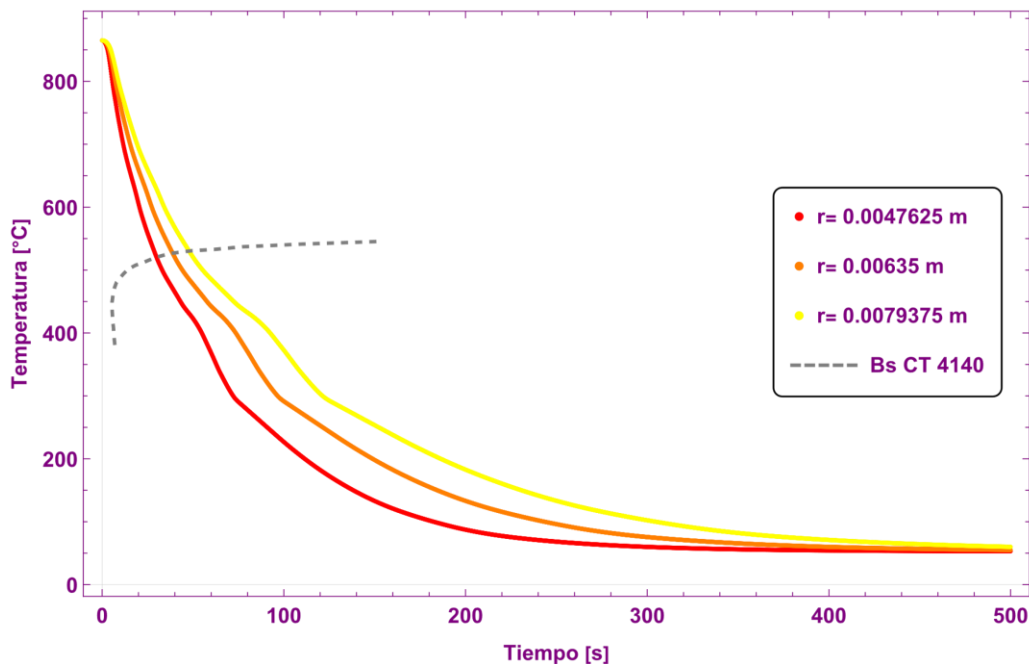


Figura 4.16. Efecto de variar el radio sobre la respuesta térmica en el centro de la probeta ($Nf = 1.1$). La línea punteada representa al inicio de la transformación bainítica.

En la Figura 4.17 se presenta la respuesta de la fracción transformada de bainita (líneas discontinuas) y martensita (líneas continuas) en el centro de la probeta cilíndrica al variar el valor del radio. Conforme el radio disminuye se presenta un poco antes la primera transformación (asociado a la mayor rapidez de extracción de calor) lo que resulta en que la transformación bainítica no sea completa, dando paso a la transformación martensítica una vez llegando al valor de M_s , por lo cual la transformación de martensita avanza más. Caso contrario, cuando el radio es mayor al valor base, la transformación bainítica ocurre a un tiempo mayor debido a que la extracción de calor es más lenta por el aumento de masa, por lo cual la bainita transforma en mayor proporción a comparación a la martensita.

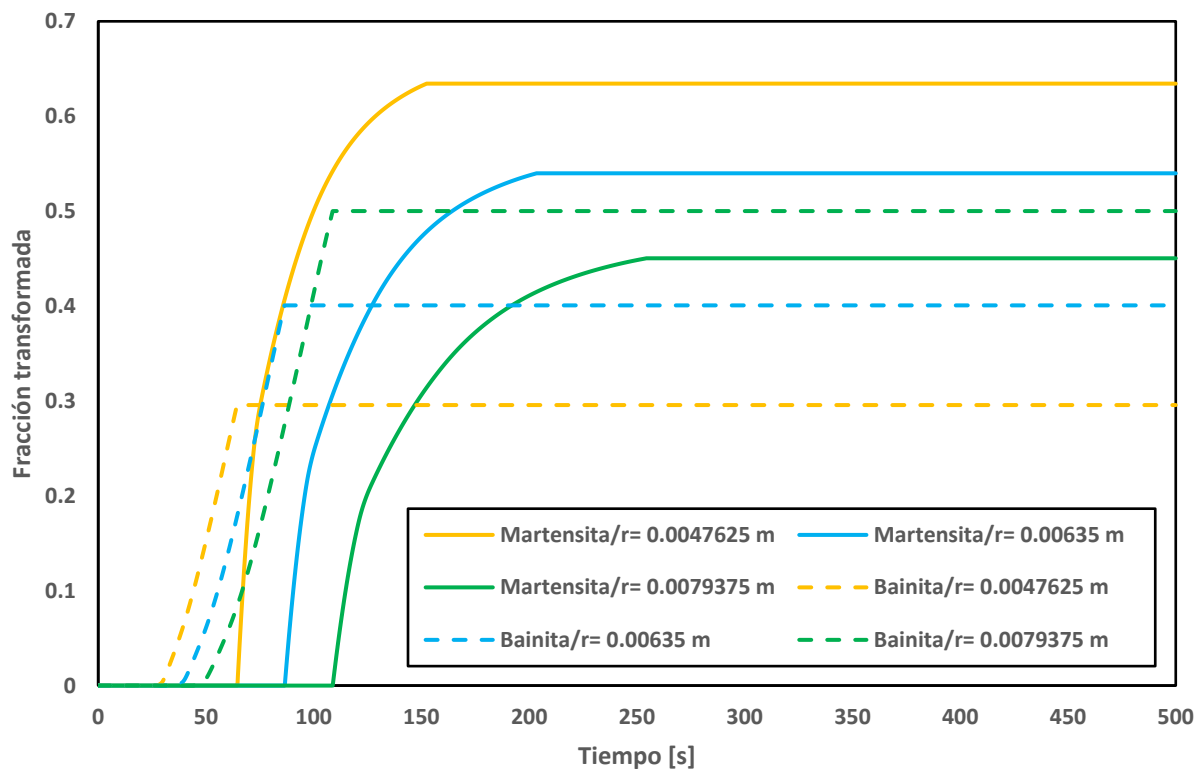


Figura 4.17. Efecto de variar el radio sobre la evolución de la fracción transformada de bainita y martensita en el centro de la probeta ($N_f = 1.1$).

En la Figura 4.18 se grafica la respuesta de la fracción transformada de bainita y martensita en el centro de la probeta cilíndrica al variar el valor de M_s . Conforme el valor de M_s disminuye, el máximo valor de la fracción transformada para martensita es mucho menor, ya que se limita el rango de temperatura en la cual puede transformarse, por lo cual la fracción transformada de bainita es mucho mayor. Por otro lado, cuando el valor de M_s es mayor al valor base existe un mayor rango de temperatura para la transformación martensítica, en la cual el rango para la transformación bainítica disminuye significativamente, predominando la martensita.

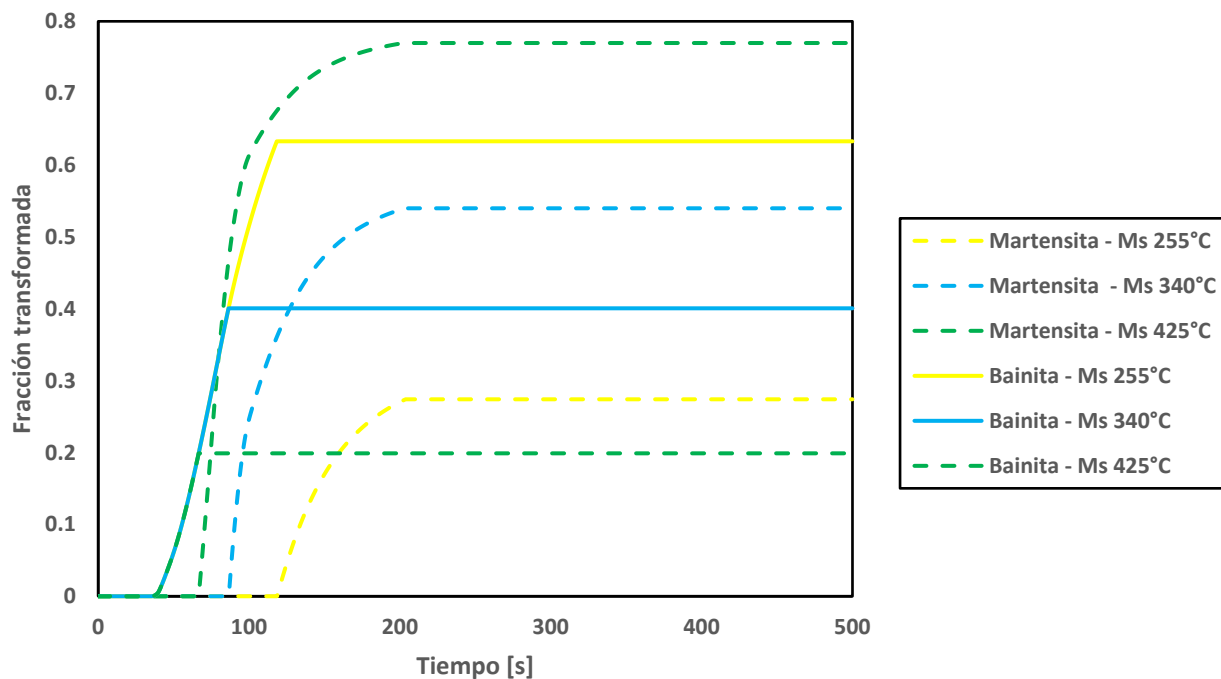


Figura 4.18. Efecto de M_s sobre la evolución de la fracción transformada de bainita y martensita en el centro de la probeta ($N_f = 1.1$).

4.7 Aplicación

De acuerdo con la hipótesis planteada al inicio de este trabajo, el número de fluidización tendría un mayor efecto sobre la respuesta termo estructural de la probeta que variar el radio de la probeta. Comparando las curvas de la Figura 4.3, que corresponde a un valor N_f de 1.8, de la Figura 4.4, que resulta con un N_f de 1, y de la Figura 4.5 que corresponde a un valor de N_f de 1.1, se nota una gran sensibilidad de la respuesta térmica. Para el valor de N_f máximo se nota una recalentamiento alrededor de los 340°C, lo cual es un indicador de una transformación martensítica. Por otra parte, para el valor de N_f mínimo (ver Figura 4.5) se presenta recalentamiento alrededor de los 520 °C, debido a la transformación bainítica, y un enfriamiento más suave. Por último, para el valor intermedio de N_f (ver Figura 4.5) como es de esperarse, se presentan dos recalentamientos, el primero al momento de cruzar la línea de B_s alrededor de los 520°C correspondiente a la transformación bainítica, una vez llegado al valor de M_s alrededor de los 340°C se nota otra recalentamiento correspondiente a la transformación martensítica que es consecutiva de la anterior, por lo cual el comportamiento de la curva es intermedia entre las dos anteriores, además de que presenta ambas transformaciones.

En contraste, al cambiar el radio de la probeta, los resultados del modelo indican que no cambia el tipo de transformación microestructural.

Finalmente, es útil conocer la evolución de la rapidez de transformación. En la Figura 4.19 se presenta la evolución de la fracción transformada en el centro de la probeta para N_f de 1.8, junto con la evolución de la rapidez de transformación. El comportamiento de la rapidez de transformación indica que la transformación fue severa ya que rápidamente se alcanza un punto máximo y, posteriormente, decae hasta llegar a cero y mantenerse constante.

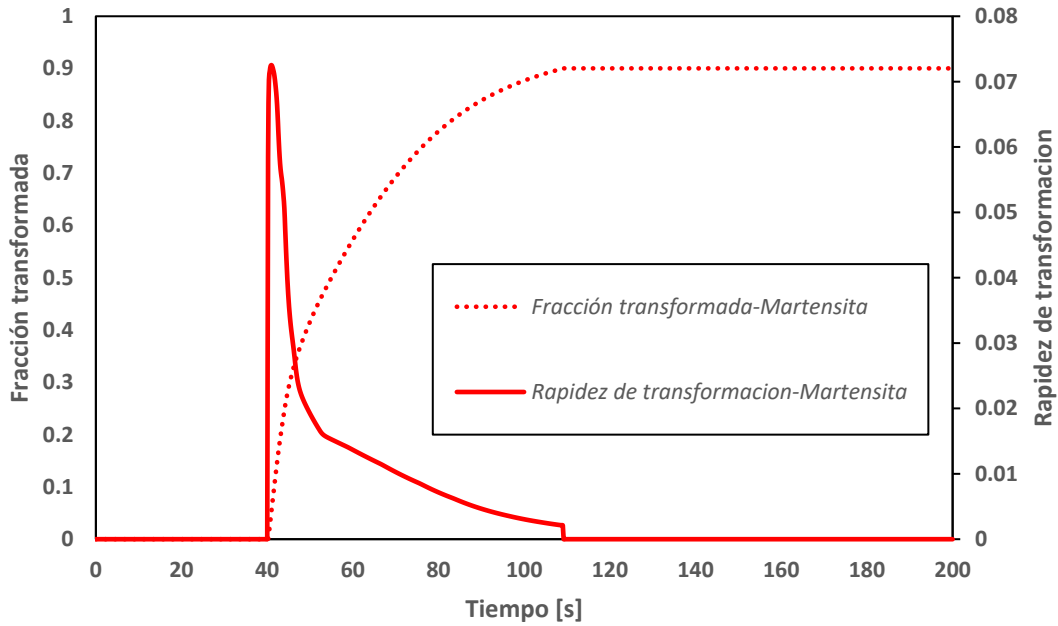


Figura 4.19. Evolución de la fracción transformada (línea punteada) y de la rapidez de transformación (línea sólida), en el centro de la probeta, para $N_f=1.8$.

En la Figura 4.20 se presenta la evolución de la respuesta de la fracción transformada para N_f de 1 en el centro de la probeta, junto con la rapidez de transformación. El comportamiento de la rapidez de transformación indica que el cambio microestructural fue menos severo que en el caso de la transformación martensítica (ver Figura 4.4), ya que se presenta una evolución de la rapidez de transformación más suave, llegando al punto máximo y decayendo en un mayor tiempo, llegando a transformar por completo a bainita.

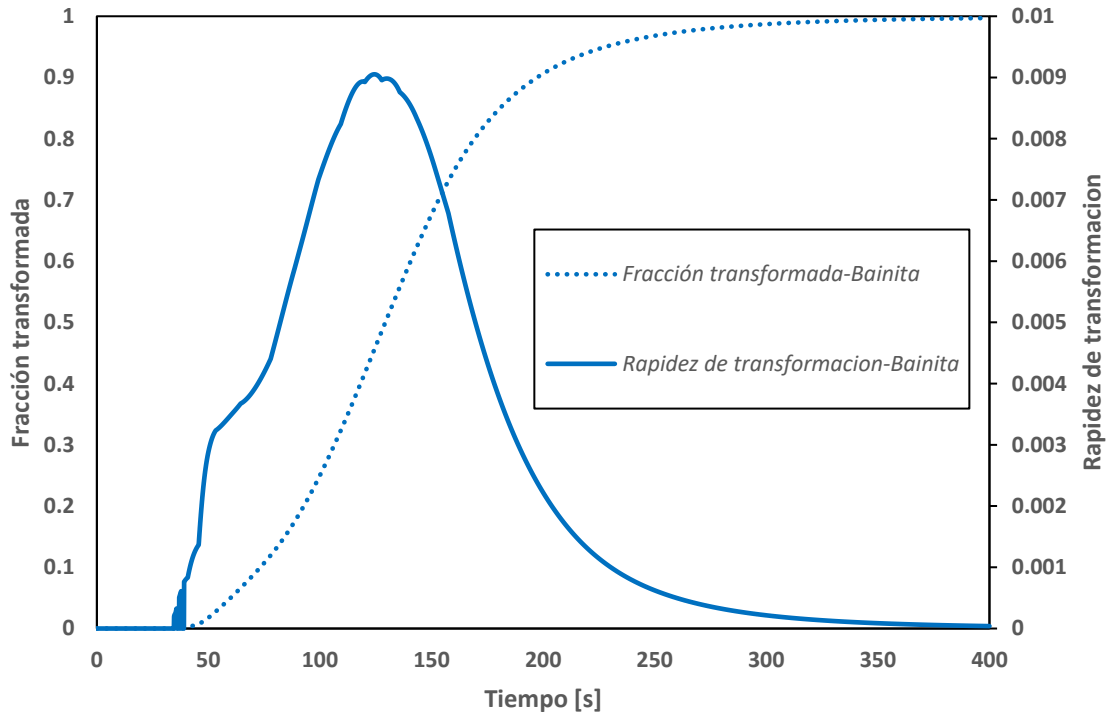


Figura 4.20. Evolución de la fracción transformada (línea punteada) y de la rapidez de transformación (línea sólida), en el centro de la probeta, para $N_f=1$.

En la Figura 4.21 se presenta la evolución de la respuesta de la fracción transformada para N_f de 1.1 en el centro de la probeta, junto con la rapidez de transformación. El comportamiento de las gráficas de la rapidez de transformación nos indica el inicio de una transformación (bainita) y el término de esta para tener la siguiente transformación (martensita), es decir, se tienen transformaciones consecutivas. La primera transformación será a bainita ya que la temperatura a la cual empieza a transformar se encuentra a 520°C al cruzar la línea de B_s en la curva CCT del AISI 4140; se puede notar que la rapidez de transformación no es muy severa ya que se tarda en llegar a su punto máximo. Sin embargo, cuando llega a su máximo esa transformación se detiene ya que a ese tiempo se llega a la temperatura de M_s , a la cual empieza la transformación martensítica.

La transformación martensítica es más severa, llegando a su punto máximo en muy poco tiempo; debido a que el intervalo de temperatura es mayor para esta segunda transformación, la fracción transformada que se obtiene de martensita es significativamente mayor con respecto a la de bainita.

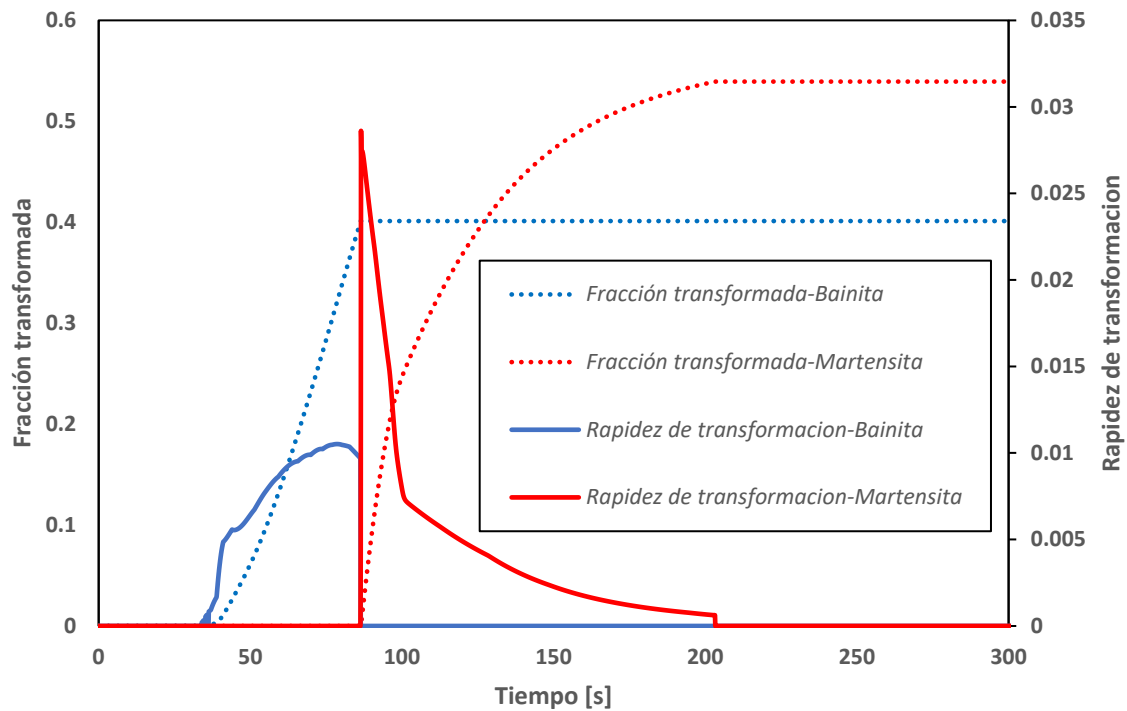


Figura 4.21. Evolución de la fracción transformada (líneas punteadas) y de la rapidez de transformación (líneas sólidas), en el centro de la probeta, para $N_f=1.1$.

4.8 Interfaz gráfica del usuario

En esta sección se presenta una interfaz gráfica para el usuario (*GUI*, por sus siglas en inglés). Con esta herramienta, el usuario pueda cambiar los parámetros de la simulación del problema planteado en la modelación matemática sin tener que entrar al código ni tener instalado el *software Mathematica*, dado que se ejecuta con la aplicación gratuita *Wolfram Player* (<https://www.wolfram.com/player/>). En la Figura 4.22 se muestra una captura de pantalla de la interfaz, para la etapa 1 del desarrollo del modelo matemático. A la izquierda están las variables del modelo y a la derecha una imagen de la evolución del campo térmico.

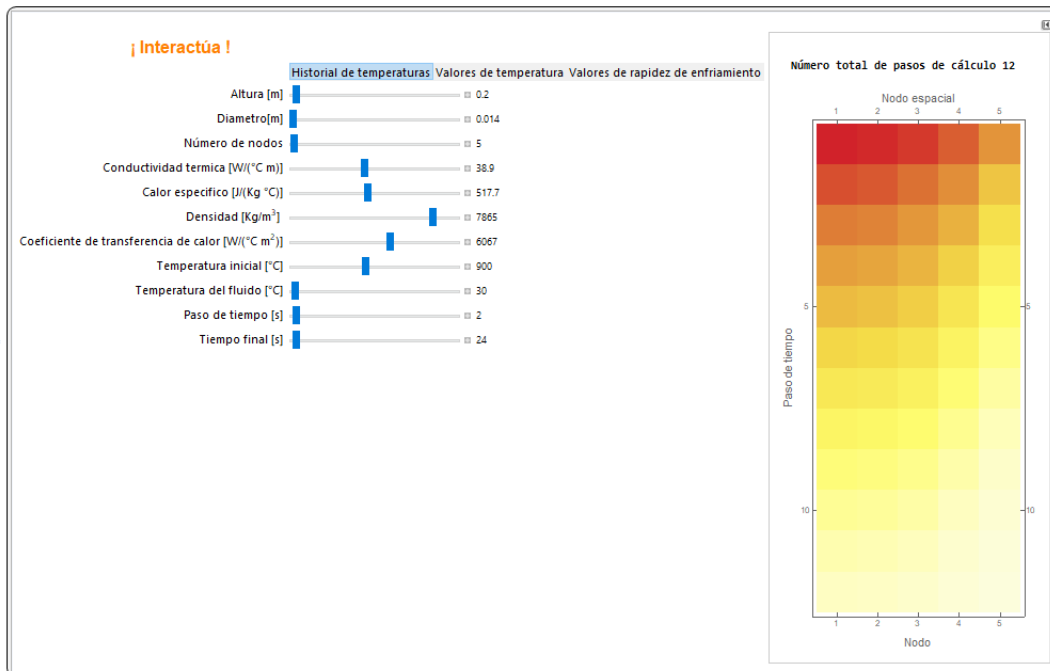


Figura 4.22. Captura de pantalla de la interfaz gráfica para el usuario (etapa 1 del código).

En la Figura 4.23 se muestra una captura de pantalla de la pestaña de valores de temperatura, en la que el usuario podrá visualizar una matriz del historial de temperatura a cada paso de tiempo solicitado (en cada fila) y con los nodos propuestos en las columnas.

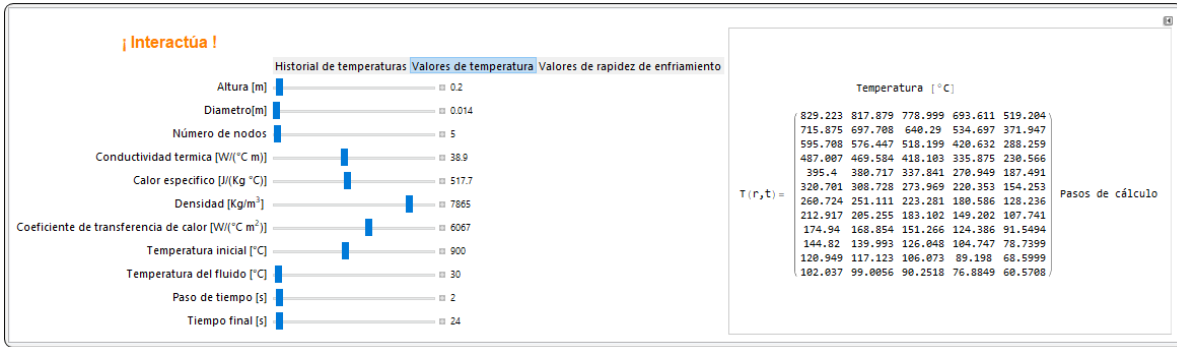


Figura 4.23. Captura de pantalla de la interfaz gráfica para el usuario (etapa 1 del código).

En la Figura 4.24 se presenta una captura de pantalla de la etapa 4 de la pestaña evolución de la fracción transformada (martensita): el usuario puede visualizar una gráfica de la fracción transformada en función del tiempo propuesto.

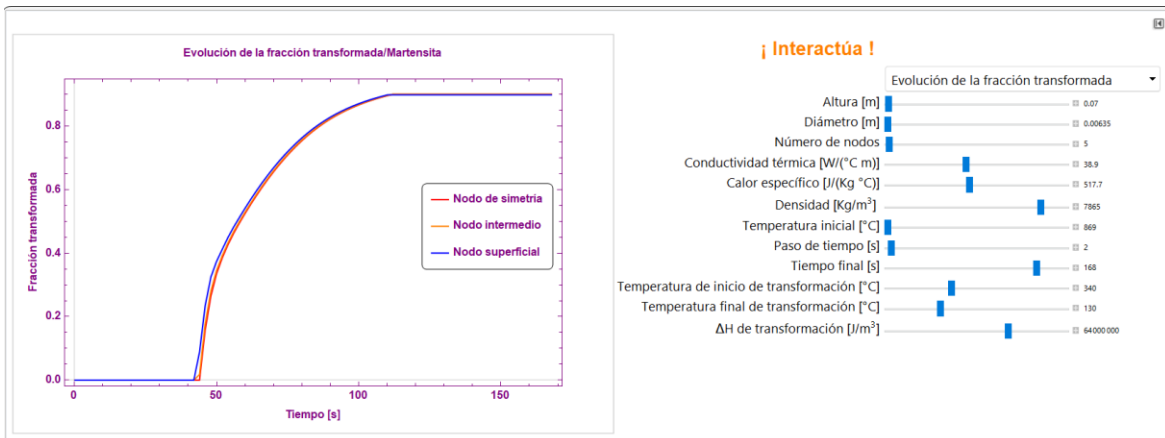


Figura 4.24. Captura de pantalla de la interfaz gráfica para el usuario (etapa 4 del código).

En la Figura 4.25 se presenta una captura de pantalla de la etapa 5; se trata de la pestaña evolución de la fracción transformada (bainita), en la que el usuario podrá visualizar una gráfica de la fracción transformada a bainita en función del tiempo propuesto, con los parámetros del lado derecho para poder interactuar con las variables.

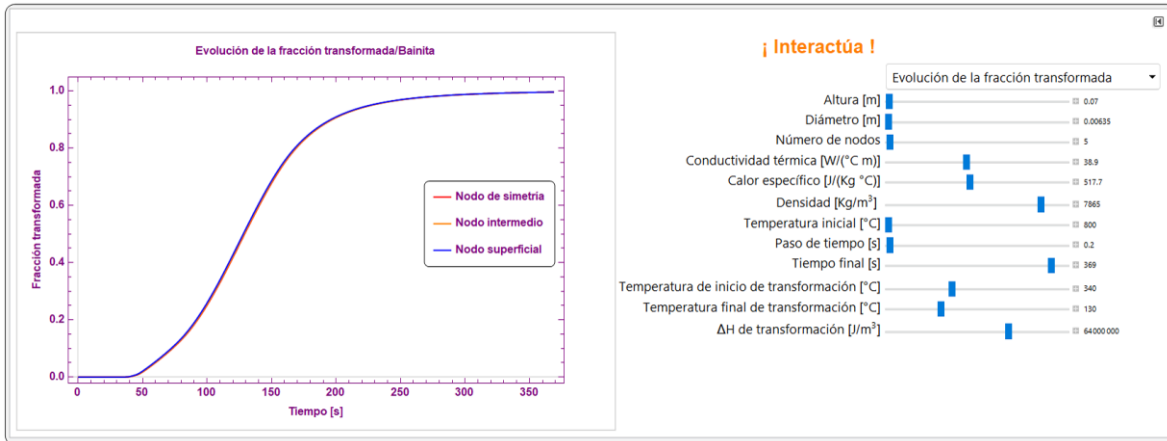


Figura 4.25. Captura de pantalla de la interfaz gráfica para el usuario (etapa 5 del código).

En la Figura 4.26 se muestra una captura de pantalla de la etapa 6, en particular de la pestaña evolución de la fracción transformada a bainita y martensita. El usuario podrá visualizar una gráfica de las fracciones transformadas en función del tiempo propuesto con los parámetros del lado derecho para poder interactuar con las variables.

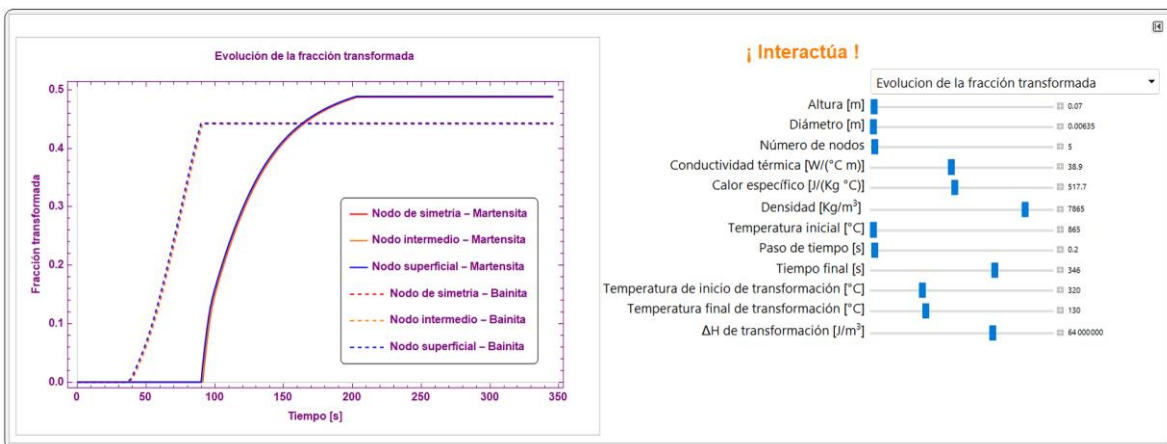


Figura 4.26. Interfaz gráfica para el usuario (etapa 6 del código).

Cada una de las versiones de la interfaz de las distintas etapas cuenta con diferentes pestañas para modificar los datos y mostrar gráficas para la evolución térmica, evolución de la fracción transformada y evolución de la rapidez de enfriamiento.

5. Conclusiones

- El análisis de independencia de malla (realizado solamente para la etapa 1) mostró que es posible discretizar el sistema correctamente usando solo cinco nodos.
- En el ejercicio de verificación se observó que las soluciones numérica y analítica son casi idénticas, por lo que la estructura e implementación del programa de cómputo fue adecuada.
- En la validación se observa que los valores calculados son similares a los experimentales, por lo que la estructura del programa de cómputo fue adecuada y el código es válido y confiable para las transformaciones martensítica y bainítica.
- El modelo es más sensible a cambios en el número de fluidización que a cambios del radio de la probeta, con lo que se muestra que la hipótesis fue verdadera.
- La rapidez de transformación cambia más rápidamente durante la transformación martensítica que durante la transformación bainítica.

6. Bibliografía

1. Molera Solá, P. *Tratamientos térmicos de los metales*. Marcombo, vol. 51, pp. 88-90, 1991.
2. Totten G.E., Ph.D., FASM. "Steel Heat Treatment Handbook". 2ª ed. Taylor and Francis Group, EUA, pp. 145-146, 159-163, 395, 2006.
3. Giraldo V. *Tecnología del tratamiento térmico de los metales*. Medellín, 2009.
4. Higuera O. *Metalografía y curso de ingeniería mecánica*. Universidad Tecnológica de Pereira, 2014.
5. Apraiz J. *Tratamientos térmicos de los aceros*. CEGAL, 1974.
6. Higuera, O. F., Flores, L. C., & Arroyave, J. F. *Diseño de un sistema de enfriamiento para temple de aceros*. *Scientia et technica*, 14(39), pp. 170-175. 2008.
7. Murillo García Mayra. *Caracterización de la extracción de calor durante el temple de probetas de acero con transformación de fase (Tesis de licenciatura)*. Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Química, México. 2014.
8. *Heat Treating. Metal Handbook, Vol. 4, 9ª ed.*, Ohio, ASM International, 1981.
9. Grajales Mesa, Hernan Dairo, & Meneses Zapata, *Consideraciones sobre aplicaciones tecnológicas de transformaciones de fase en aceros*. *Scientia et technica*, 11(27), pp. 115-120. 2005.
10. Viáfara, C., & Vélez, J. M. *Transformación bainítica en aleaciones Fe-C*. *Ingeniería y Ciencia*, 1(2), pp. 83-96. 2005.
11. Macha Garita, Vitaliano Edwin. *Técnica y práctica de los tratamientos térmicos en hornos de lecho fluidizado con atmósfera controlada*, Universidad nacional de san Agustín, Facultad de ingeniería de procesos. 2016.

12. Prada Díaz Ángel. *Estudio experimental de la aglomeración de partículas en un lecho fluidizado (Tesis de maestría)*, Universidad Carlos III, Departamento Ingeniería térmica y de fluidos. 2014.
13. Valle Núñez Manuel Francisco. *Diseño de un horno de lecho fluidizado para tratamientos térmicos (Tesis de licenciatura)*, Universidad Autónoma de Occidente. 2005.
14. Shuai Wang, Yansong Shen, *Particle-scale study of heat and mass transfer in a bubbling fluidised bed*, *Chemical Engineering Science*, vol 240, 2021.
15. Chapra, S. C., Canale, R. P., Ruiz, R. S. G., Mercado, V. H. I., Díaz, E. M., & Benites, G. E. *Métodos numéricos para ingenieros*, vol. 5. McGraw-Hill. 2011.
16. D.R. Poirier and G. H. Geiger, *Transport Phenomena in Materials Processing*, The Minerals, Metals and Materials Society. 2016.
17. V. Pérez Felipe. *Simulación de tratamiento térmico por diferencias finitas*. *Ingeniería Mecánica*, pp. 19-24. 1997.
18. Lee, S.J., Van Tyne, C.J. *Un modelo cinético para la transformación de martensita en aceros al carbono y de baja aleación*. *Metall Mater Trans A* 43, pp. 422–427, 2012.
19. D.P. Koistinen, R.E. Marburger, *A general equation prescribing the extent of the austenite martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels*, *Acta Metallurgica*, vol 7, Issue 1, pp. 59-60. 1959.
20. P. Carlone, G.S. Palazzo, R. Pasquino, *Finite element analysis of the steel quenching process: Temperature field and solid–solid phase change*, *Computers & Mathematics with Applications*, vol 59, Issue 1, pp. 585-594. 2010.
21. Bokota Adam, Sławomir Iskierka, *Numerical analysis of phase transformations and residual stresses in steel cone-shaped elements hardened by induction and flame methods*, *International Journal of Mechanical Sciences*, vol 40, Issue 6, pp. 617-629. 1998.

22. Vander Voort, G. F. (Ed.). *Atlas of time-temperature diagrams for irons and steels*. ASM international. 1991.
23. B.P. Flannery, S. A. Teukolsky y W. H. Press. *Numerical recipes: the art of scientific computing (3a ed.)*. New York, NY: Cambridge University Press, 2007.
24. Agarwal, P. y Brimacombe J, "Mathematical model of heat flow and austenite-pearlite transformation in eutectoid carbon steel rods for wire". *Metallurgical Transactions B*, Vol.12, No. 1, pp. 121. 1981.
25. Pineda, E, "Desarrollo de un modelo experimental, a escala laboratorio, de un proceso de temple y auto revenido de varillas de acero" Tesis de Licenciatura. Ciudad de México, UNAM, Facultad de Química. 2017.
26. Giménez, M., Llobet, A., Riera Colom, M. D., & Prado Pozuelo, J. M. *Simulación de un tratamiento térmico mediante elementos finitos*. Congreso Nacional de Tratamientos Térmicos y de Superficie, pp. 147-158. 2013.
27. R.W. Reynoldson, *Advances in surface treatments using fluidised beds, Surface, and Coatings Technology*, vol 71, Issue 2, pp. 102-110. 1995.
28. Z. Qi, A.B. Yu, A new correlation for heat transfer in particle-fluid beds, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol 181, 2021.
29. T.C. Ho, H.T. Lee, C.C. Shiao, J.R. Hopper, W.D. Bostick, *Metal behavior during fluidized bed thermal treatment of soil*, *Waste Management*, vol 15, Issues 5–6, pp. 325-334. 1995.

7. Apéndice A

En este apéndice se muestran las ecuaciones usadas para los cálculos de las áreas y volúmenes, junto con las ecuaciones nodales utilizadas para cada etapa del modelado matemático.

Áreas y volúmenes

Nodo de simetría

$$\begin{aligned}r_{nodal} &= 0; & r_W &= 0; & r_E &= \frac{dr}{2} \\A_W &= 0; & A_E &= 2\pi r_E Lz; & A_T &= \pi r_E^2 \\V_P &= A_T Lz\end{aligned}$$

Nodo interno ($2 \leq i \leq N - 1$)

$$\begin{aligned}r_{nodal} &= (i - 1)dr; & r_W &= r_E[i - 1]; & r_E &= r_E[i - 1] + dr \\A_W &= 2\pi r_W Lz; & A_E &= 2\pi r_E Lz; & A_T &= \pi(r_E^2 - r_W^2) \\V_P &= A_T Lz\end{aligned}$$

Nodo de superficie

$$\begin{aligned}r_{nodal} &= (n - 1)dr; & r_W &= r_E[i - 1]; & r_E &= Lr \\A_W &= 2\pi r_W Lz; & A_E &= 2\pi r_E Lz; & A_T &= \pi(r_E^2 - r_W^2) \\V_P &= A_T Lz\end{aligned}$$

Etapla 1

Nodo de simetría

$$T_P^j = T_P^{j+1} \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + T_E^{j+1} \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right]$$

$$a_P T_W^{j+1} + b_P T_P^{j+1} + c_P T_E^{j+1} = d_P$$

$$a_P = 0, \quad b_P = \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad c_P = \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad d_P = T_P^j$$

Nodo interno ($2 \leq i \leq N - 1$)

$$T_P^j = T_W^{j+1} \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + T_P^{j+1} \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + T_E^{j+1} \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right]$$

$$a_P T_W^{j+1} + b_P T_P^{j+1} + c_P T_E^{j+1} = d_P$$

$$a_P = \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad b_P = \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad c_P = \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right]$$

$$d_P = T_P^j$$

Nodo de superficie

$$T_P^j = T_W^{j+1} \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + T_P^{j+1} \left[1 + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} + \frac{\bar{h} A_E \Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + T_f \left[-\frac{\bar{h} A_E \Delta t}{\rho C_p V_p} \right]$$

$$a_P T_W^{j+1} + b_P T_P^{j+1} + c_P T_E^{j+1} = d_P$$

$$a_P = \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad b_P = \left[1 + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} + \frac{\bar{h} A_E \Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad c_P = 0,$$

$$d_P = T_P^j - T_f \left[-\frac{\bar{h} A_E \Delta t}{\rho C_p V_p} \right]$$

Etapa 2

Generación

$$S_H = \Delta H \frac{\Delta F}{\Delta t}$$

Fracción transformada a martensita

$$\Delta F = F_P^{j+1} - F_P^j$$

$$F_P^{j+1} = 1 - \exp\left(-0.011 * (Ms - T_P^j)\right)$$

Nodo de simetría

$$T_P^j = T_P^{j+1} \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho Cp Vp}\right] + T_E^{j+1} \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho Cp Vp}\right] - q_{GP} \left[\frac{\Delta t}{\rho Cp}\right]$$

$$a_P T_W^{j+1} + b_P T_P^{j+1} + c_P T_E^{j+1} = d_P$$

$$a_P = 0, \quad b_P = \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho Cp Vp}\right], \quad c_P = \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho Cp Vp}\right], \quad d_P = T_P^j + q_{GP} \left[\frac{\Delta t}{\rho Cp}\right]$$

Nodo interno ($2 \leq i \leq N - 1$)

$$T_P^j = T_W^{j+1} \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho Cp Vp}\right] + T_P^{j+1} \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho Cp Vp} + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho Cp Vp}\right] + T_E^{j+1} \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho Cp Vp}\right] - q_{GP} \left[\frac{\Delta t}{\rho Cp}\right]$$

$$a_P T_W^{j+1} + b_P T_P^{j+1} + c_P T_E^{j+1} = d_P$$

$$a_P = \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho Cp Vp}\right], \quad b_P = \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho Cp Vp} + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho Cp Vp}\right], \quad c_P = \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho Cp Vp}\right]$$

$$d_P = T_P^j + q_{GP} \left[\frac{\Delta t}{\rho Cp}\right]$$

Nodo de superficie

$$T_P^j = T_W^{j+1} \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho Cp Vp}\right] + T_P^{j+1} \left[1 + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho Cp Vp} + \frac{\bar{h}A_E \Delta t}{\rho Cp Vp}\right] + T_f \left[-\frac{\bar{h}A_E \Delta t}{\rho Cp Vp}\right] - q_{GP} \left[\frac{\Delta t}{\rho Cp}\right]$$

$$a_P T_W^{j+1} + b_P T_P^{j+1} + c_P T_E^{j+1} = d_P$$

$$a_P = \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho Cp Vp}\right], \quad b_P = \left[1 + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho Cp Vp} + \frac{\bar{h}A_E \Delta t}{\rho Cp Vp}\right], \quad c_P = 0,$$

$$d_p = T_p^j - T_f \left[-\frac{\bar{h}A_E \Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + q_{GP} \left[\frac{\Delta t}{\rho C_p} \right]$$

Etapa 3

Generación

$$S_H = \Delta H \frac{\Delta F}{\Delta t}$$

Fracción transformada a martensita

$$\Delta F = F_p^{j+1} - F_p^j$$

$$F_p^{j+1} = 1 - \exp \left(-0.011 * (M_s - T_p^j) \right)$$

Nodo de simetría

$$T_p^j = T_p^{j+1} \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + T_E^{j+1} \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] - S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C_p} \right]$$

$$a_p T_W^{j+1} + b_p T_p^{j+1} + c_p T_E^{j+1} = d_p$$

$$a_p = 0, \quad b_p = \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad c_p = \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad d_p = T_p^j + S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C_p} \right]$$

Nodo interno ($2 \leq i \leq N - 1$)

$$T_p^j = T_W^{j+1} \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + T_p^{j+1} \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + T_E^{j+1} \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] - S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C_p} \right]$$

$$a_p T_W^{j+1} + b_p T_p^{j+1} + c_p T_E^{j+1} = d_p$$

$$a_p = \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad b_p = \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad c_p = \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right]$$

$$d_p = T_p^j + S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C_p} \right]$$

Nodo de superficie

$$T_p^j = T_W^{j+1} \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + T_p^{j+1} \left[1 + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + q_{sup\ cte} \left[\frac{A_E \Delta t}{\rho C_p V_p} \right] - S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C_p} \right]$$

$$a_P T_W^{j+1} + b_P T_P^{j+1} + c_P T_E^{j+1} = d_P$$

$$a_P = \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad b_P = \left[1 + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad c_P = 0,$$

$$d_P = T_P^j - q_{sup\ cte} \left[\frac{A_E \Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C_p} \right]$$

Etapa 4

Generación

$$S_H = \Delta H \frac{\Delta F}{\Delta t}$$

Fracción transformada a martensita

$$\Delta F = F_P^{j+1} - F_P^j$$

$$F_P^{j+1} = 1 - \exp \left(-0.011 * (M_s - T_P^j) \right)$$

Nodo de simetría

$$T_P^j = T_P^{j+1} \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + T_E^{j+1} \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] - S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C_p} \right]$$

$$a_P T_W^{j+1} + b_P T_P^{j+1} + c_P T_E^{j+1} = d_P$$

$$a_P = 0, \quad b_P = \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad c_P = \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad d_P = T_P^j + S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C_p} \right]$$

Nodo interno ($2 \leq i \leq N - 1$)

$$T_P^j = T_W^{j+1} \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + T_P^{j+1} \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + T_E^{j+1} \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] - S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C_p} \right]$$

$$a_P T_W^{j+1} + b_P T_P^{j+1} + c_P T_E^{j+1} = d_P$$

$$a_P = \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad b_P = \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad c_P = \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right]$$

$$d_P = T_P^j + S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C_p} \right]$$

Nodo de superficie

$$T_P^j = T_W^{j+1} \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + T_P^{j+1} \left[1 + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + q_{sup}(T_{sup}) \left[\frac{A_E \Delta t}{\rho C_p V_p} \right] - S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C_p} \right]$$

$$a_P T_W^{j+1} + b_P T_P^{j+1} + c_P T_E^{j+1} = d_P$$

$$a_P = \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad b_P = \left[1 + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad c_P = 0,$$

$$d_P = T_P^j - q_{sup}(T_{sup}) \left[\frac{A_E \Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C_p} \right]$$

Etapas 5

Generación

$$S_H = \Delta H \frac{\Delta F}{\Delta t}$$

Fracción transformada a bainita

$$t_{j,fict}(T^j) = \left[\frac{-\ln(1 - F_i^j)}{n(T^j)} \right]^{b(T^j)}$$

$$t_j = \Delta t_j + t_{j,fict} = \Delta t_j \left[\frac{-\ln(1 - F_i^j)}{n(T^j)} \right]^{b(T^j)}$$

$$F_i^j = 1 - \exp(-n(T^j) t_j^{b(T^j)})$$

$$\Delta F_i^j = F_i^j - F_i^{j-1}$$

Nodo de simetría

$$T_P^j = T_P^{j+1} \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] + T_E^{j+1} \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right] - S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C_p} \right]$$

$$a_P T_W^{j+1} + b_P T_P^{j+1} + c_P T_E^{j+1} = d_P$$

$$a_P = 0, \quad b_P = \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad c_P = \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C_p V_p} \right], \quad d_P = T_P^j + S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C_p} \right]$$

Nodo interno ($2 \leq i \leq N - 1$)

$$T_P^j = T_W^{j+1} \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p} \right] + T_P^{j+1} \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p} + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p} \right] + T_E^{j+1} \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p} \right] - S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C p} \right]$$

$$a_P T_W^{j+1} + b_P T_P^{j+1} + c_P T_E^{j+1} = d_P$$

$$a_P = \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p} \right], \quad b_P = \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p} + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p} \right], \quad c_P = \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p} \right]$$

$$d_P = T_P^j + S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C p} \right]$$

Nodo de superficie

$$T_P^j = T_W^{j+1} \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p} \right] + T_P^{j+1} \left[1 + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p} \right] + q_{sup}(T_{sup}) \left[\frac{A_E \Delta t}{\rho C p V p} \right] - S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C p} \right]$$

$$a_P T_W^{j+1} + b_P T_P^{j+1} + c_P T_E^{j+1} = d_P$$

$$a_P = \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p} \right], \quad b_P = \left[1 + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p} \right], \quad c_P = 0,$$

$$d_P = T_P^j - q_{sup}(T_{sup}) \left[\frac{A_E \Delta t}{\rho C p V p} \right] - S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C p} \right]$$

Etapa 6

Generación

$$S_H = \Delta H \frac{\Delta F}{\Delta t}$$

Fracción transformada a martensita

$$\Delta F = F_P^{j+1} - F_P^j$$

$$F_i^{j+1} = 1 - \exp \left(-0.011 * (M_s - T_i^j) \right) \left(1 - \sum F_i^j \right)$$

Fracción transformada a bainita

$$t_{j,fict}(T^j) = \left[\frac{-\ln(1 - F_i^j)}{n(T^j)} \right]^{\frac{1}{b(T^j)}}$$

$$t_j = \Delta t_j + t_{j,fict} = \Delta t_j \left[\frac{-\ln(1 - F_i^j)}{n(T^j)} \right]^{\frac{1}{b(T^j)}}$$

$$F_i^j = 1 - \exp\left(-n(T^j) t_j^{b(T^j)}\right)$$

$$\Delta F_i^j = F_i^j - F_i^{j-1}$$

Nodo de simetría

$$T_P^j = T_P^{j+1} \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p}\right] + T_E^{j+1} \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p}\right] - S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C p}\right]$$

$$a_P T_W^{j+1} + b_P T_P^{j+1} + c_P T_E^{j+1} = d_P$$

$$a_P = 0, \quad b_P = \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p}\right], \quad c_P = \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p}\right], \quad d_P = T_P^j + S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C p}\right]$$

Nodo interno ($2 \leq i \leq N - 1$)

$$T_P^j = T_W^{j+1} \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p}\right] + T_P^{j+1} \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p} + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p}\right] + T_E^{j+1} \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p}\right] - S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C p}\right]$$

$$a_P T_W^{j+1} + b_P T_P^{j+1} + c_P T_E^{j+1} = d_P$$

$$a_P = \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p}\right], \quad b_P = \left[1 + \frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p} + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p}\right], \quad c_P = \left[-\frac{kA_E}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p}\right]$$

$$d_P = T_P^j + S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C p}\right]$$

Nodo de superficie

$$T_P^j = T_W^{j+1} \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p}\right] + T_P^{j+1} \left[1 + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p}\right] + q_{sup}(T_{sup}) \left[\frac{A_E \Delta t}{\rho C p V p}\right] - S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C p}\right]$$

$$a_P T_W^{j+1} + b_P T_P^{j+1} + c_P T_E^{j+1} = d_P$$

$$a_P = \left[-\frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p}\right], \quad b_P = \left[1 + \frac{kA_W}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho C p V p}\right], \quad c_P = 0,$$

$$d_P = T_P^j - q_{sup}(T_{sup}) \left[\frac{A_E \Delta t}{\rho C p V p}\right] + S_H \left[\frac{\Delta t}{\rho C p}\right]$$

8. Apéndice B

En este apéndice se muestra el efecto del orden de interpolación que se utilizó para interpolar los datos de *flux* de calor de la superficie como función de la temperatura de la superficie.

En la Figura 8.1 se presenta desde el orden de interpolación 0 hasta el orden 3, en donde el orden 0 es el menos preciso; sin embargo, para los fines de la interpolación que se requiere de la condición de frontera activa se optó por utilizar el orden de interpolación de orden 1 ya que se ajusta de buena manera a los datos experimentales [7].

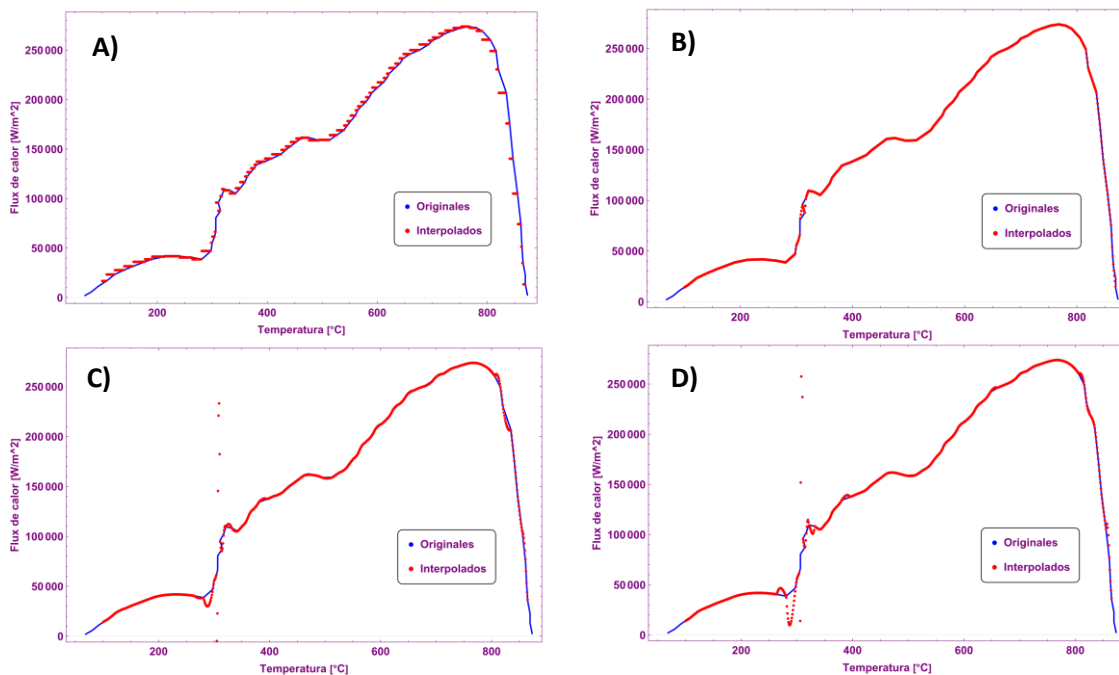


Figura 8.1. Interpolación del flux de calor en la superficie en función de la temperatura superficial con diferentes ordenes de interpolación dentro de Mathematica para la etapa 4. A) Orden 0, B) orden 1, C) orden 2 y D) orden 3.

En la Figura 8.2 se muestra el efecto que tiene el orden de interpolación en la respuesta térmica, en este caso para la etapa 4. En la parte de la recalcificación se nota como entre mayor es el orden de interpolación se presenta una meseta en esa sección de la respuesta térmica, que no se observa en los datos experimentales. Por lo tanto, se utilizó una interpolación de orden 1, tanto para la etapa 4 como para la 5.

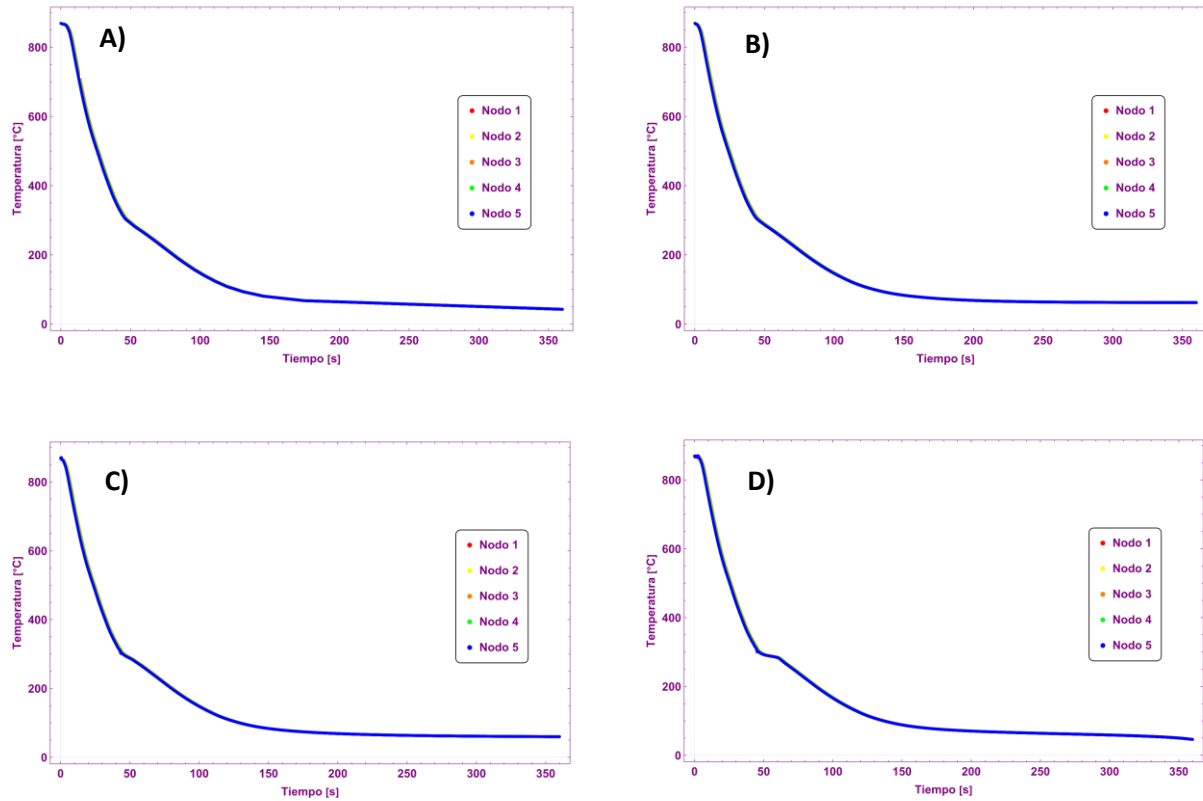


Figura 8.2. Respuesta térmica de los diferentes ordenes de interpolación de la condición de frontera activa dentro de Mathematica para la etapa 4. A) Orden 0, B) orden 1, C) orden 2 y D) orden 3.