



**Universidad Autónoma de San Luis Potosí**  
**Facultad de Ingeniería**  
**Centro de Investigación y Estudios de Posgrado**

**Predicción de transformaciones de fases en aceros  
enfocada a la mejora de modelos termo-mecánicos**

**T E S I S**

Que para obtener el grado de:

Maestría en Metalurgia e Ingeniería de Materiales

Presenta:

I.M. Aurora Pérez Espinosa

Asesor:

Dr. Dirk Frederik de Lange

San Luis Potosí, S. L. P.

Julio de 2018







**UASLP**

Universidad Autónoma  
de San Luis Potosí

14 de diciembre de 2017

**ING. AURORA PÉREZ ESPINOSA  
P R E S E N T E.**

En atención a su solicitud de Temario, presentada por el **Dr. Dirk Frederik de Lange**, Asesor de la Tesis que desarrollará Usted con el objeto de obtener el Grado de **Maestra en Metalurgia e Ingeniería de Materiales**, me es grato comunicarle que en la Sesión del H. Consejo Técnico Consultivo celebrada el día 14 de diciembre del presente, fue aprobado el Temario propuesto:

**TEMARIO:**

**“Predicción de transformaciones de fases en aceros enfocada a la mejora de modelos termo-mecánicos”**

- Introducción.
1. Estado del arte en procesos termo-mecánicos y transformaciones de fases en aceros.
  2. Estudio de ecuaciones cinéticas para transformaciones de fases en aceros.
  3. Implementación de ecuaciones en el modelo termo-metalúrgico.
  4. Resultados y validación del modelo termo-metalúrgico.
- Conclusiones.  
Referencias.

**“MODOS ET CUNCTARUM RERUM MENSURAS AUDEBO”**

**A T E N T A M E N T E**

**M. I. JORGE ALBERTO PÉREZ GONZALEZ  
DIRECTOR.**

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA  
DE SAN LUIS POTOSÍ  
FACULTAD DE INGENIERÍA  
DIRECCION



**FACULTAD DE  
INGENIERÍA**

Copia. Archivo.  
\*etn.

Av. Manuel Nava 8  
Zona Universitaria • CP 78290  
San Luis Potosí, S.L.P.  
tel. (444) 826 2330 al39  
fax (444) 826 2336  
www.uaslp.mx



## RESUMEN

En el presente trabajo se describe el desarrollo de un modelo matemático por el método de elemento finito para procesos térmicos en aceros, en el cual se acoplan el aspecto metalúrgico y el aspecto térmico con el fin de analizar las transformaciones de fases fuera del equilibrio de estado sólido que ocurren en el material. Es importante poder identificar los cambios de fase que ocurren en un material dado que estas transformaciones influyen en el nivel de esfuerzos que tienen lugar durante y después de un proceso térmico.

La simulación de las transformaciones de la fase ferrita y los agregados bifásicos perlita y bainita, los cuales en este trabajo se refieren como “fases”, se realiza en el programa COMSOL Multiphysics. La cinética de transformaciones de fases se representa con un sistema de ecuaciones diferenciales acoplado, dicho sistema se basa en el modelo de Kirkaldy. Las expresiones integrales de Kirkaldy fueron convertidas en ecuaciones diferenciales que permiten su implementación en el programa. En el presente trabajo, dichas ecuaciones son parametrizadas, introduciendo coeficientes específicos para identificar cuáles son los parámetros esenciales que la constituyen. Los términos que constituyen las ecuaciones son analizados gráficamente para entender su comportamiento y se han introducido modificaciones necesarias para evitar algunas complicaciones numéricas que surgen al tratar de resolver las ecuaciones derivadas del modelo original de Kirkaldy. La modificación de las ecuaciones individuales de cinética de transformación involucra un cambio de forma en las expresiones para hacerlas continuas y derivables y la adición de un término de incubación. Para encontrar los coeficientes que mejor describen la cinética de las transformaciones se realiza un proceso de optimización en el programa MATLAB para mejorar la correspondencia del diagrama TTT. Con estos coeficientes, posteriormente se predice el diagrama CCT. El propósito principal, es encontrar las soluciones óptimas a las funciones parametrizadas, el cual se logra mediante la variación de valores de los diferentes parámetros, la determinación del error al comparar diversos puntos entre las curvas calculadas por el modelo y las de referencia, y la minimización de tal error.

La validación del modelo ha sido llevada a cabo mediante la comparación del diagrama CCT simulado con el diagrama experimental encontrado en literatura con el fin de evaluar su aproximación. Se observa que las curvas de inicio de transformación obtenidas con el modelo tienen buena correspondencia con las curvas experimentales.

Por lo tanto, de los resultados del proyecto de investigación se tiene un modelo termo-metalúrgico con el que se puede predecir las transformaciones difusivas (ferrita, perlita y

bainita) para un acero AISI 4140 en estado isotérmico y en enfriamiento continuo. Con este modelo se puede calcular las velocidades de transformación a diferentes temperaturas y, por consiguiente, las cantidades de fases en cada instante del tiempo. Se considera que las ecuaciones propuestas pueden simular el proceso de austenitización y puede actuar como una investigación base para simular un proceso con un historial térmico como los que exhiben los procesos con láser, donde se tienen velocidades de calentamiento y enfriamiento muy rápidos.

# INDICE GENERAL

RESUMEN -----	III
INTRODUCCIÓN -----	1
Capítulo 1. Estado del Arte en Procesos Termo-Mecánicos y Transformaciones de Fases en Aceros. -----	5
1.1 Introducción -----	5
1.2 Tratamientos superficiales convencionales y por láser -----	6
Recubrimiento por fusión mediante láser -----	8
1.3 Microestructura de las capas recubiertas -----	10
1.4 Esfuerzos en el procesado -----	11
1.5 Modelado y acoplamiento de los fenómenos físicos del proceso -----	12
1.6 Influencia de la temperatura al comportamiento mecánico -----	15
1.7 Relación entre aspectos metalúrgicos y mecánicos -----	17
1.8 Relación entre aspectos térmicos y metalúrgicos -----	18
1.8.1 Transformaciones de fases en aceros -----	18
1.8.1.1 Austenita -----	20
1.8.1.2 Ferrita -----	20
1.8.1.3 Perlita -----	20
1.8.1.4 Bainita -----	21
1.8.1.5 Martensita -----	22
1.8.1.6 Diagramas de transformación -----	22
1.9 Modelos termo-mecánicos -----	24
Capítulo 2. Estudio de Ecuaciones Cinéticas para Transformaciones de Fases en Aceros -----	29
2.1 Introducción -----	29
2.2 Modelos termo-metalúrgicos -----	29
2.3 Cinética de transformaciones difusionales -----	31
2.3.1 Ecuación de Johnson – Mehl – Avrami – Kolmogorov -----	32
2.3.2 Ecuaciones de Kirkaldy -----	34
2.3.3 Principio de aditividad de Scheil -----	37
2.4 Transformación martensítica -----	38
2.5 Efecto del tamaño de grano en las transformaciones -----	39

2.6 Modelado de crecimiento de grano-----	41
2.7 Temperaturas de transformación -----	42
Capítulo 3. Implementación de Ecuaciones Cinéticas en el Modelo Termo-Metalúrgico -----	45
3.1 Introducción -----	45
3.2 COMSOL Multiphysics como herramienta en modelado-----	45
3.3 Análisis de ecuaciones para el modelo y modificaciones -----	46
3.3.1 Análisis de las ecuaciones de Kirkaldy-----	46
3.3.2 Modificación del termino de velocidad de transformación y adición del termino de incubación.-----	49
3.4 Modelado de transformaciones isotérmicas-----	51
3.4.1 Implementación de ecuaciones -----	52
3.4.2 Acoplamiento de las ecuaciones parametrizadas-----	53
3.4.3 Simulación de transformaciones a temperatura constante -----	57
3.5 Construcción del diagrama TTT -----	60
3.6 Variación de parámetros -----	62
3.7 Optimización de parámetros cinéticos -----	67
3.8 Modelado de transformación en enfriamiento continuo-----	70
Capítulo 4. Resultados y Validación del Modelo Termo-Metalúrgico-----	73
4.1 Introducción -----	73
4.2 Análisis de coeficientes de la optimización -----	73
4.2.1 Influencia de los coeficientes optimizados a los términos de la ecuación----	73
4.2.2 Influencia de otros coeficientes-----	75
4.3 Resultados-----	77
4.3.1 Diagrama TTT optimizado -----	77
4.3.2 Predicción de transformaciones en enfriamiento continuo -----	80
4.4 Validación del modelo termo-metalúrgico -----	81
4.5 Limitaciones del modelo termo-metalúrgico -----	86
4.6 Discusión-----	87
CONCLUSIONES -----	93
Conclusiones del trabajo -----	93
Trabajo a futuro-----	94
REFERENCIAS -----	97

# INTRODUCCIÓN

Los procesos de manufactura en metales tales como, soldadura, tratamientos térmicos, recubrimientos, etc., han llegado a ocupar un lugar importante en la industria. Hoy en día, son extensamente utilizados en diversos sectores como la industria automotriz, química, naval, petrolera y aeroespacial donde se buscan métodos confiables que permitan dar fiabilidad a los trabajos realizados, con mejor calidad y menos fallas. Una rama de procesos térmicos a la que se le ha dado especial atención son las tecnologías de modificación de superficies, las cuales ayudan a producir superficies resistentes al desgaste y a la corrosión con buena calidad. Estas tecnologías compiten en el mercado con diferentes características de procesado, pudiendo ser aplicadas a todos los tipos de materiales, incrementando su desempeño, reduciendo costos y modificando las propiedades. Los procesos superficiales, típicamente se clasifican como: procesos superficiales convencionales y procesos superficiales no convencionales. En los primeros se tienen técnicas como: deposición física y química de vapor, rociado térmico, soldadura por arco, entre otras. Los segundos comprenden una serie de tecnologías emergentes entre las que destacan los recubrimientos asistidos por láser o *laser cladding* en inglés. En este proceso se utiliza un haz de luz láser de alta intensidad y potencia para fundir el material de depósito, así como también el material de sustrato con el objetivo de formar un recubrimiento. A diferencia de las técnicas convencionales semejantes, como lo son los recubrimientos por soldadura de arco; en el recubrimiento asistido por láser, la distorsión de la pieza es bastante reducida ya que la zona afectada por el calor es menor. Por otro lado, esto implica altos gradientes térmicos, lo cual se traduce en esfuerzos locales grandes, así como cambios de temperatura muy rápidos.

Durante los procesos térmicos los materiales sufren cambios continuos de temperatura por el calentamiento y enfriamiento. Estas cargas térmicas causan esfuerzos térmicos, resultando en esfuerzos residuales en el material que pueden inducir a deformaciones y generación de grietas. Debido a esto, es importante estudiar los procesos para evitar estos efectos secundarios y generalmente desfavorables. En la práctica, por las condiciones de trabajo y por los diferentes aspectos como altas temperaturas, peligro de radiación y altas velocidades de calentamiento y enfriamiento que se ven involucrados en el procesamiento es difícil comprender estos fenómenos completamente. Por ello se buscan modelos que proporcionen una relación cuantitativa entre los parámetros del proceso, el historial de temperatura, los esfuerzos térmicos y la cinética de transformaciones de fase. Un punto trascendental en la optimización de los procesos es el análisis de transformaciones de fases, lo que permite conocer la distribución de fases en cada región.

En el campo de la metalurgia, la cinética de transformaciones de fase es un tema muy investigado, pues se describen las transformaciones de fase no solo experimentalmente sino también a través de modelos matemáticos que pueden ser introducidos programas de simulación. Diferentes autores [1–4] describen con modelos cinéticos las transformaciones de fases que comúnmente se forman en los aceros en el área industrial, las cuales son ferrita, perlita, bainita y martensita que se derivan a partir de la fase estable austenita. Con las ecuaciones que integran los modelos cinéticos es posible construir diagramas Tiempo-Temperatura-Transformación (TTT) y diagramas de Transformación bajo Enfriamiento Continuo (CCT) que son curvas que se utilizan para determinar la microestructura y cantidades de fase en transformaciones a temperatura constante y en enfriamiento continuo respectivamente.

Actualmente hay una fuerte demanda de modelos que sean capaces de predecir o al menos estimar la microestructura; y nivel de esfuerzos durante y después del proceso. Sin embargo, se sabe que las transformaciones microestructurales dependen del nivel de esfuerzo presente. Por otro lado, el nivel de esfuerzo también depende de las transformaciones que tienen lugar durante el proceso térmico. Por esta razón, un modelo para predecir esfuerzos residuales que no incorpore un modelo para estimar las transformaciones de fase estaría incompleto y pasaría lo mismo con un modelo para predecir las transformaciones de fase que no involucre el cálculo de los esfuerzos. De aquí surge la necesidad de elaborar modelos cada vez más completos que permitan una mejor estimación y predicción de los esfuerzos residuales y las microestructuras presentes.

Por ello, el objetivo de este trabajo es desarrollar un modelo termo-metalúrgico, en el cual se acoplen el aspecto metalúrgico y el aspecto térmico con el fin de analizar las transformaciones de fases fuera de equilibrio del estado sólido en los aceros. Se busca que el modelo se pueda resolver dentro de un programa aplicando el Método de Elemento Finito, ya que esto permitirá incorporarlo en modelos que calculan esfuerzos mecánicos y deformaciones, con esto tomar en cuenta las transformaciones fuera de equilibrio y los cambios de las propiedades mecánicas que se asocian a estas transformaciones.

El trabajo está dividido en 4 capítulos. En el capítulo 1, se presenta el estado de arte de algunas técnicas de tratamientos superficiales para comparar las ventajas entre procesos convencionales y por láser, se describe el proceso de recubrimiento por fusión mediante láser, las relaciones entre aspectos térmico-mecánico, metalúrgico-mecánico y térmico-metalúrgico. En el capítulo 2, se mencionan algunos modelos termo-metalúrgicos y se hace una descripción de modelos cinéticos para predecir las transformaciones de fases difusionales y adifusionales en aceros, también de expresiones para la predicción de tamaño de grano. En

el capítulo 3, se plantea la metodología para el desarrollo del modelo termo-metalúrgico y se describe la implementación de las ecuaciones cinéticas en el programa COMSOL Multiphysics. En el capítulo 4, se presenta el análisis y discusión de resultados, así como la validación del modelo termo-metalúrgico y se exponen sus limitaciones. Finalmente, se presentan las conclusiones del trabajo realizado.



# **Capítulo 1. Estado del Arte en Procesos Termo-Mecánicos y Transformaciones de Fases en Aceros.**

## **1.1 Introducción**

Algunos sectores, tales como la automotriz, aeroespacial, naval, defensa, entre otros, buscan mejorar las propiedades de los materiales procesados, debido a que se requieren partes con especial calidad superficial, mayor dureza, buena resistencia al desgaste y a la corrosión. Las propiedades son modificadas a través de procesos térmicos mediante tratamientos y modificación de superficies, los cuales también ayudan a reducir los costos de reparación o degeneración en los componentes. La variedad de tratamiento térmicos superficiales en el mercado es extensa, se encuentran los procesos convencionales que incluyen varias técnicas como deposición física y química de vapor, rociado térmico, soldadura por arco, entre otras. Una tecnología no convencional que suele competir con éxito en el mercado debido a una distorsión reducida y una alta productividad es el láser. Su uso para tratamientos incluye calentamiento de superficie, fusión superficial, aleación de superficie, recubrimiento, texturizado, marcado láser, etc. [5]. Debido a la atención que se ha dado a los procesos mediante laser, se trata de modelar los fenómenos físicos que ocurren durante el procesamiento, para predecir las condiciones para su optimización, sin realizar demasiados experimentos. Analizar la física del proceso es complejo, puesto que, es necesario combinar cálculos de transferencia de calor, cinética de transformación y relaciones cuantitativas entre propiedades y estructuras [6]. De las relaciones de estas físicas surgen modelos térmicos, termo-mecánicos y termo-metalúrgicos, sus aspectos han sido modelados por separado o acoplados, generalmente combinando el modelo térmico con otra física (mecánica o metalúrgica), pero el acoplamiento de las tres físicas no es muy común.

Diversos modelos han sido desarrollados que estudian el historial térmico, transformaciones de fases, deformaciones y esfuerzos térmicos. Pero en literatura se siguen reportando sobre microestructuras y propiedades no uniformes en materiales procesados mediante láser. Esto se debe a que en las predicciones realizadas en la mayoría de los casos no se toman en cuenta las transformaciones de fases fuera de equilibrio formadas por las grandes velocidades de enfriamiento y la rápida solidificación del material. Las transformaciones de fase afectan el campo de temperatura a través del calor latente de transformación y de las propiedades termo-físicas dependientes de la microestructura y al campo mecánico debido a las deformaciones por transformación. Tomar en cuenta las transformaciones microestructurales usualmente no es fácil, ya que, es importante tener una comprensión de sus mecanismos. Los trabajos de modelado que se realizan sobre los procesos térmicos tienen un objetivo en común, la

optimización del proceso, mejorando las propiedades de las piezas y minimizando los esfuerzos residuales que pueden conducir a la delaminación y al agrietamiento.

## 1.2 Tratamientos superficiales convencionales y por láser

Los materiales al estar en contacto con los alrededores resultan en degradaciones, es por eso que, para competir en el mercado, se necesita producir superficies resistentes al desgaste, a la corrosión y con buena calidad superficial. Las áreas vulnerables a las degradaciones sólo se centran en ciertas partes del material, generalmente en la superficie, por lo tanto, en el campo industrial el enfoque de modificación de propiedades es frecuentemente en áreas discretas como la superficie. La modificación de superficies ofrece la oportunidad de que materiales conserven sus propiedades eléctricas, ópticas o térmicas durante un periodo largo, sobre condiciones específicas. Estos procesos pueden ser aplicados a todo tipo de productos, incrementando su desempeño, reduciendo costos y modificando las propiedades superficiales. En la siguiente tabla se resumen algunos procesos superficiales.

Tabla 1. Procesos superficiales [5]

Proceso	Características del proceso
Láser	- Entrada de calor baja, capas delgadas, baja dilución y baja porosidad, pequeñas zonas afectadas por el calor (ZAT), alta inversión inicial de equipos, productividad volumétrica baja.
Soldadura	- Oxiacetileno- unión líquida/sólida, entrada de calor alta - Soldadura por gas inerte de tungsteno (TIG) - uniones razonables, entradas de calor medias - Arco abierto- entrada de calor baja - MIG - enlace razonable, entrada de calor medio - Arco sumergido - Electroescoria - Fusión de sodio - Arco de plasma
Rociado	- Unión por Polvo de llama / Fusión de alambre, sin dilución - Metalización por arco eléctrico - Plasma- Enlace líquido / sólido, baja entrada de calor, sin dilución
Deposición física de vapor (PVD)	- Recubrimiento en vacío (evaporación térmica) - Lanzamiento - Chapado de iones - Implantación de iones
Chapado mecánico	- Granallado - Fillet Rolling
Electroquímico	- Acuoso - Sales fundidas

Una tecnología de calentamiento de superficies que se ha adoptado es el láser, el cual tiene propiedades únicas. El láser compite con los procesos convencionales por las ventajas que ofrece como puede verse en la tabla 1 y esto es debido a que la energía es aplicada exactamente en la superficie donde se necesita. Además del control de la penetración térmica y, por lo tanto, de la zona afectada térmicamente.

Desde hace años el láser se usa ampliamente en el procesamiento de materiales en diferentes condiciones de operación y sus aplicaciones son tales como tratamientos térmicos, fundición, unión, aleación, recubrimientos, marcado láser, micromaquinado, etc.

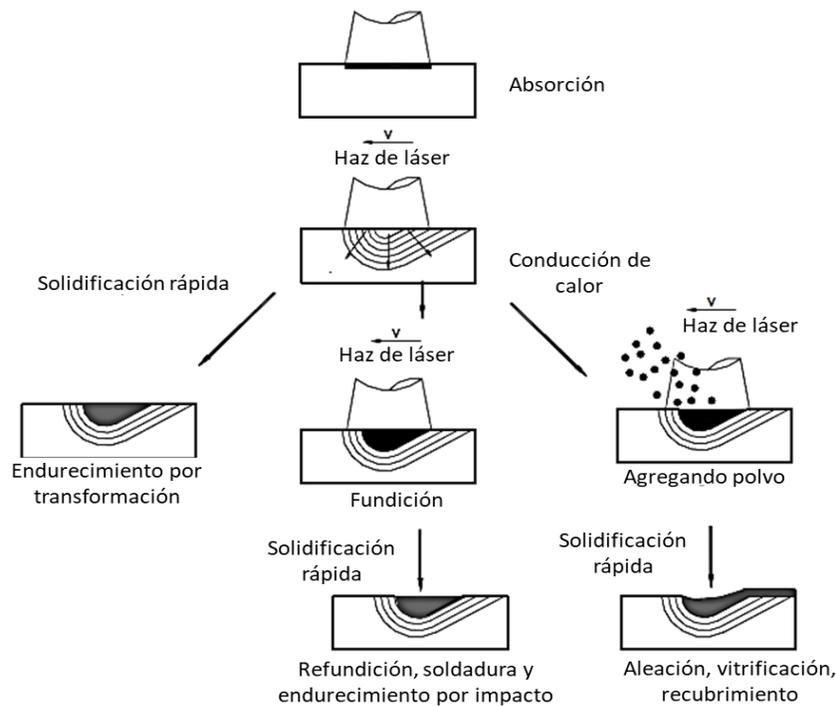


Figura 1. Esquema de fenómenos físicos durante diferentes técnicas de procesamiento de materiales por láser [7].

Entender el proceso de maquinado por láser requiere conocimientos de los fenómenos físicos que ocurren, debido a que, cuando el material absorbe la radiación electromagnética ocurren diferentes formas de transferencia de calor como la refracción, reflexión, absorción, dispersión y transmisión [5]. La absorción de radiación en el sustrato da como resultado diversos efectos de calentamiento, que principalmente se basa en el tiempo de interacción del láser con el material lo cual conduce a diferentes procesos como se muestra en la figura 1.

En el esquema mostrado tres grupos de tratamiento superficial son distinguidos: calentamiento sin fusión, fusión en la superficie y fusión en la superficie más material

adicional. La diferencia en estos procesos reside en las diferentes formas de absorción, conducción térmica, fusión y solidificación rápida.

### **Recubrimiento por fusión mediante láser**

El recubrimiento por fusión mediante láser es uno de los tipos de procesado de materiales por láser que ha tenido rápido crecimiento y ha ido ganando importancia, puesto que es utilizado en la reparación de componentes de alto valor, recubrimiento metálico, remodelación y el prototipado rápido, poniendo a esta a técnica a competir contra los métodos alternativos por las ventajas que ofrece como baja dilución, mínima distorsión, endurecimiento selectivo y mejor controlabilidad en el proceso.

La técnica de recubrimiento por fusión mediante láser o *laser cladding* involucra el uso de una fuente de calor láser de alta potencia para fundir el material de depósito (aporte) y una capa delgada del sustrato (pieza de trabajo) para formar un recubrimiento perfectamente unido al sustrato. El grosor típico del recubrimiento producido mediante láser varía en un rango de 50  $\mu\text{m}$  - 2 mm [8]. Esta técnica también se considera como una tecnología interdisciplinaria, dado que utiliza tecnología láser, diseño asistido por computadora y manufactura (CAD/CAM), robótica, sensores, control y metalurgia de polvos [7].

El proceso de recubrimiento se muestra esquemáticamente en la figura 2, en el cual se representa el haz de láser (fuente de calor), el material depositado, la corriente de polvo, el charco fundido, la zona de fusión, el gas protector y la pieza de trabajo. El proceso de trabajo se puede explicar de la siguiente manera: Mientras el haz de láser se aproxima a la superficie del sustrato e impacta en la superficie produciendo el charco fundido, el material de aporte es inyectado a través de la tobera, pasan por la fuente de calor y llegan precalentadas a la superficie del material. Con el movimiento de la fuente de calor o la pieza de trabajo se forma la capa sólida después que el haz de láser ha pasado.

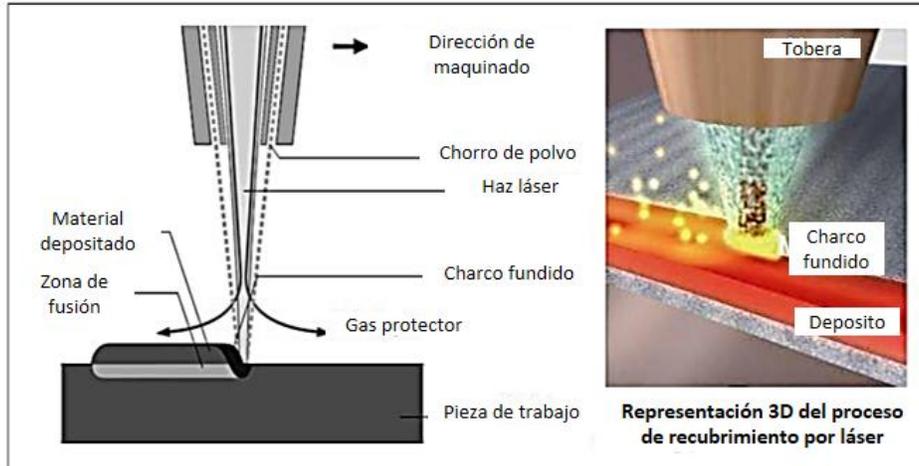


Figura 2. Proceso de recubrimiento mediante láser [9].

Para lograr una capa de recubrimiento delgado, el material puede ser depositado en tres diferentes formas: 1) inyección de partículas de polvo a la masa fundida en el sustrato mediante un haz de láser de alta intensidad; 2) alimentación por alambre (*wire feeding*) y 3) polvo pre-colocado en el sustrato para luego ser expuesto al haz de láser. De estos tres métodos, el recubrimiento por inyección de polvo ha demostrado ser efectivo en la producción de un sistema uniforme, sin defectos y un recubrimiento metalúrgicamente unido al sustrato [10]. Por ello, la mayoría de los estudios y aplicaciones realizadas se enfocan en este método.

Las capas de recubrimiento son utilizadas frecuentemente para incrementar la dureza en la superficie y con ello también se promueve el incremento a la resistencia a la fatiga y al desgaste de la superficie del material.

Las principales aplicaciones del recubrimiento asistido por láser se centran en la reparación y renovación de componentes de alto valor, tales como herramientas, alabes de turbinas, turbinas de gas y partes de motores de combustión interna, así como diversos componentes de carácter militar [9]. Sus campos más importantes de aplicación industrial son el cubrimiento superficial, la reparación de soldadura y el prototipado.

La investigación sobre este proceso hasta hoy en día es extensa, el estudio de nuevas aleaciones para mejorar las propiedades mecánicas va en rápido crecimiento. Los materiales que pueden ser utilizados para el depósito y sustrato pueden ser de igual o diferente composición química, es decir, puede ser de un único material metálico a múltiples aleaciones. Teniendo en cuenta la necesidad de que, en recubrimiento superficial, por ejemplo, el material de depósito debe poseer mejores propiedades mecánicas para aguantar

el desgaste y la corrosión. En la literatura se reportan tres tipos de materiales principales en polvos. Se encuentran aleaciones en base a cobalto, hierro y níquel. Las aleaciones en base cobalto son usadas para endurecimiento por su resistencia al desgaste y a la corrosión a altas temperaturas [8, 11, 12]. Actualmente el uso de las aleaciones base titanio se ha incrementado en varias industrias por sus excepcionales propiedades y buena biocompatibilidad [13]. También se ha introducido compuestos intermetálicos. Pero actualmente las investigaciones se centran en el cermet (compuestos cerámicos-metálicos).

### **1.3 Microestructura de las capas recubiertas**

En el recubrimiento de una pieza se tienen principalmente tres regiones que se relacionan con la máxima temperatura y velocidad de enfriamiento que cada una experimenta, la región donde se encuentra el material de recubrimiento, un área de mezclado o también llamada de dilución que se refiere a la mezcla del material de aporte-substrato y la zona afectada térmicamente (ZAT), en esta última región las transformaciones de fases del estado sólido y el crecimiento de grano se llevan a cabo debido al aporte y a los gradientes térmicos. Las transformaciones de fases se producen con el cambio de una fase matriz ( $\alpha$ ) a una fase nueva ( $\beta$ ), esto implica una alteración en la microestructura del material, puesto que al formarse una nueva fase puede tener una composición y/o estructura cristalina diferente de la fase matriz.

La microestructura obtenida en los procesos térmicos depende de las velocidades de solidificación y de enfriamiento del área fundida. En la zona expuesta a una fuente de calor existirá diferencia de velocidades, ya que cada punto tendrá una máxima temperatura. En los procesos que involucran una fuente de láser se ha encontrado que la microestructura muestra una estructura fina, característica de altas velocidades de enfriamiento inherente a tales procesos [14], resultando las áreas superficiales con un incremento de dureza. La dureza cambia dependiendo de la microestructura presente. Se sabe por Sun et al. [15] que para aceros de baja aleación, la estructura de solidificación consiste en dendritas de austenita y otras fases dependientes de la velocidad de enfriamiento, demostraron que para altas velocidades de enfriamiento la microestructura martensítica domina en el recubrimiento en un material AISI 4340. También Liu et al. [16] observaron microestructuras martensíticas en el material solidificado, similar a la martensita acicular y en otras regiones revelan una microestructura dendrítica y celular, con una dirección de crecimiento parcial hacia el centro del charco fundido empezando desde la línea de fusión. Debido a las altas velocidades de solidificación durante el proceso, los tamaños de las células y dendritas (ramas laterales primarias) son muy pequeñas.

## 1.4 Esfuerzos en el procesado

En los procesos térmicos mediante láser (p. ej., soldadura, fusión selectiva con láser, refundición de superficie y recubrimientos), la fuente de calor es la responsable de la carga térmica, los cuales contribuyen a la formación de esfuerzos térmicos y esfuerzos residuales. Los esfuerzos térmicos son inducidos durante el procesamiento, surgen con las expansiones y contracciones térmicas provocados por los cambios de volumen del material y también debido a las variaciones de las propiedades termo-mecánicas que están en función de la temperatura y el tiempo (p.ej., calor específico y conductividad térmica). Por otro lado, los esfuerzos residuales, son los esfuerzos que quedan en un material después de haber quitado la carga térmica.

Los esfuerzos residuales según Withers & Bhadeshia [17] se pueden categorizar en 3 tipos. En el tipo I se encuentran los esfuerzos de largo alcance equilibrado sobre dimensiones macroscópicas, tales esfuerzos pueden ser estimados usando modelos continuos los cuales ignoran la naturaleza policristalina o multifase del material. El tipo II es equilibrado sobre el número de dimensiones de grano ( $l = 3-10 \times$  tamaño de grano) y el tipo III existe sobre dimensiones atómicas y se sitúa dentro de un grano, por ejemplo, estos son causados por dislocaciones o por defectos de punto. En capas delgadas o películas también se pueden dividir en extrínsecos; tales como los esfuerzos que surgen de una diferencia en los coeficientes de expansión térmica, e intrínsecos; tales como los esfuerzos que surgen de la deposición epitaxial coherente.

Los esfuerzos del primer tipo son los esfuerzos estudiados en métodos de elemento finito y pueden ser comparados directamente con diagramas experimentales que se obtienen por métodos de escaneo de profundidad, tales como la difracción de neutrones, el cual es capaz de producir mapas tridimensionales de esfuerzos y deformaciones.

Los efectos de los esfuerzos residuales se estudian ampliamente, pues son perjudiciales de varias formas durante el proceso: afectan el funcionamiento de la pieza procesada en el servicio, ocasionan agrietamientos, influyen en la resistencia a la fatiga y el desgaste. Por ello, se estudian los mecanismos de generación para poder minimizarlos y optimizar los procesos. En tratamientos mediante láser, se ha encontrado que los mecanismos de origen de esfuerzos residuales son la deformación plástica y flujo debido a la expansión y contracción térmica, y el cambio de volumen debido a las transformaciones de fases [18].

En el procesamiento de materiales con láser pueden producirse esfuerzos residuales, no obstante, el estado de esfuerzos puede variar considerablemente para diferentes materiales. En investigaciones sobre recubrimientos se ha encontrado que, altos esfuerzos residuales a

tensión localizados pueden conducir a la generación de grietas disminuyendo la vida a fatiga. Esfuerzos residuales compresivos moderados son benéficos, pero esfuerzos relativamente altos puede conducir también a la distorsión del componente dependiendo de la resistencia a la cedencia del material [19].

## **1.5 Modelado y acoplamientos de los fenómenos físicos del proceso**

El proceso de deposición de material metálico directo asistido por láser presenta muchas ventajas y a pesar del enorme progreso en el proceso, se han reportado muchos problemas sobre la uniformidad de las propiedades y microestructura de la pieza terminada [20, 21], haciendo que la aceptación del proceso disminuya en el área industrial.

Los diferentes aspectos del proceso no pueden ser distinguidos o comprendidos completamente en la práctica por la relación y variables que se ven involucrados en el procesamiento. Por ello, se buscan modelos completos que proporcionen una relación cuantitativa entre los parámetros del proceso, el historial de temperatura, la cinética de transformación de fase y los esfuerzos térmicos. Para el entendimiento de la física una opción es la simulación y el modelado del proceso, permitiendo la predicción de condiciones para su optimización sin realizar demasiados experimentos.

En los modelos de recubrimiento por láser se toman en cuenta los parámetros principales involucrados, tales como la potencia del láser, la velocidad de polvo inyectado en el sustrato y la velocidad de escaneo. Estos determinan la calidad del revestimiento prediciendo la geometría, la temperatura de las capas revestidas, la microestructura, composición, dilución, etc.

Durante los procesos térmicos, no sólo en los procesos de láser, sino también en tratamientos térmicos, soldadura, recubrimientos, entre otros, los materiales sufren cambios continuos de temperatura por el calentamiento y enfriamiento. Por lo tanto, el estudio de los fenómenos de transporte y el análisis de transferencia de calor es esencial para predecir los esfuerzos inducidos térmicamente en los materiales depositados.

Conocer la microestructura final y la distribución de propiedades permite entender cómo se interrelacionan. Algunos puntos que se debe tener claro es la influencia de los parámetros de procesamiento y el historial térmico en cada punto de la pieza. Es importante poder identificar las transformaciones de fase que se llevan a cabo en el material y cómo afectan a las propiedades de los materiales. La información de esta relación puede ser obtenida experimentalmente, pero muchas veces se hace difícil realizarlo por el alto costo y el consumo de tiempo.

En la simulación del proceso se consideran los acoplamientos de tres distintos aspectos o campos físicos: el térmico, mecánico y metalúrgico. Entre estos campos surgen interacciones con fenómenos de transferencia de calor, cambios microestructurales y los esfuerzos internos del material. En el cual, la transferencia de calor es el responsable principal en la activación de los otros fenómenos. Cada aspecto se representa por ecuaciones de gobierno y condiciones de frontera. Para poder analizar los aspectos acoplados se requiere la interrelación de los campos.

Las interacciones que suceden en el proceso se muestran en la figura 3, en la cual se muestran los campos que se ven involucrados en el proceso y de éstos se derivan tres acoplamientos principales:

- Acoplamiento termo-mecánico.

Los gradientes de temperaturas generan esfuerzos térmicos fluctuantes en el material debido a las contracciones o expansiones térmicas y también a causa de las transformaciones de fase. En el caso de la relación mecánica-térmica se genera calor inducido por la deformación plástica.

- Acoplamiento termo-microestructural.

Las transformaciones de fases en un componente se deben a la interacción entre los aspecto térmico y metalúrgico que producen una evolución microestructural en el material, gracias a la transferencia de calor. La cinética de transformación es dependiente de la composición química de la fase matriz, velocidad de calentamiento y enfriamiento del material. Por otra parte, la influencia de las transformaciones de fases en el aspecto térmico se atribuye al calor latente liberado durante un cambio de fase en el componente.

- Acoplamiento mecano-microestructural.

Las transformaciones de fases pueden ocasionar deformaciones y esto se debe a la diferencia en densidad de las fases que llegan a formarse en el proceso. En las transformaciones una micro-región de transformación cambia su volumen, estos cambios resultan en dilataciones y deformaciones plásticas inducidas por transformación (TRIP). Este fenómeno es explicado por la existencia de una deformación irreversible como resultado de las transformaciones de fase que ocurren bajo un campo de esfuerzos [22].

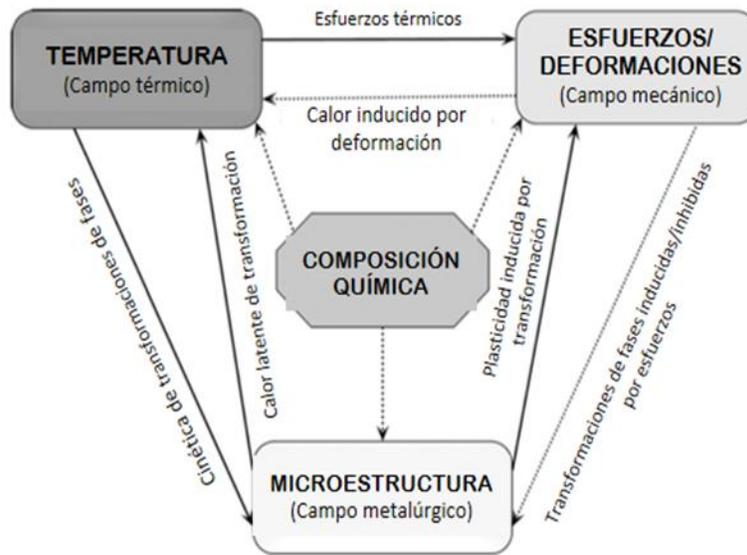


Figura 3. Campos físicos y acoplamientos en el modelo [23].

En otro caso, el aspecto mecánico puede alterar al metalúrgico mediante los campos de esfuerzos que causan transformaciones de fase. Los esfuerzos y las deformaciones afectan las transformaciones de fase a través de la modificación de las temperaturas de transformación. El esfuerzo aplicado conduce también al movimiento de las curvas TTT a pequeños tiempos y un incremento de la velocidad de transformación [24]. Del mismo modo, las deformaciones elásticas afectan a la cinética de transformación cambiando la movilidad de los átomos y el volumen libre. La plasticidad altera los procesos de transporte cambiando la concentración de defectos de punto, proporcionando atajos para la difusión a través del centro (núcleo) de dislocaciones o proporcionando un mecanismo de transporte no difusivo donde los átomos son transportados moviendo las dislocaciones, ya sea geoméricamente, o mediante un efecto de arrastre debido a la interacción soluto/dislocación [25].

Los modelos han sido estudiados extensamente. Entre los modelos para el análisis del proceso se encuentran:

- a) Los modelos térmicos para estudiar la evolución de la temperatura y determinar el historial térmico.
- b) Los modelos termo-mecánicos utilizados para predecir los esfuerzos residuales, el agrietamiento y la deformación inducida por esfuerzos causado por la historia térmica.

- c) Los modelos termo-cinéticos o termo-metalúrgicos usados para estudiar los efectos de los parámetros del proceso en la microestructura final de materiales, producidas mediante recubrimiento por láser y así mismo la distribución de las propiedades. Estos modelos combinan un modelo de transferencia de calor, permitiendo la evolución de la temperatura en la parte analizada, la teoría de la solidificación para predecir la solidificación de la microestructura y los modelos cinéticos para todas las transformaciones de fase del estado sólido que pueden ocurrir en el material.

Cada uno de estos aspectos han sido modelados por separado o acoplado, generalmente combinando el modelo térmico con otra física. Pero el acoplamiento de las tres físicas no es muy común.

## **1.6 Influencia de la temperatura al comportamiento mecánico**

En el proceso de recubrimiento por fusión mediante láser el primer paso es la formación de un charco de material fundido en la superficie del material sustrato, en donde las partículas de polvo precalentadas del material de aporte son inyectadas y comienza la creación de la pista de recubrimiento. En el proceso no toda la energía del láser alcanza la superficie por la atenuación de la nube de polvo, esta atenuación es la que causa el precalentamiento del polvo [7]. Una región del material es calentada hasta llegar al punto de fusión como resultado de la energía transmitida, la capa de recubrimiento es aplicada en el sustrato y después empieza la solidificación. Cuando el material se solidifica se encoge por la contracción térmica que se presenta, entonces debido al ciclo que experimenta, surgen los esfuerzos térmicos.

Con el objetivo de minimizar los esfuerzos residuales en el proceso se han realizado numerosas investigaciones sobre los tipos que existen, los efectos que pueden llegar a tener en capas simples y multicapas para diferentes materiales y los tratamientos para su disminución. Hasta ahora, gracias a estas investigaciones se sabe que los esfuerzos residuales a tensión en el material son los que podrían iniciar el agrietamiento en la pieza. El estado de los esfuerzos dependerá de varios factores, por ejemplo: para procesos de deposición con láser influyen las propiedades del material, la geometría de la muestra, los parámetros del proceso; tales como la entrada de energía, el grosor de las capas de polvo, la estrategia de escaneo, el precalentamiento, entre otros [26]. En investigaciones se ha encontrado que los esfuerzos longitudinales a tensión aparecen en las regiones cercanas de las capas depositadas, debido a la contracción transversal en estas zonas, mientras que, los esfuerzos longitudinales a compresión surgen en las zonas lejanas del recubrimiento depositado [27]. Con respecto a los esfuerzos residuales a compresión pueden ser favorables debido a los efectos benéficos en las propiedades mecánicas del material, por ejemplo conducir a un aumento de resistencia

a la fractura y con eso un incremento de resistencia al desgaste por erosión en boquillas de SiC / (W, Ti) C producidas mediante prensado en caliente [28]. También se han evaluado los niveles de esfuerzos a compresión en compuestos de alúmina en donde se encontró que al aumentar los esfuerzos residuales a compresión, tanto el desgaste como la fricción se reducen [29], mientras el esfuerzo residual a tensión en el recubrimiento deteriora su rendimiento mecánico grandemente. La acumulación de estos esfuerzos residuales a tensión son los que conducen a delaminación y agrietamiento del recubrimiento [19], especialmente en el procesado de multi-pistas y multicapas [30]. Mazumder et al. [31] analizaron los esfuerzos residuales en recubrimientos de multi-capas en un acero herramienta y concluyeron que las capas que son depositadas anteriormente de las capas siguientes, sus esfuerzos residuales fueron disminuidos, pero la última pista depositada muestra un esfuerzo máximo, ya que los esfuerzos residuales no fueron liberados.

Köhler et al. [32] realizaron pruebas en dos diferentes materiales en acero austenítico X5CrNi18-10 y 42CrMo4 tratado térmicamente. El resultado de esfuerzos encontrados para el primer material no concuerda con los de literatura, ya que presenta los esfuerzos residuales de compresión en la interfaz y en el caso del acero 42CrMo4 los esfuerzos son a tensión en la interfaz que corresponden a los resultados encontrados por otros autores, en este trabajo se anticipa que la diferencia en los resultados del acero X5CrNi18-10 se basa en las diferentes formas de los especímenes y las trayectorias de procesamiento.

La aplicación de recubrimiento por láser induce a situaciones de esfuerzos residuales los cuales influyen negativamente las propiedades de fatiga. Especialmente la resistencia a la fatiga de aceros de baja aleación que es fuertemente reducida por el recubrimiento por láser. Los resultados se correlacionan bien con los hallazgos de las pruebas de fatiga: las ubicaciones de inicio de grietas coinciden con las áreas de esfuerzos residuales a tensión altos. Las muestras de acero austenítico se agrietan en la superficie, mientras que los componentes de acero tratados térmicamente y las muestras se agrietan cerca de la interfaz [32, 33].

Para la minimización de esfuerzos se han estudiado los efectos del precalentamiento en el sustrato y se han observado algunas reducciones en los esfuerzos térmicos residuales [33], [34]. Sobre este caso no solo se ha investigado experimentalmente, Alimardani et al. [35] demostraron con resultados numéricos y experimentales que mediante el precalentamiento del sustrato antes del proceso de deposición, es posible manejar los esfuerzos térmicos y consecuentemente cesar la formación de grietas a través de la capa depositada. También fue encontrado que los efectos de los esfuerzos térmicos como la delaminación y el agrietamiento

es más prominente en algunos materiales aditivos como la estelita 1, ya que por naturaleza es sensible al agrietamiento durante el proceso de revestimiento duro.

### **1.7 Relación entre aspectos metalúrgicos y mecánicos**

Como se ha abordado anteriormente, el proceso de recubrimiento por láser involucra el acoplamiento de varios fenómenos; en la relación mecánica-metalúrgica, los esfuerzos afectan la cinética de transformación de fases y las transformaciones a su vez alteran el comportamiento termo-mecánico del material a través de la plasticidad inducida por transformación y por los cambios en las propiedades mecánicas.

Las transformaciones de fases (aspecto metalúrgico) afectan al aspecto mecánico con las deformaciones que se originan debido a los cambios de volúmenes que provocan las diferencias en compactación entre las fases (p. ej., martensita y austenita en aceros). La deformación plástica inducida por transformación (TRIP), la cual se define como la plasticidad significativamente incrementada durante un cambio de fase es una deformación que aparece por la transformación de un material sobre esfuerzos aplicados incluso para esfuerzos más bajos que los esfuerzos de fluencia de las fases [36]. Tal ablandamiento se origina cuando ocurren las transformaciones de fases, ya que una región o microrregión del material puede cambiar su volumen y algunas veces también su forma. Dado que se desarrolla un desajuste entre la zona de transformación y la matriz debe existir una compensación para lograr compatibilidad, esto se acomoda por un estado de esfuerzo propio que puede variar de grano a grano, se tiene en cuenta entonces que el desarrollo del estado de esfuerzo propio está influenciado por un esfuerzo aplicado [37].

Los esfuerzos y la plasticidad previa afectan las transformaciones de fases al alterar tanto la estabilidad termodinámica de las fases como la cinética de la transformación [23]. En relación a los efectos de los esfuerzos se encontró que las temperaturas de transformación y tiempos críticos en aceros son alteradas, ya que la temperatura  $M_s$  (temperatura de inicio de martensita) disminuye al aplicar un esfuerzo compresivo en la pieza de trabajo durante el enfriamiento, pero este incrementa con la aplicación de un esfuerzo uniaxial (esfuerzo a tensión). Además, el esfuerzo aplicado conduce también al desplazamiento de las curvas TTT a pequeños tiempos y un incremento de la velocidad de transformación [36]. En el caso de la cinética de transformación, las velocidades y la trayectoria de transformación son alteradas por el cambio en la movilidad de los átomos debido a las deformaciones elásticas y plásticas. En algunos casos, las transformaciones pueden ser inducidas o totalmente inhibidas por los esfuerzos, denominado comúnmente como Transformación inducida/inhibida por esfuerzos

(SIPT). Además de los esfuerzos elásticos, la deformación plástica previa de la austenita también influye en las transformaciones de fase subsiguientes [23].

## **1.8 Relación entre aspectos térmicos y metalúrgicos**

El campo térmico afecta al campo metalúrgico mediante las transformaciones de fases que modifican la distribución microestructural, los cuales en una transición sólido-líquido son conocidos como fusión y solidificación y transformaciones de una fase matriz ( $\alpha$ ) a una fase nueva ( $\beta$ ) en estado sólido. La velocidad de transformación básicamente depende de la temperatura, la velocidad de enfriamiento/calentamiento, concentración de elementos aleantes, esfuerzos y la deformación plástica previa. Por otro lado, las transformaciones de fase influyen en la temperatura mediante la liberación de calor latente. Este calor es liberado o almacenado en las transiciones de fases o en las transformaciones de fases.

### **1.8.1 Transformaciones de fases en aceros**

Con los procesos térmicos el acero puede procesarse de diferentes formas con el objetivo de obtener diversas microestructuras y al mismo tiempo propiedades. En todo proceso de calentamiento y enfriamiento del material se producen transformaciones de fase y la base de los tratamientos térmicos es el diagrama de fase en equilibrio de hierro- carbono (Fe-C). Este diagrama representa las composiciones a diferentes temperaturas donde las fases del acero son estables, también los límites de equilibrio en los campos de fase.

El hierro es un elemento alotrópico: a presiones atmosféricas puede existir en más de una forma de cristal dependiendo de la temperatura. Hierro  $\alpha$  (ferrita) con estructura cristalina BCC (cúbico centrado en el cuerpo) existe debajo de 912 °C; hierro  $\gamma$  (austenita) con un sistema FCC (cúbico centrado en caras) existe entre 912 y 1394 °C; y desde 1394 °C al punto de fusión del hierro puro de 1538 °C existe ferrita  $\delta$  que tiene la misma estructura que la ferrita  $\alpha$ . En la figura 4 se muestra el diagrama de fase Fe-C hasta un 7% de contenido de carbono, en ella se pueden encontrar las diferentes fases del hierro. El diagrama Fe-C es utilizado en los aceros por ser aleaciones de hierro, carbono y otros elementos, los cuales contienen menos del 2% de carbono, entonces, la mayoría de los tratamientos térmicos se centran en la zona de entre 0 y 2% de carbono, puesto que de esta cantidad en adelante se encuentran los hierros fundidos.

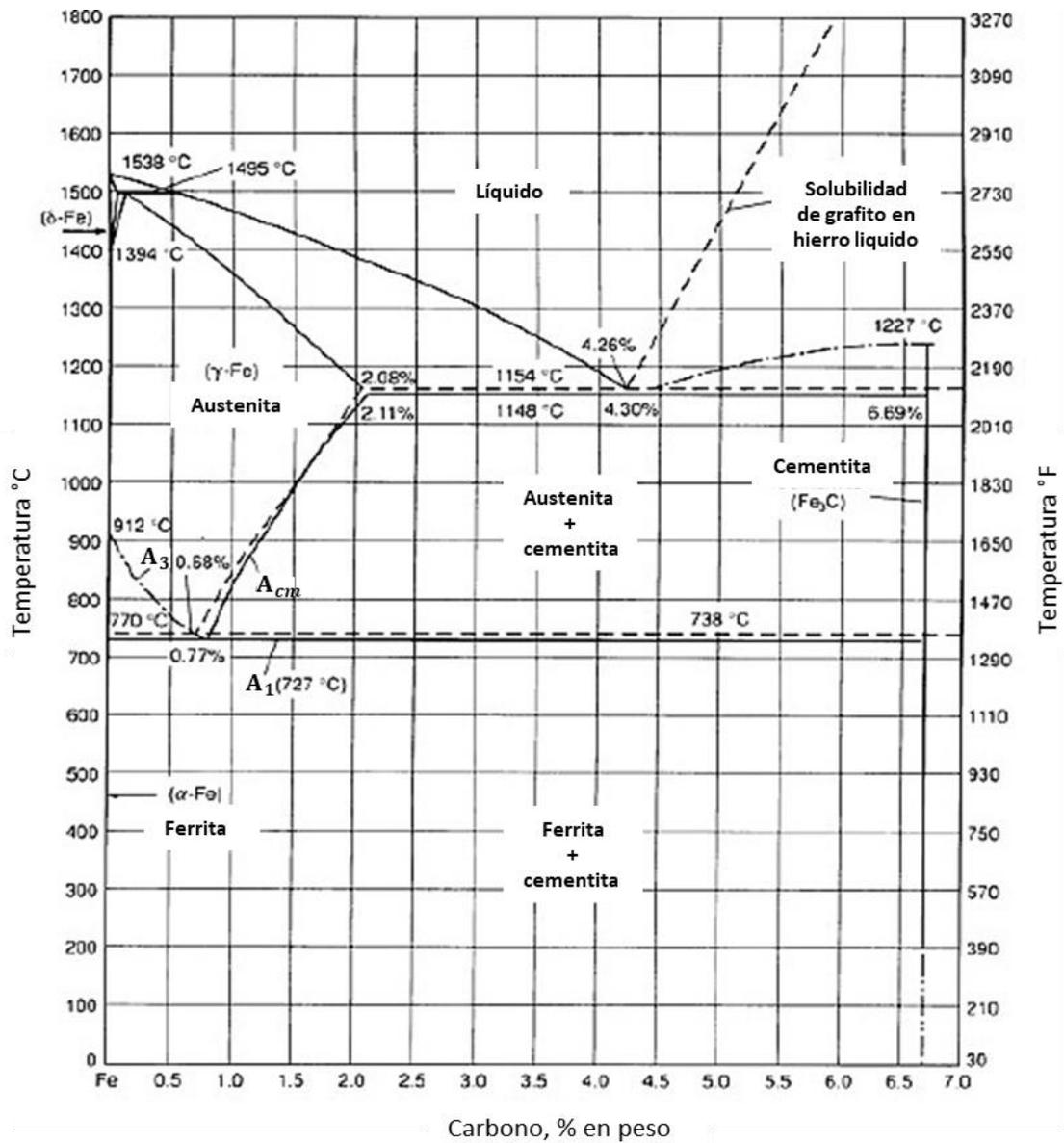


Figura 4. Diagrama de equilibrio Fe-C hasta 7% de carbono. Líneas sólidas indican el diagrama Fe-Fe<sub>3</sub>C; Líneas discontinuas indican el diagrama Fe-grafito [38].

En el acero se distinguen dos tipos de transformaciones dependiendo del mecanismo de transformación atómica: las difusivas (o reconstructivas) y no difusivas (o displacivas). En la difusiva se requiere cierto tiempo por el desplazamiento de los átomos a través de la interfaz de transformación. En cambio, la transformación no difusiva puede ocurrir rápidamente, y esto se debe a que los átomos no tienen el suficiente tiempo ni movilidad para el desplazamiento. La morfología, la composición química y otras características de la microestructura son dependientes del mecanismo de transformación.

Las fases y agregados bifásicos que pueden ser formadas en un proceso de enfriamiento cuando se parte de la fase austenita son la ferrita, perlita, bainita y martensita. Bhadeshia y Honeycombe [39] han estudiado los diferentes tipos de microestructuras, características de transformación y clasificación.

### **1.8.1.1 Austenita**

El porcentaje de carbono soluble en esta fase depende de los elementos aleantes del acero. Al momento de alear el hierro con carbono, la austenita se estabiliza a temperaturas más bajas, alcanzando un mínimo en la composición eutectoide de 0.78 porcentaje en peso (wt %) de carbono, la cual marca una frontera de fase es conocida como línea  $A_3$ . La máxima solubilidad de carbono en la austenita es aproximadamente el 2 wt % a 1147 °C.

### **1.8.1.2 Ferrita**

Bhadeshia [39] propuso una clasificación de los tipos de ferrita: la ferrita Wittmanstätten ( $\alpha_w$ ) y la ferrita acicular ( $\alpha_a$ ) ocurren mediante un mecanismo displacivo. Por otro lado, la ferrita alotriomórfica ( $\alpha$ ) y la idiomórfica ( $\alpha_i$ ) pertenecen al grupo de transformaciones reconstructivas.

La ferrita alotriomórfica es la primera fase que se puede obtener durante el proceso de enfriamiento de la austenita, empieza a formarse debajo de la temperatura  $A_3$  y nuclea en los bordes de grano de la austenita. Su transformación termina hasta que toda la austenita ha sido transformada a la temperatura  $A_1$  (723 °C en un sistema Fe-C).

La ferrita idiomórfica que tiene la misma formación que la alotriomórfica, pero su nucleación es en los granos de austenita, inclusiones u otros lugares de nucleación heterogéneos.

La ferrita Wittmanstätten, se presenta en forma de placas, puede nuclear en los bordes de grano austeníticos y en la ferrita alotriomórfica formada previamente. Su transformación ocurre entre temperaturas de transformación de la ferrita Wittmanstätten y la bainita. Su mecanismo de transformación es displacivo.

### **1.8.1.3 Perlita**

La formación de la perlita empieza debajo del punto  $A_1$  (723 °C), siendo el producto de descomposición eutectoide del acero y es una mezcla laminar de ferrita y cementita ( $Fe_3C$ ), involucra un crecimiento cooperativo de ambas fases. Los lugares de nucleación de la perlita pueden encontrarse tanto en la ferrita (aceros hipoeutectoides), cementita (aceros hipereutectoides) como en el límite de grano austenítico (aceros eutectoides).

### 1.8.1.4 Bainita

De manera similar la bainita es una mezcla de ferrita y cementita y, por lo tanto, depende de la distribución del carbono entre la ferrita y la cementita controlada por difusión. Sin embargo, a diferencia de la perlita, la ferrita y la cementita no se presentan en arreglos laminares. La ferrita de las microestructuras bainíticas puede aparecer como cristales aciculares o laminas muy finas (subunidades microestructurales) que se agrupan en plumas.

Se pueden encontrar dos tipos de bainitas:

La bainita superior se forma en el rango de temperaturas justo debajo de donde se forma la perlita entre 550 y 400 °C, consiste de láminas finas de ferrita bainítica rodeadas por partículas de carburos de cementita ( $Fe_3C$ ), estos son formados a partir de la austenita residual enriquecida en carbono que rodea las láminas. La bainita inferior se forma a bajas temperaturas entre 400 y 200 °C donde carburos finos puede también precipitar directamente dentro de las láminas de ferrita.

El mecanismo de descomposición de austenita a bainita se considera como displaciva, este mecanismo se divide en dos partes: difusión de carbono durante la nucleación y sin difusión durante el crecimiento, tal como se muestra en la figura 5.

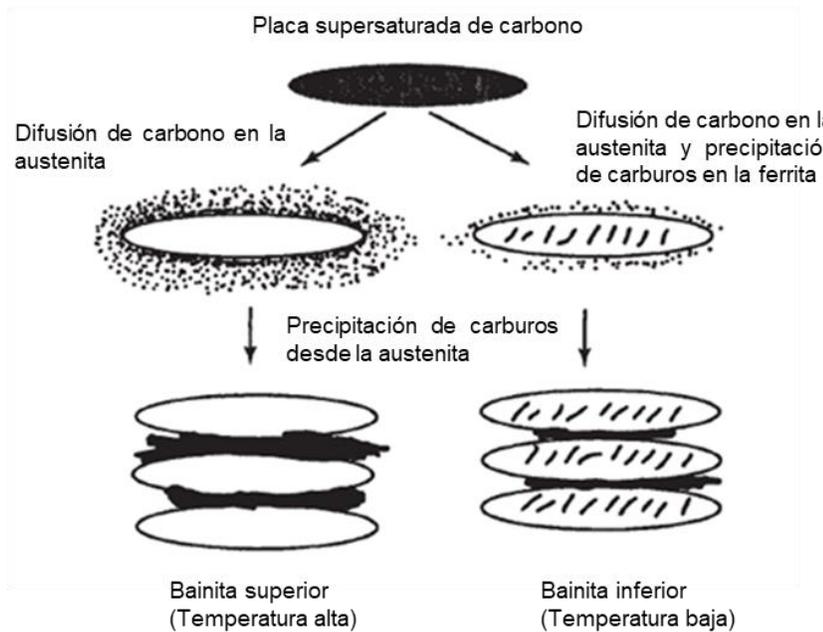


Figura 5. Representación esquemática de la transición de bainita superior a inferior [39]

### **1.8.1.5 Martensita**

Es la estructura más dura encontrada en los aceros. Es una estructura metaestable que se forma cuando las fases austeníticas son enfriadas a velocidades elevadas. El mecanismo de transformación de la martensita es adifusional, puesto que nuclea y crece sin difusión. Dado que la difusión es suprimida por el rápido enfriamiento, los átomos de C no tienen tiempo de difundir, sino que quedan atrapados en sitios octaédricos de una estructura cúbica centrada en el cuerpo (BCC). Una nueva fase es producida con una nueva estructura, una celda unitaria tetragonal centrada en el cuerpo (BCT). La fase martensítica llega a tener una composición de carbono igual que la austenita, dependiendo de la composición de la aleación.

La temperatura a la cual la martensita comienza a formarse se le designa como ( $M_s$ ). Y la temperatura final a la cual la transformación martensítica se completa es ( $M_f$ ). Se ha encontrado que estas temperaturas varían dependiendo del contenido de carbono. En el caso que la formación de la martensita sea interrumpida a una temperatura dada, y después se requiera seguir esa transformación, será necesario un subenfriamiento que conduce a la nucleación y al rápido crecimiento de las placas de martensita. A la martensita es posible descomponerla durante un calentamiento, en la cual a los átomos de carbono se les otorga movilidad y entonces otras microestructuras pueden ser formadas, a este proceso se le llama revenido.

### **1.8.1.6 Diagramas de transformación**

Los diagramas de transformación se emplean para determinar la microestructura y las cantidades de fase que pueden formarse en un determinado proceso. Pueden determinarse experimentalmente mediante métodos tales como, técnicas de análisis térmicos, baños de sales combinados con metalografía y medición de dureza, dilatometría, métodos de resistividad, mediciones de susceptibilidad magnética, técnicas de difracción de rayos X y neutrones, emisión acústica, técnicas de medición de densidades y predicciones termodinámicas.

Para el ciclo de calentamiento de un material se utilizan diagramas de austenización (figura 6) y en procesos de enfriamiento se usan diagramas Tiempo-Temperatura-Transformación (TTT) y diagramas de Transformación bajo Enfriamiento Continuo (CCT). Estos diagramas son determinados para representar el tiempo de inicio y fin de la descomposición de la fase austenítica.

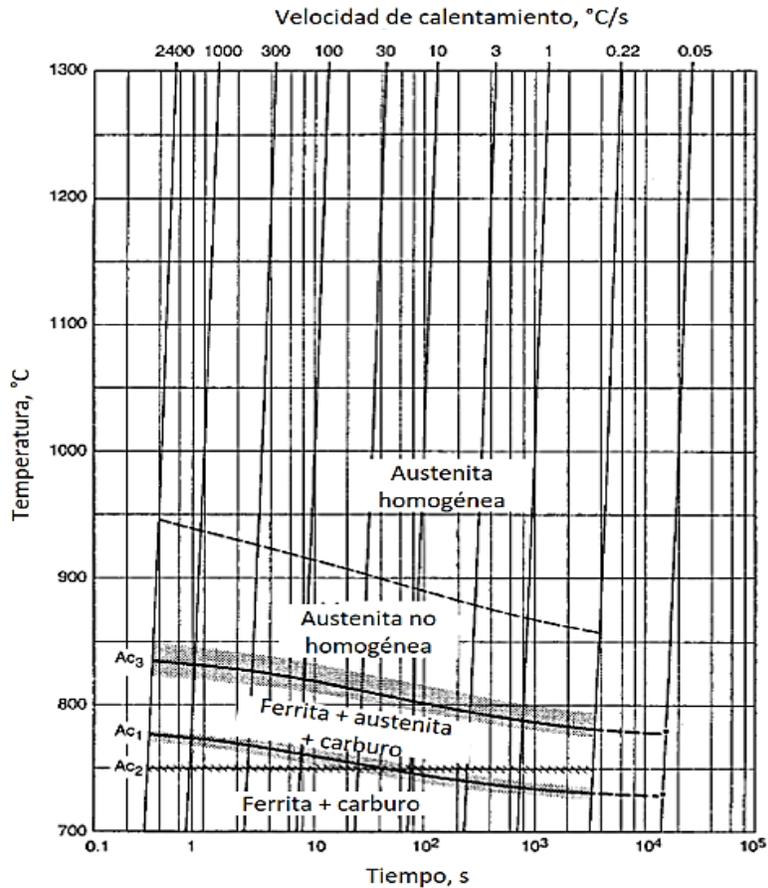


Figura 6. Diagrama Tiempo-Temperatura-Austenización para un acero SAE 52100 [38]

Los diagramas TTT describen las transformaciones a una temperatura determinada, es decir, para procesos en donde la temperatura se mantiene constante (isotérmicos) y los diagramas CCT son para procesos en donde la temperatura varía con el tiempo, este tipo de diagrama son los más utilizados en la industria, ya que los tratamientos o procesos térmicos son realizados en enfriamiento continuo y con ello la microestructura del material cambiara debido a un aumento o disminución continuo de la temperatura.

Los diagramas comúnmente se realizan con los métodos de dilatometría y metalografía con ellas se investiga la influencia de algunos factores como velocidad de transformación, tiempo, tamaño de grano y elementos aleantes en las transformaciones de fases. Dado que la temperatura representa un factor importante en la velocidad de transformación de una fase, es posible obtener gráficas para representar el porcentaje de transformación en función del logaritmo del tiempo a cada temperatura. Las curvas que se obtienen adoptan una forma de S y la información que arrojan son los tiempos y porcentajes de transformación desde el 0 al 100% para una temperatura específica. En la parte superior de la figura 7 se muestra un

ejemplo de curva S para la transformación perlítica y en la parte inferior se muestra el diagrama TTT que es obtenido graficando cada tiempo de inicio y fin de transformación a diferentes temperaturas.

La obtención de los diagramas CCT son similares a los diagramas isotérmicos, pero en lugar de tomar el tiempo de transformación a temperaturas constantes, son graficados los tiempos con un perfil de temperatura de enfriamiento continuo. Debido a que en este caso las temperaturas cambian continuamente, los tiempos de inicio y fin se retrasan, haciendo que las curvas de transformación se desplacen hacia la derecha en una gráfica tiempo contra temperatura, ya que se necesita más tiempo para la transformación. En literatura pueden encontrarse diversos diagramas de transformación dependiendo del tipo de acero.

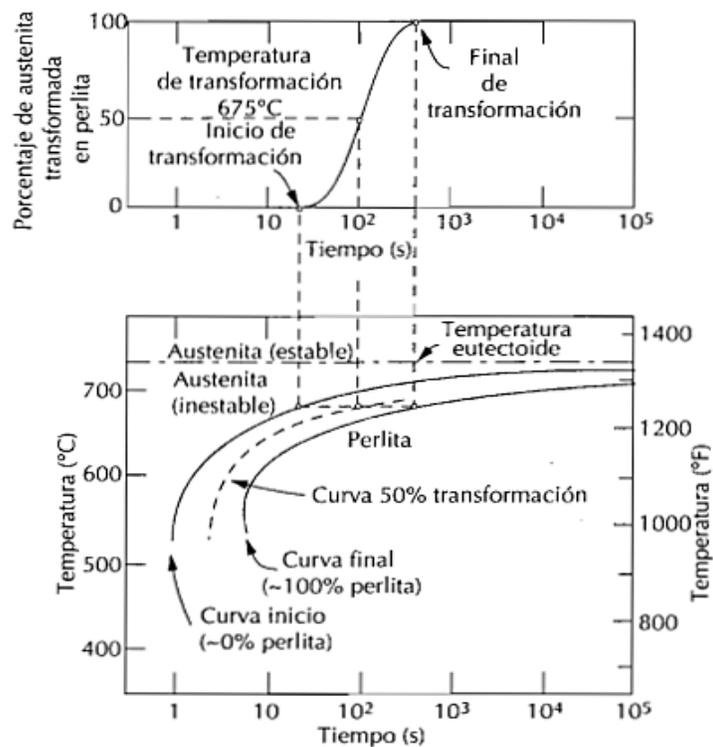


Figura 7. Obtención de un diagrama de transformación isotérmica a partir del porcentaje de transformación en función del tiempo de experimentación [40].

## 1.9 Modelos termo-mecánicos

Para el proceso de recubrimiento mediante láser varios autores han implementado y desarrollado modelos analíticos y numéricos con el fin de entender el proceso teórico de la técnica de recubrimiento asistido por láser. En estos modelos se plantea el acoplamiento de los aspectos térmico y mecánico para predecir los esfuerzos residuales y las deformaciones.

También se ha estudiado la influencia de los parámetros de procesamiento en los esfuerzos térmicos y en las propiedades mecánicas.

En el modelado de esfuerzos residuales y deformaciones, Pilloz et al. [41] propone un modelo fenomenológico en la cual descompone un espécimen en tres partes para determinar los esfuerzos en varios materiales, con su predicción se logra sólo una aproximación debido a que no se tienen los datos suficientes de las propiedades físicas y mecánicas del material, conforme a la evolución térmica. Deus y Deus y Mazumder [42] desarrollaron una evaluación cuantitativa de los esfuerzos residuales en dos capas de un material C95600 en un sustrato AA333. En los resultados la expansión térmica de la capa de recubrimiento es menor que del sustrato y los valores máximos de esfuerzos longitudinales se presentan en ambos materiales, alrededor de con 65% del esfuerzo de cedencia a temperatura ambiente.

Zhao et al. [43] en un análisis de proceso de multi-pistas concordaron con que los esfuerzos longitudinales son más grandes que los esfuerzos laterales y el esfuerzo en dirección al grosor es el más pequeño. Estos esfuerzos varían en varias direcciones [44]. Se predicen esfuerzos de compresión en la superficie del recubrimiento, los cuales son originados para contrarrestar los esfuerzos tensiles inducidos en la interface por la contracción térmica alta [45]. Labudovic et al. [46] desarrollaron un modelo tridimensional que calcula los esfuerzos residuales y las dimensiones de la zona de fusión. En los resultados se muestra que los esfuerzos residuales se ven incrementados en la construcción de capas subsecuentes en comparación con una capa y añaden que el agrietamiento puede ocurrir longitudinalmente, así como transversalmente.

Wang et al, [47] con un modelo termo-mecánico para simular la deposición LENS de multicapas, en el cual se evaluó la influencia de parámetros en el proceso, encontraron que para el caso estudiado la velocidad de avance analizadas no tiene efecto significativo en los esfuerzos residuales en el componente z (pistas perpendiculares al sustrato), pero al incrementar la potencia de la fuente se incrementa la magnitud de los esfuerzos. Con el incremento de la potencia láser, el tamaño de la zona afectada se incrementa y también modifica las velocidades de calentamiento y enfriamiento del recubrimiento.

Javid y Ghoreishi [48] realizan un modelo termo-mecánico para estudiar el historial térmico y la distribución de esfuerzos residuales en un proceso de recubrimiento de carburo de tungsteno en Inconel 718. Con un modelo térmico predicen la distribución de temperaturas y la dilución, para la predicción de los esfuerzos residuales se calculó con un modelo de material termo-elastoplástico, basado en la regla isotrópica de endurecimiento por deformación. Es encontrado que con el incremento en la energía de entrada los esfuerzos residuales aumentan, pero el número de grietas en el recubrimiento disminuye.

Otro parámetro es estudiado en un modelo termo-mecánico por Foroozmehr & Kovacevic [49], en el modelo realizado a un material AISI 4140 se muestra que el patrón de deposición afecta significativamente la historia de temperatura del proceso, las propiedades mecánicas y microestructurales del material depositado y por lo tanto influye en la distribución de los esfuerzos. En el análisis se mostró que el patrón de cordón corto tiene el mínimo y el patrón de espiral tiene el esfuerzo residual máximo en el material depositado.

Un modelo termo-mecánico realizado por Zhao et al. [27] basada en un proceso de soldadura de prototipado rápido de un paso (una pista) y múltiples capas en el cual se analizó la influencia de la dirección de deposición en los esfuerzos residuales y deformaciones residuales, también se estudió la evolución de los esfuerzos térmicos y la distribución de los esfuerzos residuales. En el trabajo se realizaron comparaciones entre los esfuerzos residuales obtenidos y experimentales, en las figuras 8a y 8b se muestran los resultados en dos posiciones diferentes, a lo largo de EF y  $E_1F_1$ . En las figuras, la dirección longitudinal es paralela a la dirección del depósito y la transversal es perpendicular a esta dirección. Como lo predicen otros autores, es encontrado que los esfuerzos longitudinales tensiles aparecen en la región cercana de las capas depositadas, debido al encogimiento del material de depósito en el proceso de enfriamiento y los esfuerzos longitudinales compresivos aparecen en la región lejos de las capas depositadas.

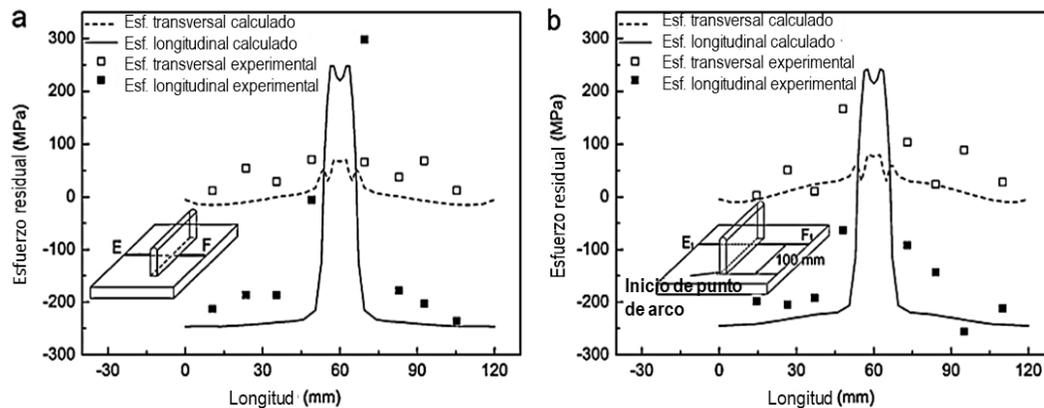


Figura 8. Esfuerzos residuales experimentales y calculados. a) Esfuerzos residuales a lo largo de la línea central EF; b) esfuerzos residuales a lo largo de la línea  $E_1F_1$  [27].

En la comparación de los esfuerzos residuales simulados y experimentales se reportan concordancias y sobre la distribución de esfuerzos en diferentes zonas del componente se informa que aparentemente tienen caracteres diferentes. También observaron que las fluctuaciones de esfuerzos relativamente mayores existen en las áreas de arco inicial y final.

Por los casos mencionados se tiene en cuenta que, realizar predicciones de esfuerzos residuales mediante modelos es complicado ya que, muchas veces los resultados presentan errores de predicción, debido a que los datos medidos no son precisos o por las suposiciones y datos que son tomados para alimentar el modelo, la mayoría de los modelos al compararlo con la experimental solo son similares en las áreas importantes, pero en las otras difieren [50].

La mayoría de los investigadores usan suposiciones similares para el modelado del material y la simulación del proceso. En el análisis del proceso con un modelo termo-mecánico acoplado la historia de la temperatura se considera como la carga para el análisis mecánico.



## **Capítulo 2. Estudio de Ecuaciones Cinéticas para Transformaciones de Fases en Aceros**

### **2.1 Introducción**

En el campo de la metalurgia, la cinética de transformaciones de fase es un tema muy investigado, ya que se requiere describir esas transformaciones de fase no solo experimentalmente sino también a través de modelos matemáticos que pueden ser introducidos a softwares de simulación y con ello simular esos cambios microestructurales.

Existen diferentes modelos descritos en la literatura que permiten determinar la cantidad de fase, ya sea por transformación difusional o adifusional. Los modelos termo-metalúrgicos son ejemplos de investigaciones que utilizan estos modelos matemáticos teóricos, están enfocados a procesos térmicos como recubrimientos por láser, procesos de deposición de polvos, etc. Sin embargo, las ecuaciones cinéticas pueden ser utilizadas para predecir las transformaciones de fases en cualquier proceso de manufactura que involucre una alteración en la temperatura del material, puesto que, tal alteración ocasionara un cambio en la microestructura de la pieza.

Los modelos cinéticos para transformaciones de fases tratan de simular el proceso de nucleación y crecimiento de grano en el material. Los primeros modelos que sentaron las bases fueron desarrollados por Johnson–Mehl–Avrami–Kolmogorov (JMAK) [51,52], Zenner-Hillert [53,54], Kirkaldy [55] con algunas modificaciones y Bhadeshia [56]. Actualmente se encuentran variedad de modelos que predicen con precisión razonable los cambios microestructurales en un material [57–60].

### **2.2 Modelos termo-metalúrgicos**

Actualmente la mayoría de las operaciones o procedimientos que se realizan en los procesos térmicos han dejado de ser elegidos en base a prueba y error en muchos campos. Las propiedades deseadas pueden ser controladas con los parámetros adecuados del proceso. La cuantificación de estos procesos se ha logrado gracias a modelos matemáticos y computacionales, los cuales permiten la predicción de las propiedades finales de una pieza procesada. La necesidad de control en las propiedades, reducción de costos y el mejoramiento de la productividad, aún siguen vigentes y con ello de igual manera, el desarrollo de modelos numéricos. Los modelos pueden analizar las relaciones entre los campos térmico, metalúrgico y mecánico como se ha mencionado anteriormente en el capítulo 1. La interacción entre el campo metalúrgico y térmico también ha recibido especial atención con el desarrollo de modelos termo-cinéticos o termo-metalúrgicos, los cuales combinan estudios

de transferencia de calor y la cinética de transformación para la predicción de la evolución microestructural por medio de un historial térmico dado.

Se realizan modelos térmicos para simular la evolución de la temperatura y modelos cinéticos para todas las transformaciones que puedan ocurrir en el material. Los modelos cinéticos relevantes de transformaciones de fase en estado sólido han sido descritos por varios investigadores, desde los primeros que sentaron las bases para describir los procesos de nucleación y crecimiento, tales como Johnson y Mehl, Avrami, Kolmogorov (JMAK) [51,52], modelos semi-empíricos propuestos por Venugopalan y Kirkaldy [2,3,57,61,62], Koistinen y Marburger (K-M) [63]. Le siguieron más investigadores como Leblond y Devaux [64], Denis et al. [65], Oddy et al. [57], Jones y Bhadeshia [66] y Réti et al. [58]. Los modelos proporcionan la microestructura del material y en base a ella se puede estimar la dureza con los modelos de Li et al. [62], Brooks et al. [67] y Bhadeshia [68].

La mayoría de los modelos actuales están basados en las ecuaciones de los modelos de JMAK, Kirkaldy, K-M y algunos modelos libres. Estas ecuaciones son válidas para la predicción de la microestructura final en cualquier proceso térmico. Se pueden encontrar para tratamientos térmicos como templados, calentamiento de superficies, estampados, procesos de soldadura, procesos de manufactura aditiva, entre otros.

Los procesos de manufactura aditiva han recibido especial atención por las ventajas que pueden ofrecer, son técnicas de manufactura rápida, reparadores de componentes y modificadores de propiedades en materiales metálicos. De esta gran rama de procesos, el enfoque de la investigación para productos metálicos reside en procesos mediante láser, debido a que se requieren mejores propiedades estructurales en las piezas, las cuales pueden verse influenciadas por la evolución microestructural. Para el caso del procesado mediante láser, la microestructura y propiedades dependen de varios factores como: el historial térmico, el mecanismo de solidificación y la fracción volumétrica de las fases formadas en el proceso de enfriamiento. Para poder aplicar los modelos cinéticos es necesario conocer algunas constantes relacionadas con las propiedades del material como las propiedades físicas y termodinámicas. De igual manera, es importante tener al alcance la información del tipo de aleación del material, además se debe tener una comprensión completa del historial térmico en cada punto de la pieza. Por lo tanto, para poder explicar la microestructura final y la distribución de propiedades, uno debe, por una parte, entender la influencia de los parámetros de procesamiento y estrategia de acumulación de parte de la historia térmica en cada punto de la pieza, y por otro, identificar las transformaciones de fases que pueden ocurrir en el material y entender como esas transformaciones afectan las propiedades de los materiales

En literatura se encuentran varios modelos realizados, los cuales se enfocan al procesado mediante láser. Costa et al. [6] realizaron un modelo termo-cinético de LPD (*Laser Powder Deposition*) para una pared de acero AISI 420 de diez capas, y encontraron que parámetros como el tamaño del sustrato y el tiempo de inactividad entre cada deposición afectan al historial térmico, microestructura y en consecuencia las propiedades finales. Debido a las altas velocidades de enfriamiento se analiza solo la formación de fase martensítica mediante la ecuación de Koistinen and Marburger, también es incluido un análisis de revenido del material. Similarmente, en el trabajo que presentaron Wang y Felicelli [69] se encontró que parámetros como la potencia del láser y la velocidad de desplazamiento tienen influencia en las transformaciones de fases y en la dureza resultante en la construcción de una placa de acero inoxidable AISI 410 mediante un proceso de LENS (*Laser Engineering Net Shaping*). En un análisis de diferentes patrones de deposición fue encontrado que su patrón de deposición tiene influencia en el historial térmico, por lo tanto, también en la microestructura [70].

Estas investigaciones demuestran que los parámetros de procesamiento influyen en las propiedades resultantes del material y en el caso del estudio cuantitativo de las transformaciones solo se analiza la transformación martensítica, ya que es posible saber para un material dado, cual es la velocidad de enfriamiento mínima para que exista transformación martensítica, puesto que, las velocidades de enfriamiento en los procesos con láser están alrededor de  $10^3 - 10^4$  °C/s.

Los modelos termo-cinéticos se realizan para diferentes materiales. Suárez et al. [71] reporta un modelo termo-metalúrgico para la simulación de la deposición de una aleación de titanio Ti6Al4V sobre titanio puro. En este modelo se simulan transformaciones con y sin difusión. Para ello se consideraron las ecuaciones K-M para transformaciones sin difusión y la ecuación de JMAK para transformaciones con difusión. El modelo es comparado con datos experimentales y se encuentra buena concordancia entre ellas. Una reciente publicación sobre la evolución microestructural en un proceso de soldadura para aceros de baja aleación es la que reporta Ni y Wahab [72], quienes desarrollaron un modelo en base al modelo microestructural de Bhadeshia. Los resultados obtenidos fueron comparados con el modelo de Kirkaldy y con información experimental. En el trabajo se concluye que el modelo desarrollado predice mejor las transformaciones de fases.

### **2.3 Cinética de transformaciones difusionales**

Como se ha mencionado anteriormente un tipo de transformación es la reconstructiva o con difusión, estas transformaciones pueden presentarse en un proceso de austenitización y en la

descomposición de la austenita. Un proceso de austenitización se lleva a cabo en el calentamiento y la descomposición de la fase austenita en la fase ferrita y en los agregados bifásicos perlita y bainita se presentan en el enfriamiento. Varios modelos cinéticos han sido propuestos que predicen las transformaciones difusivas en aceros. Las ecuaciones más utilizadas se presentan en las siguientes secciones.

### 2.3.1 Ecuación de Johnson – Mehl – Avrami – Kolmogorov

Gracias a las contribuciones de Johnson y Mehl [51], Avrami [52,73,74] y Kolmogorov [75] quienes aportaron información sobre la teoría cinética de transformaciones de fases, se han podido desarrollar modelos para la predicción de transformaciones de fases del estado sólido. El modelo en el cual se aplica las contribuciones de los cuatro autores es conocido como el modelo de Johnson-Mehl-Avrami Kolmogorov (JMAK), esta relación ha sido utilizada de referencia para describir los procesos de nucleación, crecimiento y choque entre partículas en crecimiento para diferentes materiales.

La ecuación de JMAK es utilizada sobre condiciones isotérmicas y se asume que las velocidades de crecimiento y nucleación son independientes del tiempo.

$$X = 1 - \exp[-bt^n] \quad (1)$$

Donde  $X$  es la fracción transformada,  $b$  es una constante de velocidad que generalmente depende de la temperatura, composición de la fase matriz y el tamaño de grano. El parámetro  $n$  es conocido como el exponente de Avrami y es una constante que depende del tipo y de las condiciones de transformación. y  $t$  es el tiempo. Las variables  $b$  y  $n$  pueden ser calculadas cuando los diagramas de temperatura-tiempo-transformación (TTT) estén disponibles y se pueden obtener con las ecuaciones (2) y (3).

$$b = - \frac{\ln(1 - X_s)}{(t_s)^n} \quad (2)$$

$$n = \frac{\ln[\ln(1 - X_s)/\ln(1 - X_f)]}{\ln[t_s/t_f]} \quad (3)$$

Donde  $X_s$  y  $X_f$  son las fracciones en volumen que frecuentemente es tomado como 0.01 y 0.99 respectivamente para los tiempos de inicio y fin de transformación de fase a una temperatura constante.

La ecuación de JMAK no considera el tiempo de incubación en los procesos de transformación por esa razón las fracciones de transformación son tomadas en valores

mayores que 0 y menores que 100% de transformación. Por esta razón, Chen et al. desarrollaron un modelo de análisis de descomposición de austenita [76], agregando un tiempo de incubación en la ecuación de JMAK y se reporta que con la modificación se puede obtener una predicción más razonable en las transformaciones de fases.

En el modelo utilizan la ecuación modificada por Hawbolt et al. [77], en la cual se considera el tiempo de incubación y se representa con la siguiente expresión:

$$X = 1 - \exp[-b(t - t_s)^n] \quad (4)$$

Donde  $X$  es la fracción en volumen de fase transformada,  $t$  es el lapso de tiempo para empezar la transformación y  $t_s$  es el tiempo real de inicio de la transformación de fase, por ejemplo del tiempo de incubación de la transformación isotérmica. Las ecuaciones (2) y (3) también se ven alteradas, resultando de la siguiente manera

$$b = -\frac{\ln(1 - F_{a\%})}{(t_{a\%} - t_s)^n} \quad (5)$$

$$n = \frac{\ln[\ln(1 - F_{a\%})/\ln(1 - F_{b\%})]}{\ln[t_{a\%} - t_s/t_{b\%} - t_s]} \quad (6)$$

También adopta el termino modificado por Umemoto et al. [78], el cual es un término que incluye el tamaño de grano austenítico y también los parámetros  $b$  y  $n$ . En la ecuación original de Umemoto la variable del tiempo  $t$  es substituida por el termino de incubación  $t - t_s$ .

$$X = 1 - \exp\left[-b \cdot \left(\frac{D_{\gamma TTT}}{D_\gamma}\right)^m (t - t_s)^n\right] \quad (7)$$

Donde  $D_{\gamma TTT}$  es el tamaño de grano austenítico usado para construir los diagramas TTT,  $D_\gamma$  es el tamaño de grano después de la transformación y  $m$  es una constante con un valor de 1 para ferrita y 2 para la transformación a perlita.

Las expresiones que generalmente se encuentran en muchas investigaciones tienen la forma de la ecuación 1, pero las formas más útiles son las derivadas. Con las ecuaciones derivadas es posible mejorar el entendimiento de como suceden las transformaciones de fases de acuerdo a su velocidad de transformación con respecto al tiempo por ser transformaciones difusivas.

La diferenciación de la ecuación de JMAK es expresada en la ecuación (8) y es conocida como la ecuación de velocidad de JMA.

$$\frac{dX}{dt} = n k (1 - X) \cdot [-\ln(1 - X)]^{\left(-\frac{n-1}{n}\right)} \quad (8)$$

Donde  $n$  es el exponente de Avrami,  $k$  constante dependiente de la temperatura y  $X$  es la fracción de fase transformada. Aunque la derivada de la ecuación de transformación isotérmica constituye la base para el análisis de experimentos no isotérmicos, también es válida para transformaciones isotérmicas con condiciones muy particulares [79].

### 2.3.2 Ecuaciones de Kirkaldy

Otro grupo de ecuaciones utilizadas para la predicción de la evolución microestructural es el modelo de Kirkaldy [54,55,80–82] basado en las ecuaciones de Zener y Hillert, las cuales son ecuaciones cinéticas que permiten la construcción de diagramas isotérmicos (TTT) y de enfriamiento continuo (CCT). El modelo original de Kirkaldy sólo es válido para aceros de baja aleación y son un conjunto de ecuaciones individuales que modelan las transformaciones de las fases ferrita, perlita y bainita (los agregados bifásicos son tratados como una sola fase).

La fórmula general del modelo de Kirkaldy para calcular el tiempo ( $\tau$ ) requerido para transformar una fracción  $X$  de austenita a una temperatura  $T$  es la siguiente:

$$\tau(X, T) = \frac{1}{\alpha(G)D_{eff}\Delta T^q} \int_0^X \frac{dX}{X(1-X)^{2X/3}} \quad (9)$$

Donde

$$\alpha(G) = \beta 2^{(G-1)/2} \quad (10)$$

$\beta$  = es un coeficiente empírico

$G$  = es el tamaño ASTM de grano

$D_{eff}$  = coeficiente de difusión efectiva

$\Delta T$  = es el subenfriamiento por debajo de la temperatura correspondiente a la transformación de ferrita, perlita y bainita.

$q$  = es un exponente dependiente del mecanismo de difusión efectiva

El término dentro de la integral reproduce el comportamiento sigmoideal de la transformación y los exponentes en el denominador representan la velocidad de cambio del área interfacial entre la fase austenita y los productos de descomposición.

Los parámetros de entrada que tienen que conocerse para cada caso son tamaño de grano austenítico, las temperaturas críticas  $A_{e3}$  o  $A_3$ ,  $A_{e1}$  o  $A_1$  y  $B_s$  calculadas termodinámicamente. Las variables restantes tales como, la energía de activación efectiva para la difusión ( $Q_{eff}$ ) y las constantes empíricas para cada elemento son proporcionadas en las ecuaciones para cada tipo de transformación.

Las ecuaciones individuales para ferrita, bainita y perlita son las siguientes

$$\tau_F = \frac{59.6Mn + 1.45Ni + 67.7Cr + 244Mo}{2^{\left(\frac{G-1}{2}\right)}(\Delta T)^3 \exp\left(\frac{-23500}{RT}\right)} \int_0^X \frac{dX}{X^{2(1-X)/3}(1-X)^{2X/3}} \quad (11)$$

$$\tau_P = \frac{1.79 + 5.42(Cr + Mo + 4MoNi)}{2^{\left(\frac{G-1}{2}\right)}(\Delta T)^3 D_p} \int_0^X \frac{dX}{X^{2(1-X)/3}(1-X)^{2X/3}} \quad (12)$$

$$\tau_B = \frac{(2.34 + 10.1C + 3.8Cr + 19Mo)10^{-4}Z}{2^{\left(\frac{G-1}{2}\right)}(\Delta T)^2 \exp\left(\frac{-27500}{RT}\right)} \int_0^X \frac{dX}{X^{2(1-X)/3}(1-X)^{2X/3}} \quad (13)$$

Las composiciones químicas son expresadas en porcentaje en peso, R es la constante de los gases, el término dentro de la integral es la fracción de volumen, la variable Z en la ecuación es la que representa la transformación lenta de la ecuación bainítica y  $D_p$  es el coeficiente de difusión efectiva.

$$Z = \exp[X^2(1.9C + 2.5Mn + 0.9Ni + 1.7Cr + 4Mo - 2.6)] \quad (14)$$

$$\frac{1}{D_p} = \frac{1}{\exp\left(\frac{-27500}{RT}\right)} + \frac{0.01Cr + 0.52Mo}{\exp\left(\frac{-37500}{RT}\right)} \quad (15)$$

Para la utilización del modelo se deben tomar en cuenta algunas suposiciones: las curvas para el diagrama son separadas con forma C, y van por arriba de  $M_s$ . Se sugiere el cálculo de los tiempos para 1% y 99% de transformación. También, se supone que en condiciones isotérmicas no existe la combinación de tres productos difusionales y las transformaciones austenita-ferrita y austenita-perlita son tratadas como reacciones separadas. Es asumido que la ferrita y perlita son controladas por la difusión en la frontera de fase y la bainita mediante la difusión de volumen [83].

En una investigación posterior a Kirkaldy desarrollada por Watt et al. [61] se demostró que el algoritmo del modelo desarrollado para predecir la dureza, también puede ser utilizado para prever la microestructura del HAZ y además que puede utilizarse para conocer los

efectos de los parámetros del proceso de soldadura o de factores cinéticos de manera individual. En este mismo trabajo se describe de manera general el modelo de Kirkaldy, del modelo se resume que en una simple función se pueden describir las dos etapas: nucleación y crecimiento para cada fase producto, en donde cada etapa al ser analizadas como velocidades de reacción quedan representadas con la siguiente función

$$\frac{dX}{dt} = B(G, T)X^m(1 - x)^n \quad (16)$$

Donde  $X$  es la fracción en volumen de la fase transformada,  $B$  es el coeficiente de velocidad efectiva,  $G$  es el tamaño de grano austenítico, y  $m$  y  $n$  son coeficientes semi-empíricos menores a uno con el objetivo de asegurar la convergencia en una forma derivada de una nucleación puntual y un modelo de crecimiento de choque.

Del modelo se sabe que en el momento que una fase empieza a formarse, por ejemplo, la ferrita, se nuclea en las fronteras de granos y entonces crece dentro de los granos de austenita. La fracción de ferrita formada depende de la velocidad de nucleación y del producto del área de la interface ferrita-austenita y su velocidad de avance. De acuerdo a Watt et al., el modelo plantea que la cinética de nucleación está en función de la cantidad de subenfriamiento  $\Delta T$  por debajo de la línea  $A_{e3}$  y también del tamaño de grano austenítico.

Aunque se han propuesto ecuaciones modificadas de las ecuaciones de Kirkaldy [62,84] que representan mejor la cinética de las reacciones ferrítica, perlítica y bainítica, los cambios se realizan en los coeficientes, los cuales modifican la curva de velocidad de transformación, sin embargo, las formas de sus términos permanecen similares.

Una de esas mejoras a las ecuaciones de Kirkaldy son las ecuaciones modificadas de Li et al. [62] aplicadas a un modelo computacional con el objetivo de predecir la evolución microestructural durante el tratamiento térmico de aceros y conocer la dureza resultante a temperatura ambiente. En los resultados se reporta una gran mejora con respecto a las ecuaciones del modelo de Kirkaldy y buena predicción en relación a las experimentales. En las ecuaciones mejoradas por Li se reconstruye el modelo cinético con un mejor equilibrio entre las teorías de transformaciones de fase y el empirismo con el fin de mejorar las predicciones en la etapa de enfriamiento continuo. Por los cambios realizados, se pueden manejar más elementos aleantes y en mayor cantidad en comparación con las ecuaciones de Kirkaldy que sólo son aplicables a materiales con pequeñas cantidades de elementos aleantes. La ecuación modificada tiene la siguiente forma

$$\tau(X, T) = \frac{F(C, Mn, Si, Ni, Cr, Mo, G)}{\Delta T^n \exp(-Q/RT)} \int_0^X \frac{dX}{x^{0.4(1-X)}(1-X)^{0.4X}} \quad (17)$$

Donde  $F$  está en función de la composición del acero,  $G$  es el tamaño de grano austenítico (número ASTM),  $\Delta T$  es el sobreenfriamiento y  $Q$  es la energía de activación de la reacción difusional. El exponente  $n$  en el sobreenfriamiento al igual que en las ecuaciones de Kirkaldy representa una constante empírica determinada por el mecanismo de difusión efectiva, para un volumen  $n$  toma un valor de 2 y para una difusión en la frontera  $n$  es igual a 3.

Actualmente las ecuaciones han sido modificadas para aceros generales, incluyendo tipos de media y alta aleación [84]. En variedad de trabajos se han usado las ecuaciones del modelo de Kirkaldy para predecir las transformaciones difusionales y desarrollar diagramas TTT y después CTT o para hacer comparaciones con otros modelos [2,72,85–87].

En el campo industrial se manejan con mayor frecuencia los diagramas de enfriamiento continuo (CCT). Construir un diagrama CCT es posible haciendo una transformación y es mediante el uso de la regla de aditividad de Scheil con el cual se puede obtener un diagrama CCT a partir de datos obtenidos del diagrama TTT.

### 2.3.3 Principio de aditividad de Scheil

Los diagramas de transformación en enfriamiento continuo (CCT) que son construidos en diferentes trabajos de literatura, se derivan a partir de los diagramas tiempo- temperatura-transformación (TTT) utilizando la regla aditiva de Scheil [88]. La regla de adición o Ley de Scheil es utilizada para transformaciones difusivas, en el cual una curva de enfriamiento es tratada como un conjunto de pasos isotérmicos. El método consiste en dos etapas: la nucleación y el crecimiento. Son dos cálculos diferentes, primeramente, se calcula el tiempo de incubación de cada fase y para el crecimiento se determina el volumen transformado.

En la etapa de nucleación se debe alcanzar con los pasos isotérmicos las curvas del 1% de transformación del diagrama TTT como se muestra en la figura 9 y la curva será alcanzada cuando la sumatoria de los pasos de tiempo dividida entre el tiempo de inicio de transformación en el diagrama TTT sea igual a 1, esto es

$$\Sigma \Delta t_i / \tau_i = 1 \quad (18)$$

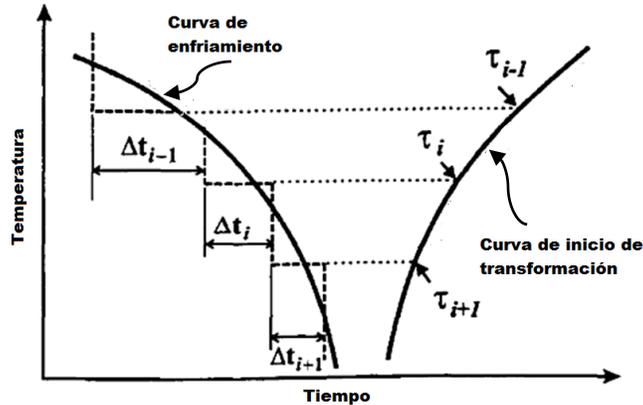


Figura 9. Representación esquemática del principio de Scheil [88].

La sumatoria de  $\Delta t_i$  empezará justo debajo de la temperatura de equilibrio de la austenita y los pasos isotérmicos dependerán de la precisión que se quiera obtener.

En la etapa de crecimiento la regla de adición se aplica como la suma de una serie de transformaciones isotérmicas, para cada transformación isotérmica corresponde una curva de transformación sigmoideal calculada con los modelos de JMAK o Kirkaldy dado sea el caso.

Al inicio de cada incremento o cada paso se tiene una fracción de volumen que es un valor igual al del incremento anterior. Para el cálculo se introduce un tiempo virtual que representa el tiempo para el cual una determinada fracción de fase es transformada. Teniendo la fracción en volumen se continua con incrementos de tiempos más el tiempo anterior y así sucesivamente hasta terminar el proceso. La suma de la fracción en volumen al finalizar el cálculo siempre será igual a 1 [89].

Donde,

$$X_{austenita} + X_{ferrita} + X_{perlita} + X_{bainita} + X_{martensita} = 1 \quad (19)$$

## 2.4 Transformación martensítica

El tipo de transformación sin difusión que puede presentarse en los aceros es la martensita, su transformación no depende del tiempo si no de la temperatura por lo que no puede ser descrita por las ecuaciones de JMAK o Kirkaldy. La ecuación que se utiliza en diversos trabajos es la de Koistinen y Marburger (K-M), la cual en algunos casos no predice efectivamente la transformación por descartar algunos efectos. Este tipo de transformación también ha sido estudiado con el fin de mejorar su predicción. Varios modelos se han realizado considerando en las ecuaciones cinéticas algunos parámetros y efectos que suceden en la transformación y con ello la predicción se ha optimizado.

La ecuación de Koistinen y Marburger es una relación que representa la cantidad de martensita transformada, puesto que no está influenciada por la velocidad de enfriamiento se calcula en función de la temperatura

$$X_M = 1 - \exp[-k(Ms - T)] \quad (20)$$

donde  $X_M$  es la fracción transformada,  $k$  es un parámetro cinético con un valor de  $0.011 \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$  para muchos aceros independientemente de la composición química y  $Ms$  es la temperatura de inicio de la transformación [63].

En trabajos recientes la ecuación K-M ha sido mejorada, como es el caso de un trabajo de optimización, en el cual se agrega una variable esencial como el tamaño de grano (AGS). Esta nueva ecuación predictiva ayuda a mejorar los resultados por la alta aproximación en el valor de  $Ms$  y por la adición del termino de tamaño de grano en la ecuación cinética. Sin embargo, aunque se reportan muy buenos resultados, la ecuación solo es aplicable para aceros de baja aleación. La ecuación de  $Ms$  en función de composición química y tamaño de grano está representada de la siguiente forma [90]

$$Ms(^{\circ}C) = 402 - 797C + 14.4Mn + 15.3Si - 31.1Ni + 345.6Cr + 434.6Mo + (59.6C + 3.8Ni - 41Cr - 53.8Mo) \cdot G \quad (21)$$

Y la ecuación cinética que predice la transformación martensítica está dada por la siguiente ecuación diferencial, en la cual se relacionan la composición química del material, el tamaño de grano austenítico y el subenfriamiento debajo de la temperatura  $Ms$ .

$$\frac{dV_M}{dT} = K \cdot V_M^a (1 - V_M)^b$$

$$K = \frac{G^{0.240} \cdot (M_S - T)^{0.191}}{9.017 + 62.88 \cdot C + 9.27 \cdot Ni - 1.08 \cdot Cr + 0.76 \cdot Mo} \quad (22)$$

$$a = 0.420 - 0.246 \cdot C + 0.359 \cdot C^2$$

$$b = 0.320 - 0.576 \cdot C + 0.933 \cdot C^2$$

Donde  $V_M$  es la fracción de volumen de martensita,  $C$  es el contenido de carbono en porcentaje en peso y  $T$  es la temperatura.

## 2.5 Efecto del tamaño de grano en las transformaciones

Generalmente, es sabido que en un proceso de transformación el tamaño de grano austenítico (AGS) influye en la velocidad de transformación, puesto que, si el tamaño de grano

austenítico es grande, la velocidad de transformación es lenta por las pocas zonas de sitios de nucleación y sucede lo contrario cuando el AGS es pequeño. Por otro lado, el tamaño de grano austenítico puede ser controlado mediante la temperatura de austenitización, debido a que el grano austenítico crece con un aumento en la temperatura de austenitización.

Como se mencionaba el AGS afecta la cinética de transformación de fase por medio de la nucleación de nuevos granos, para el caso de la ferrita se ha demostrado que su morfología puede cambiar a ferrita poligonal cuando AGS es pequeño y conforme va creciendo tiende a formarse ferrita Widmanstätten, aunque la velocidad de enfriamiento también influye en el tamaño de grano ferrítico [91]. Para la transformación de perlita también se ha encontrado que su cinética y morfología es afectado por el AGS, un estudio reciente hecho por Aranda et al. [92], reportan que en transformaciones isotérmicas en aceros hipoeutectoides el AGS afecta la fracción de volumen de perlita formada; a más alto AGS mayor cantidad de volumen obtenido y por otro lado, a más pequeños AGS la cinética de transformación es más rápida en la formación de ferrita y perlita. También fue encontrado que las lamelas de cementita son más grandes cuando las temperaturas de austenitización son bajas y la relación de espesor se equilibran conforme la temperatura de austenitización aumenta.

En el caso de la reacción bainítica en transformación isotérmica nos encontramos con una controversia. Investigadores han encontrado que conforme el tamaño de grano incrementa también lo hace la cinética de transformación, mientras otros reportan una disminución de la velocidad de transformación con una disminución del AGS [93]. En enfriamiento continuo Yamamoto et al. [94] encontraron que el AGS no tiene tanta influencia en la fracción en volumen del producto transformado, solo dependen de la temperatura de enfriamiento, pero la regla se mantiene con los sitios de nucleación que aumentan con la disminución en el AGS. Lee et al [95] estudiaron el efecto del tamaño de grano austenítico sobre la cinética de la bainita superior e inferior, también en un proceso de enfriamiento continuo y se reportó que la temperatura de transición entre la bainita superior e inferior permanece sin grandes cambios, por lo tanto es independiente del AGS. La velocidad de transformación global se incrementa con la disminución en AGS para ambos casos, pero en la velocidad de transformación instantánea en cada fracción de bainita relativa la bainita superior aumenta con una disminución de AGS y en el caso de la bainita inferior se encuentra que no depende del tamaño de grano austenítico

La transformación martensítica no queda excluida de los efectos del tamaño de grano austenítico. El tamaño de grano austenítico determina el tamaño máximo de una placa martensítica, por lo que podría esperarse cierta dependencia de la fuerza en el tamaño del grano [39]. Varios investigadores han estudiado la influencia del tamaño de grano austenítico

a la temperatura de transformación  $M_s$  [96–99]. Se ha visto que la  $M_s$  decrece conforme la disminución de AGS y Brofman y Ansell [100] le han dado una explicación basándose en la ecuación de Hall-Petch que aborda las teorías de dislocaciones, esto es que existe una relación inversa entre tamaños de granos y densidad de dislocaciones ( $p$  vs  $1/D$ ), el argumento es que con un incremento en la cantidad de dislocaciones existe una disminución de tamaño de grano. Pero esta explicación no aborda todos los casos que han sido investigados, puesto que ha sido encontrado que la  $M_s$  puede aumentar con el incremento de tamaño de grano [96].

En recientes trabajos Bhadeshia et al. [97] y Lee et al. [101] han estudiado los efectos del AGS. Lee ha propuesto una ecuación de la temperatura de inicio de transformación martensítica en función del AGS para aceros de baja aleación y Bhadeshia propuso un modelo a partir de la hipótesis de particionamiento de Fisher et al. [102] pero solo ha sido evaluado en un rango de datos publicados.

## 2.6 Modelado de crecimiento de grano

En las ecuaciones cinéticas que simulan las transformaciones de fases se encuentra involucrado el tamaño de grano austenítico. Por ser un parámetro microestructural importante en la predicción del endurecimiento del acero, su proceso de crecimiento de grano también es modelado con el objetivo de mejorar la predicción de las transformaciones.

Varias ecuaciones han sido utilizadas en modelos de transformaciones de fase. Por ejemplo, en el modelo de Li et al. [62] fue adoptada la ecuación cinética de crecimiento de grano propuesta por De Andrés & Carsí [103]

$$G = \frac{a}{T} + b \ln(t) + c \quad (23)$$

Donde  $a$ ,  $b$  y  $c$  son constantes dependiendo si el acero tiene modificadores de crecimiento.

La siguiente ecuación también ha sido aplicada en varios trabajos [64,104,105]. Con tal ecuación se puede calcular la evolución del tamaño de grano de austenita  $D$  tomando en consideración el ciclo de temperatura.

$$\frac{dD}{dt} = C \cdot \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (24)$$

Donde  $D$  es el tamaño promedio de grano,  $a$ ,  $C$  y  $Q$  son constantes positivas  $R$  es la constante universal de los gases,  $t$  es el tiempo y  $T$  temperatura

De igual manera se utiliza la relación de crecimiento de Ashby/Easterling que supone un crecimiento de los granos austeníticos, después de la disolución de los precipitados [61].

$$\frac{dD}{dt} = \frac{1}{2g} k \left[ \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \right] \quad (25)$$

Donde  $D$  es el tamaño de grano ( $\mu\text{m}$ ),  $k$  es una constante de crecimiento ( $\mu\text{m}^2/\text{s}$ );  $Q$  es la energía de activación para el crecimiento ( $\text{kJ/mol}$ )

Una ecuación reciente para el tamaño de grano es desarrollada por Lee et al. [90], la ecuación se puede utilizar para prevenir el AGS en aceros de baja aleación durante la austenitización, es una ecuación tipo Arrhenius y está en función de los elementos aleantes, temperatura y tiempo.

$$D = 76671 \exp\left(-\frac{89098 + 3581C + 1211Ni + 1443Cr + 4031Mo}{RT}\right) t^{0.211} \quad (26)$$

## 2.7 Temperaturas de transformación

Como es observado en las ecuaciones de Kirkaldy son necesarias las temperaturas de transformación o también conocidas como temperaturas críticas. En el modelo de predicción hay cuatro temperaturas que deben ser calculadas: temperatura de equilibrio superior ( $A_{e3}$ ), temperatura de equilibrio inferior ( $A_{e1}$ ), temperatura de inicio de bainita (Bs) y temperatura de inicio de martensita. El cálculo puede hacerse en base a modelos termodinámicos, los cuales asumen el particionamiento total de los elementos aleantes. Existen diversas ecuaciones para encontrar los valores de tales temperaturas.

Para la temperatura crítica  $A_{e3}$  se han encontrado modelos en donde se utiliza la ecuación de Andrews (1965), la cual puede ser encontrada en compilaciones de ecuaciones matemáticas realizada por Gorni [106] para tratamientos térmicos. La ecuación para  $A_{e3}$  se representa de la siguiente forma

$$A_{e3}(\text{°C}) = 910 - 203\sqrt{C} - 15.2Ni + 44.7Si + 104V + 31.5Mo + 13.1W \\ - [30Mn - 11Cr + 20Cu - 700P - 400Al - 120As - 400Ti] \quad (27)$$

Aunque también puede encontrarse otras relaciones con algunas modificaciones [2,107].

De la misma manera  $A_{e1}$  es representada con la siguiente ecuación

$$A_{e1}(\text{°C}) = 723 - 10.7Mn + 16.9Ni + 29Si + 16.9Cr + 290As + 6.4W \quad (28)$$

Donde la composición de los elementos aleantes están en porcentaje en peso. También la relación anterior fue propuesta por Andrews, pero ambas ecuaciones solo son válidas para aceros de baja aleación con una cantidad de carbono menor del 0.6%.

Para calcular la temperatura de inicio de transformación de bainita se encuentra la ecuación propuesta por Kirkaldy para aceros de baja y alta aleación.

$$B_s(^{\circ}\text{C}) = 656 - 58C - 35Mn + 75Si - 15.3Ni - 34Cr - 41.2Mo \quad (29)$$

Similarmente para la temperatura de transformación de inicio de martensita se han desarrollado ecuaciones para mejorar la predicción de transformación. En algunos de los modelos citados anteriormente se utilizaron las ecuaciones de Krauss y Andrews, encontradas en la recopilación de ecuaciones de Gorni [106]. Una ecuación prometedora que incluye el tamaño de grano austenítico es modelada con la ecuación (21) la cual es válida para aceros de baja aleación.



## Capítulo 3. Implementación de Ecuaciones Cinéticas en el Modelo Termo-Metalúrgico

### 3.1 Introducción

En este capítulo se desarrolla el modelo termo-metalúrgico para la predicción de las transformaciones de las fases ferrita, perlita y bainita (ignorando que en realidad estas últimas son agregados bifásicos, ya que las ecuaciones de Kirkaldy estudian estas transformaciones como si fueran de “fases”), durante un proceso isotérmico y en enfriamiento continuo. Partiendo de las ecuaciones del modelo de Kirkaldy, se proponen ecuaciones parametrizadas que mejoran la simulación de las transformaciones de fases difusivas. Estas nuevas ecuaciones cinéticas son implementadas y simuladas a través del método de elementos finitos usando el programa Comsol Multiphysics® 4.2a [108]. En la etapa de implementación las ecuaciones parametrizadas son acopladas para simular la descomposición de la austenita en los diferentes productos. El modelo utilizado al basarse en ecuaciones semi-empíricas, tiene faltas de correspondencia con respecto a los resultados experimentales y por ello, en este trabajo, se realizó un proceso de optimización de parámetros en el programa Matlab minimizando esos errores y mejorando la predicción.

### 3.2 COMSOL Multiphysics como herramienta en modelado

Para desarrollar el modelo termo-metalúrgico se utilizó el programa COMSOL Multiphysics® 4.2a, es una herramienta de simulación y modelado que emplea el método de elementos finitos (MEF) para la resolución numérica de problemas multifísicos para una gran variedad de aplicaciones en áreas físicas y de ingeniería. Este programa permite el acoplamiento de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales comúnmente llamadas PDEs o *partial differential equations* por sus siglas en inglés y de ecuaciones diferenciales ordinarias ODEs u *ordinary differential equations*. Por medio de estas ecuaciones es posible modelar en el programa de manera virtual fenómenos físicos tales como transferencia de calor, movimiento de fluidos, electromagnetismo y mecánica estructural. Actualmente contiene varios módulos especializados que pueden ser acoplados dependiendo de los efectos que quieran obtenerse. Los módulos que se manejan son AC/DC, acústica, reacciones químicas, flujo de fluidos, transferencia de calor, mecánica estructural y matemáticas.

Puesto que el programa utiliza el método de elementos finitos se obtiene una solución numérica de manera aproximada sobre un dominio sobre el que están definidas las ecuaciones que caracterizan el comportamiento físico del problema. El desarrollo del método se divide en tres etapas: pre-procesamiento, procesamiento y post-procesamiento.

Pre-procesamiento, es la etapa en la cual se modela el sistema, estructura o dominio sobre el cual se trabaja, incluye la definición de parámetros, funciones y variables, es la parte en donde se establecen las ecuaciones que describen el fenómeno físico y también se genera el mallado.

Procesamiento, es la etapa en donde se realizan los cálculos y solución del sistema de ecuaciones, se controlan las características del estudio que pueden ser estacionarios, dependiente del tiempo o transientes, en frecuencia, etc. De igual forma se pueden configurar tiempos de paso para la solución, parámetros del método de solución (*solvers*), tolerancias, seleccionar si el problema es altamente no lineal, etc.

Post-procesado, es la parte en la cual se manipulan y visualizan los resultados obtenidos y es posible interpretarlos a través de gráficas, superficies o volúmenes.

### **3.3 Análisis de ecuaciones para el modelo y modificaciones**

Para desarrollar el modelo microestructural se eligió el conjunto de ecuaciones del modelo de Kirkaldy para la predicción de las transformaciones de ferrita, perlita y bainita. Entender el comportamiento de las ecuaciones es muy importante, por ello, es necesario realizar un análisis de los términos de las ecuaciones, después viene la implementación de dichas funciones en el programa COMSOL Multiphysics, para ello, deben ser convertidas a ecuaciones diferenciales y así finalmente simular las velocidades de transformación con respecto al tiempo.

#### **3.3.1 Análisis de las ecuaciones de Kirkaldy**

Las ecuaciones de cada tipo de transformación deben estar en forma de ecuaciones diferenciales para ser implementadas en el programa, con ellas las velocidades de transformación con respecto al tiempo pueden ser simuladas. Las ecuaciones (11), (12) y (13) de Kirkaldy presentadas en el capítulo 2 que representan cada transformación están en forma ordinaria, las cuales de forma generalizada se puede representar con la función a) en la figura 10 y convertida a ecuación diferencial se expresa con la función b) en la misma figura.

$$\begin{aligned}
 \text{a) } \tau(X, T) &= \frac{F(C, Mn, Si, Ni, Cr, Mo)}{2^{\left(\frac{G-1}{2}\right)} \Delta T^n \exp(-Q/RT)} \int_0^X \frac{dX}{X^{2(1-X)/3} (1-X)^{2X/3}} \\
 \text{b) } \frac{dX}{dt} &= \frac{2^{\left(\frac{G-1}{2}\right)} \Delta T^n \exp(-Q/RT)}{F(C, Mn, Si, Ni, Cr, Mo)} X^{2(1-X)/3} (1-X)^{2X/3} \\
 \frac{dX}{dt} &= \underbrace{\quad \quad \quad}_{Vt(T)} \quad \quad \quad \underbrace{\quad \quad \quad}_{S(X)} \\
 &\quad \quad \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Coeficientes de Velocidad}} \quad \quad \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Efecto sigmoidal}}
 \end{aligned}$$

Figura 10. Términos en la ecuación de Kirkaldy.

Analizando la ecuación se encontró que consta básicamente de dos términos, que son coeficientes de velocidad y efecto sigmoidal. Estos términos constituyen cada expresión diferencial que resultan para las transformaciones individuales y las cuales son expresadas de la siguiente forma

Ferrita,

$$\frac{dX_F}{dt} = \frac{2^{\left(\frac{G-1}{2}\right)} (\Delta T)^3 \exp\left(\frac{-23500}{RT}\right)}{59.6Mn + 1.45Ni + 67.7Cr + 244Mo} X_F^{2(1-X_F)/3} (1-X_F)^{2X_F/3} \quad (30)$$

Perlita,

$$\frac{dX_P}{dt} = \frac{2^{\left(\frac{G-1}{2}\right)} (\Delta T)^3 Dp}{1.79 + 5.42(Cr + Mo + 4MoNi)} X_P^{2(1-X_P)/3} (1-X_P)^{2X_P/3} \quad (31)$$

Bainita,

$$\frac{dX_B}{dt} = \frac{2^{\left(\frac{G-1}{2}\right)} (\Delta T)^2 \exp\left(\frac{-27500}{RT}\right)}{(2.34 + 10.1C + 3.8Cr + 19Mo) 10^{-4} Z} X_B^{2(1-X_B)/3} (1-X_B)^{2X_B/3} \quad (32)$$

Las ecuaciones diferenciales anteriores fueron presentadas por Watt et al. [61,109] basándose de las ecuaciones originales de Kirkaldy, Donde las variables  $Dp$  y  $Z$  pueden ser calculadas con las ecuaciones (14) y (15) del capítulo 2.

Teniendo las ecuaciones diferenciales se realizó un análisis con el objetivo de entender el comportamiento de cada ecuación. Se graficó el término de coeficientes de velocidad que involucra la ecuación de Arrhenius, el subenfriamiento ( $\Delta T$ ), el tamaño de grano ( $G$ ) y la cantidad de elementos aleantes (figura 11a), de igual manera el término de efecto sigmoidal

representante de la velocidad de transformación mostrado en la figura 11b), en donde la derivada de esta expresión toma forma de una curva simétrica para las transformaciones de ferrita y perlita, en el caso de la transformación bainítica la curva se encuentra sesgada a la derecha representando una velocidad rápida al inicio de la transformación y después una velocidad lenta. Al integrar la expresión de efecto sigmoideal las curvas adoptan la forma de “S” y de ahí es donde se proviene el termino sigmoideo o sigmoideal.

La función del término de efecto sigmoideal es representar la velocidad de transformación, entonces, significa que en un extremo de la curva se encuentra la etapa de nucleación y en la otra de saturación de la nueva fase, esto ocasionaría que en esos tramos la velocidad sea lenta, pero en un punto de la trayectoria de transformación se presenta una velocidad máxima y en la gráfica se puede observar en los puntos más altos. En la figura 11 b) se encuentra que la curva de ferrita y perlita tienen la misma pendiente en los extremos por lo tanto mantienen una misma velocidad en la nucleación y saturación. Por otro lado, en la curva de velocidad de transformación bainítica se observa que la transformación será más rápida al inicio, pero la velocidad disminuye consistentemente cuando la transformación empieza a completarse. En la figura 11 a) se puede observar el efecto de la temperatura, ya que conforme esta disminuye,  $Vt(T)$  se incrementa entre mayor es el grado de subenfriamiento ( $\Delta T$ ) y lo contrario sucede con la velocidad de difusión que va en decaimiento a menores temperaturas con  $\exp(\frac{-23500}{RT})$ .

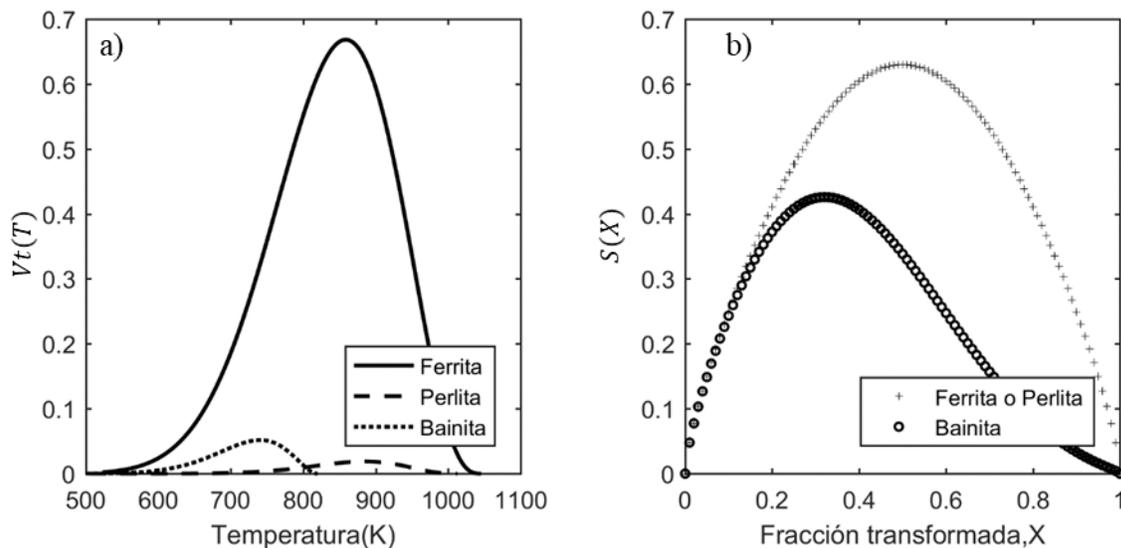


Figura 11. a) Término de coeficientes de velocidad y b) Velocidad de transformación (efecto sigmoideo)

Después de analizar las ecuaciones del modelo de Kirkaldy se encontraron dos razones por las cuales se decidió realizar modificaciones para que fueran aplicables al proyecto. La primera razón reside en la discontinuidad de la expresión del termino sigmoideal, esto pudo ser observado al tratar de simular las velocidades de transformación para una fase. Con la prueba, se encontró que el problema de discontinuidad se presenta en las líneas que se aproximan a cada extremo de la curva, las cuales son casi verticales, matemáticamente significa que sí existe una tangente vertical en la curva, entonces no tiene una pendiente definida (no es un número real). Consecuentemente, la derivada de la función  $X^{2(1-X)/3}(1-X)^{2X/3}$  en donde se encuentre una tangente vertical, que son entre los valores 0 y 1 tenderán a infinito. Por dicha situación, al realizar la simulación el programa arrojó errores numéricos.

La segunda razón es debido a que las ecuaciones no cuentan con un término de nucleación efectivo que permita dar un tiempo de incubación preciso a la nueva fase, por ello, al obtener los diagramas con las ecuaciones de Kirkaldy se esperaba que estuvieran recorridas hacia la izquierda, muy cercanas a cero.

A causa de estos puntos se optó por modificar las ecuaciones con el objetivo de evitar discontinuidades numéricas y facilitar la adición de un término de incubación, para así mejorar la predicción de las transformaciones.

### **3.3.2 Modificación del termino de velocidad de transformación y adición del termino de incubación.**

Cada ecuación de transformación se parametrizó y se planteó una nueva forma de representar la velocidad de transformación (el término de efecto sigmoideo), tomando como base la estructura de las ecuaciones de Kirkaldy. Además, se le adicionó un término que permite dar un tiempo de incubación a la fase para luego empezar con la etapa de crecimiento. El objetivo de las modificaciones fue suavizar esos puntos de errores numéricos y facilitar el acoplamiento del término de incubación.

La función propuesta para reemplazar la expresión  $X^{2(1-X)/3}(1-X)^{2X/3}$  en el término sigmoideo es de tipo arcotangente, la cual queda simbolizada como  $\arctan(X)$ , el motivo de su elección es que es una función continua y derivable, por lo tanto, al utilizarla se elimina el problema de que su derivada tienda a infinito en los puntos cercanos a 0 y 1. La función que reemplaza el término de efecto sigmoideo de Kirkaldy se representa de la siguiente manera

$$\arctan(\gamma_m X) \arctan(\delta_m (1 - X)) \quad (33)$$

Donde,  $\gamma_m$  y  $\delta_m$  son valores constantes.

Aunque esta función ya tiene solución en el programa, aún necesita un término de incubación para dar tiempo a la nucleación de la nueva fase, ya que con la ecuación sin dicho término se inicia con la etapa de crecimiento desde la fracción 0. La etapa de incubación se representó con la siguiente expresión

$$N_u = \theta \exp\left(-\frac{X}{\varphi}\right) \quad (34)$$

Donde  $\theta$  y  $\varphi$  son constantes y  $X$  es la fracción de fase. La función es dependiente del término de coeficientes de velocidad, ya que se activa para cada tipo de transformación cuando el valor del coeficiente es negativo y cuando la temperatura es menor a la temperatura crítica (ya sea  $A_3$ ,  $A_1$  o  $B_s$ ). La expresión de incubación solo es un término representativo, no se basa en ningún fundamento o teoría, es una función propuesta para mantener constante la velocidad de transformación por un corto periodo de tiempo y así poder iniciar la etapa de crecimiento.

En las siguientes gráficas (figura 12) pueden verse las modificaciones en las curvas comparando el término de las ecuaciones de Kirkaldy y la nueva función parametrizada más la adición de la relación de incubación. En la figura ampliada puede observarse las pendientes de la curva en puntos cercanos a cero, donde se presentan discontinuidades numéricas.

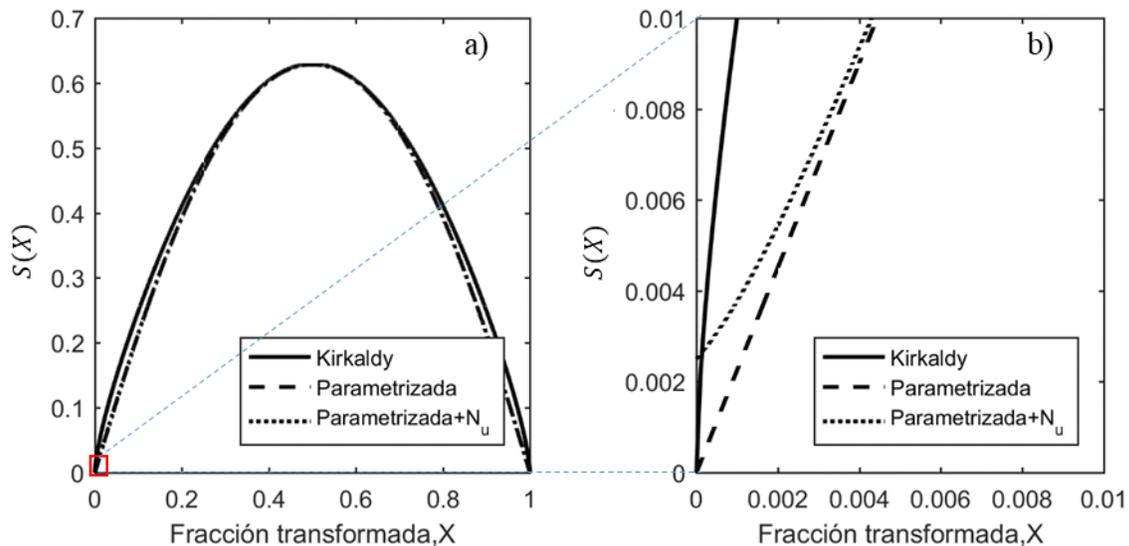


Figura 12. a) Comparación de curvas de velocidad de reacción ferrítica, b) acercamiento en el extremo izquierdo de la curva.

Las nuevas ecuaciones de velocidad de transformación conservan la misma estructura y representan de igual manera las curvas de las ecuaciones de Kirkaldy. Las ecuaciones modificadas para ferrita, perlita y bainita son las siguientes

$$\frac{dX_{FPar}}{dt} = \alpha_1(A_3 - T)^{a_1} \exp\left(\frac{-\beta_1}{T}\right) [\arctan(\gamma_1 X_F) \arctan(\delta_1(1 - X_F)) + N_{uF}] \quad (35)$$

$$\frac{dX_{PPar}}{dt} = \alpha_2(A_1 - T)^{a_2} \exp\left(\frac{-\beta_2}{T}\right) [\arctan(\gamma_2 X_P) \arctan(\delta_2(1 - X_P)) + N_{uP}] \quad (36)$$

$$\frac{dX_{BPar}}{dt} = \alpha_3(B_s - T)^{a_3} \exp\left(\frac{-\beta_3}{T}\right) [\arctan(\gamma_3 X_B) \arctan(\delta_3(1 - X_B))(\exp(-\varepsilon X_B^b)) + N_{uB}] \quad (37)$$

Dónde:  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  y  $a$  son coeficientes ajustados de tal manera que son similares a los coeficientes de las ecuaciones del modelo de Kirkaldy. Las relaciones anteriores siguen siendo ecuaciones individuales, en la que la fracción de fase de cada reacción va de un 0 a 1 de transformación.

Estas ecuaciones necesitan adaptarse para la predicción de las fracciones reales para el tipo de acero analizado, las adaptaciones y acoplamientos se explican en los siguientes apartados.

### 3.4 Modelado de transformaciones isotérmicas

Para el proyecto se simulan las transformaciones con difusión en la etapa de enfriamiento, para el cual es necesario implementar las ecuaciones que han sido modificadas a la plataforma de Comsol Multiphysics. También se ingresan datos requeridos por las ecuaciones cinéticas y son aplicadas algunas condiciones de frontera para trabajar con transformaciones isotérmicas y en enfriamiento continuo. Se propone el acoplamiento de las ecuaciones para la simulación de la descomposición de austenita en las diferentes fases.

El modelo termo-metalúrgico se dividió en dos modelos, en un modelo se simulaban las transformaciones de forma isotérmica y en el segundo las transformaciones en enfriamiento continuo.

### 3.4.1 Implementación de ecuaciones

La implementación de las ecuaciones cinéticas se realizó en el módulo de matemáticas del programa. Dentro del módulo se encuentra la sección de PDEs clásicos, puesto que las ecuaciones están expresadas en forma de ecuaciones diferenciales es posible trabajar con una de estas opciones. La PDE elegida es una interface física conocida como  $\nabla^2$  ecuación de convección-difusión (Convection-Diffusion Equation) representada con la siguiente notación

$$d_a \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (c \nabla u) + \beta \cdot \nabla u = f \quad (38)$$

donde  $\nabla = \frac{\partial}{\partial x}$ ,  $c$  es un coeficiente de difusión,  $\beta$  un coeficiente de convección,  $f$  el término fuente,  $d_a$  un coeficiente de amortiguamiento o de masa y  $u$  es la variable dependiente.

Para el proyecto se redujo la ecuación a la expresión (39) haciendo  $d_a$  igual a 1 y  $\beta$  igual a 0.

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (c \nabla u) = f \quad (39)$$

Para cada ecuación cinética corresponde una ecuación de Convección-Difusión con la forma de la ecuación (38). Por lo tanto, las ecuaciones (35), (36) y (37) fueron implementadas, ingresando cada variable dependiente para cada fase y su función de termino fuente.

Para los valores de los constantes de cada ecuación se obtuvieron conociendo las cantidades de elementos aleantes del acero, un tamaño de grano austenítico promedio, los valores de las temperaturas críticas, los valores de los coeficientes de difusión efectiva y el valor de la constante de los gases. Esto es debido a que, los coeficientes iniciales del termino de velocidad para las ecuaciones parametrizadas son las mismas que de las ecuaciones de Kirkaldy. Entonces los parámetros de  $\beta$  y  $a$  para cada fase son obtenidos directamente tomando los valores de las ecuaciones, para  $a$  es necesario conocer las cantidades de los elementos aleantes del acero y las temperaturas críticas  $A_3, A_1$  y  $B_s$  son calculadas con las ecuaciones(27),(28) y (29) del capítulo 2.

El material estudiado en este proyecto es un acero AISI 4140 con las siguientes cantidades de elementos: 0.40% C, 0.24% Si, 0.58 % Mn, 0.010% P, 0.030% S, 1.07% Cr, 0.15% Ni, 0.01% V, 0.18% Cu, 0.23% Mo [110]. Por el contenido de elementos aleantes es considerado como un acero de baja aleación, utilizada industrialmente en muchas aplicaciones como partes estructurales para automóviles, para matrices o moldes en el conformado de metales,

pero especialmente ha sido adoptado por procesos de endurecimiento superficial por sus excelentes propiedades como, resistencia al desgaste y tenacidad.

En el caso del tamaño de grano austenítico se ha visto en trabajos de literatura que para estos materiales normalmente se toma un valor entre 8 -10 ASTM, de acuerdo a esos datos se tomó un valor intermedio de 9.

Los valores de los parámetros  $\gamma$  y  $\delta$  que se encuentran dentro del término de efecto sigmoideo son definidos manualmente tratando de igualar las pendientes de las curvas de las ecuaciones de Kirkaldy.

### **3.4.2 Acoplamiento de las ecuaciones parametrizadas**

Las ecuaciones (35)-(37) hacen una descripción de evolución de las transformaciones individualmente, donde el término  $(1 - X)$  representan la transformación hasta un 100%. No obstante, para los tipos de aceros hipoeutectoides como es el caso del acero analizado hay una cantidad máxima de ferrita proeutectoide que puede ser transformado a partir de la austenita. Para una mayor aproximación los valores máximos transformados pueden ser calculados mediante bases de datos a través de programas como Thermo-Calc, MTDATA, etc., los cuales utilizan información específica del tipo de aleación con el que se trabaja. Sin embargo, una forma de simplificar el cálculo si no se cuenta con alguna base de datos, es utilizando de referencia el diagrama de fases binario Fe-C y aplicando la regla de la palanca.

En este trabajo es la forma en la que se planteó el cálculo de la ferrita proeutectoide. El cálculo de fracción transformada de ferrita se divide en dos zonas en el diagrama en equilibrio (figura 13): la zona 1 entre  $A_3$  y  $A_1$ , donde existe transformación parcial de ferrita (ferrita proeutectoide) y la zona 2, en la cual se encuentra una mezcla de ferrita y perlita.

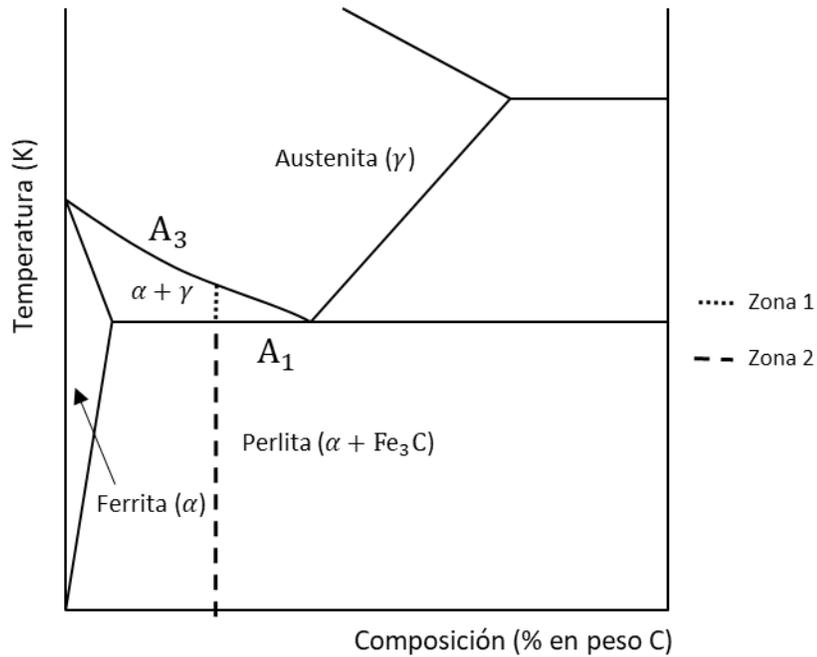


Figura 13. Zonas de cálculo para la fracción de ferrita transformada en el diagrama Fe- C.

Para encontrar la cantidad de ferrita entre  $A_3$  y  $A_1$  es usado la relación

$$X_{Feq} = \frac{C - C_{\gamma}}{C_{\alpha} - C_{\gamma}} \quad (40)$$

En esta zona existe una mezcla de ferrita y austenita. Por lo tanto, se cumple que

$$X_A = 1 - X_{Feq} \quad (41)$$

Donde,  $X_F$  es la fracción volumétrica de ferrita,  $X_A$  es la fracción volumétrica de austenita,  $C_{\alpha}$  es el contenido de carbono en la ferrita y  $C_{\gamma}$  es el contenido de carbono en la austenita.

Y de  $A_1$  hasta la temperatura ambiente la relación de cálculo de ferrita en equilibrio es

$$X_{Feq} = \frac{C - C_{eut}}{C_{\alpha} - C_{eut}} \quad (42)$$

Donde,

$$X_{Peq} = 1 - X_{Feq} \quad (43)$$

$X_{Peq}$  es la fracción volumétrica de perlita y  $C_{eut}$  es el contenido de carbono eutectoide.

Para el cálculo de los valores de  $C_{\gamma}$ ,  $C_{\alpha}$  y  $C_{eut}$  varios trabajos han adoptado expresiones obtenidas de las ecuaciones (27)-(29) [107,111].

Por arriba de  $A_1$  las relaciones utilizadas son

$$C_\gamma = \frac{[\phi_1 - \phi_2 - T]^2}{203^2} \quad (44)$$

$$\phi_1 = 912 - 15.2Ni + 44.7Si + 104V + 31.5Mo + 13.1W$$

$$\phi_2 = 30Mn - 11Cr + 20Cu - 700P - 400Al - 120As - 400Ti$$

$$C_\alpha = 0.0105 - 115.3 \times 10^{-6}(T) \quad (45)$$

Por debajo de  $A_1$ ,

$$C_{eut} = \frac{[\phi_1 - \phi_2 - A_1]^2}{203^2} \quad (46)$$

$$C_\alpha = \frac{T - 20}{A_1 - 20} (0.0105 - 115.3 \times 10^{-6}T) \quad (47)$$

Evaluando las expresiones anteriores a diferentes temperaturas se encuentran las fracciones de ferrita en el estado de equilibrio. Los valores son ingresados al programa y enseguida se procede a realizar el acoplamiento de las ecuaciones.

El acoplamiento de las ecuaciones se consideró como una etapa muy laboriosa y compleja, pues se buscó una forma diferente de unión entre ellas. El acoplamiento se logró siguiendo los conocimientos básicos de la cinética de transformaciones de fases y estudiando la forma en que el programa de Comsol Multiphysics pudiera simular el fenómeno de descomposición de una fase en otros productos. El acoplamiento de ecuaciones se centra básicamente en la descomposición de la austenita, las fracciones reales son diferentes a la unidad representado por  $(1 - X)$  en las ecuaciones parametrizadas generales, se realizó un cambio por nuevos términos que al simular representan las fracciones reales que pueden alcanzar.

Las relaciones que se integran a las ecuaciones para poder llevar a cabo el acoplamiento se desglosaron de la siguiente forma:

Por arriba de  $A_3$  la fracción de fase de austenita  $X_A$  es igual a 1, pero por debajo de su zona de estabilidad con una disminución de temperatura comienza la formación de los nuevos microconstituyentes, que son la ferrita ( $X_F$ ), perlita ( $X_P$ ) y bainita ( $X_B$ ). Por lo tanto, la relación entre la fracción de volumen de la austenita y las fases productos se expresa como sigue

$$X_A = 1 - X_B - X_F - X_P \quad (48)$$

El primer producto que se forma debajo del punto de estabilidad es la ferrita, como se mencionaba anteriormente son dos zonas en el diagrama de equilibrio (antes y después del punto eutectoide). Calculando las cantidades de ferrita que puede transformarse en función de la temperatura a cada temperatura se tiene  $X_{Feq}(T)$ , el cual toma un valor de 0 a temperatura  $A_3$  y alcanza un valor máximo en el punto  $A_1$  que es la mayor cantidad de ferrita transformada que se puede obtener, debajo de este punto el valor de  $X_{Feq}$  se mantiene casi constante.

En el acoplamiento de la ecuación (35) para la formación de ferrita, el término  $(1 - X_F)$  fue sustituido por la siguiente expresión

$$[X_{Feq}(T) - X_F]X_A \quad (49)$$

Significa que la ferrita ya no llegará a la fracción unitaria, si no que estará limitada al valor asignado para  $X_{Feq}(T)$ . Como puede observarse el término está afectado por la variable  $X_A$  y de acuerdo a la ecuación (48) sería la austenita remanente que no ha sido transformada, la variable es incluida también en las expresiones para la perlita y la bainita con el objetivo de que en condiciones de enfriamiento continuo esa fracción de austenita sea la pauta para terminar y cuantificar la transformación.

Con la expresión (50) se representa el límite de transformación de la perlita, este constituyente bifásico empieza su formación por debajo de la temperatura eutectoide ( $A_1$ ), en el término se contempla una fracción específica de austenita que será transformada a ferrita y la fracción de austenita restante puede transformarse en perlita. Entonces, cuando la fase ferrítica ha llegado a su valor máximo con respecto a cada temperatura, empieza la transformación de la perlita y termina hasta que la austenita alcanza un valor de cero.

$$[1 - X_{Feq}(T) - X_P]X_A \quad (50)$$

En el momento que empieza la transformación de bainita (temperaturas menores que  $B_s$ ) se supone que no afecta la presencia de las otras fases por lo que toda la austenita remanente tiene la libertad de transformarse al 100%, esto se representa con el término (51).

$$[1]X_A \quad (51)$$

En la ecuación (47) se puede visualizar este supuesto, ya que  $X_A$  quedaría solo con la expresión  $(1 - X_B)$  al eliminar las variables  $X_F$  y  $X_P$ , y eso significa que la fracción de  $X_B$  puede llegar a la unidad.

### 3.4.3 Simulación de transformaciones a temperatura constante

Las transformaciones isotérmicas como se ha mencionado antes, se llevan a cabo a temperatura constante. En el modelo el proceso es estudiado en un sistema de una dimensión (1D), esto significa que el dominio sobre el que se aplica las condiciones térmicas es una línea, sobre la cual se prescribe una temperatura en cada punto. La prescripción de temperatura se realiza mediante la asignación de una función, donde la temperatura varía conforme a la posición en el dominio, pero durante el proceso permanece constante. En los puntos que representan diferentes temperaturas se monitorean las soluciones y variables derivadas, la velocidad de transformación de las fases y la cantidad de fracción transformada con respecto al tiempo son ejemplos.

En las condiciones para la simulación de transformaciones, las temperaturas críticas asumen un rol importante. En las ecuaciones se encuentran incluidas en la variable  $\Delta T$ , que es el subenfriamiento dado como  $(A_3 - T)$  para la transformación ferrítica,  $(A_1 - T)$  para la transformación perlítica y  $(B_s - T)$  para la bainítica. En el modelo las temperaturas críticas marcan el inicio de transformación de cada producto, cuando la temperatura  $T$  es igual a  $A_3$  se activa la ecuación (34) para simular la velocidad de transformación ferrítica y con esta empieza la descomposición de austenita, similarmente en el caso de la ecuación (36) se activa cuando  $T$  alcanza el punto  $A_1$ , entonces inicia la simulación para las velocidades de transformación de perlita en conjunto con la ecuación (34), finalmente si  $T$  alcanza la temperatura  $B_s$  la ecuación (37) correspondiente a la velocidad de transformación de la bainita se activa.

Para la simulación de las velocidades de transformación, también son necesarios los valores de los parámetros en cada conjunto de ecuaciones, los cuales son obtenidos de las ecuaciones de Kirkaldy originales como se mencionó anteriormente. Dado que el problema de estudio es dependiente del tiempo, este se considera similarmente como un parámetro en el modelo. El tiempo que se otorga se considera suficiente para el proceso de transformación, de acuerdo a algunos diagramas consultados en literatura se proporciona un tiempo de 50000 segundos (aproximadamente 13.8 horas).

El proceso de simulación de la velocidad de transformación empieza con los valores iniciales dados para cada ecuación matemática de convección-difusión, en el cual  $X_F$ ,  $X_P$  y  $X_B$  es igual a cero. Con las condiciones iniciales y de temperatura que se les ha impuesto a las ecuaciones, se aplican a cada temperatura simulando las dos etapas de formación de la nueva fase: nucleación y crecimiento. Estas dos etapas se desarrollan consecutivamente simulando el proceso de transformación de fase.

Entre temperaturas  $A_3$  y  $B_s$  existe transformación de fase ferrítica, la transformación es parcial lo que resulta en una mezcla de ferrita proeutectoide y austenita entre  $A_3$  y  $A_1$ . Por debajo de  $A_1$  hasta  $B_s$  el porcentaje de austenita remanente que no se transformó en ferrita, se transforma en perlita y con este constituyente bifásico la austenita termina de transformarse completamente. A temperaturas isotérmicas la bainita puede transformarse al 100%, por lo que, a temperaturas por debajo del punto  $B_s$  se puede encontrar a la bainita como única fase que transforma desde la fase austenítica.

Una vez terminado el proceso de simulación pueden obtenerse las fracciones de fase con respecto al tiempo y esto el programa lo encuentra por medio de la integración de las ecuaciones diferenciales de cada tipo de transformación. Un ejemplo son las curvas de fracción de ferrita y perlita en temperaturas entre  $A_1$  y  $B_s$ , presentado en la figura 14. En la figura se grafican tres fracciones de fase a temperaturas diferentes, en los 3 puntos la transformación de ferrita es completa. En cambio, la transformación perlítica no alcanza a transformarse en la temperatura de 1000 K, esto se debe a que necesita más tiempo para transformarse.

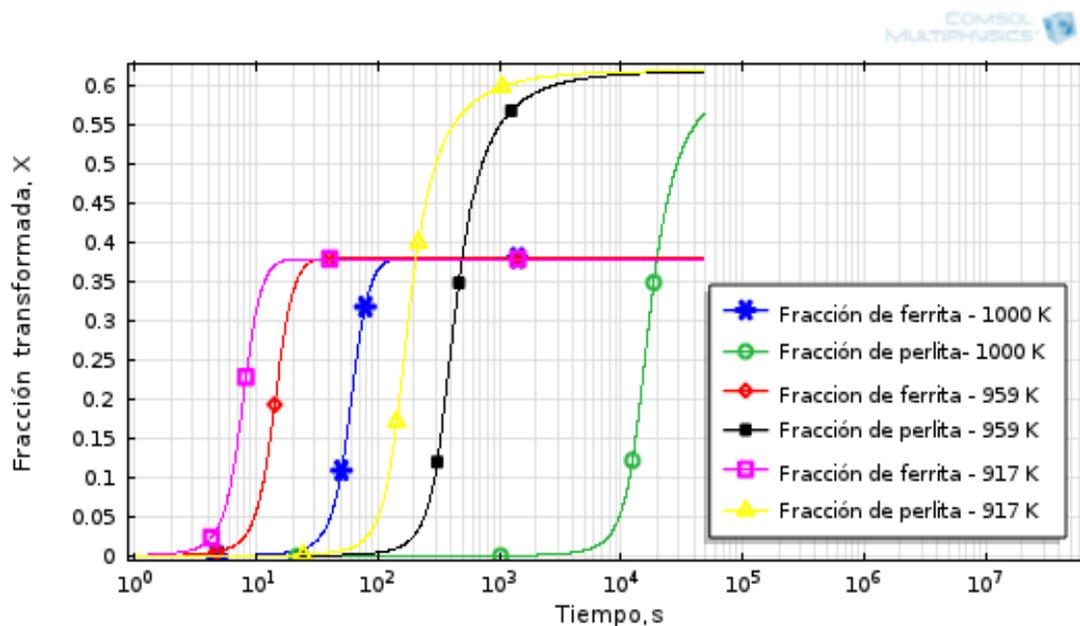


Figura 14. Curvas de transformación para las fracciones de ferrita y perlita a varias temperaturas.

Es posible encontrar las curvas para cada temperatura y con ello también los tiempos de inicio y fin de transformación de cada fase. Dado que la construcción de los diagramas TTT se basan en la ubicación de los puntos de inicio y fin de transformación, los cuales comúnmente

son el 1 y 99%, se ingresa una función en el programa que encuentra esos puntos a las temperaturas deseadas.

El objetivo de la función es encontrar puntos específicos del tiempo cuando la fracción de fase es 0.01 y 0.99 para cada una de las fases. Se basa en la integración del tiempo y es un poco diferente a las integrales en el dominio que generalmente se realizan con las ecuaciones PDE. La integración de tiempo se realizó en la parte de postprocesado, en el cual ya se encuentran los tiempos y fracciones de transformación, pero estar buscando los tiempos para cada temperatura sería muy laborioso. Comsol Multiphysics ofrece la opción de ingresar funciones matemáticas inclusive en la parte de postprocesado, por lo que se ingresó una función para la integración temporal representado por la siguiente expresión.

$$\tau_i = \frac{\int_0^{t_f} \delta(X - a) t dt}{\int_0^{t_f} \delta(X - a) dt} \quad (52)$$

Donde  $\tau_i$  es el tiempo correspondiente a la fracción  $a = 0.01$ ,  $X$  representa a las variables del tipo de transformación ( $X_F$ ,  $X_P$ ,  $X_B$  y  $X_A$ ) y las integrales van de 0 a un tiempo  $t_f$  que es el tiempo final del intervalo del tiempo simulado.  $\delta$  es una función generalizada llamada comúnmente función o delta de Dirac, donde el valor de  $\delta$  es dependiente del parámetro  $X$  y satisface las condiciones impuestas en la siguiente expresión.

$$\delta(X) = \begin{cases} \infty & \text{si } X = 0 \\ 0 & \text{si } X \neq 0 \end{cases} \quad (53)$$

La función Dirac es igual a 0 en todo su dominio, excepto en  $X = 0$  donde tiene un valor infinito de tal forma que la integral de  $\delta(X)$  sobre el dominio de  $-\infty$  a  $\infty$  es igual a 1. La función de Dirac constituye una aproximación muy útil para funciones pulso.

En la expresión (52) la función de Dirac se desplaza hacia el valor de  $a$ , la cual toma un valor de 0.01 que representa el 1% de transformación para la fase transformada

$$\delta(X - a) = \begin{cases} \infty & \text{si } X = a \\ 0 & \text{si } X \neq a \end{cases} \quad (54)$$

Con este término se llega a una versión de Dirac suavizada, donde la integral se encuentra evaluada por límites del dominio de la función del tiempo  $f(X)$  y la función  $\delta(X - a)$  es desigual a cero dentro de un pequeño dominio de  $\langle a - \epsilon, a + \epsilon \rangle$  alrededor del valor en  $X = a$ , resultando en una curva parecida a una curva gaussiana, en la cual la integral del área debajo de la curva se mantiene igual a 1 (figura 15).

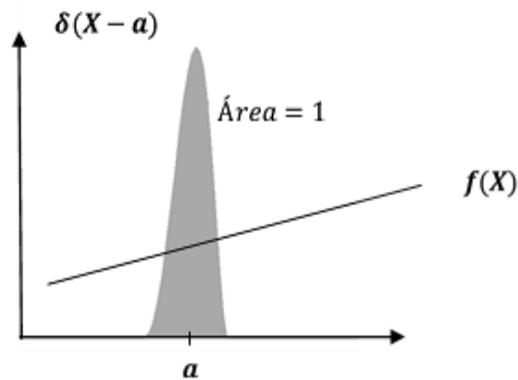


Figura 15. Propiedad de la función de Dirac.

Para realizar la integración temporal en Comsol se usa un operador incorporado llamado *timeint*, el cual integra cualquier expresión dependiente del tiempo durante un intervalo del tiempo específico. Para la función de Dirac se toma la función *fldc2hs* que pertenece a una familia de funciones suavizadas en el programa, la cual necesita dos parámetros, siendo  $X - a$  y la amplitud  $\epsilon$ . Después de haber ingresados todas las funciones referidas se busca el tiempo al 1% de cada fase y con esto ya es posible encontrar la gráfica TTT con los tiempos a cada temperatura.

### 3.5 Construcción del diagrama TTT

Para construir el diagrama TTT es necesario graficar tiempo contra temperatura, pero el tiempo que se considera es cuando las fases ferrita, perlita y bainita han alcanzado una transformación del 1% y la austenita se ha transformado a un 99% o similarmente si lo remanente ha llegado al 1%. Cuando la ecuación (52) es ingresada para encontrar los tiempos a cada temperatura y por consiguiente para cada tipo de transformación se obtiene el diagrama ilustrado en la figura 16, donde las curvas de 1%FerM, 1%PerM, 1%BaiM y 1%AusM se refieren a las curvas modeladas de ferrita, perlita, bainita y austenita correspondientemente.

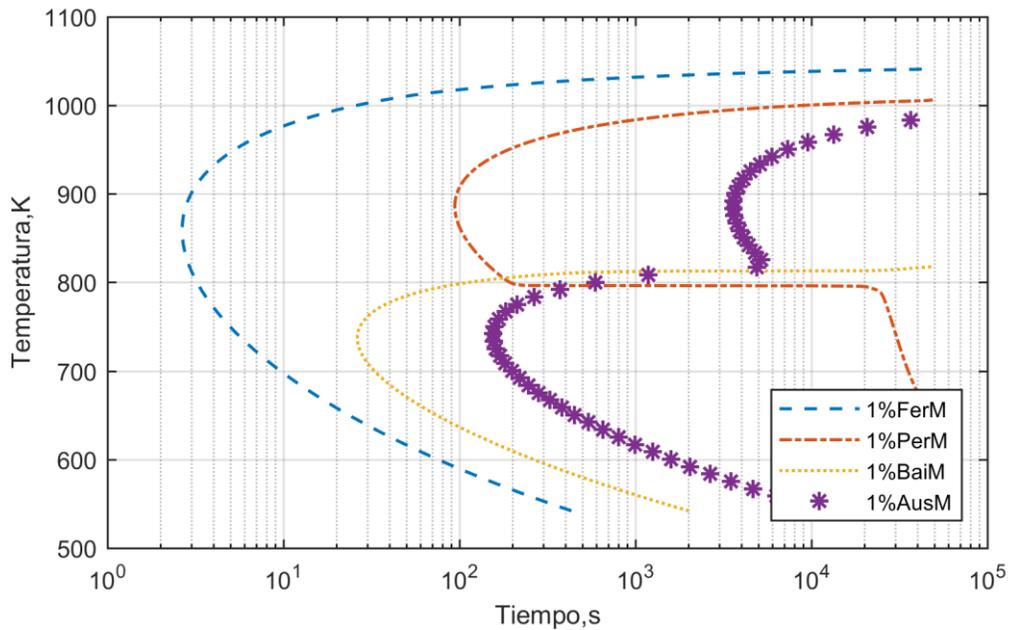


Figura 16. Primer diagrama TTT obtenido del modelo.

Es posible realizar una comparación de los resultados del modelo con un diagrama experimental, ya que los datos esenciales de las condiciones con la que se modeló el diagrama son similares a los utilizados para la construcción de diagramas experimentales. Varios diagramas han sido construidos experimentalmente para diferentes aceros, entre ellas se puede encontrar el diagrama del acero AISI 4140. En la figura 17 se muestra el diagrama TTT experimental para el acero 4140 para realizar una comparación con el diagrama del modelo.

Comparando los diagramas se puede notar que el diagrama del modelo no corresponde completamente con el diagrama experimental (figura 18). La curva ferrítica tiene buena correspondencia, sin embargo, las curvas de perlita y bainita se encuentran desplazadas, específicamente la curva bainítica se observa con alejamiento considerable hacia la derecha en la gráfica. Aunque la gráfica resultante no concuerda precisamente con la experimental, se observa que la forma “C” de las curvas coinciden razonablemente con las curvas experimentales.

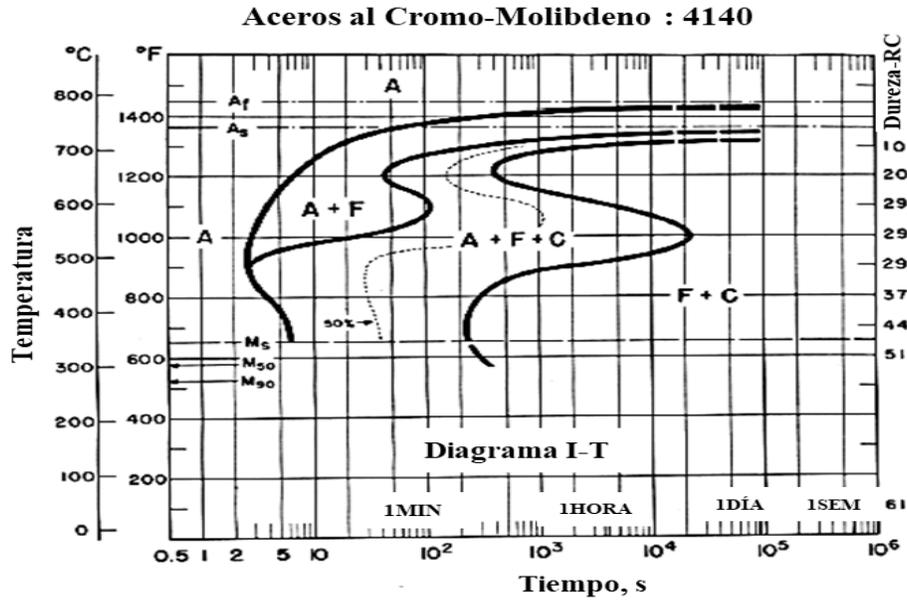


Figura 17. Diagrama TTT experimental.

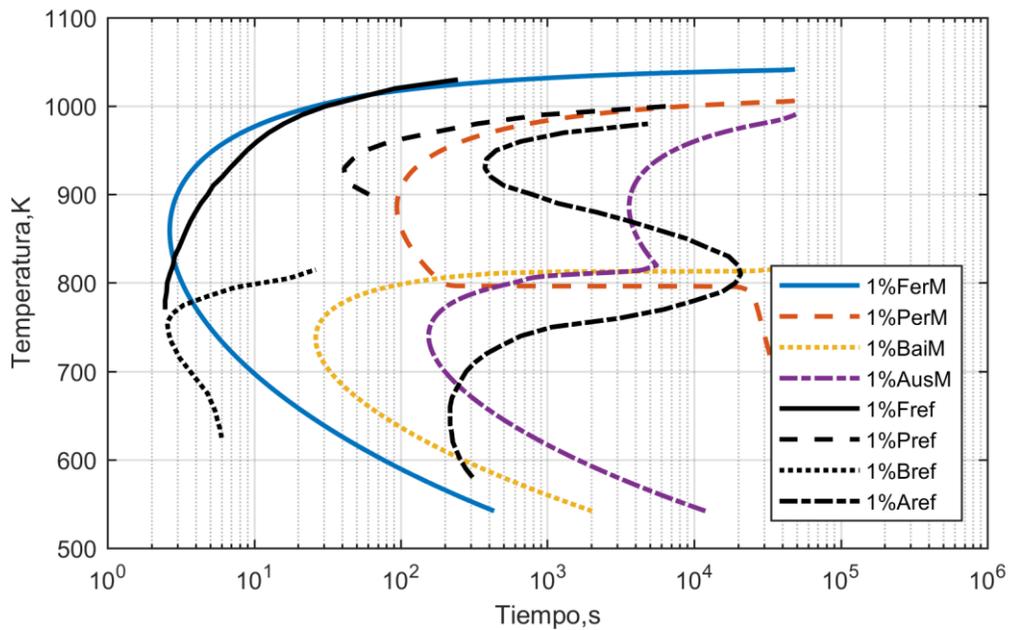


Figura 18. Comparación entre curvas del modelo y el experimental o referencia.

### 3.6 Variación de parámetros

Una opción de mejorar la correspondencia entre las curvas del diagrama TTT simulado y el experimental es variando los valores de los parámetros en las ecuaciones cinéticas. Por ello, es necesario tener el conjunto de ecuaciones con las cuales se simulan las velocidades de

transformación para visualizar los parámetros que la componen y así realizar un análisis cambiando algunos valores para observar sus efectos en el diagrama TTT.

Las ecuaciones acopladas para simular la descomposición de austenita están integradas ahora por nuevos términos que a la vez involucran nuevos parámetros, en las siguientes ecuaciones se presentan las expresiones finales para la velocidad de transformación de ferrita, perlita y bainita.

$$\frac{dX_{FPPar}}{dt} = \alpha_1(A_3 - T)^{a_1} \exp\left(\frac{-\beta_1}{T}\right) \left[ \arctan(\gamma_1 X_F) \arctan(\delta_1(X_{Feq}(T) - X_F) X_A) + \theta_1 \exp\left(-\frac{X_F}{\varphi}\right) \right] \quad (55)$$

$$\frac{dX_{PPar}}{dt} = \alpha_2(A_1 - T)^{a_2} \exp\left(\frac{-\beta_2}{T}\right) \left[ \arctan(\gamma_2 X_P) \arctan(\delta_2(1 - X_{Feq}(T) - X_P) X_A) + \theta_2 \exp\left(-\frac{X_P}{\varphi}\right) \right] \quad (56)$$

$$\frac{dX_{BPar}}{dt} = \alpha_3(B_s - T)^{a_3} \exp\left(\frac{-\beta_3}{T}\right) \left[ \arctan(\gamma_3 X_B) \arctan(\delta_3(1 - X_B))(\exp(-\varepsilon X_B^b)) + \theta_3 \exp\left(-\frac{X_B}{\varphi}\right) \right] \quad (57)$$

Los parámetros que constituyen cada ecuación con sus valores correspondientes se muestran en la tabla 2.

Tabla 2. Valores iniciales de los parámetros

	$\alpha_i$	$a_i$	$\beta_i$	$\gamma_i$	$\delta_i$	$\theta_i$	$\varphi$	$\varepsilon$	$b$
Ferrita	0.1	3	11,840	2.03	2.03	0.0025	0.002	×	×
Perlita	12.4	3	18,619	2.03	2.03	0.0025	0.002	×	×
Bainita	1,081	2	13,838	2.03	2.03	0.002	0.002	2.5	2

Con el objetivo de observar el comportamiento de las curvas y específicamente de la curva bainítica que es la que tiene mayor desfaseamiento con respecto al diagrama experimental, se hicieron algunas pruebas, en las cuales se variaron las variables  $\alpha_3$  y  $\beta_3$ .

Los resultados de los cambios en los valores de los parámetros se pueden observar en las gráficas de la figura 19, del lado derecho se muestran las curvas obtenidas al graficar la expresión del término de coeficientes de velocidad y del lado izquierdo las curvas de transformación isotérmicas. Comparando los diagramas encontrados con el primer diagrama

obtenido con el modelo de la figura 16, donde los valores de  $\alpha_3$  y  $\beta_3$  listados en la tabla 2 son 1,081 y 13,838 correspondientemente.

En la figura 19, las diferentes gráficas del término de coeficientes de velocidad muestran curvas obtenidas con los valores iniciales de la tabla 2 (bainita) y curvas en las cuales se varían los parámetros  $\alpha_3$  y  $\beta_3$  (bainita<sub>mod</sub>). En las curvas de bainita<sub>mod</sub> se observan los cambios en altura y ancho, estos cambios pueden verse reflejados en el desplazamiento de las curvas del diagrama TTT, especialmente el inicio de transformación bainítica. Con los incisos a) y b) donde sólo es cambiado el valor de  $\alpha_3$ , la curva ya sufre un movimiento hacia la izquierda y la forma aguda de la curva se mantiene, pero al modificar los dos parámetros tal movimiento se ve aumentado considerablemente, la curva se mueve más a la izquierda y ya se observa más redondeado. El inconveniente de desplazar la curva de bainita con estas variables es que la curva de 1% de austenita también se ve obligada a desplazarse hacia la izquierda. Pero esto puede ser resuelto alterando la altura de la curva del término de efecto sigmoideo para que la transformación se haga más lenta y a la austenita se le provea más tiempo para transformar.

En otro análisis de comportamientos de parámetros también se variaron coeficientes del término de incubación para observar cuanto influyen en la posición de las curvas y los resultados se muestran en la figura 20. En las gráficas del lado derecho se tienen las curvas designadas con term<sub>sig</sub> que representa la ecuación parametrizada del término sigmoideo de bainita sin incubación y term<sub>sig</sub>+N<sub>uB</sub> con la implementación del término de incubación.

Comparando las gráficas de los incisos b-d con las curvas resultantes del inciso a que son curvas obtenidas a partir de los valores iniciales encontradas en la tabla 2, con los parámetros se puede notar que entre mayor sea el valor de  $\theta$ , más suave se hace la curva y el diagrama TTT sufre un mayor desplazamiento hacia la izquierda. De la misma forma si se varía el valor de  $\varphi$  se logra un desplazamiento en la curva, aunque con solo cambiar los valores de  $\theta$  sería suficiente, pues es un factor que afecta al mismo  $\varphi$ . Se observa que a diferencia de los resultados de la figura 19, la modificación del término de incubación no mueve la curva de austenita, es decir, la mantiene constante. Por lo tanto, el término del tiempo de incubación es buena opción para ser modificado en el modelo.

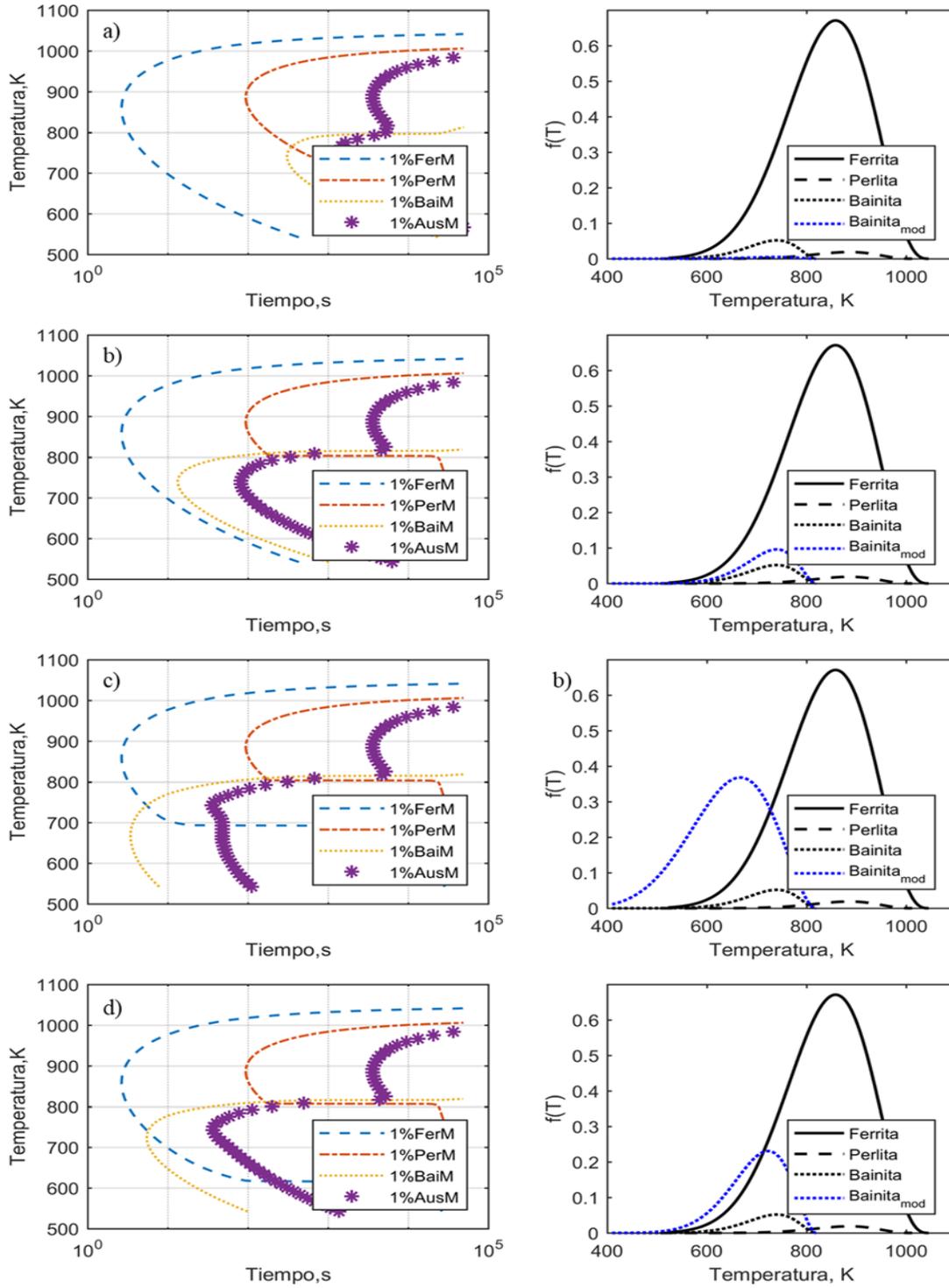


Figura 19. Efecto de los coeficientes de velocidad en las curvas de transformación. a)  $\alpha_3=100$ , b)  $\alpha_3=2000$ , c)  $\alpha_3=0.1$ ,  $\beta_3=5838$  y d)  $\alpha_3=80$ ,  $\beta_3=10838$ .

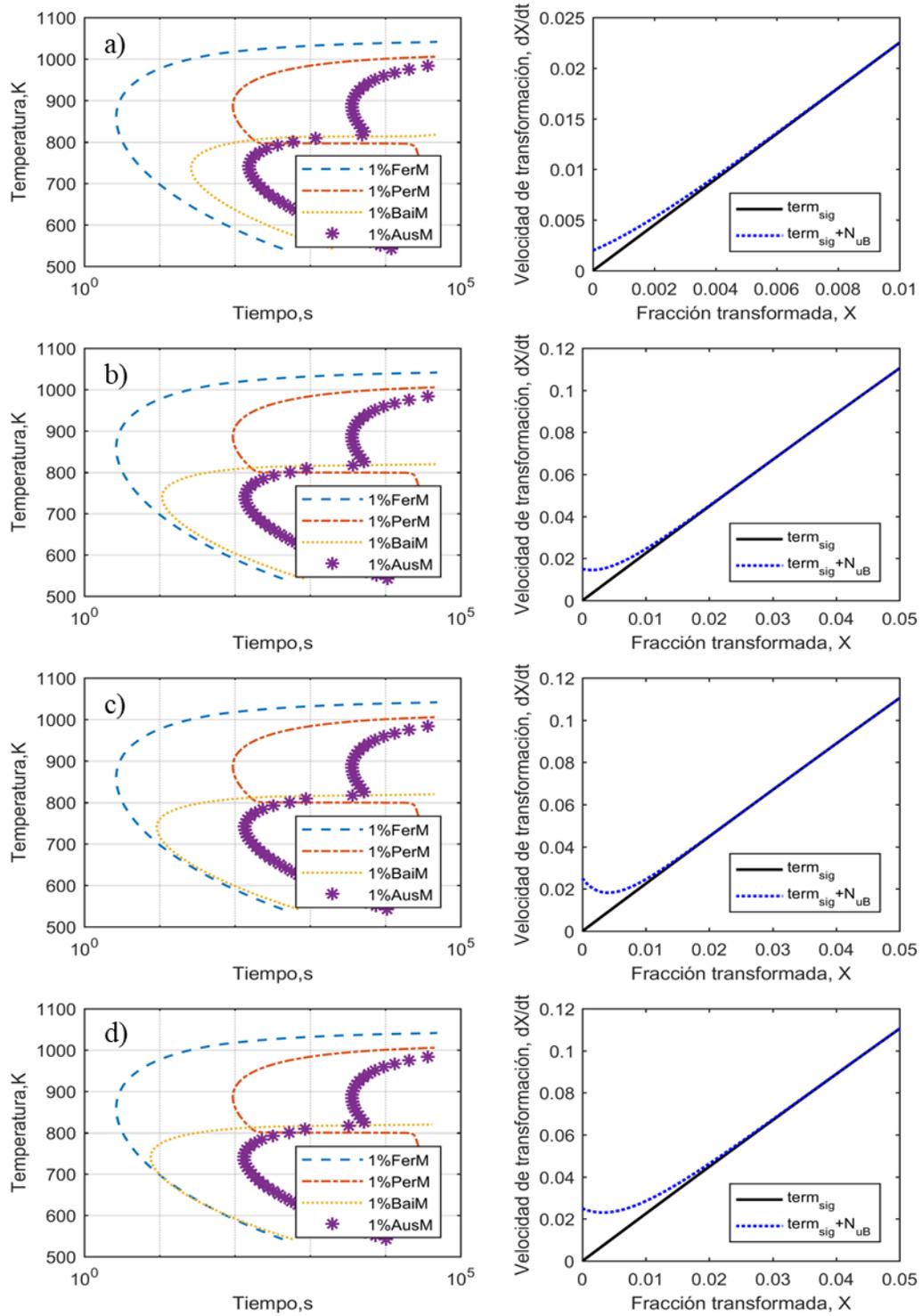


Figura 20. Efecto del término de incubación en las curvas de transformación. a)  $\theta_3=0.002$  &  $\varphi=0.002$ , b)  $\theta_3=0.015$ ,  $\varphi=0.005$ , c)  $\theta_3=0.025$ ,  $\varphi=0.004$  y d)  $\theta_3=0.025$ ,  $\varphi=0.007$ .

La variación de parámetros tiene el objetivo de identificar cuáles son los parámetros o las variables principales en la ecuación que permitan ser modificados para tener una mejor aproximación en las curvas del modelo con respecto a la experimental.

### 3.7 Optimización de parámetros cinéticos

Para mejorar la predicción del diagrama TTT, se propuso una optimización de parámetros en las ecuaciones parametrizadas, con el fin de encontrar los mejores coeficientes que puedan corregir y aproximar las curvas modeladas a las experimentales.

Optimización se refiere a buscar el mínimo o máximo de una función que es conocida como “función objetivo”. La función objetivo determina hasta donde minimizar o maximizar la función. La optimización de parámetros se realizó en el programa MATLAB utilizando una interfaz que puede comunicarse con el modelo creado en COMSOL, por lo que el modelo puede ser manipulado desde MATLAB para modificar y ajustar los parámetros. El programa Matlab contiene herramientas o “*toolbox*” de optimización, en los cuales directamente se encuentran funciones para la resolución de problemas, por ejemplo, de mínimos cuadrados y sistemas de ecuaciones no lineales, en las que se resuelven al minimizar una suma de cuadrados, pero se pueden encontrar más tipos.

En la solución del problema de optimización de parámetros se eligió la función **fminsearch** que es un tipo de función de minimización sin restricciones y tiene el objetivo de encontrar el mínimo de una función de varias variables. La optimización se realizó utilizando un código para localizar las soluciones óptimas a las funciones. El código realizado computariza la función objetivo, es decir, realiza una serie de cálculos para determinar el error. En el código primeramente se cargan datos de los resultados obtenidos en el modelo y los datos recabados del diagrama TTT experimental. La información que se analiza por parte del modelo y experimental son los tiempos de transformación para cada fase a diferente temperatura. Para hacer una estimación del error entre los dos diagramas, los puntos en los que se quieran comparar deben coincidir. Por lo tanto, para cada conjunto de datos se hace una interpolación con respecto a la temperatura y con esto, ya es posible comparar a diferentes puntos de la curva, la comparación entre las curvas del modelo, las de referencia y las interpoladas se muestran en la figura 21.

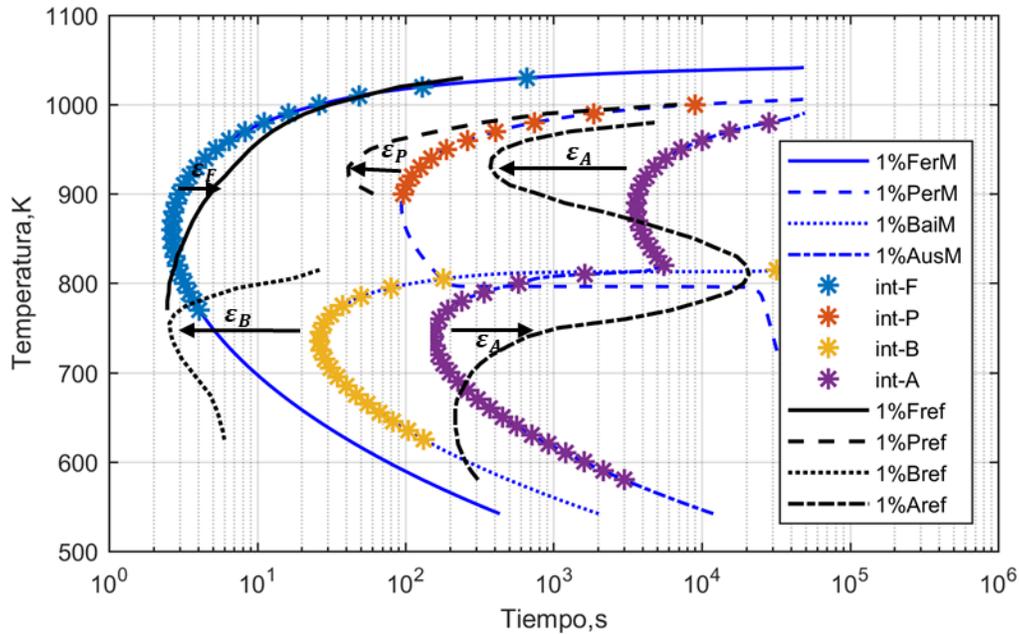


Figura 21. Curvas antes del proceso de optimización .

Un ejemplo del cálculo de error entre los tiempos de transformación bainítica del modelo y experimental se expresa como sigue

$$\varepsilon_B = \log(t_{mod}) - \log(t_{exp}) \quad (58)$$

Con la expresión anterior se calculó el error bainítico ( $\varepsilon_B$ ) en diversos puntos en la curva y se obtuvo restando logaritmo del tiempo del modelo menos el logaritmo del tiempo experimental. Posteriormente, los errores cuadráticos para cada fase fueron sumados para encontrar un error global.

$$\varepsilon_{global}^2 = \varepsilon_F^2 + \varepsilon_P^2 + \varepsilon_B^2 + \varepsilon_A^2 \quad (59)$$

Esencialmente en la función objetivo se devuelve un parámetro de salida (el error), en este caso es un valor escalar y es el que se minimiza en cada iteración.

El algoritmo implementado en la función **fminsearch** en Matlab utiliza un método de búsqueda simple Nelder-Mead, es un algoritmo de búsqueda directa que simplemente compara valores funcionales. Los valores de la función objetivo son tomados en un conjunto de puntos muestreados y son usados para continuar el proceso.

En la minimización de errores se realizaron varias optimizaciones con diferentes combinaciones de coeficientes a variar. Algunas combinaciones realizadas fueron con 2, 4,

6, 10, 13 y 19 variables. En los primeros cálculos solo se modificaron las variables  $\alpha$  y  $\beta$  en un tipo de transformación, después se incrementó para las tres transformaciones, lo que resultó en 6 parámetros. Seguidamente se agregaron las variables  $\theta$  que integran el término de incubación, también las potencias  $a$  y por último fueron añadidas las variables  $\gamma$  y  $\delta$  que modifican la pendientes en la curva del término de efecto sigmoideo.

El error global inicial se computarizó y conforme se aumentó el número de parámetros optimizados el valor de error fue disminuyendo. Por otro lado, gracias al análisis de la influencia de parámetros se realizaron combinaciones específicas de variables optimizadas y los resultados fueron aceptables en comparación con los valores iniciales. De las múltiples pruebas realizadas cada conjunto de resultados obtenidos de una optimización se usó como valores iniciales para el siguiente grupo de variables a optimizar. En el proceso se demandó tiempo considerable, pues para la optimización de un solo conjunto se necesita la evaluación de cada iteración, cada resultado es simulado, después se comparan con la experimental y se calcula nuevamente el error, para luego optimizarlo y volver a repetir el proceso hasta encontrar el valor óptimo. Este valor es encontrado cuando se alcanza la tolerancia del error de la función.

En el proyecto se encontraron valores óptimos para los parámetros computarizados y con ellos se construyó el diagrama TTT de la figura 22 que representa la mejor aproximación al diagrama experimental para un acero AISI 4140.

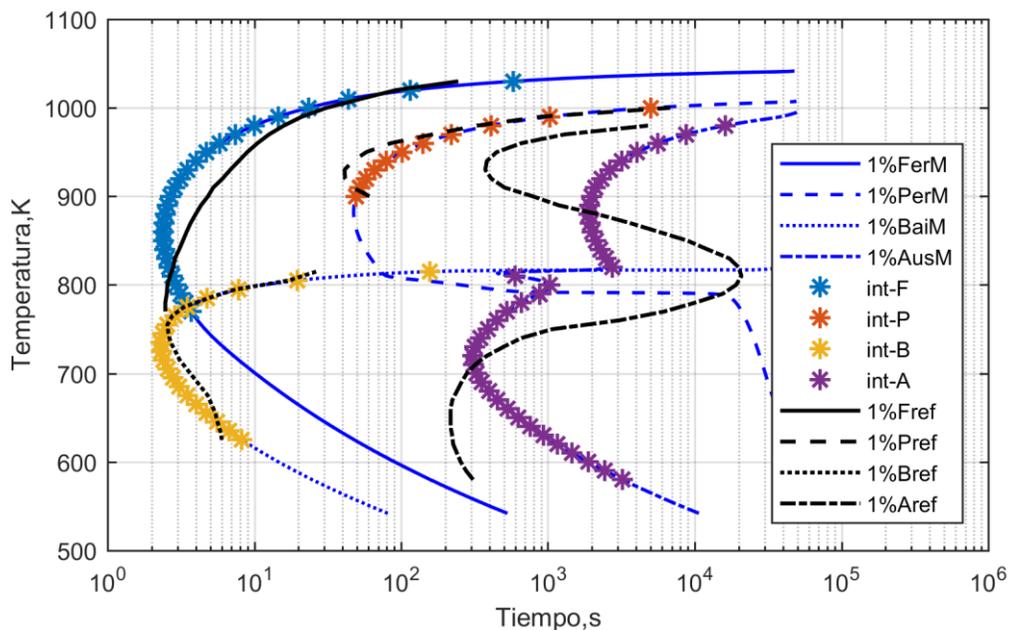


Figura 22. Diagrama TTT optimizado.

Los valores óptimos se presentan en la tabla 3, en ella se encuentran 13 parámetros diferentes a los iniciales de la tabla 2, como se puede observar los valores que no fueron modificados son los exponentes que representan el grado de transformación y los valores del término de tiempo de incubación. En la misma tabla se presentan las razones de cambio de los valores optimizados con respecto a los valores iniciales.

Tabla 3. Valores optimizados y la razón de cambio

	$\alpha_i$	$a_i$	$\beta_i$	$\gamma_i = \delta_i$	$\theta_i$	$\varphi$	$\varepsilon$	$b$
Ferrita	<b>0.102</b>	3	<b>11,888.846</b>	<b>2.265</b>	0.0025	0.002	×	×
Perlita	<b>12.984</b>	3	<b>17,917.664</b>	<b>1.79</b>	0.0025	0.002	×	×
Bainita	<b>1,257.230</b>	2	<b>12,230</b>	<b>2.07</b>	0.002	0.002	<b>14.82</b>	2
Razón de cambio (valor optimizado/valor inicial)								
Ferrita	1.020	×	1.004	1.115	×	×	×	×
Perlita	1.047	×	0.962	0.881	×	×	×	×
Bainita	1.163	×	0.883	1.019	×	×	5.928	×

Los parámetros  $\gamma$  y  $\delta$  se mantuvieron correlacionados en el proceso de optimización, por lo tanto, en el resultado sus valores son iguales. Los valores de casi todos los parámetros se mantuvieron sin grandes cambios, como puede verse en la magnitud de cambios entre las variables, se mantienen cercanos a 1. El único valor que se elevó considerablemente fue el de  $\varepsilon$ , modificado con un factor 6 aproximadamente.

### 3.8 Modelado de transformación en enfriamiento continuo

Con los nuevos valores obtenidos de la optimización para la construcción del diagrama TTT se procede a realizar el modelo para obtener el diagrama CCT. Para la simulación en COMSOL del diagrama de las transformaciones en enfriamiento continuo las temperaturas son definidas en el dominio al igual que en la simulación del diagrama TTT. El dominio analizado también es una línea, donde los perfiles parten de la temperatura de austenitización y son continuos en cada punto hasta llegar a la temperatura ambiente.

Para poder definir la variación de temperaturas en el dominio se ingresa una función de tipo exponencial que tiene la forma siguiente

$$T(t) = T_{Amb} + (T_{Aust} - T_{Amb}) * \exp(-K(x)t) \quad (60)$$

Donde,  $T_{Amb}$  es la temperatura ambiente y  $T_{Aust}$  es la temperatura de austenitización,  $t$  es el tiempo y  $K(x)$  es un coeficiente que representa una constante de tiempo del decaimiento y define que tan rápido la curva se aproxima al valor de la temperatura ambiente, y el valor de  $K$  varía con la posición en el dominio. El signo negativo en el argumento del exponente significa que la curva siempre converge a  $T_{Amb}$  a medida que pasa el tiempo. Los perfiles de temperatura se pueden observar en la figura 23, donde se tienen diferentes velocidades de enfriamiento para cada punto en el dominio  $x$ .

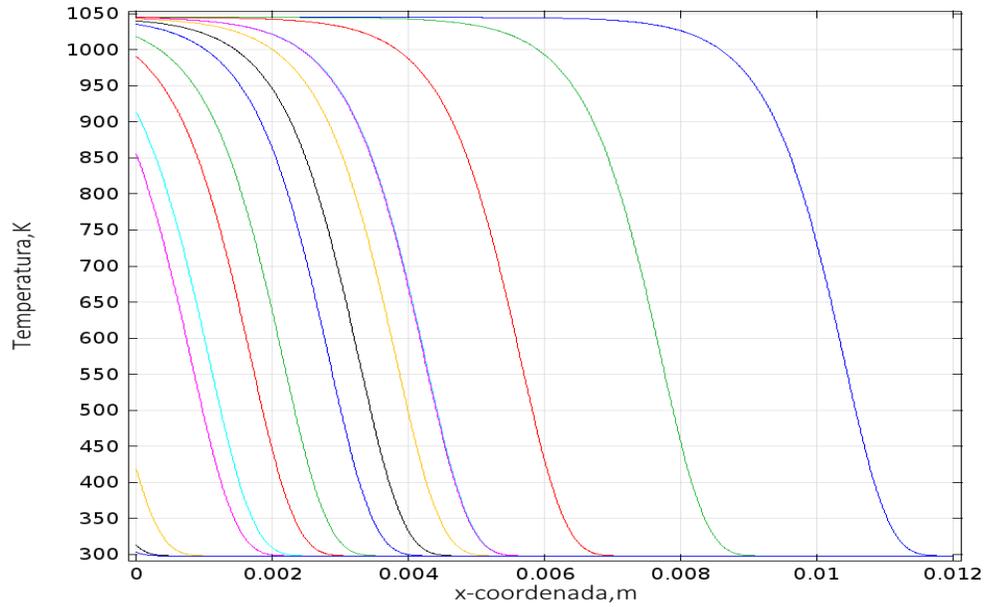


Figura 23. Perfiles de temperaturas que corresponden a diferentes velocidades de enfriamiento.

Al tener la función que define los perfiles de temperaturas, ya es posible aplicar las ecuaciones de transformación en estado de enfriamiento continuo. Con la forma de las ecuaciones, se sabe que las curvas de velocidad de transformación en el diagrama CCT serán parecidas a l diagrama TTT, es decir también representadas con formas sigmoidales. Entonces, con cada perfil de temperatura también se puede marcar un tiempo de inicio y fin de transformación, para esto se realizó una adaptación de la ecuación (59), dado que está en función del tiempo  $t$ , la variable puede ser sustituida por la expresión (52) que localiza los tiempos cuando cada fase se encuentra al 1%. Por lo tanto, al realizar la substitución se obtiene la siguiente función:

$$T_{CCT} = T_{Amb} (T_{Aust} - T_{Amb}) * \exp[- K(x) \tau_i] \quad (61)$$

Esta es la función que representa la temperatura en la cual una fase a alcanzado el 1% de transformación, en donde, la temperatura se representa con la expresión anterior y el tiempo con la de  $\tau_i$ .

Una vez aplicada la función de temperatura se realizó la simulación de las velocidades de transformación, al finalizar se obtuvieron resultados que fueron procesados con el propósito de determinar los puntos de inicio de transformación. La posición del 1% de transformación fue determinada por dos variables: tiempo y temperatura, el tiempo fue ubicado con una función de tipo pulso en un 1%, entonces dado el tiempo al porcentaje de transformación requerido, es posible hallar la temperatura.

## **Capítulo 4. Resultados y Validación del Modelo Termo-Metalúrgico**

### **4.1 Introducción**

En este capítulo se presentan resultados encontrados después de la optimización de parámetros y se explica sobre la información que puede obtenerse con el modelo realizado. También se realiza la validación del modelo termo-metalúrgico comparando los diagramas predichos con diagramas experimentales, tales diagramas corresponden a la transformación isotérmica y en enfriamiento continuo para el acero de baja aleación AISI 4140. En un apartado se efectúa la discusión de resultados, en el cual se expone sobre las desviaciones que resultan debido al efecto de las diversas suposiciones en el modelo de Kirkaldy y de la misma forma se analiza los efectos al descartar algunas variables en el presente modelo. Se incluye de la misma manera las ventajas y desventajas de las modificaciones y sobre el rango de aplicación del modelo o sus limitaciones.

### **4.2 Análisis de coeficientes de la optimización**

En el proceso de optimización se encontraron diversas curvas que corresponden a diferentes valores en los parámetros. Se tienen los coeficientes que hacen que las curvas del modelo correspondan con las curvas experimentales, sin embargo, después de las pruebas también se encontraron valores que son importantes mencionar por los resultados observados en las gráficas resultantes. Por ello, en este apartado se realiza el análisis de resultados obtenidos del proceso optimización, observando cómo influyen esos valores en los términos de la ecuación y como se ve gráficamente.

#### **4.2.1 Influencia de los coeficientes optimizados a los términos de la ecuación**

Teniendo los coeficientes optimizados es necesario analizar los efectos que tienen en las curvas de coeficientes de velocidad y efecto sigmoideo para así discutir los cambios con respecto a las curvas antes de la optimización. Para observar tales influencias se procedió a graficar los términos para cada tipo de transformación tomando los valores de la tabla 2 y 3, en las figuras 24 y 25 se muestran las curvas resultantes.

En la figura 24 se muestran dos conjuntos de curvas del termino de coeficientes de velocidad para las tres transformaciones. Las leyendas de ferrita, perlita y bainita representan las curvas iniciales y las nombradas con subíndices *opt* son las curvas obtenidas con los parámetros optimizados.

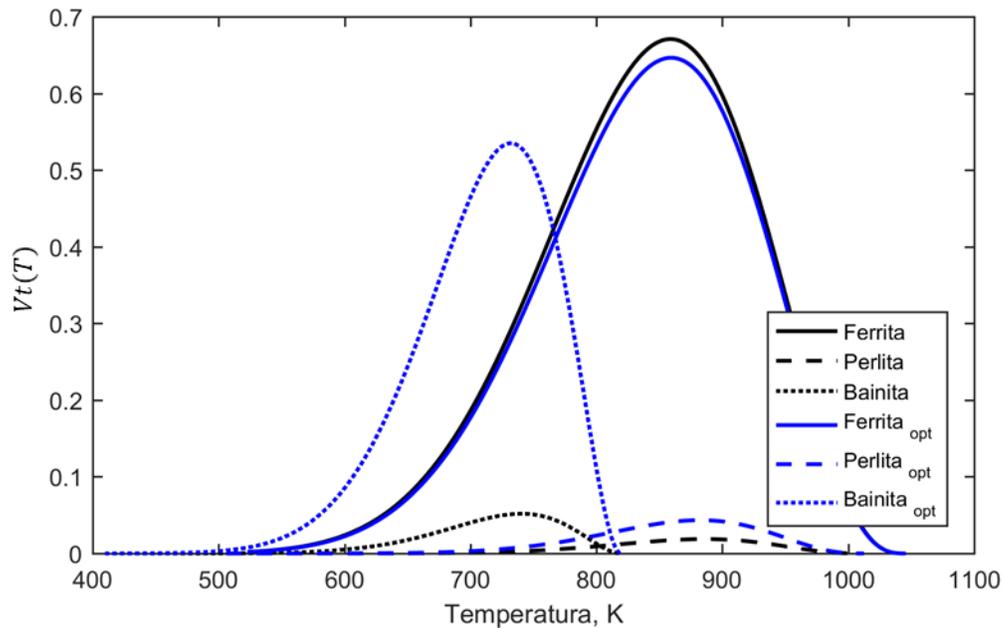


Figura 24. Término de coeficientes de velocidad entre valores de parámetros óptimos e iniciales.

En la figura se observa la influencia de los valores optimizados en el término de coeficientes de velocidad, la curva de la ferrita optimizada se mantiene muy cerca de la curva inicial, la curva perlítica se mueve aproximadamente un factor 2 y la curva de bainita se observa con un cambio grande, su velocidad máxima aumenta alrededor de un factor 9 con respecto a la bainita inicial.

Por otro lado, en la figura 25 se tienen diferentes graficas en las que se muestran las curvas del termino sigmoideal iniciales y optimizadas, de estas se observan los cambios que sufren las curvas con la modificación de algunos de los parámetros que constituyen el termino en la ecuación. En la gráfica del inciso a) se muestran las curvas de ferrita, que va de 0 hasta 0.369 (la fracción máxima que puede alcanzar en equilibrio), en la gráfica se observa que la velocidad máxima aumenta, pues la curva optimizada va más arriba que la inicial. Lo contrario sucede en la gráfica del inciso b) para la transformación perlítica, en donde se observa que la curva optimizada está por debajo de la inicial con menor velocidad y por último en c) se visualizan las curvas correspondientes a la transformación bainítica, se observa que la curva optimizada se mueve casi a la mitad de la velocidad de la inicial y esto se atribuye al valor optimizado de  $\epsilon$ . El punto de velocidad máxima se encuentra a una fracción de fase menor que la inicial, además la velocidad decae a una fracción de 0.6 aproximadamente y sigue con una velocidad muy baja hasta llegar a 1.

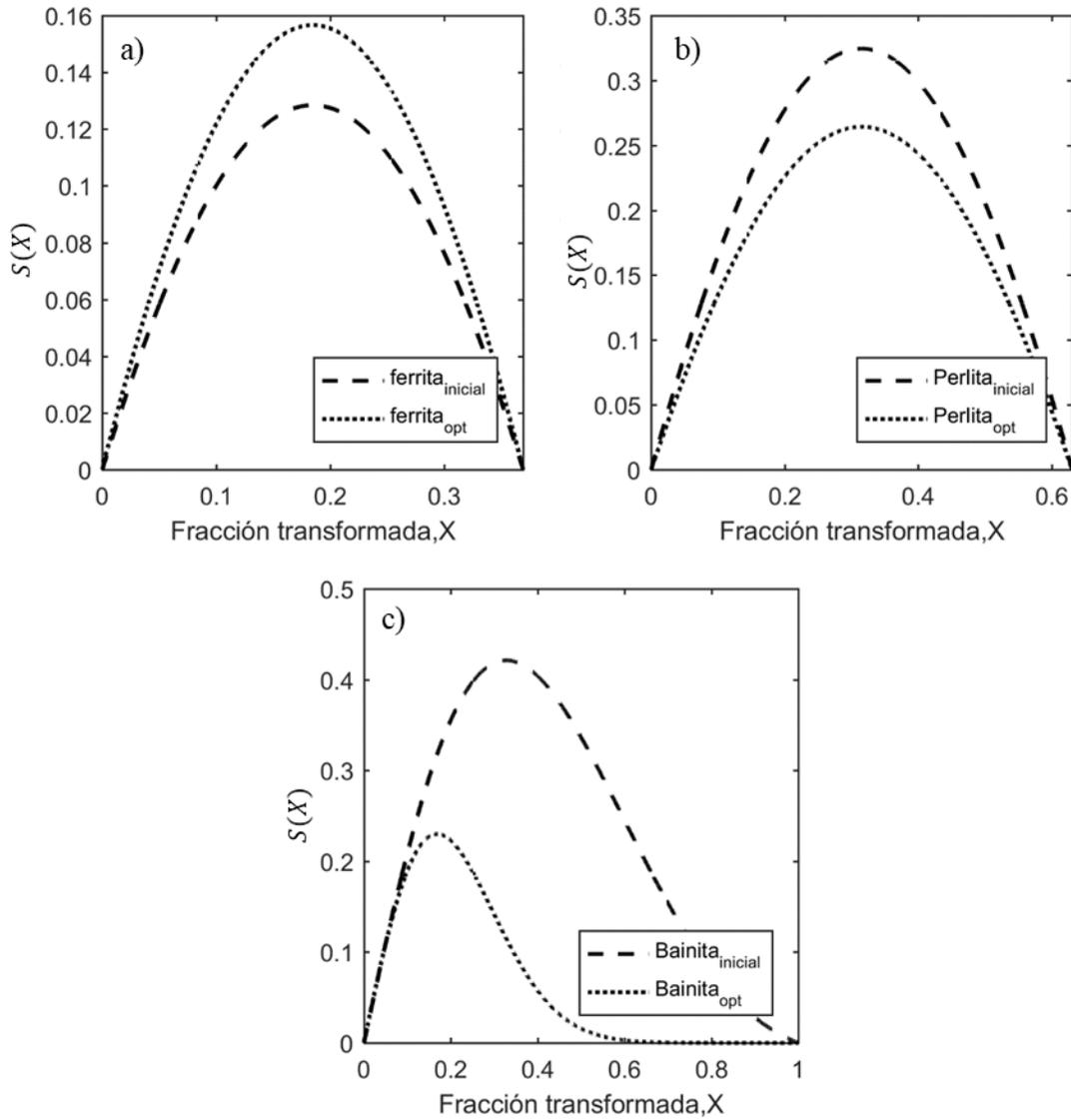


Figura 25. Comparación del termino de efecto sigmoideal entre valores de parámetros óptimos e iniciales.

#### 4.2.2 Influencia de otros coeficientes

En las pruebas realizadas se encontraron diversidades de gráficas que fueron trazadas con diferentes valores de los parámetros, algunos resultados que provocaron interés fueron los diagramas arrojados en pruebas con la curva de inicio de transformación perlítica. Como se ha observa en las curvas del diagrama de referencia y simulado de la figura 26, la curva “C” de perlita se encuentra estrecha del lado de eje de temperaturas, pero la del modelo se observa más ancha.

El grado de transformación que se maneja en la ecuación original para la transformación perlítica es de 3, al trabajar con este valor se obtuvo la curva simulada, la cual representa la transformación desde  $A_1$  hasta temperaturas cercanas de  $B_s$  con la transformación más temprana a 880 K aproximadamente. En cambio en la curva experimental se tiene que la curva “C” es más estrecha con un rango de transformación entre  $A_1$  y a una temperatura alrededor de 860 K, muy por arriba de  $B_s$ , la transformación más temprana es a un tiempo menor que del modelo y a una temperatura más alta (930 K).

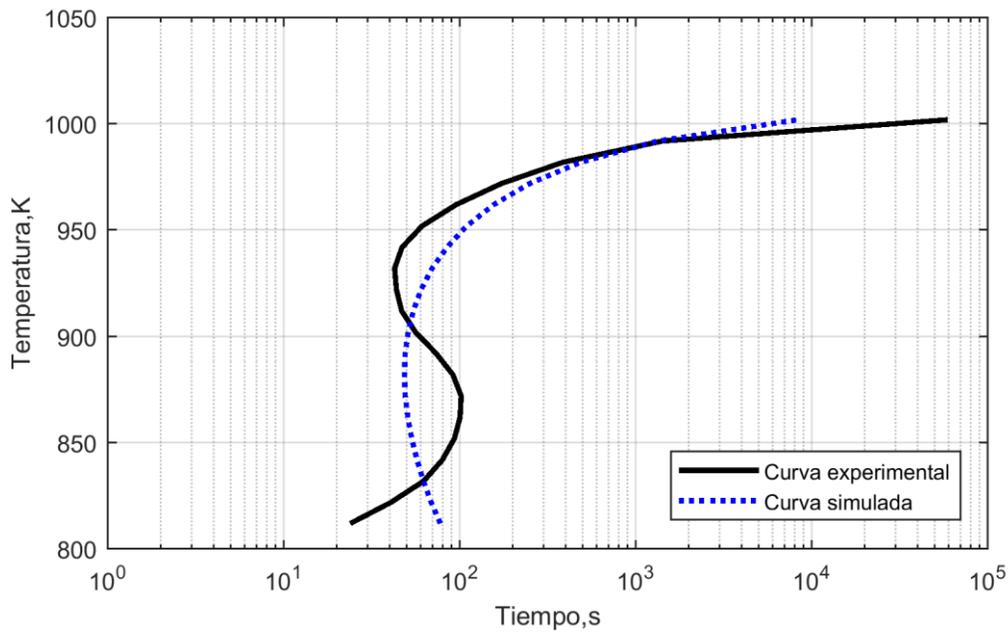


Figura 26. Curvas de inicio transformación perlítica del diagrama experimental y simulado ( $\alpha_2 = 12.98$  y  $\beta_2 = 17917$ ).

En algunas simulaciones realizadas en donde el exponente  $\alpha_2$  (grado de transformación) se mantiene constante con valor de 4 y variando los parámetros  $\alpha_2$  y  $\beta_2$ , se observaron excelentes aproximaciones entre las curvas de inicio de transformación predichas y experimental. Los efectos provocados al incrementar el grado de transformación es que los coeficientes representados por las variables  $\alpha$  y  $\beta$  (se encuentran incluidos los parámetros de tamaño de grano, elementos aleantes y energía de activación) se incrementan en gran medida.

En el diagrama de la figura 27 se observa el diagrama con la curva perlítica más aguda y con excelente aproximación a la experimental. Los coeficientes obtenidos en la optimización correspondientes a la variable  $\alpha_2$  y  $\beta_2$  son 9833878 y 34450.

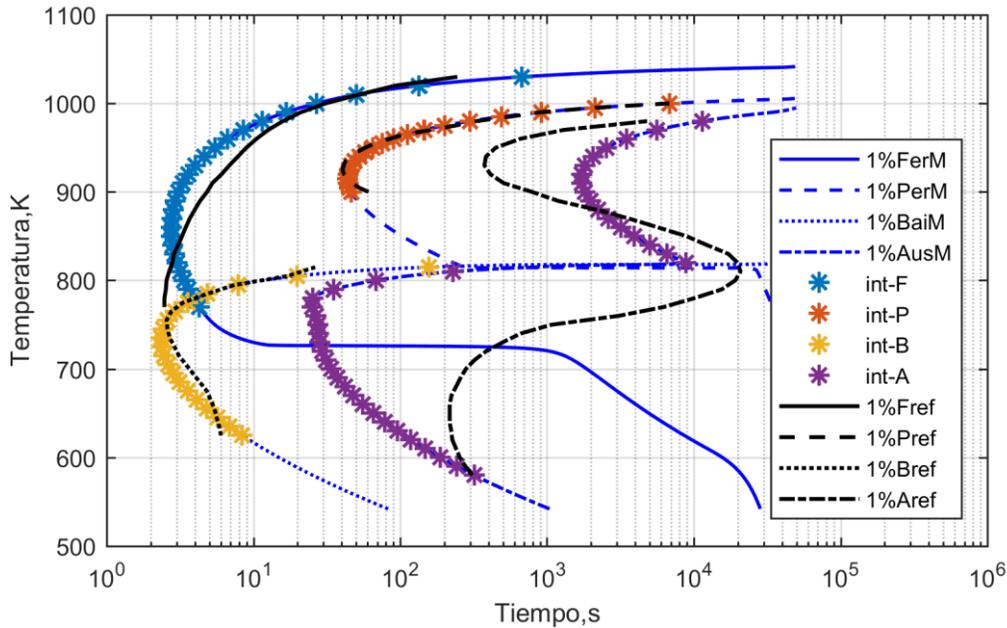


Figura 27. Diagrama TTT obtenido con  $a_2 = 4$ ,  $\alpha_2 = 9833873$  y  $\beta_2 = 34450$  .

### 4.3 Resultados

Los resultados del modelo termo-metalúrgico se pueden visualizar a través de los diagramas contruidos de tiempo-temperatura-transformación y transformación en enfriamiento continuo. Por ello, en esta sección se presenta el diagrama TTT obtenido después de la optimización y el diagrama resultante CCT al haber aplicado las condiciones de temperatura continua al modelo.

#### 4.3.1 Diagrama TTT optimizado

Después la variación de diferentes parámetros en el sistema de ecuaciones acoplados para encontrar un diagrama con buena correspondencia al diagrama experimental, se realizó la selección del mejor resultado entre variedades de diagramas arrojados por la optimización. Tal diagrama corresponde al error más bajo encontrado en el proceso y se muestra en la figura 28.

Del diagrama obtenido se observa que la curva de la transformación ferrítica continúa por debajo de la curva de inicio de transformación de bainita. La ecuación de bainita no tiene aplicabilidad por arriba de  $B_s$ , aún con el acoplamiento a través de la variable de  $X_A$  donde la suma de fracciones es igual a 1, por lo tanto, solo  $X_F$  y  $X_P$  tienen efecto en el término de  $X_A$ . Por debajo de la temperatura crítica de bainita,  $X_B$  empieza a tener efecto y hasta este momento  $X_B$  empieza a influir en  $X_A$ . Sin embargo, como se observan en los diagramas la

fracción de fase ferrítica también tiene influencia, esto es porque el rango de aplicabilidad ese extiende hasta por debajo de  $B_s$ , esto se puede observar en las gráficas de los términos de coeficientes de velocidad (p.ej, figura 24) en los cuales se tiene que la curva de ferrita se mantiene hasta temperatura ambiente. Entonces en la zona de transformación bainítica, se encuentra una mezcla de ferrita y bainita.

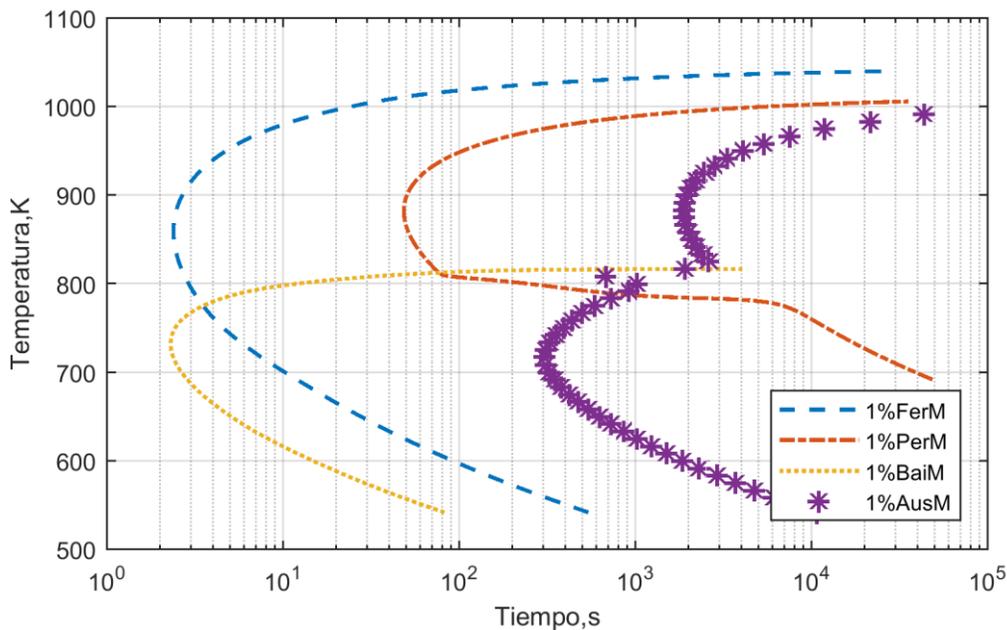


Figura 28. Diagrama Tiempo-Temperatura-Transformación (TTT) del modelo.

En la figura 29 (gráfica superior) se tienen las curvas “S” a una temperatura específica, en la cual se puede interpretar que la velocidad inicial de transformación es baja en los tiempos entre 0 y el 1% de transformación (0.01 de fracción de fase), es la zona en el cual desarrollan los primeros núcleos estables y en los diagramas se tienen el periodo de incubación. En la etapa de crecimiento la velocidad de transformación incrementa cuando aparecen más núcleos y estos empiezan a desarrollarse y crecer (etapa de crecimiento), representado en la curva del 1% - 99% o del 0.01-0.99 de fracción de fase transformada. Llega un momento en el que ya no puede haber crecimiento, debido a que los granos empiezan a chocar unos contra otros y la velocidad de transformación vuelve a disminuir hasta completarse la transformación.

En la figura 29 (gráfica inferior) también se muestran los puntos de transformación que son graficados en el diagrama TTT a la temperatura de 950 K y la ruta o el proceso de transformación que sigue la austenita, ferrita y perlita. En la trayectoria marcada se observa primeramente la formación de la ferrita, una vez alcanzada su transformación parcial entra

en transformación la perlita, esta culmina cuando la austenita se transforma completamente y se encuentra representado con el 1% de austenita remanente.

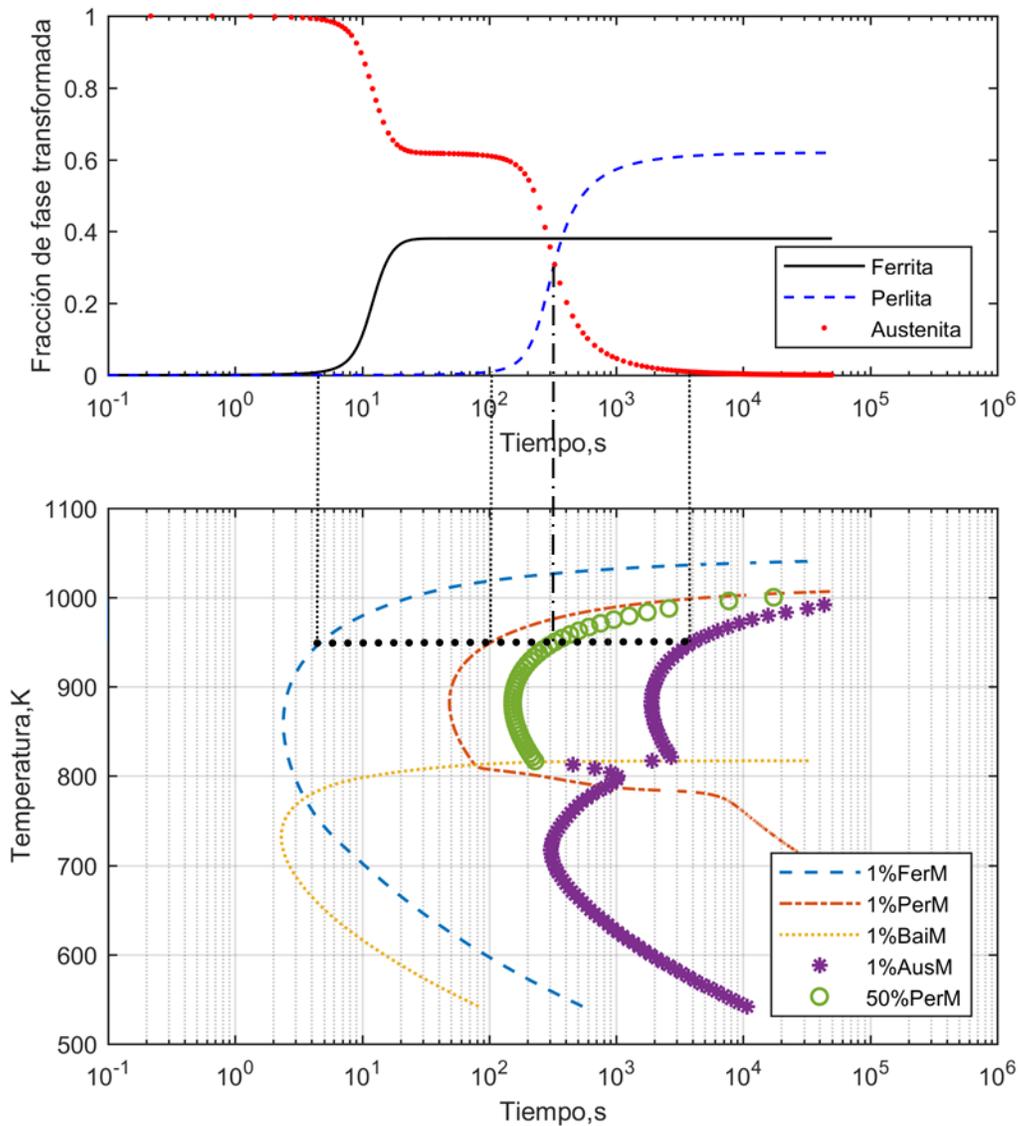


Figura 29. Curvas sigmoideas seguida por la transformación perlítica y su representación en el diagrama TTT.

En los resultados presentados en la figura 28 solo se muestran las curvas de inicio y fin de transformación, sin embargo, en el modelo pueden reproducirse curvas a cualquier porcentaje de transformación con la misma metodología utilizada para encontrar el 1 y 99 %. Como ejemplo en la figura 29 se muestra la curva que representa el 50% de transformación de la fase perlita. En la curva sigmoideal ese 50% representa un punto en donde la velocidad de transformación es alta y su valor es de 0.31 de fracción de fase, debido a que la perlita solo llega al 0.62 de transformación.

### 4.3.2 Predicción de transformaciones en enfriamiento continuo

Una vez aplicada la función de temperatura se realizó la simulación de las velocidades de transformación en enfriamiento continuo. Por lo tanto, para la construcción del diagrama CCT se tiene que, para cada perfil de temperatura, inicialmente, se encontró el tiempo de inicio de transformación y a tal tiempo le correspondió una temperatura. De esta forma el diagrama fue construido, graficando de la misma manera que en el diagrama TTT el inicio de la transformación de ferrita, perlita, bainita y la curva que representa la transformación al 99% de austenita. En la figura 30 se muestra el diagrama CCT obtenido mediante el modelo termo-metalúrgico.

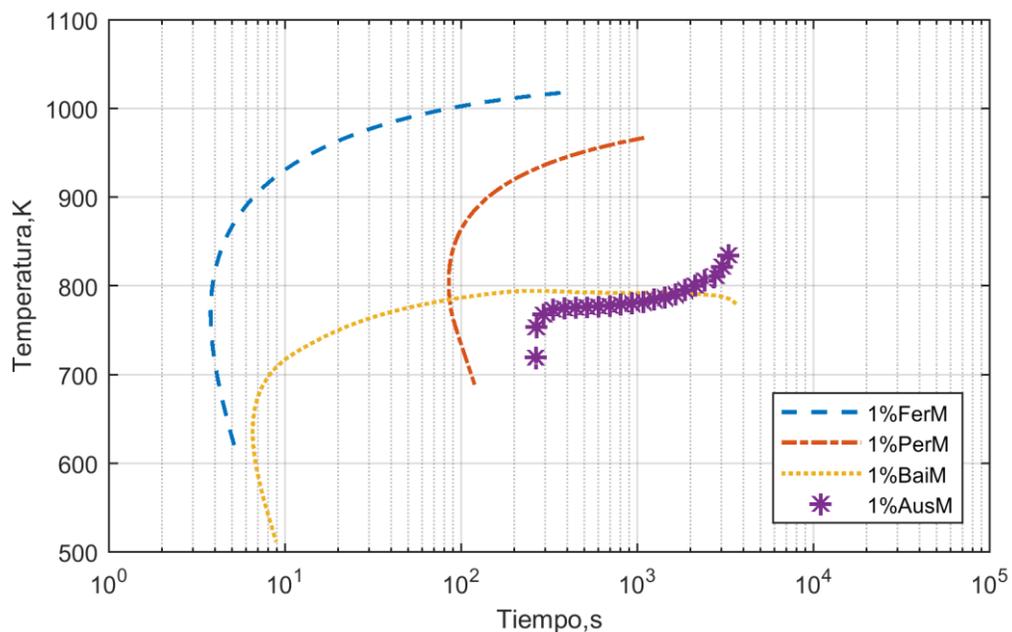


Figura 30. Diagrama de Transformación en enfriamiento continuo (CCT) del modelo.

En el diagrama CCT anterior se muestran 4 curvas que corresponden al inicio de cada tipo de transformación, se denota 1%FerM al 1% de transformación ferrítica, 1%PerM la curva perlítica, 1%BaiM al inicio de transformación bainítica y la curva 1%AusM representa el 1% de fase austenita remanente.

El diagrama se construyó con diferentes velocidades de enfriamiento, la velocidad de enfriamiento en el modelo se puede controlar con la función de temperatura que cambia con el tiempo, pero experimentalmente este puede controlarse modificando el medio de enfriamiento. En la figura 31 se muestra algunos perfiles de enfriamiento superpuestos sobre el diagrama, en ella se marca la trayectoria de transformación para cada curva.

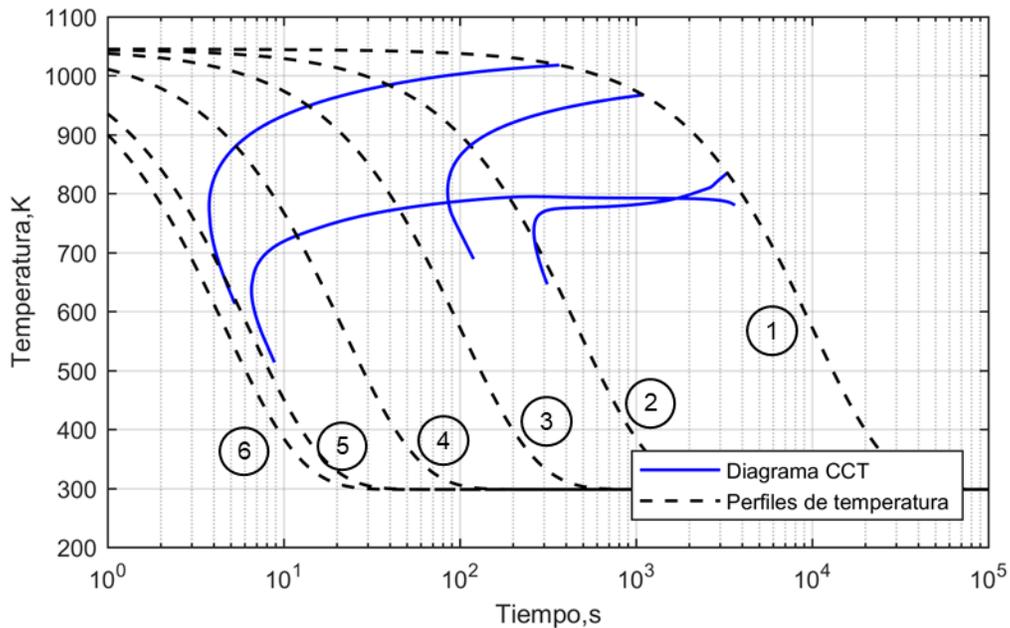


Figura 31. Perfiles de enfriamiento en el diagrama CCT

Las transformaciones comienzan al tiempo en que el perfil cruza por el 1% representado el inicio de la reacción, se desarrolla la nueva fase y termina cuando cruza la curva final y se puede obtener diferentes microestructuras con cada curva de enfriamiento.

En enfriamiento continuo existe una velocidad de enfriamiento crítica, que representa la velocidad a la que se puede transformar una fase difusional, esta velocidad también representa la velocidad mínima en la que se puede convertir la fase austenita en martensita (perfil 5 en la figura 31). Esta velocidad de enfriamiento toca la nariz de la curva que corresponde al inicio de la transformación bainítica como se muestra en la figura 31. Entonces, es de esperarse que a mayores velocidades que la velocidad crítica representado por el perfil de enfriamiento 6 se formará una microestructura totalmente martensítica. Se sabe que los elementos aleantes y el carbono modifican la forma de las curvas de transformación, alargando el tiempo para que suceda una transformación de fase, haciendo que la velocidad crítica de enfriamiento disminuya.

#### 4.4 Validación del modelo termo-metalúrgico

La validación del modelo termo-metalúrgico consiste en la comparación de los diagramas construidos con diagramas experimentales de literatura. Los resultados de los modelos microestructurales de una gran variedad de trabajos en literatura se han comparado con diagramas experimentales tomadas del atlas ASM de diagramas de transformaciones isotérmicas y transformaciones en enfriamiento [2,107]. De la misma manera en este trabajo

se compara el diagrama TTT y CCT con diagramas de transformación isotérmica y en enfriamiento continuo para un acero aleado Cromo-Molibdeno AISI 4140 [38]. En la figura 32 se muestran los diagramas TTT Y CCT experimental del acero estudiado, en ella se observan dos tipos de líneas sólidas, las líneas delgadas pertenecen al diagrama TTT y las líneas gruesas remarcadas corresponden al diagrama CCT.

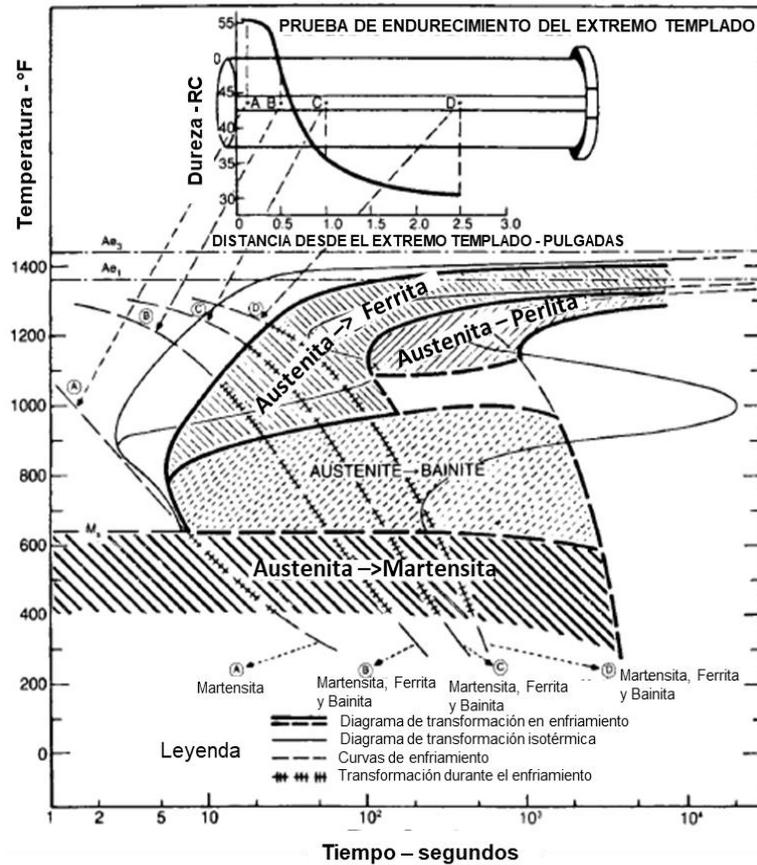


Figura 32. Diagrama Experimental. Prueba de endurecimiento del extremo templado del acero AISI 4140 [38].

En la figura 32 también se visualizan diferentes curvas de enfriamiento y para cada perfil se encuentra marcado la ruta de transformación que sigue dependiendo de la velocidad de enfriamiento.

Teniendo los diagramas experimentales se procedió a hacer la comparación con las curvas del modelo y se tienen las figuras 33 y 34 en donde se grafican los diagramas para los dos casos, TTT y CCT respectivamente. Las curvas resultantes del modelo han sido adaptadas y modificadas con el objetivo de observar claramente los dos diagramas.

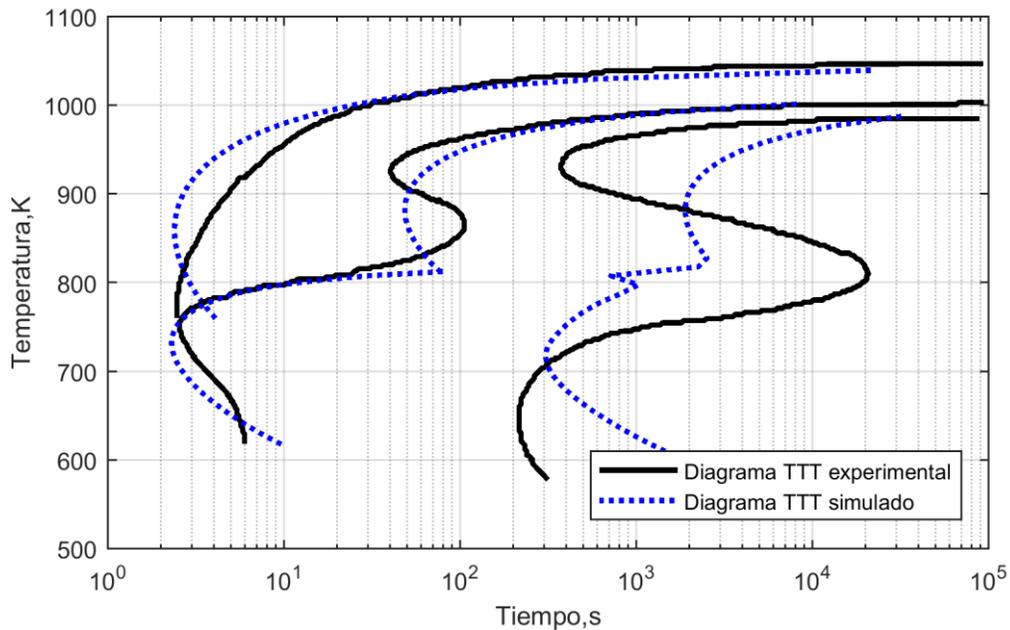


Figura 33. Diagrama TTT del modelo.

En la figura 33 se observan las curvas de inicio de transformación de ferrita y perlita con buen ajuste con la experimental, ya que mantienen una desviación de 0.227 en escala logarítmica que corresponde un factor de error de 1.686. En la curva de bainita se mejora la aproximación con una desviación de 0.136 que corresponde a un factor de error de 1.36 y con relación a la curva de transformación total de la austenita (99% de transformación) se observa que su correspondencia es menor que las otras fases teniendo una desviación de 0.81 en escala logarítmica correspondiente a un factor de error de 6.57, pero se observan buenas tendencias.

En la figura 34 se tienen las curvas de transformación en enfriamiento continuo, se encuentra que las curvas de inicio de transformación de ferrita, perlita y bainita tienen muy buena aproximación con una precisión similar a lo obtenido en las curvas correspondientes del TTT, sin embargo, la curva de transformación total se desplaza hacia la izquierda hacia el eje de las ordenadas. Esta es la curva que se encuentra más alejada de las curvas experimentales y se debe principalmente por la desviación de la curva simulada en el diagrama TTT. En el caso del diagrama TTT influyeron los valores de los parámetros que fueron variados en la optimización ( $\alpha, \beta, \gamma$ ), al modificarse estos para mejorar la predicción de las curvas de inicio de transformación de ferrita, perlita y bainita hacían que la curva del 1% de austenita se moviera considerablemente. El término de incubación agregado también influye, puesto que solo depende de la fracción de fase transformada y además que la función se encuentra dentro de la ecuación de velocidad de crecimiento, es decir no es independiente.

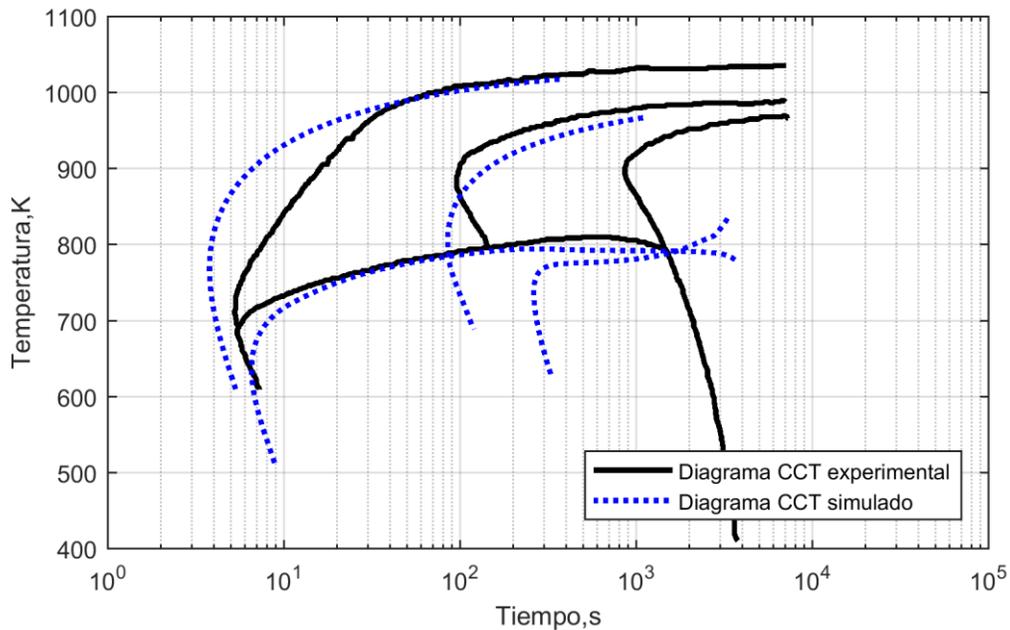


Figura 34. Diagrama Tiempo-Temperatura-Transformación del modelo.

Como resultado se presenta también una gráfica en la cual se superponen dos conjuntos de curvas, un conjunto pertenece al diagrama TTT y el otro al diagrama CCT, esto con el objetivo de observar el movimiento de las curvas cuando se trabaja en enfriamiento continuo con respecto a la transformación en estado isotérmico y al mismo tiempo compararlas con los diagramas experimentales de la figura 32.

Comúnmente en los diagramas TTT se puede observar que las curvas de inicio de transformación para la ferrita y perlita son asintóticas a  $A_3$  y a  $A_1$  respectivamente, lo cual significa que no pueden formarse a temperaturas cercanas a esos puntos a menos que se mantengan durante un largo tiempo isotérmicamente. Entonces, se tiene que las curvas de inicio y final de transformación de la perlita y ferrita se encuentran en tiempos de transformación muy largos conforme se acercan a las líneas críticas y los tiempos son más cortos conforme la temperatura decrece. Esto se puede apreciar en la figura 35 en donde se grafican los diagramas TTT y CCT.

En la figura 35 se observa el desplazamiento de las curvas cuando la pieza se trabaja en enfriamiento continuo en relación al tratamiento a temperatura constante, esto se debe a que los tiempos requeridos para la transformación se alarga, esto aplica para el tiempo de inicio y final de transformación. Como se observa el diagrama TTT se mueve en dirección en la que necesita menos tiempo, pero más temperatura para transformación y lo contrario para el diagrama CCT, ya que se necesita más tiempo, pero temperaturas más bajas.

Una manera de mejorar la comparación de las curvas entre experimentales y predichas es con la figura 36 en donde se muestran los 2 conjuntos de diagramas experimentales y 2 grupos predichos con el modelo, para transformaciones en estado isotérmico y en enfriamiento continuo respectivamente.

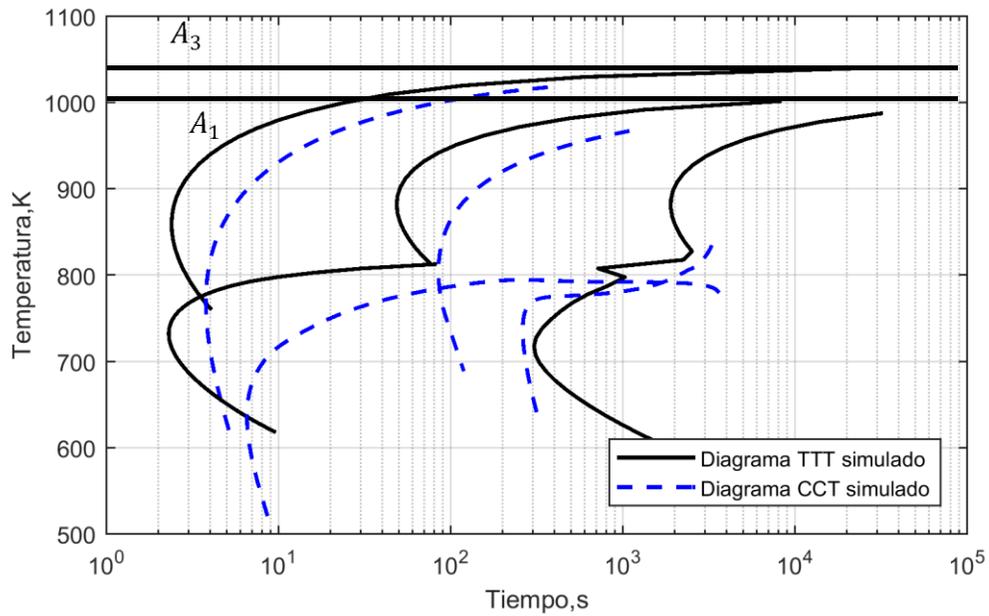


Figura 35. Diagrama TTT y CCT modelado para el acero AISI 4140.

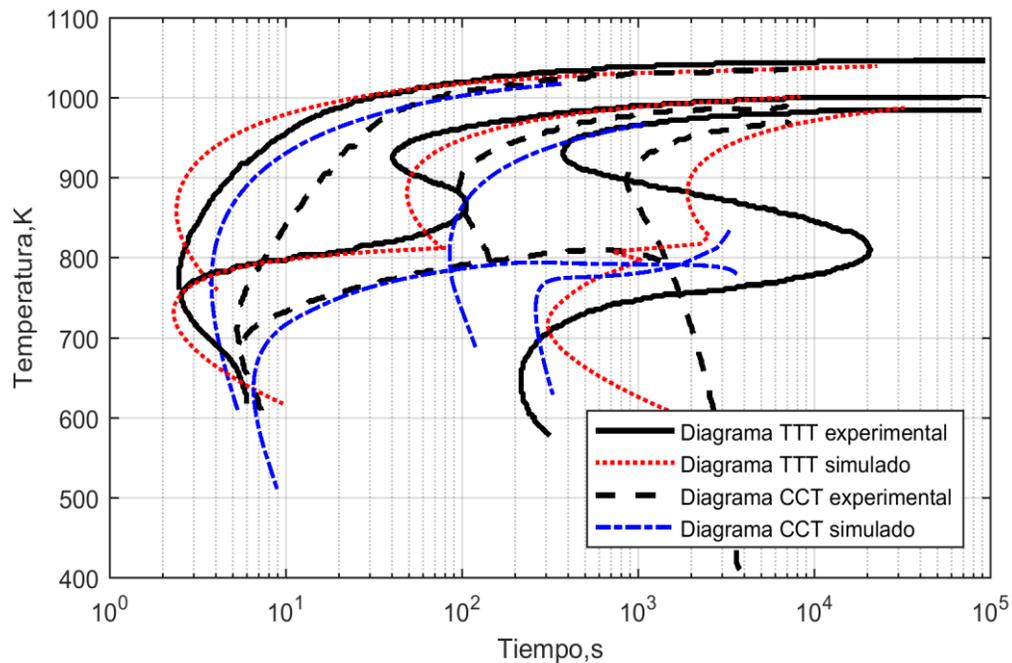


Figura 36. Comparación de diagramas experimentales y modelados.

Con la figura 36 se demuestra que haber cambiado las ecuaciones y haber realizado las optimizaciones fue una buena alternativa, puesto que permitió una mejor predicción en las curvas de transformación. La curva de 1% de austenita no se ajustó adecuadamente con el diagrama experimental, pero la forma corresponde apropiadamente con las construidas en trabajos de literatura.

En un trabajo de Buchmayr y Kirkaldy [82] se construyó el diagrama TTT con un modelo computacional para el acero 4140, tales curvas se observan similares a las encontradas en este trabajo. En otro trabajo de Kim [107] se construyen varios diagramas tomando las ecuaciones del modelo de Kirkaldy, se reportó que los diagramas mejor predichos corresponden a los aceros al carbono, pero en el caso de los aceros aleados en base cromo-molibdeno como el AISI 4140 y 4130 se encuentran pronunciadamente desplazados con respecto a los diagramas experimentales, en los análisis de resultados reportan que dichos desajustes se presentan por las suposiciones consideradas en el modelo de Kirkaldy, principalmente por tres puntos, en el cual se menciona una nucleación única independiente de la temperatura, las desviaciones de bainita se atribuyen al término de crecimiento que no funciona apropiadamente y la falta de consideración de la bainita superior e inferior. Se utilizó un factor de corrección para ajustar las curvas de inicio de transformación, principalmente la de los aceros aleados. En la investigación de simulación computacional realizada por Babu y Prasanna Kumar [2] también se construyeron diagramas para el acero AISI 4140, en el cual se realiza una comparación de los diagramas predichos para procesos de templado en agua y enfriamiento en aire con el modelo de Kirkaldy, el modelo modificado de Li et al. [62] y el diagrama experimental publicado en el Atlas de diagramas TTT. En todas las predicciones de los diagramas se observa que las curvas mantienen la misma configuración y la información extraída es utilizada para después calcular la dureza resultante o para calcular esfuerzos y deformaciones en un modelo mecánico.

#### **4.5 Limitaciones del modelo termo-metalúrgico**

Con el modelo termo-metalúrgico se ha logrado predecir las transformaciones de fase, en base a la descomposición isotérmica y en enfriamiento continuo de la austenita. En el trabajo se realizó un buen análisis con las ecuaciones que representan los dos tipos de transformaciones, no obstante, el modelo tiene limitaciones. Las limitaciones se centran en la aplicabilidad, debido a que sólo se realizó el estudio para un tipo de acero, aunque se sabe de literatura que las ecuaciones originales pueden ser aplicadas para aceros de baja aleación. Por lo tanto, es de suponerse que si el modelo se aplica a otro tipo de acero dentro del rango de baja aleación se encontrarían resultados aceptables. Para el caso del material estudiado fue realizado una optimización de parámetros para mejorar la predicción porque al

compararla con la experimental la falta de correspondencia era considerable. Pero se sabe por las investigaciones de literatura que principalmente el acero estudiado es una de las aleaciones con las que se tiene mayor error en la predicción.

Otra de las limitaciones del modelo reside en la predicción los tipos de transformaciones que se presentan en el material tratado, ya que la transformación martensítica no se encuentra contemplada en el modelo.

#### **4.6 Discusión**

Es importante discutir los diferentes aspectos del proyecto de tesis. Los puntos interesantes para explicar son, por qué utilizar las ecuaciones de Kirkaldy, los errores que se presentan principalmente con la curva bainítica en la predicción, el término de incubación agregado a las ecuaciones parametrizadas, el tamaño de grano austenítico constante, esencialmente manifestar como afectan las suposiciones tomadas a la predicción y el significado de los resultados antes y después de realizar el proceso de optimización.

Dado que la investigación se centra en predecir transformaciones de fases en aceros con un enfoque en la mejora de modelos termo-mecánicos en el trabajo se presentó un modelo termo-metalúrgico que predice las transformaciones de fase difusionales, isotérmicamente y en enfriamiento continuo en un acero de baja aleación AISI 4140. El proyecto es la base para realizar una combinación entre tres diferentes físicas: térmica, mecánica y metalurgia. Esto con el objetivo de realizar estudios en procesos de recubrimientos asistido por láser, debido a la necesidad de optimizar ciertas condiciones para mejorar la técnica. Para esto se modelan las diferentes físicas realizando modelos termo-cinéticos o metalúrgicos y modelos termo-mecánicos. Con el modelo termo-cinético interesa predecir una microestructura lejana a la del equilibrio, puesto que estos procesos involucran enfriamientos muy rápidos, en cambio, con los modelos termo-mecánicos se busca predecir esfuerzos residuales y deformaciones. El dilema entre los modelos termo-mecánicos es que, sí pueden predecir los esfuerzos residuales en la pieza terminada tomando en cuenta las propiedades del material solo en función de la temperatura, esto significa que las transformaciones son consideradas como en los procesos en equilibrio. Por lo tanto, la importancia tecnológica de las investigaciones radica en tomar en cuenta esos estados meta-estables para poder mejorar las predicciones de esfuerzos residuales considerando las transformaciones de fases lo más cercanamente.

Para llevar a cabo un modelo termo-metalúrgico es de gran interés investigar la influencia del tiempo en las transformaciones de fases, esto significa estudiar la cinética de transformaciones de fases para la predicción de la fracción de fase transformada. Para la predicción de las velocidades de transformación inicialmente fue representada con el

conjunto de ecuaciones del modelo de Kirkaldy, se eligió este modelo porque tiene la ventaja de que el diagrama TTT puede ser calculado usando sólo información de composición química y tamaño de grano austenítico. Además, puede ser aplicado en la predicción de variedades de aceros al carbono, de baja aleación y actualmente ha sido modificado para aceros altamente aleados. La elección del modelo particularmente el original de Kirkaldy se debe a que son ecuaciones generalizadas que permiten una mejor comprensión física de la descomposición de austenita en los otros productos a través del estudio de los términos y variables que componen cada ecuación.

Elegir tal modelo implicó lidiar con los errores de predicción de las ecuaciones, con la información incompleta y la metodología ambigua para el acoplamiento del conjunto de ecuaciones individuales que representan la transformación ferrítica, perlítica y bainítica. A pesar de que en variedad de trabajos sobre modelado de transformaciones se reporta sobre la simulación de la formación de los constituyentes, existen incertidumbres entorno. Lo anterior, debido al desacuerdo entre las curvas que se presentaron una vez teniendo los resultados y comparando con los diagramas experimentales, la falta de correspondencia que se reportan han sido manipulados, se ha modificado de alguna manera las ecuaciones o agregado algún factor de corrección para obtener buenas aproximaciones.

En el presente trabajo también se hicieron modificaciones, parametrizaciones y optimizaciones para poder simular las transformaciones de fase a partir de las ecuaciones del modelo de Kirkaldy, todos estos puntos fueron mencionados en el capítulo 3. Las adaptaciones de las ecuaciones fueron necesarias, pues en el análisis de sus términos se pudo observar que todas van a la fracción transformada igual a 1, lo cual no es del todo cierto. Tratándose de un acero hipoeutectoide como el del trabajo; en estado isotérmico se puede tener ferrita proeutectoide que no se transforma completamente, una mezcla de ferrita-perlita, y solamente la bainita puede completar su transformación hasta llegar a la unidad. En el caso de enfriamiento continuo puede haber hasta una mezcla de tres fases para tener una transformación del 100%. Sumándole a lo anterior las complicaciones que se presentaron al tratar de simularlas, debido a que el programa COMSOL Multiphysics que se basa en la resolución de ecuaciones diferenciales encontró ciertos errores numéricos. Las discontinuidades presentes al evaluar la derivada de la fracción de fase con respecto al tiempo en los puntos cercanos a 0 y 1 en la curva del término sigmoide fueron la principal razón para modificar las expresiones. En la metodología se demostró que la nueva expresión es continua y derivable, por lo tanto, se pudo eliminar puntos de inconsistencias en la simulación.

En el análisis de ecuaciones se encontró algo importante. Las ecuaciones del modelo de Kirkaldy solo representan un proceso de crecimiento, entonces cuando  $t=0$ ,  $X=0$  y conforme incrementa el tiempo aún sigue el crecimiento. Esto fue observado en las primeras pruebas, donde las curvas del inicio de transformación se recorrieron muy cercanas al eje de las ordenadas. Se pudo entender que el término de incubación propuesto en el modelo de Kirkaldy se basa en el cálculo de la zona de crecimiento entre 0 y 1% de transformación, pues considera que la incubación es una etapa de crecimiento lento. Tal suposición puede ser aplicado a la predicción de los aceros al carbono situados más próximos al eje y, sin embargo, con los aceros aleados que necesitan más tiempo para su transformación se incumple el supuesto.

Las desviaciones fueron corregidas con la implementación del término de incubación propuesto, el cual contiene un coeficiente que multiplica a un factor exponencial, dentro de la exponencial se encuentra la variable de fracción de fase, ya sea  $X_F$ ,  $X_P$  o  $X_B$ , esto significa que la velocidad de nucleación depende de la fracción de fase transformada. El término utilizado no se trata como un modelo de nucleación, sólo es una función que se agregó porque la velocidad de transformación en las ecuaciones de Kirkaldy es cero cuando la fracción de fase es 0. Fue esencial agregar el término para dar inicio a la transformación, ya que para poder arrancar el término de crecimiento es necesario tener granos iniciales como punto de partida. Su importancia también se basa en que las formas de las curvas pueden ser modificadas variando la magnitud del término como se pudo observar en el análisis de coeficientes antes de realizar la optimización.

Con los resultados obtenidos antes del proceso de optimización se confirma que la curva de la reacción bainítica es la que influyó mayormente por su gran desfaseamiento con respecto a la curva del diagrama experimental. El término Z definido por la ecuación 14 del capítulo 2, el cual describe la transformación lenta de bainita no es suficiente para predecir exitosamente la transformación y esto lo comprueban los trabajos que se han realizado recientemente, en el cual se utilizan las ecuaciones de Kirkaldy para la predicción de transformaciones. Las discontinuidades que se presentan con el modelo de Kirkaldy fueron contemplados y reportados como una posibilidad por los mismos autores, considerando que se derivaban a causa de las suposiciones en el modelo. En una de las primeras investigaciones sobre la predicción de las curvas, Puls y Kirkaldy [80] reportaron que los desajustes se atribuyen a la forma en que se toma en cuenta la nucleación y el crecimiento, se manifiesta que es una forma cruda o burda. En el mismo trabajo se aclara también sobre la posibilidad de considerar un proceso parecido al de JMAK, no obstante, tales consideraciones podrían no ser significativas desde el punto de vista tecnológico.

Con respecto a lo anterior, por un lado, es cierto que, si se quiere predecir con mejor precisión será necesario tener en cuenta datos experimentales y considerar las dos etapas individualmente. Debido a que, los procesos de nucleación y crecimiento son diferentes, ambos son afectados de distinta forma por la temperatura y el tiempo. Por otro lado, si se requiere solo una predicción aproximada, es posible realizarlo con ecuaciones parecidas a las de Kirkaldy, haciendo modificaciones a los coeficientes o agregando términos que no dependan de información empírica.

Sobre la influencia de las suposiciones y los datos descartados en el modelo para la predicción de las curvas se tiene que:

En relación a la influencia del tamaño de grano, en el modelo se tomó como un valor constante, pues no se trata de predecir o monitorear los tamaños de granos, el enfoque se centra más en la cantidad de fases y la rapidez en las transformaciones. Sin embargo, por lo encontrado en literatura este concepto podría haber influido en la posición de la curva antes de la optimización, puesto que las temperaturas críticas puede variar con el tamaño de grano. Después de realizar la optimización de parámetros el concepto de tamaño de grano se perdió ya que todas las variables se integraron en coeficientes específicos para ser ajustados, entonces ya no fue necesario tomarlo en cuenta para la predicción.

El otro punto que pudo afectar en la predicción de las transformaciones fue el acoplamiento de las ecuaciones. Como se observó en los resultados, la curva de ferrita todavía sigue por debajo de la temperatura de inicio de transformación bainítica, es decir sigue su transformación. En el modelo no hay un límite para que la curva de transformación de la ferrita se frene y se le da libertad para seguir hasta temperaturas por debajo del punto de Bs, entonces existe una transición incorrecta entre las dos fases (ferrita y bainita). En la zona donde solo debería existir bainita hasta la fracción unitaria se tiene una mezcla de ferrita y bainita, como hay formación de ferrita casi simultáneamente que bainita, la austenita se termina antes. En el diagrama TTT se encontraron los coeficientes para tener buena correspondencia al 1 % de austenita, sin embargo, en los resultados en enfriamiento continuo se muestra que la curva se retrasa (a tiempos más cortos) comparado con el diagrama experimental. Se infiere que esa transición es el factor más influyente de los tiempos más cortos en la curva del 1% de austenita en el diagrama CCT.

Como comentado anteriormente se observan muy buenas aproximaciones entre las curvas de inicio de transformación de ferrita, perlita y bainita en el diagrama TTT. Comparando la curva de transformación total de la austenita con los encontrados en literatura se observa excelente correspondencia, pero con respecto al diagrama experimental todavía se visualizan

algunas zonas de separación, específicamente la curva de transformación completa. Se concuerda con lo reportado que los errores proceden de la predicción de transformación bainítica (diferencia entre bainita superior e inferior), también el concepto de nucleación tiene influencia considerable, dado que se necesita más bases teóricas para mejorar su predicción. En el caso del material con el que se trabajó, hay que estudiar profundamente las transiciones de una fase a otra, ya que son puntos que incrementan la falta de aproximación.

Es necesario poner atención a la zona debajo de Bs, pues se podría mejorar o suavizar la transición entre ferrita y bainita, además sería interesante estudiar la formación de los dos tipos de bainita (superior e inferior) si se necesita mayor aproximación de las curvas modeladas a las experimentales. En el caso de la bainita inferior se sabe que a los rangos de temperaturas de transformación, la difusión del carbono se hace más lenta, por ello en el diagrama experimental las curvas de transformación de inicio y final de la transformación bainítica se encuentran diferenciadas en dos zonas. En la zona de bainita superior las curvas se encuentran más cerradas entre el inicio y final, en el caso de la zona de bainita inferior encuentran con más espacio entre ellas. La transformación de la bainita superior se realiza a velocidad rápida con respecto a las bainita inferior en donde se tiene una velocidad más lenta de transformación, por lo que la curva final se mueve más a la derecha. También se sabe de literatura que este efecto de desplazamiento de las curvas lo ocasiona la presencia de elementos aleantes sustitucionales que retardan el crecimiento a tiempos más largos.

Sobre los resultados reportados en pruebas de la curva de inicio de transformación perlítica sería interesante darle una interpretación física a los valores encontrados, en el caso de  $\alpha$  se podrían compensar las cantidades en los coeficientes de elementos aleantes, pero los valores se incrementarían grandemente, ya que la razón de cambio del valor optimizado con respecto a la inicial es enorme. Con respecto al término  $\beta$  su valor modificado se elevó aproximadamente un factor 2 del valor inicial, sin embargo no es un cambio tan extremo.

La información encontrada con el proceso de optimización es relevante, pues en muchos trabajos se han construido modelos matemáticos a través de ingeniería inversa, encontrando valores para ajustar los resultados a la experimental y regresando a las variables iniciales para distribuir la información en diferentes coeficientes. Un ejemplo de la importancia del proceso de optimización se encuentra en un proyecto de optimización realizada por S. Lee y Y. Lee [101], en el cual se optimiza las ecuaciones cinéticas para transformaciones difusivas en calentamiento y en enfriamiento para transformaciones con difusión y sin difusión para un acero AISI 5120. Un punto de discusión con relación al trabajo reportado es que las ecuaciones son parecidas a los encontrados en esta investigación y la función que representa la velocidad de austenización no difiere de las demás. Entonces, las ecuaciones optimizadas

también pueden ser utilizadas para predecir las transformaciones de las fases iniciales a austenita en el proceso de calentamiento.

## CONCLUSIONES

En este apartado se presentan las conclusiones a las que se llegó con respecto a los resultados obtenidos en este trabajo y también se incluyen algunas recomendaciones de trabajo a futuro.

### Conclusiones del trabajo

Con el modelo termo-metalúrgico se logró construir el diagrama de transformación isotérmico y en enfriamiento continuo para un acero AISI 4140, con las que se pueden calcular las velocidades de transformación a diferentes temperaturas y, por ende, las cantidades de cada fase presentes en cada instante. Las ecuaciones utilizadas para simular las velocidades de transformación están basadas en el modelo de Kirkaldy, son ecuaciones parametrizadas, con las que se permite identificar cuáles son las variables que influyen en la obtención de un resultado cada vez más próximo al experimental. Además, las ecuaciones propuestas implican expresiones modificadas con funciones continuas y derivables que son una mejor opción para simular transformaciones de fases para aceros en programas de elemento finito como COMSOL Multiphysics que utiliza ecuaciones diferenciales parciales para representar los diferentes fenómenos.

En el análisis de las ecuaciones se encontró que las ecuaciones diferenciales derivadas de las ecuaciones integrales originales de Kirkaldy solo comprenden la etapa de crecimiento, pues considera que la etapa incubación comprende del valor 0 hasta el 1% del término de crecimiento que es donde existe la velocidad más lenta. Al aplicar la formulación diferencial, no hay inicio de la transformación cuando la fase inicial es 0, dado que la velocidad de crecimiento es 0. Por estas razones se agregó un término que representa la etapa de incubación que inicia la transformación. El término agregado es necesario para poder comenzar la etapa de crecimiento obtenido del modelo de Kirkaldy. Se concluye que la función agregada es indispensable en las ecuaciones, pues representa el tiempo de incubación que puede considerarse de una forma parcial parte de la etapa de nucleación en el proceso. En el presente trabajo, el término de incubación se tomó en cuenta dentro de la misma función de crecimiento, pero al analizar los resultados, se considera que puede ser mejor trabajarlo de forma individual, es decir independiente del proceso de crecimiento.

La optimización de los coeficientes de los términos en las ecuaciones parametrizadas permitió mejorar la correspondencia entre el diagrama simulado y experimental, comparando las curvas de inicio de transformación de ferrita, perlita y bainita. Además, contribuyó encontrar otros resultados, como el caso de los coeficientes con los cuales se obtiene una excelente aproximación a la experimental de la curva de inicio de transformación de perlita,

al elevar el exponente del factor de subenfriamiento ( $\Delta T$ ) de 3 a 4. En general, con los coeficientes obtenidos es posible explorar y obtener, por ingeniería inversa, información relevante, que posteriormente se pueden relacionar con valores teóricos derivados a partir de fenómenos físicos bajo ciertas suposiciones, donde por ejemplo existen actualmente bases teóricas para suponer que el exponente mencionado anteriormente debería tener el valor de 2 o 3 para transformaciones con difusión volumétricos y difusión superficial respectivamente. Con el proceso de optimización se puede encontrar coeficientes de cada material, siempre y cuando se disponga de información del diagrama TTT o en otro caso que se calculen los coeficientes con las ecuaciones de Kirkaldy y este sea el punto de partida para general el diagrama TTT y después el diagrama CCT.

Con los resultados obtenidos se tiene una base para analizar las transformaciones de fase en un proceso térmico y se considera que puede ser aplicable para un proceso de calentamiento y enfriamiento rápido como ocurre en el proceso de recubrimiento asistido por láser. Esto servirá de guía para después estudiar los efectos que tienen las transformaciones de fases en la física termo-mecánica y así predecir las propiedades mecánicas y esfuerzos residuales para evitar el agrietamiento de piezas tratadas con el proceso de recubrimiento mediante láser.

Se considera también que con los resultados obtenidos en este trabajo se tiene una aproximación más al complejo mundo de la modelación de las curvas para la construcción de diagramas TTT y CCT.

Se concluye que las desviaciones entre las curvas TTT simuladas y experimental se deben principalmente a que no se toman en cuenta las dos zonas bainíticas (superior e inferior), a la diferencia del rango de transformación perlítica y al termino de nucleación que sólo está definida en función de la fracción de fase y no tiene un factor propio de velocidad de transformación que sea dependiente de la temperatura.

Las desviaciones entre las curvas CCT se deben los en el diagrama isotérmico, ya que, en las curvas de inicio de transformación de ferrita, perlita y bainita se encontró buena aproximación.

### **Trabajo a futuro**

Para poder desarrollar un modelo metalo-termo-mecánico, se debe primeramente concluir el modelo termo-cinético. Para esto se proponen los siguientes puntos:

- Mejorar la transición entre ferrita y bainita para tener solo una transformación por debajo de Bs. Esto se puede lograr haciendo que la misma ecuación de ferrita sea la que represente la transformación de bainita, dado que en el modelo actual las dos

transformaciones ocurren simultáneamente por debajo de  $B_s$ . Otra opción puede ser poniendo una condición para frenar la transformación de ferrita en el punto de transición con la bainita.

- Agregar la transformación martensítica, la cual es un proceso dependiente solo de la temperatura y puede utilizarse el modelo de Lee et al. [90] para calcular la  $M_s$  y las fracciones de martensita formada con la ecuación formulada.
- Tomar en cuenta el tamaño de grano austenítico, puesto que para los procesos que involucran calentamiento y enfriamiento rápidos influyen significativamente en las temperaturas de transformación, sería muy útil incluir este fenómeno utilizando de igual manera una de las ecuaciones mencionadas en el estado del arte.
- Simular el proceso de austenitización, esto es posible tomando la misma forma de las ecuaciones de transformación, pero con signo opuesto, discriminando entre la formación de las diferentes fases cuando el signo es positivo y la descomposición de la misma fase cuando el signo es negativo, resultando en la formación de austenita. El signo directamente se deriva de la temperatura, siendo está por debajo de la temperatura de equilibrio de austenita (signo positivo) o por encima de esta (signo negativo).



## REFERENCIAS

- [1] P. Hippchen, A. Lipp, H. Grass, P. Craighero, M. Fleischer, and M. Merklein, “Modelling kinetics of phase transformation for the indirect hot stamping process to focus on car body parts with tailored properties,” *J. Mater. Process. Technol.*, vol. 228, pp. 59–67, Feb. 2016.
- [2] K. Babu and T. S. Prasanna Kumar, “Comparison of austenite decomposition models during finite element simulation of water quenching and air cooling of AISI 4140 steel,” *Metall. Mater. Trans. B*, vol. 45, no. 4, pp. 1530–1544, Aug. 2014.
- [3] H.-H. Bok, M.-G. Lee, E. J. Pavlina, F. Barlat, and H.-D. Kim, “Comparative study of the prediction of microstructure and mechanical properties for a hot-stamped B-pillar reinforcing part,” *Int. J. Mech. Sci.*, vol. 53, no. 9, pp. 744–752, Sep. 2011.
- [4] J. X. Fang *et al.*, “The effects of solid-state phase transformation upon stress evolution in laser metal powder deposition,” *JMADE*, vol. 87, pp. 807–814, 2015.
- [5] W. M. Steen and J. Mazumder, *Laser Material Processing*. London: Springer London, 2010.
- [6] L. Costa, R. Vilar, T. Reti, and A. M. M. Deus, “Rapid tooling by laser powder deposition: Process simulation using finite element analysis,” *Acta Mater.*, vol. 53, no. 14, pp. 3987–3999, Aug. 2005.
- [7] E. Toyserkani, S. Corbin, and A. Khajepour, *Laser cladding*. CRC Press, 2005.
- [8] R. Vilar, “Laser cladding,” *J. Laser Appl.*, vol. 11, no. 2, pp. 64–79, Apr. 1999.
- [9] T. Torims, “The application of laser cladding to mechanical component repair, renovation and regeneration,” in *DAAAM International Scientific Book*, 2013, pp. 587–608.
- [10] S. Santhanakrishnan, F. Kong, and R. Kovacevic, “An experimentally based thermo-kinetic hardening model for high power direct diode laser cladding,” *J. Mater. Process. Technol.*, vol. 211, no. 7, pp. 1247–1259, Jul. 2011.
- [11] V. Ocelík, U. de Oliveira, and J. T. M. De Hosson, “Metallic laser clad coatings: on the processing-microstructure-property relationships,” in *WIT Transactions on Engineering Sciences*, 2009, vol. 62, pp. 39–50.
- [12] R. Jendrzewski, G. Śliwiński, M. Krawczuk, and W. Ostachowicz, “Temperature and stress fields induced during laser cladding,” *Comput. Struct.*, vol. 82, no. 7–8, pp. 653–658, Mar. 2004.
- [13] F. Weng, C. Chen, and H. Yu, “Research status of laser cladding on titanium and its alloys: A review,” *Mater. Des.*, vol. 58, pp. 412–425, Jun. 2014.
- [14] F. Huang, Z. Jiang, X. Liu, J. Lian, and L. Chen, “Microstructure and properties of thin wall by laser cladding forming,” *J. Mater. Process. Technol.*, vol. 209, no. 11, pp. 4970–4976, Jun. 2009.

- [15] S. Da Sun, Q. Liu, M. Brandt, M. Janardhana, and G. Clark, "Microstructure and mechanical properties of laser cladding repair of AISI 4340 steel," *28th Int. Congr. Aeronaut. Sci.*, no. i, pp. 1–9, 2012.
- [16] Z. H. Liu, C. K. Chua, K. F. Leong, L. Thijs, J. VanHumbeeck, and J. P. Kruth, "Microstructural investigation of M2 High Speed Steel produced by selective laser melting," in *2012 Symposium on Photonics and Optoelectronics*, 2012, pp. 1–4.
- [17] P. J. Withers and H. K. D. H. Bhadeshia, "Residual stress. Part 2 – Nature and origins," *Mater. Sci. Technol.*, vol. 17, no. 4, pp. 366–375, Apr. 2001.
- [18] B. A. Van Brussel and J. T. M. De Hosson, "Residual stresses in the surface layer of laser-treated steels," *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 161, no. 1, pp. 83–89, 1993.
- [19] P. Kattire, S. Paul, R. Singh, and W. Yan, "Experimental characterization of laser cladding of CPM 9V on H13 tool steel for die repair applications," *J. Manuf. Process.*, vol. 20, pp. 492–499, Oct. 2015.
- [20] A. S. C. M. D'Oliveira, P. S. C. . da Silva, and R. M. C. Vilar, "Microstructural features of consecutive layers of Stellite 6 deposited by laser cladding," *Surf. Coatings Technol.*, vol. 153, no. 2–3, pp. 203–209, Apr. 2002.
- [21] S. Da Sun, M. Leary, Q. Liu, and M. Brandt, "Evaluation of microstructure and fatigue properties in laser cladding repair of ultrahigh strength AerMet ® 100 steel," *J. Laser Appl.*, vol. 27, no. S2, p. S29202, Feb. 2015.
- [22] C. Şimşir and C. H. Gür, "A FEM based framework for simulation of thermal treatments: Application to steel quenching," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 44, no. 2, pp. 588–600, Dec. 2008.
- [23] C. Şimşir and C. H. Gür, "3D FEM simulation of steel quenching and investigation of the effect of asymmetric geometry on residual stress distribution," *J. Mater. Process. Technol.*, vol. 207, no. 1–3, pp. 211–221, Oct. 2008.
- [24] M. Yaakoubi, M. Kchaou, and F. Dammak, "Simulation of the thermomechanical and metallurgical behavior of steels by using ABAQUS software," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 68, no. February, pp. 297–306, Feb. 2013.
- [25] J. D. Embury, A. Deschamps, and Y. Brechet, "The interaction of plasticity and diffusion controlled precipitation reactions," *Scr. Mater.*, vol. 49, no. 10, pp. 927–932, Nov. 2003.
- [26] I. Yadroitsava and I. Yadroitsev, "Residual stress in metal specimens produced by direct metal laser sintering," *J. Chem. Inf. Model.*, vol. 53, no. 9, pp. 1689–1699, 2013.
- [27] H. Zhao, G. Zhang, Z. Yin, and L. Wu, "Three-dimensional finite element analysis of thermal stress in single-pass multi-layer weld-based rapid prototyping," *J. Mater. Process. Technol.*, vol. 212, no. 1, pp. 276–285, Jan. 2012.
- [28] J. Deng, L. Liu, and M. Ding, "Effect of residual stresses on the erosion wear of laminated ceramic nozzles," *Mater. Charact.*, vol. 59, no. 1, pp. 1–8, Jan. 2008.
- [29] S. Novak, M. Kalin, P. Lukas, G. Anne, J. Vleugels, and O. Van Der Biest, "The effect

- of residual stresses in functionally graded alumina–ZTA composites on their wear and friction behaviour,” *J. Eur. Ceram. Soc.*, vol. 27, no. 1, pp. 151–156, Jan. 2007.
- [30] D. Wang, Q. Hu, and X. Zeng, “Residual stress and cracking behaviors of Cr<sub>13</sub>Ni<sub>5</sub>Si<sub>2</sub> based composite coatings prepared by laser-induction hybrid cladding,” *Surf. Coatings Technol.*, vol. 274, pp. 51–59, Jul. 2015.
- [31] J. Mazumder, J. Choi, K. Nagarathnam, J. Koch, and D. Hetzner, “The direct metal deposition of H13 tool steel for 3-D components,” *JOM*, vol. 49, no. 5, pp. 55–60, May 1997.
- [32] H. Köhler, K. Partes, J. R. Kornmeier, and F. Vollertsen, “Residual stresses in steel specimens induced by laser cladding and their effect on fatigue strength,” *Phys. Procedia*, vol. 39, pp. 354–361, 2012.
- [33] S. Ghosh and J. Choi, “Deposition pattern based thermal stresses in single-layer laser aided direct material deposition process,” *J. Manuf. Sci. Eng.*, vol. 129, no. 2, p. 319, Apr. 2007.
- [34] M. Schneider, “Laser cladding with powder - effect of some machining parameters on clad properties,” PhD thesis, University of Twente, 1998.
- [35] M. Alimardani, V. Fallah, A. Khajepour, and E. Toyserkani, “The effect of localized dynamic surface preheating in laser cladding of Stellite 1,” *Surf. Coatings Technol.*, vol. 204, no. 23, pp. 3911–3919, Aug. 2010.
- [36] S. Denis, “Considering Stress-Phase Transformation Interactions in the Calculation of Heat Treatment Residual Stresses,” in *Mechanics of Solids with Phase Changes*, vol. 6, no. Colloque C1, Vienna: Springer Vienna, 1997, pp. 293–317.
- [37] F. D. Fischer, Q.-P. Sun, and K. Tanaka, “Transformation-Induced Plasticity (TRIP),” *Appl. Mech. Rev.*, vol. 49, no. 6, p. 317, 1996.
- [38] G. Krauss, *Steels: Processing, Structure, and Performance*. ASM International, 2005.
- [39] H. K. D. H. Bhadeshia and R. Honeycombe, *Steels: Microstructure and Properties*, Third. Elsevier, 2006.
- [40] D. William and J. Callister, *Introducción a la Ciencia e Ingeniería de los Materiales*. Reverté, SA, 1995.
- [41] M. Pilloz, J. M. Pelletier, and A. B. Vannes, “Residual stresses induced by laser coatings: phenomenological analysis and predictions,” *J. Mater. Sci.*, vol. 27, no. 5, pp. 1240–1244, 1992.
- [42] A. de Deus and J. Mazumder, “Two-dimensional thermo-mechanical finite element model for laser cladding,” *Proc. ICALEO*, pp. 174–183, 1996.
- [43] H. Zhao, H. Zhang, C. Xu, and X. Yang, “Temperature and stress fields of multi-track laser cladding,” *Trans. Nonferrous Met. Soc. China*, vol. 19, pp. s495–s501, Sep. 2009.
- [44] Y. Jia and N. Hao, “Thermal-mechanical coupling finite element analysis of laser

cladding process Part II: Strain-stress field,” in *2011 Second International Conference on Mechanic Automation and Control Engineering*, 2011, pp. 5496–5499.

- [45] S. Paul, R. Singh, and W. Yan, “Thermo-mechanical modelling of laser cladding of CPM9V on H13 tool steel,” in *Proceedings of the 5th International and 26th All India Manufacturing Technology, Design and Research Conference (AIMTDR 2014)*, 2014, pp. 10–16.
- [46] M. Labudovic, D. Hu, and R. Kovacevic, “A three dimensional model for direct laser metal powder deposition and rapid prototyping,” *J. Mater. Sci.*, vol. 38, no. 1, pp. 35–49, 2003.
- [47] L. Wang, S. D. Felicelli, and P. Pratt, “Residual stresses in LENS-deposited AISI 410 stainless steel plates,” *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 496, no. 1–2, pp. 234–241, 2008.
- [48] Y. Javid and M. Ghoreishi, “Thermo-mechanical analysis in pulsed laser cladding of WC powder on Inconel 718,” *Int. J. Adv. Manuf. Technol.*, vol. 92, no. 1–4, pp. 69–79, 2017.
- [49] E. Foroozmehr and R. Kovacevic, “Effect of path planning on the laser powder deposition process: thermal and structural evaluation,” *Int. J. Adv. Manuf. Technol.*, vol. 51, no. 5–8, pp. 659–669, Nov. 2010.
- [50] A. Suárez, J. M. Amado, M. J. Tobar, A. Yáñez, E. Fraga, and M. J. Peel, “Study of residual stresses generated inside laser cladded plates using FEM and diffraction of synchrotron radiation,” *Surf. Coatings Technol.*, vol. 204, no. 12–13, pp. 1983–1988, Mar. 2010.
- [51] W. A. Johnson and R. F. Mehl, “Reaction kinetics in processes of nucleation and growth,” *Trans. Am. Inst. Min. Met. Eng.*, vol. 135, pp. 414–458, 1939.
- [52] M. Avrami, “Kinetics of phase change. I general theory,” *J. Chem. Phys.*, vol. 7, no. 12, pp. 1103–1112, Dec. 1939.
- [53] M. Hillert, “Impact of Clarence Zener upon metallurgy,” *J. Appl. Phys.*, vol. 60, no. 6, pp. 1868–1876, Sep. 1986.
- [54] J. S. Kirkaldy, “A Zener-Hillert model for growth of binary alloy cells,” *Scr. Metall.*, vol. 14, no. 7, pp. 739–744, Jul. 1980.
- [55] J. S. Kirkaldy, “Prediction of alloy hardenability from thermodynamic and kinetic data,” *Metall. Trans.*, vol. 4, no. 10, pp. 2327–2333, Oct. 1973.
- [56] H. K. D. H. Bhadeshia, “Thermodynamic analysis of isothermal transformation diagrams,” *Met. Sci.*, vol. 16, no. 3, pp. 159–166, Mar. 1982.
- [57] A. S. Oddy, J. M. J. McDill, and L. Karlsson, “Microstructural predictions including arbitrary thermal histories, re-austenization and carbon segregation effects,” *Can. Metall. Q.*, vol. 35, no. 3, pp. 275–283, Jul. 1996.
- [58] T. Reti, Z. Fried, and I. Felde, “Computer simulation of steel quenching process using a multi-phase transformation model,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 22, no. 3–4, pp. 261–278, Dec. 2001.

- [59] S. J. Lee, M. T. Lusk, and Y. K. Lee, “Conversional model of transformation strain to phase fraction in low alloy steels,” *Acta Mater.*, vol. 55, no. 3, pp. 875–882, 2007.
- [60] J. Kohout, “An alternative to the JMAK equation for a better description of phase transformation kinetics,” *J. Mater. Sci.*, vol. 43, no. 4, pp. 1334–1339, 2008.
- [61] D. F. Watt, L. Coon, M. Bibby, J. Goldak, and C. Henwood, “An algorithm for modelling microstructural development in weld heat-affected zones (part a) reaction kinetics,” *Acta Metall.*, vol. 36, no. 11, pp. 3029–3035, 1988.
- [62] M. V. Li, D. V. Niebuhr, L. L. Meekisho, and D. G. Atteridge, “A computational model for the prediction of steel hardenability,” *Metall. Mater. Trans. B*, vol. 29, no. 3, pp. 661–672, 1998.
- [63] D. P. Koistinen and R. E. Marburger, “A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels,” *Acta Metall.*, vol. 7, no. 1, pp. 59–60, 1959.
- [64] J. B. Leblond and J. Devaux, “A new kinetic model for anisothermal metallurgical transformations in steels including effect of austenite grain size,” *Acta Metall.*, vol. 32, no. 1, pp. 137–146, Jan. 1984.
- [65] D. Farias, S. Denis, and A. Simon, “Mathematical model coupling phase transformations and temperature evolutions in steels,” *ISIJ Int. ISIJ Int.*, vol. 32, no. 3, pp. 316–325, 1992.
- [66] S. J. Jones and Bhadeshia H.K.D.H, “Kinetics of the simultaneous decomposition of austenite into several transformation products,” *Acta Metall. Inc*, vol. 45, no. 7, pp. 2911–2920, 1997.
- [67] J. Brooks, C. V Robino, T. Headley, S. Goods, and M. Griffith, “Microstructure and property optimization of LENS deposited H13 tool steel,” in *Proceedings of the Solid Freeform Fabrication Symposium*, 1999, pp. 375–382.
- [68] H. K. D. H. Bhadeshia, “Complex weldment properties trends in predictive power,” in *Proceedings of the 6th International Conference on Trends in Welding Research*, 2002, pp. 680–689.
- [69] L. Wang and S. Felicelli, “Process modeling in laser deposition of multilayer SS410 steel,” *J. Manuf. Sci. Eng.*, vol. 129, no. 6, p. 1028, 2007.
- [70] E. Foroozmehr and R. Kovacevic, “Thermokinetic modeling of phase transformation in the laser powder deposition process,” *Metall. Mater. Trans. A*, vol. 40, no. 8, pp. 1935–1943, Aug. 2009.
- [71] A. Suárez *et al.*, “Modeling of phase transformations of Ti6Al4V during laser metal deposition,” *Phys. Procedia*, vol. 12, no. PART 1, pp. 666–673, 2011.
- [72] J. Ni and M. A. Wahab, “A numerical kinematic model of welding process for low carbon steels,” *Comput. Struct.*, vol. 186, pp. 35–49, Jul. 2017.
- [73] M. Avrami, “Kinetics of phase change. II transformation-time relations for random distribution of nuclei,” *J. Chem. Phys.*, vol. 8, no. 2, pp. 212–224, Feb. 1940.

- [74] M. Avrami, "Granulation, phase change, and microstructure kinetics of phase change. III," *J. Chem. Phys.*, vol. 9, no. 2, pp. 177–184, Feb. 1941.
- [75] A. A. Burbelko, E. Fraś, and W. Kapturkiewicz, "About Kolmogorov's statistical theory of phase transformation," *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 413–414, no. 9, pp. 429–434, Dec. 2005.
- [76] X. Chen, N. Xiao, D. Li, G. Li, and G. Sun, "The finite element analysis of austenite decomposition during continuous cooling in 22MnB5 steel," *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 22, no. 6, p. 065005, Sep. 2014.
- [77] E. B. Hawbolt, B. Chau, and J. K. Brimacombe, "Kinetics of austenite-pearlite transformation in eutectoid carbon steel," *Metall. Trans. A*, vol. 14, no. 9, pp. 1803–1815, 1983.
- [78] M. Umemoto *et al.*, "Computer modelling of phase transformation from work-hardened austenite.," *ISIJ Int.*, vol. 32, no. 3, pp. 306–315, 1992.
- [79] J. Farjas and P. Roura, "Modification of the Kolmogorov – Johnson – Mehl – Avrami rate equation for non-isothermal experiments and its analytical solution," *Acta Mater.*, vol. 54, pp. 5573–5579, 2006.
- [80] M. P. Puls and J. S. Kirkaldy, "The pearlite reaction," *Metall. Trans.*, vol. 3, no. 11, pp. 2777–2796, 1972.
- [81] J. S. Kirkaldy and R. C. Sharma, "A new phenomenology for steel it and CCT curves," *Scr. Metall.*, vol. 16, no. 10, pp. 1193–1198, 1982.
- [82] B. Buchmayr and J. S. Kirkaldy, "Modeling of the temperature field, transformation behavior, hardness and mechanical response of low alloy steels during cooling from the austenite region," *J. Heat Treat.*, vol. 8, no. 2, pp. 127–136, 1990.
- [83] J. Chipalkatti, "Modeling of austenite decomposition in an AISI 4140 steel," Master of Science Thesis, University of British Columbia, 1999.
- [84] N. Saunders, Z. Guo, a P. Miodownik, and J.-P. Schillé, "The calculation of TTT and CCT diagrams for general steels." *JMatPro Software Literature*, pp. 1–12, 2004.
- [85] Z. Guo, N. Saunders, P. Miodownik, and J. P. Schille, "Modelling phase transformations and material properties critical to the prediction of distortion during the heat treatment of steels," *Int. J. Microstruct. Mater. Prop.*, vol. 4, no. 2, p. 187, 2009.
- [86] H. Dai, "Modelling residual stress and phase transformations in steel welds," in *Neutron Diffraction*, InTech, 2012, p. 50-.
- [87] P. Åkerström and M. Oldenburg, "Austenite decomposition during press hardening of a boron steel—Computer simulation and test," *J. Mater. Process. Technol.*, vol. 174, no. 1–3, pp. 399–406, May 2006.
- [88] C. H. Gür and A. E. Tekkaya, "Finite element simulation of quench hardening," *Steel Res.*, vol. 67, no. 7, pp. 298–306, Jul. 1996.

- [89] M. Gimenez, A. Llobet, M. Riera, and J. Prado, “Simulación de un tratamiento térmico mediante elementos finitos,” *Trater Press*, no. 38, pp. 41–50, 2013.
- [90] S. J. Lee and Y. K. Lee, “Prediction of austenite grain growth during austenitization of low alloy steels,” *Mater. Des.*, vol. 29, no. 9, pp. 1840–1844, 2008.
- [91] C.-W. Lee, S.-H. Uhm, K.-M. Kim, K.-J. Lee, and C.-H. Lee, “Modeling of phase transformation kinetics in the coarsened grain HAZ of C-Mn steel weld considering prior austenite grain size,” *ISIJ Int.*, vol. 41, no. 11, pp. 1383–1388, 2001.
- [92] M. M. Aranda, B. Kim, R. Rementeria, C. Capdevila, and C. G. de Andrés, “Effect of prior austenite grain size on pearlite transformation in a hypoeutectoid Fe-C-Mn steel,” *Metall. Mater. Trans. A*, vol. 45, no. 4, pp. 1778–1786, Apr. 2014.
- [93] A. Matsuzaki and H. K. D. H. Bhadeshia, “Effect of austenite grain size and bainite morphology on overall kinetics of bainite transformation in steels,” *Mater. Sci. Technol.*, vol. 15, no. 5, pp. 518–522, May 1999.
- [94] S. Yamamoto, H. Yokoyama, K. Yamada, and M. Niikura, “Effects of the austenite grain size and deformation in the unrecrystallized austenite region on bainite transformation behavior and microstructure,” *ISIJ Int.*, vol. 35, no. 8, pp. 1020–1026, 1995.
- [95] S. J. Lee, J. S. Park, and Y. K. Lee, “Effect of austenite grain size on the transformation kinetics of upper and lower bainite in a low-alloy steel,” *Scr. Mater.*, vol. 59, no. 1, pp. 87–90, 2008.
- [96] S. J. Lee and Y. K. Lee, “Effect of austenite grain size on martensitic transformation of a low alloy steel,” *Mater. Sci. Forum*, vol. 475–479, pp. 3169–3172, Jan. 2005.
- [97] H. S. Yang and H. K. D. H. Bhadeshia, “Austenite grain size and the martensite-start temperature,” *Scr. Mater.*, vol. 60, no. 7, pp. 493–495, 2009.
- [98] S. Morito, H. Saito, T. Ogawa, T. Furuhashi, and T. Maki, “Effect of austenite grain size on the morphology and crystallography of lath martensite in low carbon steels,” *ISIJ Int.*, vol. 45, no. 1, pp. 91–94, 2005.
- [99] A. García-Junceda, C. Capdevila, F. G. Caballero, and C. G. de Andrés, “Dependence of martensite start temperature on fine austenite grain size,” *Scr. Mater.*, vol. 58, no. 2, pp. 134–137, 2008.
- [100] P. J. Brofman and G. S. Ansell, “On the effect of fine grain size on the Ms temperature in Fe-27Ni-0.025C alloys,” *Metall. Trans. A*, vol. 14, no. 9, pp. 1929–1931, 1983.
- [101] S. J. Lee and Y. K. Lee, “Finite element simulation of quench distortion in a low-alloy steel incorporating transformation kinetics,” *Acta Mater.*, vol. 56, no. 7, pp. 1482–1490, 2008.
- [102] J. C. Fisher, J. H. Hollomon, and D. Turnbull, “Kinetics of the austenite-martensite transformation,” *Met. Trans.*, vol. 185, no. October, pp. 691–700, Oct. 1949.
- [103] M. P. De Andres and M. Carsi, “Hardenability: an alternative to the use of grain size as calculation parameter,” *J. Mater. Sci.*, vol. 22, pp. 2707–2716, 1987.

- [104] F. Klaproth and F. Vollertsen, “Residual stress formation relating to peak temperature- and austenite grain size-based phase transformation of S355 steel,” in *Physics Procedia*, 2014, vol. 56, no. C, pp. 1343–1352.
- [105] P. Ferro, H. Porzner, A. Tiziani, and F. Bonollo, “The influence of phase transformations on residual stresses induced by the welding process—3D and 2D numerical models,” *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 14, no. 2, pp. 117–136, Mar. 2006.
- [106] A. A. Gorni, *Steel forming and heat treating handbook*. 2015.
- [107] D. Kim, “Prediction of microstructure evolution of heat-affected zone in gas metal arc welding of steels,” Doctoral dissertation, The University of Texas at Austin, 2012.
- [108] COMSOL Inc., “COMSOL Multiphysics® Modeling Software,” 2014. [Online]. Available: <https://www.comsol.com/>. [Accessed: 21-May-2018].
- [109] C. Henwood, M. Bibby, J. Goldak, and D. Watt, “Coupled transient heat transfer-microstructure weld computations (part B),” *Acta Metall.*, vol. 36, no. 11, pp. 3037–3046, 1988.
- [110] Steel Data, “1.7225 Steel,” 2014. [Online]. Available: <http://www.steeldata.info/std/cct/html/849.html>. [Accessed: 22-Feb-2018].
- [111] C. E. Henwood, “An analytical model for computing weld microstructure,” Master thesis, Carleton University, 1987.