

**UNIVERSIDAD NACIONAL DE GENERAL SAN MARTIN
COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
“Prof. Jorge A. Sabato”**

Estudio teórico y experimental del proceso de temple

por Ing. Christian Salles

Directores

**Dr. Diego Passarella
Dr. Juan Manuel Ranalli**

(*) Tesis para optar al título de Magister en Ciencia y Tecnología de Materiales

República Argentina

2023

Agradecimientos

A mis directores, Diego y Juan, por compartir conmigo tanto conocimiento, análisis y enseñanzas a lo largo de los años (incluso mucho antes de esta tesis en el caso de Juan). Particularmente a Diego por toda su paciencia, perseverancia y grandiosa actitud que fue el gran motor para poder completar esta tesis. Siempre voy a estar agradecido con ambos por haber hecho todos los esfuerzos y a su vez compartido lindos momentos.

A la Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), la Universidad Nacional de San Martín (UNSAM) y, en particular el Instituto de Tecnología Jorge Sabato (ITJS) por haber brindado todo el marco para la realización no solo de esta tesis pero sino también de la maestría y la continuación de mi formación profesional y académica.

A todos los grupos de trabajo y laboratorios de la CNEA que me abrieron sus puertas para poder realizar todos los estudios necesarios para esta tesis: Laboratorio de Metalografía (Guille, Ramón y Ricardo), Tratamientos Térmicos, Caracterización de Materiales, y toda la Gerencia de Materiales del CAC-CNEA en general. Y sin duda un particular agradecimiento a la Gerencia de Coordinación de Proyectos CNEA-NASA, la cual considero ahora y siempre como mi primera casa (profesional) donde no solo obtuve muchos conocimientos y experiencias, sino que también amigos/as (Gero, Pablo, Dani, Elvio, Martín, Fede, y muchos más).

A toda mi familia y amigos, que durante toda mi vida han sido sin duda mis más importantes pilares, brindando apoyo y amor incondicional. Particularmente todo lo recibido y compartido con mis padres (Monika y Daniel) y mi hermana (Sa), incluso, y a veces más, a la distancia (geográfica).

Y finalmente a mi esposa (Barby) y a mis hijos (Cami y Male). No hay palabras para describir todo el amor que siento por ellos, y menos aún el apoyo de Barby en absolutamente todo lo que emprendemos juntos.

Resumen

En el presente trabajo se estudió el proceso de temple de aceros. Este proceso es utilizado en la industria para lograr propiedades finales en piezas templadas, por lo que un óptimo temple será aquel que logre generar una combinación de fases metalúrgicas que dé lugar a las deseadas propiedades mecánicas, minimizando distorsiones y eliminando fisuraciones. En el modelado del proceso de temple de aceros se combinan tres físicas distintas: (i) fenómenos de transferencia de calor, (ii) transformaciones metalúrgicas, y (iii) deformaciones inducidas. Este trabajo se enfocó en el desarrollo de un modelo numérico que contempla los dos primeros campos (térmico y metalúrgico) y su acoplamiento.

Como punto de partida para el desarrollo del modelo numérico, se realizaron ensayos de temple instrumentados en probetas cilíndricas (de 1" y ½" de diámetro) de dos aceros distintos: SAE 1045 y SAE 4140. De esta forma se registraron los valores de temperatura en el centro de las probetas al realizar los temples desde 850°C en aceite de temple a 100°C sin agitación. Esta información es post-procesada (esquema de filtrado basado en el método de difusión no lineal) para obtener las curvas de velocidad de enfriamiento (dT/dt , T), las cuales se utilizaron como punto de partida para el desarrollo del modelo numérico. Por otro lado, las probetas ensayadas fueron caracterizadas metalográficamente (microscopía óptica y mediciones de microdureza) con el fin de comparar las durezas y la proporción de microconstituyentes obtenidos experimentalmente con los predichos por el modelo numérico.

El cálculo térmico se realizó considerando una simplificación 1-D axisimétrica de las probetas, y a partir del dato de las temperaturas en el centro de la probeta, se calcula un coeficiente de transferencia térmica inicial (h_0). Sin embargo, como este es un parámetro de la superficie de la probeta, calculado con temperaturas en el centro de la misma, se desarrolló una función de ajuste que permite obtener un h_0 que logra copiar la historia térmica de la probeta.

Una vez resuelta la evolución térmica de las barras en todos los puntos de su radio, se desarrolló el modelo metalúrgico. El mismo se basó en la ecuación de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) para las transformaciones por difusión, y Koistinen y Marburger para la displasiva. A su vez, fue posible utilizar diagramas temperatura tiempo transformación (TTT) para enfriamientos continuos a través de la incorporación del tiempo de inicio de transformación ficticio, calculado por la regla de adición de Scheil. En función de los resultados de microestructuras y durezas obtenidas, fue necesario realizar una pequeña modificación en los tiempos de los diagramas TTT, lo cual es razonablemente atribuible a los efectos de tamaño de grano, segregaciones, etc. que afectan los tiempos de inicio y fin de las transformaciones. Para el cálculo de las durezas se implementaron las ecuaciones de Mayner.

Al comparar los resultados del modelo numérico con los experimentales, se observó un buen ajuste entre ambos. Particularmente las durezas mostraban una desviación en general menor al 10%, y en todos los casos menores al 15%, con resultados excepcionalmente buenos para las barras de menor diámetro (½"): errores promedio de tan solo 4% y 5%. Con respecto a los microconstituyentes también hay en la mayoría de los casos buen ajuste con respecto a sus proporciones, salvo en una condición (SAE 4140 y 1" de diámetro). Se analizan en detalles algunas limitaciones del modelo (bainita en muestra de SAE 1045 y martensita disminuyendo hacia la superficie) y se proponen trabajos a futuro para resolver las mismas (incorporación de calores de

transformaciones, mediciones de temperaturas en otros puntos, ensayos de caracterización más precisos, entre otros).

Palabras clave: Tratamiento térmico - Temple - Acero - Curvas de enfriamiento - Modelado - Transferencia de calor - Transformaciones metalúrgicas - Comparación experimental.

Abstract¹

The present work studied the process of steel quenching. This process is used in the industry to achieve final properties in quenched parts, so an optimal quenching will be the one that generates a combination of metallurgical phases that give rise to the desired mechanical properties, minimizing distortions and eliminating cracks. In the modeling of the steel quenching process, three different physics are combined: (i) heat transfer phenomena, (ii) metallurgical transformations, and (iii) induced deformations. This work focused on the development of a numerical model that considers the first two fields (thermal and metallurgical) and their coupling.

As a starting point for the development of the numerical model, instrumented quenching tests were performed on cylindrical specimens (1" and ½" in diameter) made of two different steels: SAE 1045 and SAE 4140. Temperature values were recorded at the center of the specimens during quenching from 850°C in quenching oil to 100°C without agitation. This information is post-processed (using a filtering scheme based on the nonlinear diffusion method) to obtain the cooling rate curves (dT/dt , T), which were used as a starting point for the development of the numerical model. Additionally, the tested specimens were characterized metallographically (optical microscopy and microhardness measurements) in order to compare the experimentally obtained hardness and microconstituent proportions with those predicted by the numerical model.

The thermal calculation was performed considering a 1-D axisymmetric simplification of the specimens, and based on the temperature data at the center of the specimen, an initial heat transfer coefficient (h_0) is calculated. However, since this is a surface parameter of the specimen, calculated using temperatures at its center, a fitting function was developed to obtain an h_f that reproduces the thermal history of the specimen.

Once the thermal evolution of the bars at all points of their radius was solved, the metallurgical model was developed. It was based on the Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) equation for diffusion transformations, and Koistinen and Marburger for displacive transformations. Moreover, it was possible to use time-temperature transformation (TTT) diagrams for continuous cooling by incorporating the fictitious transformation start time, calculated by the Scheil's additivity rule. Based on the results of microstructures and hardness obtained, a slight modification of the times in the TTT diagrams was necessary, which can reasonably be attributed to grain size effects, segregations, etc. that affect the transformation start and end times. Mayner's equations were implemented for hardness calculations.

When comparing the results of the numerical model with the experimental ones, a good agreement was observed between them. Particularly, the hardness values showed a deviation generally lower

¹ Durante la preparación de este trabajo los autores usaron ChatGPT para traducir el resumen al inglés. Luego de utilizar esta herramienta, los autores revisaron y editaron el contenido y toman total responsabilidad por el contenido de esta publicación. Declaración de acuerdo a <https://www.elsevier.com/journals/dendrochronologia/1125-7865/guide-for-authors>

than 10%, and in all cases lower than 15%, with exceptionally good results for the smaller diameter bars (1/2"): average errors of only 4% and 5%. With respect to the microconstituents, there is also good agreement in most cases regarding their proportions, except for one condition (SAE 4140 and 1" diameter). Some limitations of the model are analyzed in detail (bainite in SAE 1045 sample and decreasing martensite towards the surface), and future work is proposed to address them (incorporation of transformation heats, temperature measurements at other points, more precise characterization tests, among others).

Keywords: Heat treatment - quenching - Steel - Cooling curves - Modeling - Heat transfer - Metallurgical transformations - Experimental comparison.

Índice

Agradecimientos	2
Resumen	3
Abstract	4
Índice	6
1. Introducción	8
1.1 Proceso de Temple	8
1.2 Reseña histórica	9
1.3 Objetivos del trabajo	12
1.4 Organización del documento	12
2. Método Experimental	13
2.1 Materiales y muestras	13
2.1.1 Materiales utilizados	13
2.1.2 Preparación de muestras para temple	15
2.2 Tratamiento Térmico	17
2.2.1 Temple.....	17
2.3 Análisis Metalográfico	18
2.3.1 Preparación Metalográfica	18
2.3.2 Cuantificación de fases.....	19
2.3.3 Mediciones de microdureza Vickers.....	19
2.4 Procesamiento de datos experimentales T-t	20
3. Cálculo Numérico	22
3.1 Análisis térmico	22
3.1.1 Modelo Térmico	22
3.1.2 Resolución Problema Térmico	24
3.2 Análisis metalúrgico	29
3.2.1 Modelo metalúrgico	29
3.2.2 Resolución Problema metalúrgico.....	31
4. Resultados	39
4.1 Resultados experimentales	39
4.1.1 Resultados Térmicos.....	39
4.1.2 Microestructura.....	45
4.2 Resultados numéricos	48
4.2.1 Curvas de enfriamiento a lo largo de todo el radio	48
4.2.2 Superposición de curvas de enfriamiento y diagramas CCT.....	51
4.2.3 Resultados de durezas.....	52
4.2.4 Resultados de Microconstituyentes	56
4.2.5 Validación del modelo a partir variaciones del coeficiente de transferencia térmica	59

5. Discusión.....	62
6. Conclusiones	65
7. Bibliografía	66
8. Listado de publicaciones.....	70
9. Anexos	71
Anexo A: Rutina para cuantificación fases	71
A.1 Cuantificación Muestras SAE 1045.....	71
A.2 Cuantificación Muestras SAE 4140.....	72
Anexo B: Determinación de modelo de propiedades termofísicas dependientes de la temperatura	72
Anexo C: Diagramas TTT originales.....	77
Anexo D: Curvas CCT	78
Anexo E: Metalografías de barras normalizadas y templadas	80
Anexo F: Descarburización superficial	85
F.1 Análisis de metalografías en la superficie.....	86
F.2 Microdurezas en la superficie.....	89
F.3 Cálculo de perfil de descarburización según la Ley de Fick	89

1. Introducción

1.1 Proceso de Temple

El proceso de temple de aceros consiste en el enfriamiento brusco de piezas desde la temperatura de austenización o de solubilización, típicamente entre 815° y 870°C. Para la mayoría de los aceros, incluidos los aceros al carbono, de baja aleación y aceros para herramientas, el objetivo de este tratamiento térmico es producir una cantidad controlada de martensita en su microestructura. Un tratamiento exitoso implica lograr la microestructura, dureza, resistencia o tenacidad requerida [1].

El tamaño global del mercado de tratamiento térmico fue valorado en USD 103,87 mil millones en 2022 donde la mayor fracción del mercado (en términos de materiales) es el acero [2]. Si bien este mercado se espera que crezca en los próximos años (a una tasa de crecimiento anual compuesta del 3,4% hasta 2030), algunos de los detractores para su crecimiento son las restricciones sobre los hornos con combustibles fósiles o el alto costo inicial de hornos eléctricos. Además, el tratamiento térmico requiere cantidades relativamente grandes de energía, tiempos de procesamiento más largos y emisiones de CO₂ más altas en comparación con métodos convencionales de fabricación como el conformado y el mecanizado. Por lo tanto, la demanda de fabricación sustentable y amigable con el medio ambiente también obliga a los fabricantes a pensar más en la mejora de la eficiencia del tratamiento térmico [3].

Finalmente, a pesar de ser una parte vital de la producción basada en aceros, el temple es aún una de las mayores causas de rechazo de componentes, pérdidas de producción y re-trabajado de componentes [4]. La distorsión, la fisuración, la microestructura y las propiedades como la dureza y las tensiones residuales se consideran los problemas más importantes durante el tratamiento térmico de metales y aleaciones [3].

Es por estas razones que el estudio y comprensión de los tratamientos térmicos cobra vital importancia tanto para el crecimiento del mercado de los tratamiento térmicos, el acero, así como también la reducción de emisiones de gases de efecto invernadero (CO_{2,eq}).

El estudio del proceso de temple involucra la comprensión de la evolución de tres aspectos físicos distintos, además de sus correspondientes interacciones (ver Figura 1).

1. El campo de temperatura en la pieza: El problema térmico requiere la resolución de la evolución de la temperatura en el volumen de la pieza a estudiar. Depende de los mecanismos de transferencia de calor con el medio de temple y la presencia de fuentes o sumideros de calor [5] [6]
2. Las transformaciones de fases: El problema metalúrgico plantea la resolución de la evolución micro-estructural en el componente. Las transformaciones metalúrgicas son dependientes de la evolución térmica en cada punto de la pieza.
3. Las deformaciones inducidas. El problema mecánico plantea la resolución del desarrollo y evolución de distorsiones en el componente, las cuales si inducen tensiones que excedan el límite elástico del material, producirán tensiones residuales. Depende de la evolución térmica y microestructural de la pieza y de las condiciones de sujeción de la misma [7][8][9][10].

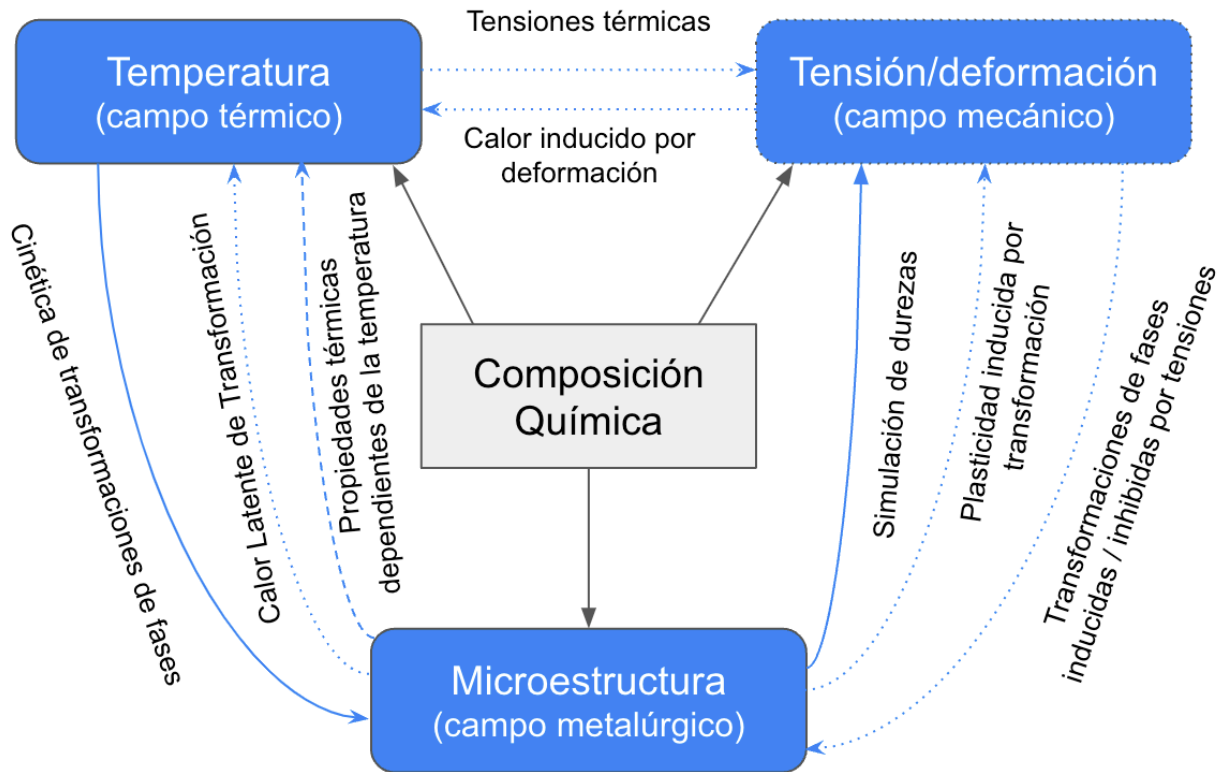


Figura 1: Campos físicos involucrados en un proceso de temple, y sus interacciones [11] (en líneas continuas o con guiones los acoplamientos considerados en este trabajo y en líneas punteadas los que no se consideraron).

Debido a la naturaleza compleja, acoplada (térmica-metalúrgica-mecánica) y no lineal del problema, no se cuentan con soluciones analíticas del problema, más aún para aplicaciones industriales. Por lo tanto, se han desarrollado soluciones que involucran la aplicación de distintos métodos numéricos como: método de diferencias finitas (MDF), método de volúmenes finitos (MVF) y método de elementos finitos (MEF). Debido a su amplio espectro de aplicación y facilidad de uso, el MEF es el método más popular y conveniente para la simulación de temple [12].

Este trabajo en particular se enfocó en la resolución del problema térmico y el acoplamiento con el campo metalúrgico, de forma tal de crear una base de conocimiento sobre la cual abordar también la resolución del problema mecánico a futuro.

1.2 Reseña histórica

Muchos autores han estado estudiando los tratamientos térmicos, en particular, el temple de aceros desde hace varias décadas. Estos estudios comparten ciertos elementos en común pero también presentan diferencias entre sí, ya sea en el cálculo del problema térmico, metalúrgico o mecánico, así como en el tipo de materiales de estudio y programas utilizados para el cálculo. En esta sección, se detallan algunos de los principales trabajos que abordaron la simulación numérica del temple y otros tratamientos térmicos similares.

En cuanto al cálculo metalúrgico, existen aspectos del cálculo sobre los que la mayoría de ellos se basan, desde uno de los primeros trabajos en abordar la simulación numérica de este problema de

forma acoplada para aceros como es el de (Denis, Sjöström, & Simon, 1987)[13], hasta trabajos más recientes como el de (Esfahani, Babaei, & Sarrami-Foroushani, 2021)[14]. Estos elementos comunes son dos tipos de ecuaciones de transformación: Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) para las transformaciones por difusión, y Koistinen y Marburger (K-M) para las displasivas. A su vez, y en particular para las transformaciones por difusión y con el objetivo de utilizar diagramas Temperatura-Tiempo-Transformación (TTT) para enfriamientos continuos, la regla de adición de Scheil se emplea [9][13][14][15][16]. Para la utilización de la ecuación de JMAK, (Denis, Sjöström, & Simon, 1987)[13] especifican como las tensiones presentes en las muestras afectan los parámetros de dicha ecuación (típicamente referidos como K y n), mientras que (Kang & Im, 2005)[15] plantean el cálculo directo de los parámetros de dicha ecuación en función de los tiempos de inicio y fin de las transformaciones en diagramas TTT (sin considerar el efecto de las tensiones). Esta forma directa de calcular los coeficientes de la ecuación de JMAK también fue utilizada más recientemente por (Kešner, Chotěborský, & Linda, 2016)[16] y (Esfahani, Babaei, & Sarrami-Foroushani, 2021)[14], sin embargo, en el primero de estos dos casos, los autores calcularon una estimación de cómo los parámetros K y n dependen con la temperatura (polinomios de grados 2 a 5) para poder resolver la ecuación diferencial por métodos numéricos. Por otro lado, (Khan & Gautham, 2018)[17] utilizan para el cálculo de las transformación por difusión un modelo empírico que contempla la composición química del acero, el tamaño de grano austenítico, la temperatura y las fases previamente transformadas. Si bien la mayoría de los estudios revisados utilizan los diagramas TTT, algunos también trabajan con diagramas de enfriamiento continuo (CCT) como (Camurri, Carrasco, & Dille, 2008)[7] y (Bandyopadhyaya, Lee, Shim, Hwang, & Lee, 2019)[18]. En este último, los parámetros para la ecuación de JMAK se calculan a partir de un modelo que contempla el tamaño de grano austenítico y la temperatura. Si bien la ecuación de K-M es la más utilizada para la predicción de martensita, (Esfahani, Babaei, & Sarrami-Foroushani, 2021)[14] utilizan la regla de Magee para tomar en cuenta el efecto de las tensiones en este tipo de transformación sin difusión. Independientemente del método utilizado, una vez obtenidas las proporciones de fases a partir del cálculo numérico, una práctica común es calcular la dureza de las piezas finales. Para ello típicamente se utilizan ecuaciones empíricas que permiten obtener valores de dureza teniendo en cuenta: microconstituyentes y sus proporciones, composición química y velocidad de enfriamiento. Para la simulación de temple de aceros, ecuaciones como las de Mayner et.al [14][18], o las de Ion y Anishdal [17] son las utilizadas.

Para estudiar el campo térmico del tratamiento de temple, la mayoría de los autores se basan en la ecuación de calor de Fourier [7][9][13][14][15][16]. Sin embargo, distintos estudios utilizan distintas formas de resolver la evolución térmica, en particular, algunos utilizan diferencias finitas (implícitas en (Denis, Sjöström, & Simon, 1987)[13] o explícitas en (Camurri, Carrasco, & Dille, 2008)[7]), mientras que la mayoría, y en particular en los últimos años, se vuelcan por el método de elementos finitos [9][14][15][16]. Aparte de estos métodos, distintas herramientas matemáticas son utilizadas para la resolución numérica, como el cálculo del flujo de calor en la superficie a través de la resolución inversa de la ecuación de calor (Denis, Sjöström, & Simon, 1987)[13], o métodos iterativos para obtener el flujo de calor en la superficie (Passarella, 2015)[6]. A su vez, existen casos donde se simplifican las condiciones de contorno, como en (Camurri, Carrasco, & Dille, 2008)[7], donde no se considera calor por radiación (tampoco así en (Esfahani, Babaei, & Sarrami-Foroushani, 2021)[14]), ni el generado por las transformaciones metalúrgicas, las densidades de las fases como constantes (también así en (Kešner, Chotěborský, & Linda, 2016)[16]) y c_p con dependencia lineal con la temperatura. Sin embargo, la gran mayoría de los

1. Introducción

autores opta por sistemas menos simplificados y más acoplados donde las propiedades termofísicas de cada fase, y su respectiva variación con la temperatura, se toma en cuenta a través de la regla de mezcla, así como también el calor liberado por las transformaciones de fases [9][13][15]. Si bien algunos autores plantean el problema desde el punto de vista del cálculo numérico, y sólo realizan ensayos experimentales a fin de corroborar la exactitud del modelo [7][13][15], otros utilizan el registro de temperaturas experimentales para alimentar el modelo, el cual luego de los cálculos numéricos e iteraciones puede predecir la evolución térmica en distintos puntos de la muestra en cuestión [14][16].

En cuanto a los materiales utilizados, todos los trabajos mencionados trabajan con aceros, aunque distintos tipos de aleaciones entre sí. En general, los autores analizados utilizan aceros de alto carbono (>0,6% C) (Camurri, Carrasco, & Dille, 2008)[7], lo cual es de esperar ya que son estos los que típicamente son sometidos a tratamientos de temple. Uno de los más utilizados para estos trabajos es el C60 [9][16], aunque en varias ocasiones, otros autores utilizan aceros del tipo eutectoide [13][15] (facilita el modelado numérico debido a la ausencia de fases proeutectoides). También son estudiados aceros de uso común en la industria, como el SAE 1045[14], o incluso aceros de baja aleación como el SD 600S (Bandyopadhyaya, Lee, Shim, Hwang, & Lee, 2019)[18], que se utiliza como barras de refuerzo, o SAE 4320 (Khan & Gautham, 2018)[17]. Con respecto a la geometría, la mayoría de los autores decide utilizar barras cilíndricas de distintos diámetros: desde ½ pulgada (Denis, Sjöström, & Simon, 1987)[13] hasta 5 pulgadas (Camurri, Carrasco, & Dille, 2008)[7], aunque también se hallan reportadas validaciones de algunos de estos modelos numéricos con la utilización de piezas industriales como anillos y engranajes (Bandyopadhyaya, Lee, Shim, Hwang, & Lee, 2019)[18]. Finalmente, dentro del grupo de los materiales utilizados, cabe destacar los medios de temple, donde muchos autores optan por utilizar el agua como medio de temple (altas velocidades de enfriamiento), pero también hay autores que utilizan medios que logran menores velocidades de enfriamiento y por ende más transformaciones de fase por difusión. Estos últimos suelen utilizar aceites, ya sea a temperatura ambiente (Bandyopadhyaya, Lee, Shim, Hwang, & Lee, 2019)[18] o mayores temperaturas (por ejemplo 60°C) (Simsir & Hakan Gür, 2008)[9].

Otros autores, no se enfocan en el estudio numérico del proceso de temple, pero sí en la caracterización de muestra de acero de medio carbono templadas en distintos aceites. De esta forma, temples de muestras de SAE 1035 en aceite de palma presentaron valores de durezas superficiales de 330HV (Odusote, Ajiboye, & Rabi, 2012)[19], mientras que muestras de SAE 1039 tratadas en aceite de temple lograron una dureza de 270HV (Zeyad, 2016)[20]. Por otro lado, (Hariningsih, Sumpena, & Sukarjo, 2020)[21] reportaron para el acero SAE 4140 (baja aleación) valores de dureza de 520 HV con 80% de martensita para temple en aceites de distintos tipos.

Algunos de los lenguajes de programación utilizados por los mencionados autores para el estudio termomecánico-metalúrgico del temple de acero son FORTRAN[13][15], Basic [16] y ABAQUS [17][18]. Existen a su vez plataformas de software comerciales, aunque cabe destacar que no existe una solución (incluso de acceso abierto) que pueda estudiar todas las combinaciones de aleaciones, tratamientos térmicos, geometrías y medios de temple aún (razón por la cual el estudio en este campo continúa al día de la fecha). Algunos los de estos paquetes comerciales de FEM para simulaciones de tratamiento térmico (DANTE, DEFORM-HT, FORGE, HEARTS, MUSIMAP, SIMUFACT, SYSWELD, SIMHEAT, Thermo-calc), si bien se han mejorado para cumplir con ciertos estándares, su desarrollo en términos de funcionalidad, facilidad de uso y flexibilidad se

1. Introducción

queda atrás en comparación con el progreso en paquetes más ampliamente utilizados como análisis estructural y conformado de metales [3], sin contar con su relativamente altos costos de licencia .

A partir de la revisión bibliográfica inicial, en este trabajo se propuso utilizar dos de los aceros de mayor uso comercial (dentro de los capaces de transformar martensíticamente y de media-alta resistencia mecánica) que son el SAE 1045 y SAE 4140, templado en un medio de aceite a 100°C y con una geometría simple de cilindros de diferentes diámetros (1" y ½" de diámetros y largos de 90 mm). Dicha combinación no fue encontrada en bibliografía al saber y entender del autor al día de la fecha. Lo que es más, el desarrollo numérico se realizó utilizando Matlab y solo necesitando registrar temperaturas en un punto de la pieza.

1.3 Objetivos del trabajo

El objetivo **general** de este trabajo fue estudiar el proceso de temple de metales combinando modelos físicos, ensayos experimentales y simulación numérica, orientado a desarrollar capacidades de modelado de tratamientos térmicos de elementos mecánicos.

Para ello se plantearon los siguientes objetivos **específicos**

1. Estudiar los modelos térmicos, metalúrgicos y mecánicos, y sus acoplamientos, necesarios para simular el proceso de temple de componentes metálicos.
2. Realizar ensayos físicos del proceso de temple en piezas de acero (SAE 1045 y SAE 4140) de geometría simple (cilindros de 1" y ½" de diámetros) empleando condiciones controladas para recabar datos experimentales que permitan verificar o ajustar el modelo.
3. Incorporar los modelos estudiados a una herramienta numérica que permita simular el proceso de temple. De ser necesario, ajustar las variables del modelo en función de los resultados de los ensayos físicos.

1.4 Organización del documento

Luego de haber presentado la introducción y objetivo del trabajo, el presente trabajo se encuentra organizado de la siguiente manera:

2. Método Experimental: se describen aquí las muestras utilizadas y su preparación para los ensayos, así como también la obtención y procesamiento de datos
3. Cálculo numérico: se separa esta sección en Térmico y Metalúrgico, donde para cada uno de esas dos, se presenta primero el modelo utilizado y luego la resolución adoptada para estos modelos.
4. Resultados: se presentan aquí las curvas de enfriamiento experimentales y las obtenidas por cálculo numérico en todos los puntos de la pieza, así como también los perfiles de durezas y metalografías realizadas.
5. Discusión: se comparan y analizan los resultados experimentales y numéricos
6. Conclusiones: resumen de resultados más importantes de todo el estudio realizado

2. Método Experimental

2.1 Materiales y muestras

2.1.1 Materiales utilizados

Dentro de la industria de las aleaciones de mediana-alta resistencia, los aceros de baja aleación continúan representando el mayor volumen de los materiales utilizados. Para el presente estudio, se utilizaron dos clases de acero a fin de contemplar las transformaciones metalúrgicas más comunes de este material: SAE 1045 y SAE 4140.

El acero SAE 1045 es un acero de medio carbono típicamente utilizado para aplicaciones como partes de máquinas que requieran dureza y tenacidad: bulones, engranajes de baja velocidad, acoplamientos, árboles, bielas, cigüeñales, ejes de maquinaria de resistencia media, etc. Debido a su medio contenido de carbono y ausencia de elementos de aleación (ver Tabla 1), su microestructura consta de típicamente ferrita y perlita, por lo que se lo considera un acero de baja templabilidad o directamente no templable (no es posible obtener altas durezas a grandes profundidades de piezas de este material templadas)[22][23].

Por otro lado, el acero SAE 4140 es un acero de medio carbono y baja aleación con Cr y Mo como aleantes (ver Tabla 1), los cuales desplazan las curvas de transformación por difusión a mayores tiempos, permitiendo así aumentar su templabilidad y obtener bainita y martensita en su microestructura. Esto le permite ser utilizado en aplicaciones que requieran mayores resistencias mecánicas y durezas, así como también a la fatiga como árboles de transmisión de servicio pesado, bielas de conexión, pernos de alta resistencia, etc [22][23].

Ambos aceros, fueron ensayados y estudiados en forma de barra de sección circular, utilizando dos diámetros (para cada material): $\frac{1}{2}$ y 1 pulgada (12.7 y 25.4mm). Las composiciones químicas de los materiales utilizados en este trabajo fueron obtenidas por Espectroscopía de Emisión Óptica, de acuerdo a la norma ASTM E 415/99 en la empresa “Corporación ABS”. Los valores obtenidos, junto a los valores de referencia según literatura, se detallan en la Tabla 1:

Tabla 1: Composición química de muestras y referencias

Material	Diámetro	C	Si	Mn	P	S	Cr	Ni	Mo
SAE 1045	1"	0.43	0.22	0.795	0.02	0.0175	0.035	0.025	0.01
	$\frac{1}{2}$ "	0.43	0.23	0.775	0.023	0.015	0.03	0.025	0.01
	Valores de referencia [22]	0.43-0,5		0,60-0,90	<0,04	<0,05			
SAE 4140	1"	0.39	0.27	0.86	0.018	0.013	1.1	0.03	0.15
	$\frac{1}{2}$ "	0.41	0.27	0.86	0.02	0.015	1.09	0.03	0.19
	Valores de referencia [22]	0,38-0,43	0,15-0,35	0,75-1,00	<0,035	<0,04	0,8-1,1		0,15-0,25

2. Método Experimental

En este trabajo, se realizaron dos tandas de ensayos con los mismos materiales y similares condiciones, nombradas como Lote 0 y Lote 1 de aquí en más. La caracterización completa y análisis de los lotes se realizó de forma secuencial. Es decir, se realizaron todos los ensayos (caracterización metalúrgica y medidas de dureza del Lote 0 [24][25]) para probar la metodología, la cual fue aplicada al Lote 1 luego de pequeños ajustes. Por otro lado, la nomenclatura utilizada para todas las muestras se explica con el ejemplo a continuación.

Para cada Lote, un aceite de temple distinto fue utilizado: OIL TEMP N° 2 (Lote 0) y Thermisol QH 15L (Lote 1). Estos son aceites de temple acelerado que son caracterizados industrialmente por una serie de parámetros como la viscosidad a 40°C (típicamente medida en centistokes), su punto de inflamación (limita la temperatura de uso) y la velocidad de enfriamiento a dadas temperaturas (típicamente medidas en probetas de Níquel siguiendo la norma ASTM D 6200 [26]). Estos valores se presentan en la Tabla 2:

Tabla 2: Especificaciones de fábrica de los aceites utilizados

Muestras	Nombre	Viscosidad a 40°C (cSt.)	Punto de inflamación (°C)	Velocidad de enfriamiento a 600°C (°C/s)
Lote 0	OIL TEMP N° 2	20-30	180	54,5
Lote 1	Thermisol QH 15L	14.7	164	110

En la Tabla 3 se resume lo explicado así como también detalla el número de muestras para cada condición.

Tabla 3: Matriz de ensayos de temples instrumentados

Material	Diámetro	Lote	Cantidad de muestras (y nombres)
SAE 1045	1"	0	3 (L0-1045-1p-1, L0-1045-1p-2, L0-1045-1p-3)
		1	3 (L1-1045-1p-1, L1-1045-1p-2, L1-1045-1p-3)
	½"	0	3 (L0-1045-05p-1, L0-1045-05p-2, L0-1045-05p-3)
		1	2 (L1-1045-05p-1, L1-1045-05p-2)
SAE 4140	1"	0	2 (L0-4140-1p-1, L0-4140-1p-2)
		1	2 (L1-4140-1p-1, L1-4140-1p-2)
	½"	0	2 (L0-4140-05p-1, L0-4140-05p-2)
		1	2 (L1-4140-05p-1, L1-4140-05p-2)

No se tuvieron en cuenta, desde el punto de vista de los resultados metalúrgicos las muestras de 1" de diámetro del Lote 0, debido a que luego de analizados los resultados, el tiempo de austenización utilizado en esas muestras podría considerarse insuficiente de acuerdo a prácticas recomendadas (1 hora por pulgada de espesor [1]).

2.1.2 Preparación de muestras para temple

Como ya se adelantó en la sección anterior, la geometría de las probetas consistió en cilindros, y particularmente de dos diámetros distintos, $\frac{1}{2}$ " y 1". El diseño de las probetas fue basado en la norma ISO 9950 para el análisis de curvas de enfriamiento de aceites de temple, y reportado en (Totten & Howes, 2001) [27]. Para este trabajo en particular, el largo de dichos cilindros fue de 90 mm (ambos diámetros), con excepción de uno que fue de 100 mm para luego del normalizado poder sacar una sección de 10 mm para metalografía, tal como se muestra en la Figura 2.

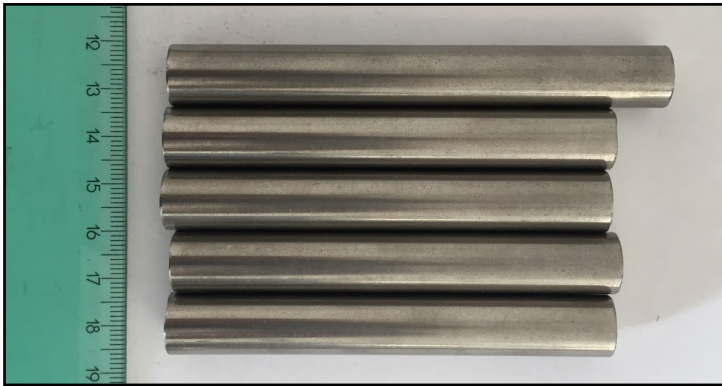


Figura 2: Barras cortadas listas para tratamiento térmico de normalizado Figura 3: Barras normalizadas

Una vez cortadas las barras, y con el objetivo de lograr una misma condición metalúrgica para todas las probetas, las barras fueron sometidas a tratamientos de normalizado. Los tiempos y temperaturas de dicho tratamiento térmico fueron los comúnmente utilizados en la industria (1 hora por pulgada de espesor [1]) y se muestran en la Tabla 4 para los dos diámetros, mientras que el aspecto de las mismas luego de dicho tratamiento térmico se puede observar en la Figura 3.

Tabla 4: Condiciones de tratamientos térmicos de normalizado

Diámetro	Temperatura	Tiempo*	Enfriamiento
$\frac{1}{2}$ "	860°C	0,5 horas	Al aire calmo
1"	860°C	1 hora	Al aire calmo

*El tiempo que se considera es cuando el horno retoma la temperatura seteada (860°C)

Tras el normalizado, las muestras son perforadas para lograr un agujero longitudinal de 3 mm de diámetro y 45 mm de profundidad en la zona central de la probeta, por el que irá la termocupla. Cabe aclarar que se realiza también un bisel a 45° en la zona final del agujero para facilitar el posterior ingreso de la termocupla (ya que el agujero realizado es muy estrecho, para que la termocupla esté en contacto siempre con la barra, pero lo cual dificulta su inserción sin este bisel). En el extremo de la muestra donde se halla el agujero se le soldó un tubo de $\frac{3}{8}$ " de diámetro y 20 cm de largo con manija en el extremo opuesto. El mismo servirá como protección para la termocupla y agarre para la manipulación durante la realización de los ensayos. La Figura 4 muestra esquemáticamente un corte de la muestra con el agujero, la termocupla y el tubo soldado.

2. Método Experimental

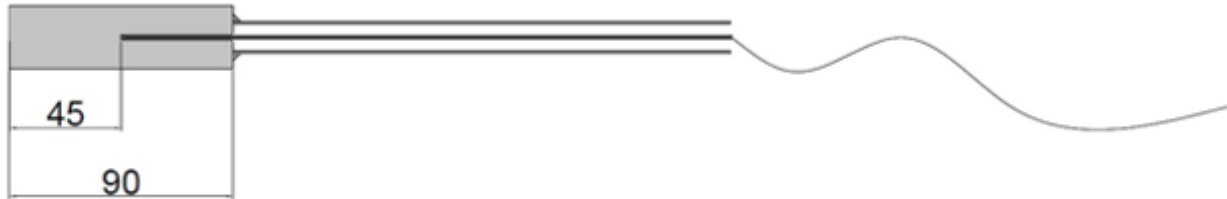


Figura 4: Corte esquemático de una de las probetas con tubo soldado por el que pasa la termocupla (valores en mm)

Para corroborar que se haya hecho una correcta soldadura del cilindro al tubo, y de esta forma evitar que durante el temple ingrese aceite por el agujero en el que se halla la termocupla, se realizaron pruebas de estanqueidad. Las mismas consistieron en sumergir las barras en agua e inyectar aire comprimido por el tubo, para finalmente observar si aire (burbujas) salía a través de algún punto de la soldadura, como se muestra en un caso en el que no había estanqueidad en la Figura 5.

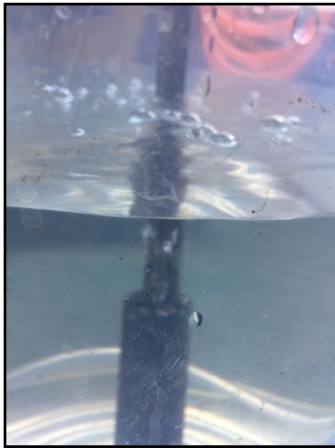


Figura 5: Prueba de estanqueidad de la soldadura



Figura 6: Cepillado de muestra

Una vez asegurado que todas las soldaduras estaba correctamente realizadas, se procedió a pulir las muestras con un cepillo de cerdas de acero para remover el óxido generado en el tratamiento térmico de Normalizado (óxido en la superficie podría sino alterar las condiciones de transferencia de calor en la superficie) como se muestra en la Figura 6.

Finalmente, el último paso consistió en limpiar con alcohol la superficie de las probetas para evitar la generación de óxido. Luego de este último paso, las muestras ya están listas para ser ensayadas, tal como muestra la Figura 7.



Figura 7: Probeta de ½" de diámetro lista para ser templada

2.2 Tratamiento Térmico

2.2.1 Temple

Con el objetivo de analizar el comportamiento térmico y las transformaciones metalúrgicas de estos dos aceros, se procedió a realizar temple instrumentados con las probetas descritas en la sección anterior, con una termocupla insertada hasta el centro de las mismas (ver Figura 4):

La disposición de la instalación para hacer dichos tratamiento térmicos puede observarse en la Figura 8, donde los principales componentes son:

- Horno eléctrico seteado a 850°C con un agujero por el que entra y sale la muestra, ver Figura 9 (y se cubre con lana de vidrio cuando la misma se encuentra dentro). De esta manera se evitaba abrir la puerta de la mufla y por ende grandes disminuciones de temperatura al ingresar la muestra.
- Adquisidor de Temperatura: Novus FieldLogger con capacidad de adquisición de 100 datos por segundo.
- Aceite de temple: Thermisol QH 15L (aceite de temple acelerado) a 100°C y sin agitación, y para el Lote 0: OIL TEMP N° 2, ver Tabla 2.
- Termocupla tipo K con vaina de Inconel (Temperatura máxima admisible 1000°C).



Figura 8: Disposición de los ensayos de temple



Figura 9: Probeta dentro del horno

2.3 Análisis Metalográfico

2.3.1 Preparación Metalográfica

La preparación de las muestras para el estudio metalográfico se realizó de acuerdo a los siguientes pasos recomendados en [28].

2. Método Experimental

1. Corte de muestras templadas en discos de 10 mm de espesor aproximadamente
2. Inclusión en resina acrílica
3. Desbaste con papeles de SiC de granulometría 320, 400, 600, 1000, 1500
4. Pulido con paños y suspensiones de diamante de 6 y 3 μm
5. Ataque metalográfico: solución con 4% de ácido pícrico (Picral) por 25 segundos, seguido de una segunda inmersión en una solución 2% de ácido nítrico (Nital) por 15 segundos.

2.3.2 Cuantificación de fases

Para la cuantificación de fases se utilizó el software libre de procesamiento de imágenes ImageJ y se procedió a ajustar los contrastes de colores e intensidades. Por ejemplo, para las muestras bainítico-martensíticas (SAE 4140) los tonos de la imagen se ajusta de tal forma de que se separen los dos valores de brillo más altos (el más oscuro correspondiente a bainita, mientras que el más claro a martensita). En la Figura 10 se muestra un ejemplo para una muestra SAE 4140, seguido de la detección de las zona con mayor brillo (marcadas de color negro) en la Figura 11. En la sección de análisis y discusión se proponen otros métodos para lograr esta cuantificación de forma más precisa, mientras que en el “Anexo A: Rutina para cuantificación fases” se explican las rutinas de cuantificación utilizadas, particularmente para la muestras de SAE 1045 templadas donde 3 distintos microconstituyentes se cuantificaron.



Figura 10: Metalografía de muestra L1-4140-1p-1 en el centro ($r=0$), templada, 500x

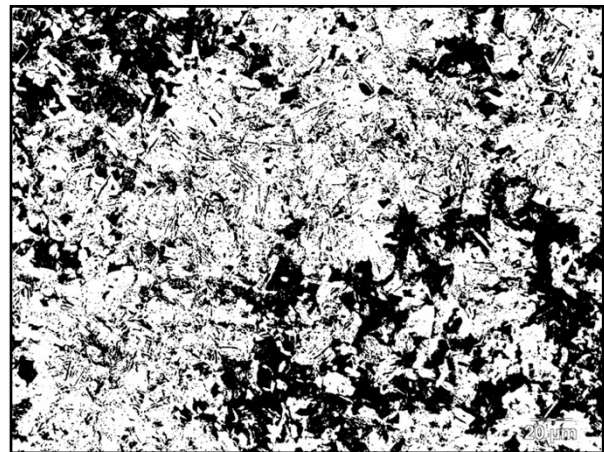


Figura 11: Misma muestra de la Figura 10 pero con la martensita detectada en negro

Para cada muestra se analizaron dos zonas: centro ($r=0$) y medio radio ($r=R/2$), ya que la superficie ($r=R$) no fue tomada en cuenta debido a la descarburización, tal como se explica en el “Anexo F: Descarburización superficial”. Para cada una de estas zonas se utilizaron tres metalografías a 500x y así se obtuvo un valor promedio de cada zona. Los resultados de la cuantificación de fases se detallarán en la sección de resultados correspondientes.

2.3.3 Mediciones de microdureza Vickers

Las durezas en este caso se realizaron siguiendo los lineamientos de la norma ASTM E384 [49] y utilizando un microdurómetro Leitz Durimet del Departamento de Materiales de la CNEA. Para ellos se realizaron perfiles de microdureza tal como se esquematiza en la Figura 12.

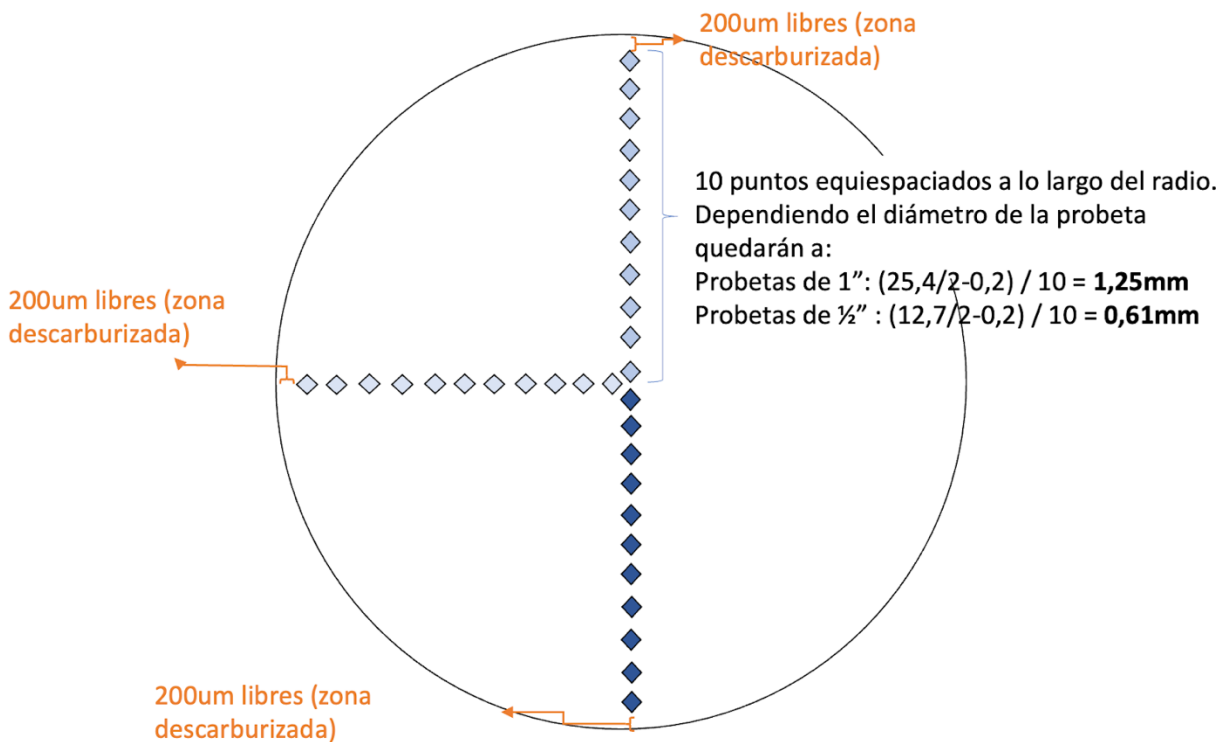


Figura 12: Representación esquemática de las mediciones de dureza tomadas.

De esta manera, cada posición del radio está representada por 3 puntos de medición. A su vez, como las muestras de SAE 4140 mostraron mayor dispersión entre las 3 mediciones de cada posición, 3 perfiles extra se realizaron en estas muestras (dando un total de 6 perfiles por muestras, es decir, 6 puntos de medición para cada posición del radio).

2.4 Procesamiento de datos experimentales T-t

Para la determinación del coeficiente de transferencia de calor es necesario disponer de los valores de temperatura (T-t) y velocidad de enfriamiento (dT/dt-t) en el centro de la probeta (donde se colocó la termocupla que registró las curvas de enfriamiento).

La velocidad de enfriamiento se estimó utilizando una fórmula centrada de segundo orden:

$$\frac{dT^{(i)}}{dt} = \frac{T^{(i+1)} - T^{(i-1)}}{t^{(i+1)} - t^{(i-1)}} \quad \text{Ecuación 2-1}$$

La señal de temperatura (registrada en el centro de las probetas) fue filtrada utilizando dos etapas de filtro por difusión no lineal [6]. Este filtrado permitió poder trabajar con los datos sin que existiesen saltos de temperatura a intervalos de tiempo muy pequeños, productos del ruido generado por el sistema de adquisición (termocupla, adquisidor, etc.), a la vez que mantiene las características principales de la señal analizada. Los resultados obtenidos gracias al filtrado se muestra en la Figura 13:

2. Método Experimental

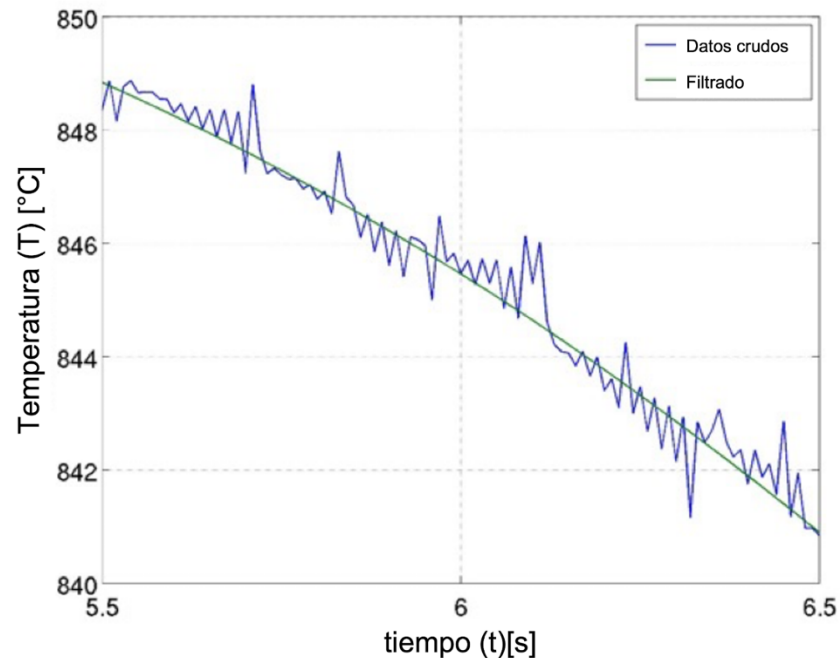


Figura 13: Ejemplo de resultados obtenido gracias al filtrado de la señal recopilada experimentalmente (adaptado de [6])

3. Cálculo Numérico

3.1 Análisis térmico

3.1.1 Modelo Térmico

Para el estudio del problema térmico, se consideró la ecuación de transferencia de calor 1-D axisimétrico en toda la geometría (Figura 14):

$$\frac{\delta T}{\delta t} - \alpha \frac{1}{r} \left(\frac{\delta}{\delta r} \left(r \frac{\delta T}{\delta r} \right) \right) = Q_z \quad \text{Con } t > 0, 0 < r \leq R \quad \text{Ecuación 3-1}$$

Donde:

- α es la difusividad térmica y se define como

$$\alpha = \frac{k}{\rho C_p} \quad \text{Ecuación 3-2}$$

con α =difusividad térmica (m²/s); ρ =densidad (kg/m³); k =conductividad térmica (W/m/K); C_p = Calor específico (J/kg/K)

- Q_z es una fuente o sumidero de calor debida al cambio de entalpía debido a las transformaciones de fase por unidad de volumen que pueden ocurrir durante el proceso. Este valor no fue considerado en este trabajo, es decir: $Q_z=0$

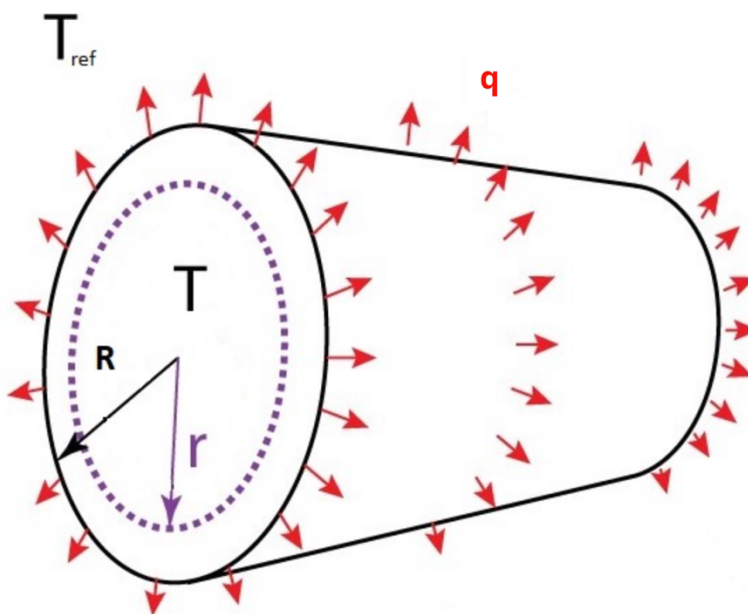


Figura 14: Representación esquemática de la transferencia de calor en las muestras

3. Cálculo Numérico

Las condiciones de contorno (Figura 15) fueron

$$\frac{\delta T}{\delta t} = 0, \text{ para } r=0 \text{ (condición de simetría)}$$

$$q_w(T_w) = -k \frac{\delta T}{\delta r} = h(T_w - T_{Ref}) \quad \text{Ecuación 3-3}$$

para $r = R$ (Continuidad de flujos en la superficie)

$$T_{ref} = T_{aceite} = 100^\circ\text{C}$$

$$q_{extremos} = 0 \text{ W/m}^2 \text{ (tapas superior e inferior del cilindro, ver Figura 15)}$$

Y la condición inicial:

$$T(r,0) = T_0 = 850^\circ\text{C}$$

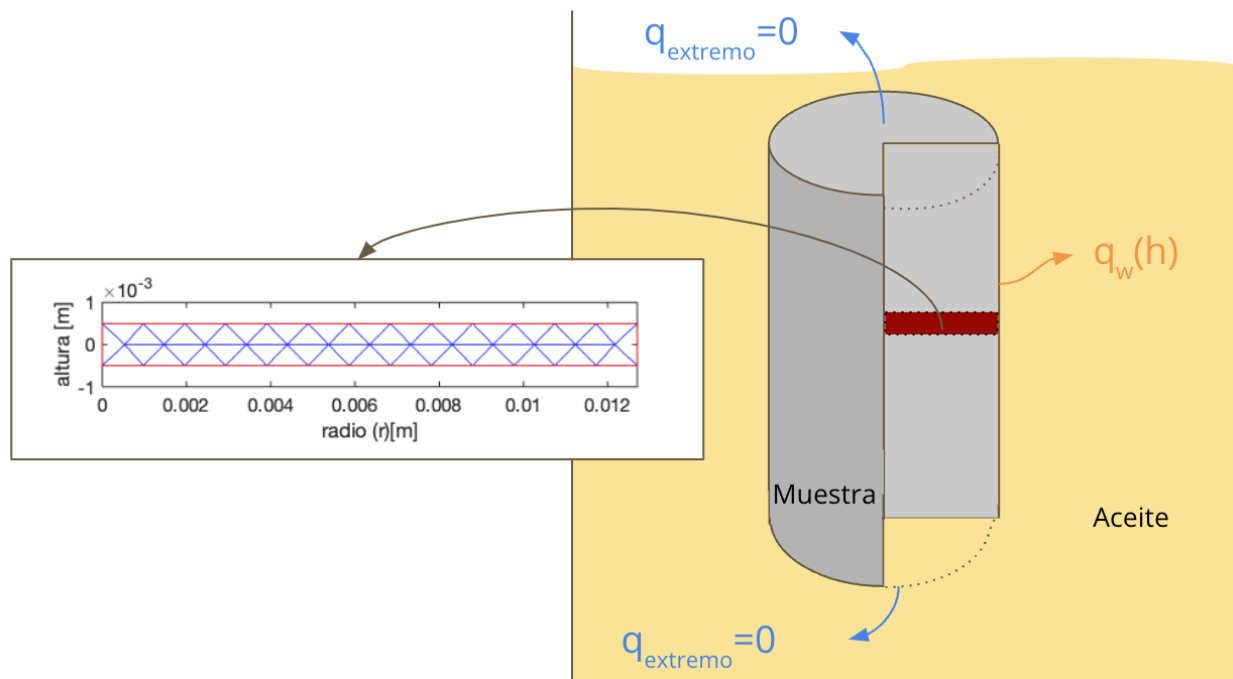


Figura 15: Imagen esquemática de la probeta en el aceite y mallado utilizado durante la simulación de la sección analizada.

La transferencia de calor entre la pieza y el medio (aceite a 100°C), puede describirse por medio de un coeficiente de transferencia térmica “h” (dependiente de la temperatura) que engloba los mecanismos de transferencia de calor involucrados (convección y radiación), de acuerdo a

$$q_w(T_w, T_{Ref}) = h(T_w) \times (T_w - T_{Ref}) \quad \text{Ecuación 3-4}$$

siendo q_w el flujo de calor por unidad de superficie en la superficie (“wall”), T_w la temperatura en la superficie (“wall”) de la probeta y T_{ref} la temperatura de referencia del aceite (100°C).

Este coeficiente de transferencia térmica (h) describe cómo se está transfiriendo calor desde la pieza al medio, para lo cual existen tres mecanismos principales que se dan en el tratamiento

térmico de aceros a distintas temperaturas (en orden decreciente de temperatura): Película de vapor, nucleación de burbujas y convección monofásica (ver Figura 16)

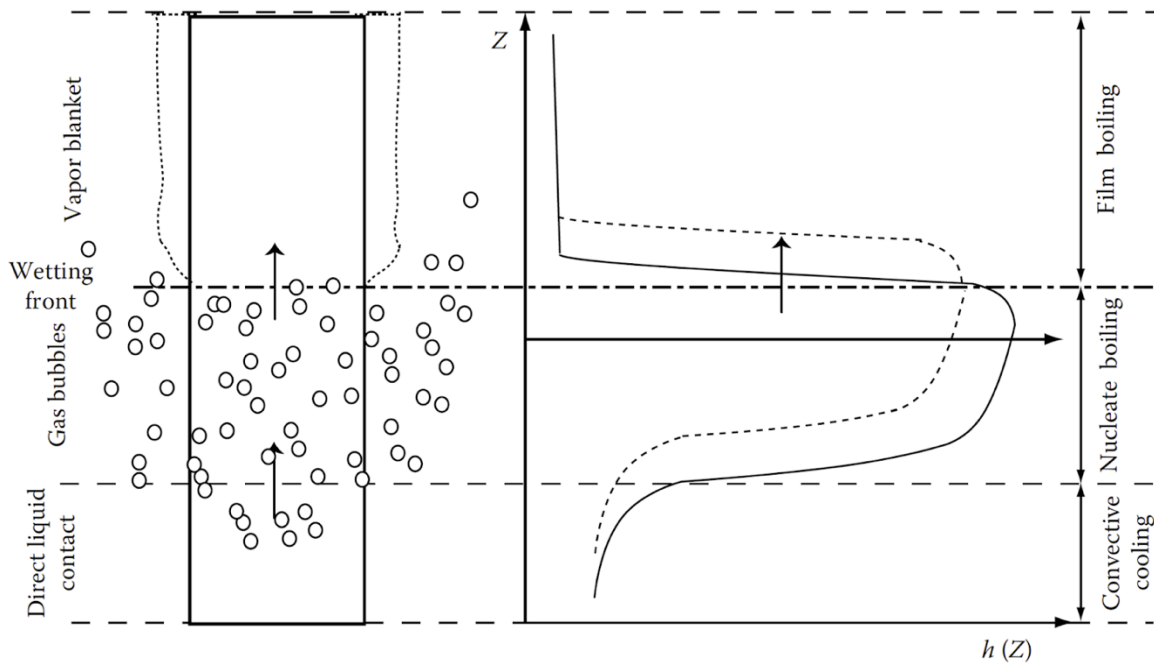


Figura 16: Movimiento del frente de mojado y variación del coeficiente de transferencia térmica en función de la posición (Hakan Gür, Cemil, & Jiansheng Pan, 2009)[29]

3.1.2 Resolución Problema Térmico

El punto de partida para la resolución del problema térmico son los valores de temperatura del centro de la probeta adquiridos durante los ensayos de temple. Estos valores, suelen también representarse como las velocidades de enfriamiento (dT/dt , T) de acuerdo a la Ecuación 2-1 y tal como se muestra a modo de ejemplo en la Figura 17. El problema térmico consiste entonces en poder reproducir estas curvas a partir del registro de temperaturas en el centro de la probeta y dadas una condiciones de contorno en la superficie que son desconocidas [6].

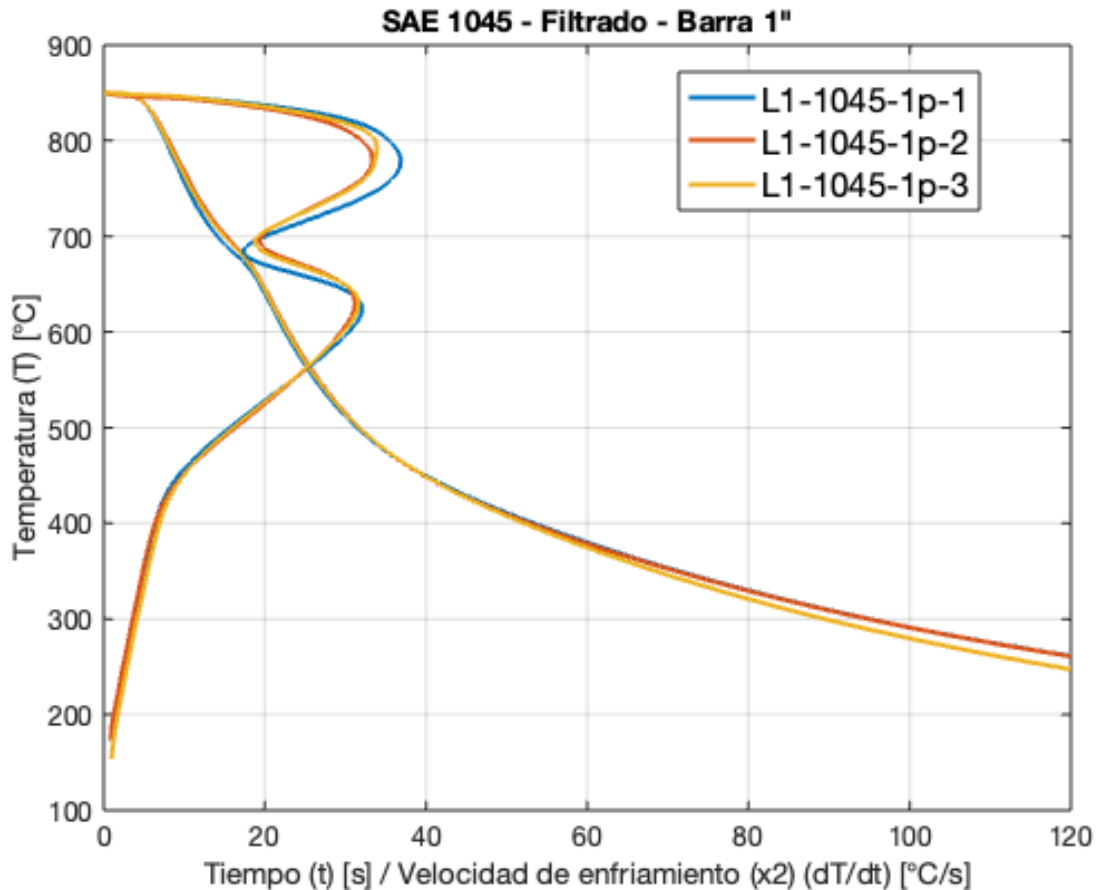


Figura 17: Ejemplo de curvas de enfriamiento expresadas como T vs t , y T vs dT/dt

Una vez filtrados los valores experimentales de temperaturas en el centro (ver “2.4 Procesamiento de datos experimentales $T-t$ ”), se busca obtener el coeficiente de transferencia térmica (h) que describa al proceso de enfriamiento de la pieza. La obtención de este coeficiente no puede realizarse de forma directa. Como estrategia de resolución, se estimó un coeficiente de transferencia de calor inicial (h_0) a partir de las temperaturas registradas en el centro de la probeta, el cual fue aplicado a la resolución del problema directo (Con $t > 0$, $0 < r \leq R$ Ecuación 3-1 y Ecuación 3-2). A partir de las diferencias entre los valores de temperatura numéricos y experimentales del centro de la probeta, se modificó el coeficiente h_0 hasta lograr un buen ajuste de temperaturas, obteniendo el coeficiente de transferencia térmica final (h_f). La estrategia de resolución del problema térmico es similar a la utilizada en [6].

Para ello, primero se deben definir un conjunto de propiedades termofísicas (para el iterante inicial h_0). Se utilizó para eso las propiedades descritas en (Kang & Im, 2005)[15] para las fases austenita y perlita, y considerando a la ferrita y martensita con las mismas propiedades que los microconstituyentes anteriores.

Las muestras de acero que fueron templadas, tendrán distintas fracciones de fases dependiendo de las temperaturas. Debido a ello, se consideró como iterante inicial, que las propiedades termofísicas de la muestra (“Steel” en la Figura 18), a cada temperatura iban a corresponder siempre al de la fase que tenga mayor conductividad, y menor densidad y calor específico (de forma de obtener la mayor difusividad térmica). La decisión de adoptar este método se tomó en

3. Cálculo Numérico

base de comparar con diversas opciones que son detalladas en el “Anexo B: Determinación de modelo de propiedades termofísicas dependientes de la temperatura”.

De esta manera, los valores de difusividad térmica (α) para las fases/microconstituyentes independientes, así como también para lo considerado como iterante inicial de la muestra (“Steel”), se calculan de acuerdo a la Ecuación 3-2 y se grafican en la Figura 18:

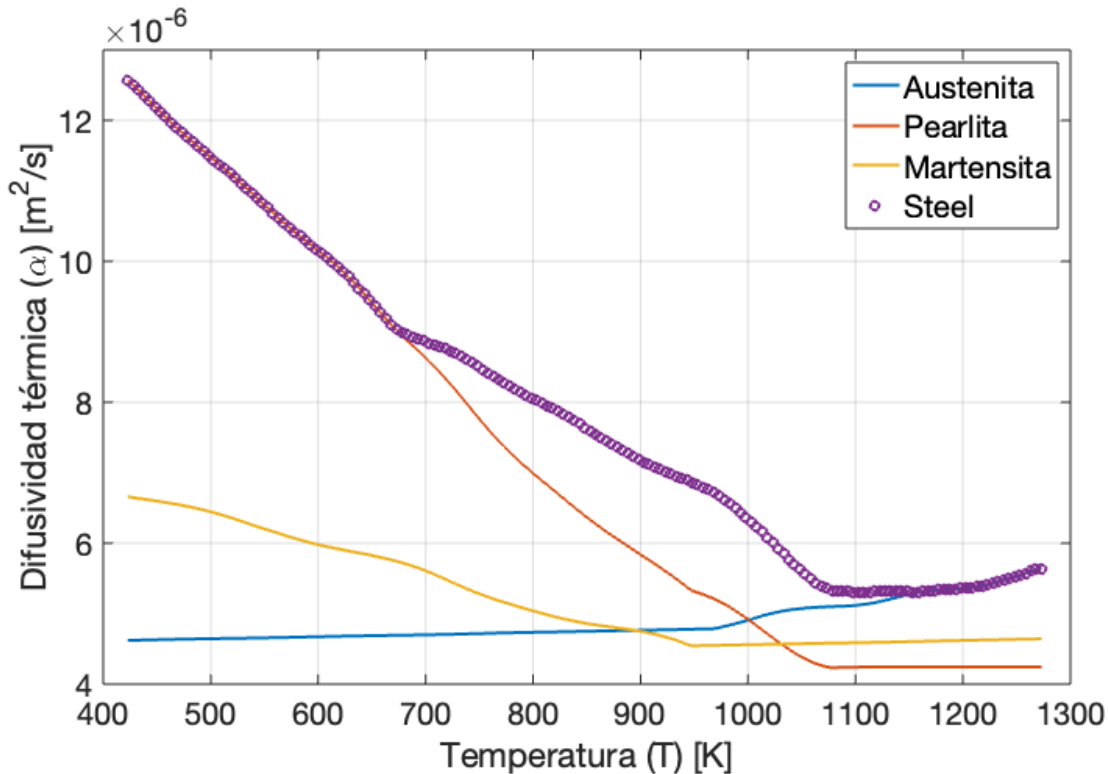


Figura 18: Difusividad térmica utilizada para la muestra (y de sus microconstituyentes), calculadas a partir de las propiedades termofísicas de sus microconstituyentes

Con dichas propiedades establecidas el coeficiente de transferencia térmica inicial (h_0) para cada temperatura, el cual se calcula de acuerdo a [6] como:

$$h_0 = \frac{k\beta_1 J_1(\beta_1 R)}{J_0(\beta_1 R)} \quad \text{Ecuación 3-5}$$

$$\text{con } \beta_1 \approx \sqrt{-\frac{dT/dt}{\alpha(T-T_{ref})}} \quad \text{Ecuación 3-6}$$

donde J_0 y J_1 son polinomios de Bessel de primer orden, y los k y α son las conductividades y difusividades térmicas correspondientes de la muestra a cada temperatura de acuerdo a la Figura 18. Es importante destacar que la función β_1 surge de la solución analítica de enfriamiento de un cilindro sometido a un coeficiente de transferencia de calor constante. Los considerandos de la utilización de esta aproximación se detallan en [6]. Los registros experimentales de temperatura y velocidades de enfriamiento en el centro de la probeta y su procesamiento, son necesarios para

3. Cálculo Numérico

obtener la aproximación de coeficiente de transferencia de calor que describa el proceso de temple realizado.

De esta manera se calcula un vector de valores h_0 (valor h_0 para cada temperatura), el cual se lo considera como el iterante inicial. Dicho valor es una buena aproximación del coeficiente de transferencia térmica del caso en estudio (como se verá más adelante en la sección “4. Resultados”).

Este coeficiente h_0 se calcula a partir de los valores de temperatura en el centro de la probeta. Sin embargo, el coeficiente de transferencia térmico es una función dependiente de los valores de temperatura en la superficie (ver Ecuación 3-4), por lo que es de esperar que exista una diferencia entre los valores experimentales y los obtenidos de forma numérica. Por lo tanto, luego de encontrar este h_0 a partir de la temperatura del centro, se procede a realizar una optimización del mismo. Para ello, el primer paso es calcular el error (e_r) entre los valores experimentales y los numéricos de temperaturas en el centro de la probeta (T_e y T_{num} respectivamente) para cada tiempo de la siguiente manera:

$$e_r = \sum_{t=0}^{t_f} abs(T_e(t) - T_{num}(t)) \quad \text{Ecuación 3-7}$$

En función de la observación de la tendencia de los errores obtenidos, se propuso utilizar una función exponencial de tres coeficientes para encontrar el coeficiente h que minimice este error, tal como se muestra en la Ecuación 3-8:

$$\frac{h_f}{h_0} = (b - c) \cdot e^{(-a \cdot t)} + c \quad \text{Ecuación 3-8}$$

donde t es el tiempo para cada h , a , b y c coeficientes de ajuste y h_f el coeficiente de transferencia de calor que minimiza el error entre los valores de temperatura numéricos y experimentales en el centro de la pieza.

El promedio y rango de cada uno de los parámetros de ajuste a , b y c utilizados para las distintas condiciones Se presentan en laTabla 5:

Tabla 5: Promedios y rangos de los parámetros de ajuste para los coeficientes “h”

Parámetro de ajuste	Promedio	Mínimo	Máximo
a	0,18	0,03	0,60
b	2,78	1,70	3,60
c	1,96	1,80	2,00

A modo de ejemplo, en la Figura 19 se presentan para el caso de SAE 1045 y 1” de diámetro, los valores de h_0 (estimado a partir de valores experimentales) y h_f (ajustado). En la Figura 20 se presentan los valores de temperatura en el centro de la probeta. Los valores experimentales en

3. Cálculo Numérico

azul, los valores numéricos obtenidos utilizando h_0 (curva roja) y los numéricos utilizando el h_f optimizado (curva amarilla).

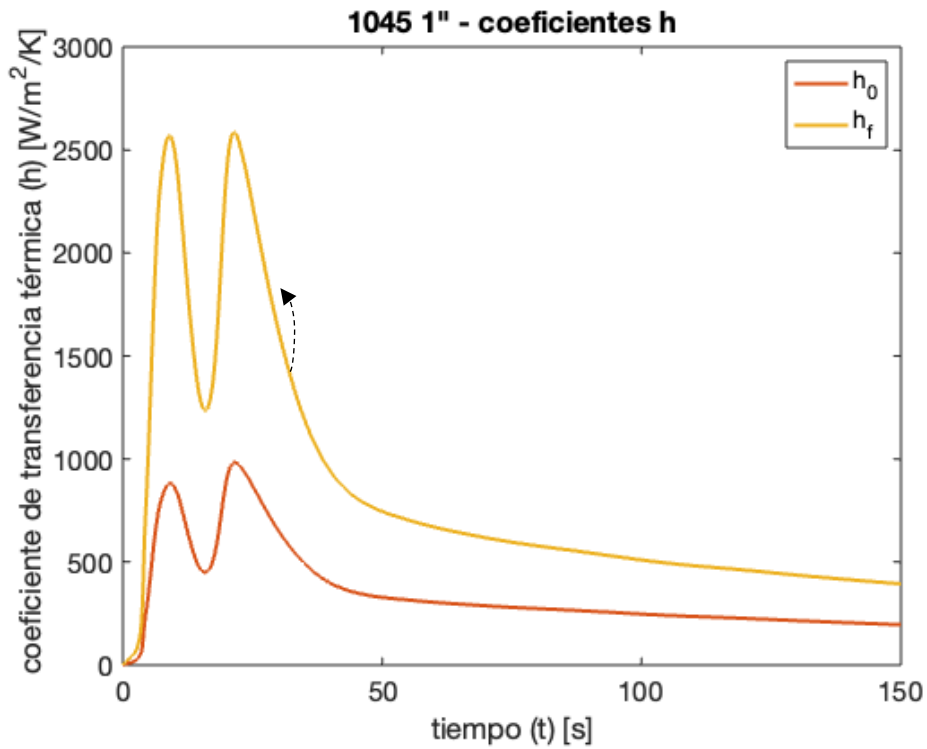


Figura 19: Coeficientes de transferencia térmica h_0 y h_f en función del tiempo

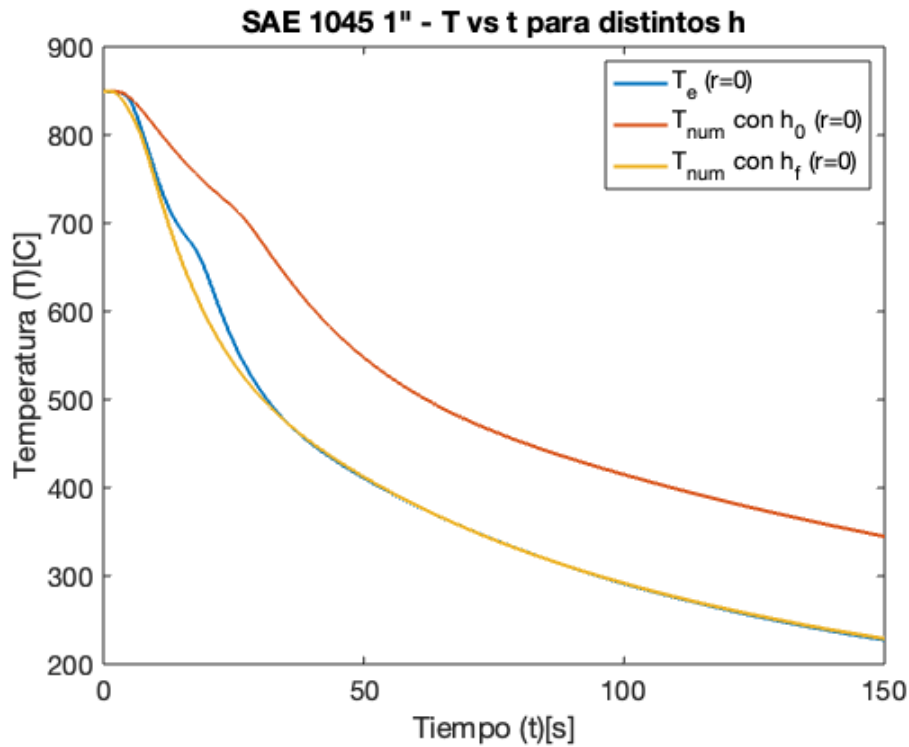


Figura 20: Curvas de enfriamiento experimental, utilizando h_0 y utilizando h_f

Una vez hallado el h_f , se procede a realizar todo el cálculo térmico (utilizando las condiciones de contorno e iniciales descritas a principio de la sección 3.1.1 Modelo Térmico) con el objetivo de hallar las temperaturas a lo largo de todo el radio de la barra. Para ello se utiliza el resolvidor “solve” de la versión de Matlab R2019b, capaz de resolver sistemas de ecuaciones algebraicas, así como también “createpde” para la creación del modelo de convección de calor no constante (dependiente del h) [30]. Este resolvidor utiliza el método de elementos finitos (FEM) para resolver el problema de conducción de calor. Los tamaños mínimos y máximos de elementos de la malla utilizados (ver Figura 15) fueron de 0,1 y 1 mm, respectivamente.

3.2 Análisis metalúrgico

3.2.1 Modelo metalúrgico

Durante el enfriamiento de los aceros desde el campo austenítico, los mismos evidencian cambios en sus microestructuras. Estos cambios pueden clasificarse como cambios de fase por **difusión** (movimiento de elementos dentro de la estructura determinan las transformaciones: ferrita y perlita) o **displativos** o sin difusión (mecanismos de desplazamiento y deformación, ejemplo martensita). Existe una tercera categoría que es la de las transformaciones mixtas (inicio por desplazamiento y deformación pero crecimiento por difusión, como la bainita), pero a fines de simplificación, estas últimas serán tratadas como difusivas [31].

3.2.1.1 Transformaciones por difusión

La forma más simple de las transformaciones por difusión es la de las transformaciones isotérmicas, las cuales siguen las cinéticas de transformación de Johnson-Mehl-Avrami-Kolgomorov (JMAK) [32]:

$$\xi_k = 1 - \exp(-b_k \cdot t^{a_k}) \quad \text{Ecuación 3-9}$$

donde ξ_k es la fracción transformada de la fase k , y “ b ” y “ a ” coeficientes que dependen de la temperatura y la transformación asociada. Esta expresión se corresponde con una curva sigmoideal como puede verse en la parte derecha de la Figura 21. Ya que las transformaciones en este trabajo no ocurrirán a temperaturas constantes, y que para cada temperatura existe un conjunto de factores a y b que determinan la ecuación de JMAK, se procedió entonces a discretizar los tiempos en pequeños intervalos Δt , dentro de los cuales las transformaciones pueden seguir la regla de JMAK [15].

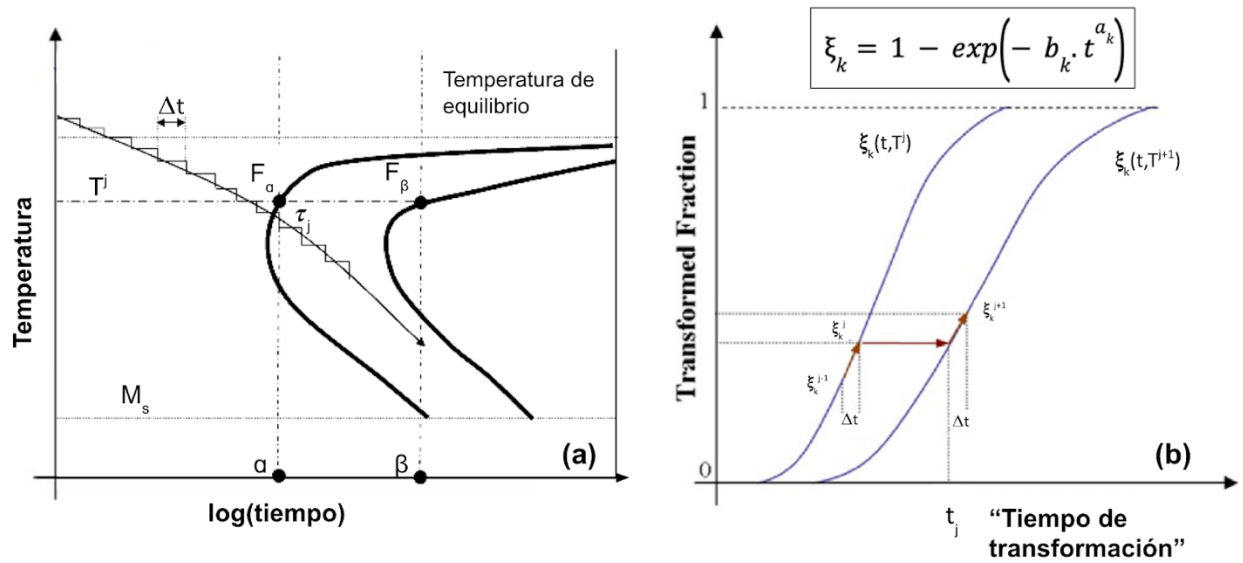


Figura 21: (a) Representación esquemática de la regla de aditividad de Scheil [15], (b) fracción transformada vs “tiempo de transformación” con las curvas para dos pasos distintos (j y $j+1$) [14].

Por otro lado, los coeficientes a y b pueden expresarse en función de los tiempos de inicio y finalización de la transformación de la fase en cuestión (α y β) y las fracciones al inicio y fin (F_{α} y F_{β} , consideradas como 0,01 y 0,99 para este trabajo respectivamente) (ver curva de la izquierda en Figura 21), para cada temperatura de transformación, de la siguiente manera [15]:

$$a_k = \frac{\ln\left(\frac{\ln(1 - F_{\alpha k})}{\ln(1 - F_{\beta k})}\right)}{\ln\left(\frac{\alpha_k}{\beta_k}\right)} \quad \text{Ecuación 3-10}$$

$$b_k = -\left(\frac{\ln(1 - F_{\alpha k})}{\alpha^{a_k}}\right) \quad \text{Ecuación 3-11}$$

Para adaptar el modelo a un enfriamiento continuo, dos otros cambios se realizan:

1. El tiempo de transformación (t_j) se lo considera como la suma de los intervalos de tiempos registrados (Δt_j) y el tiempo obtenido en base a la fracción transformada de cada fase en el tiempo anterior (ξ_k^{j-1}), de acuerdo a la siguiente ecuación y el gráfico en la parte izquierda de la Figura 21[15]:

$$t_j = \Delta t_j + \left(-\frac{\ln(1 - F^{j-1})}{a_k}\right)^{\frac{1}{b_k}} \quad \text{Ecuación 3-12}$$

2. Se utiliza la regla de adición de Scheil [33]: la curva de enfriamiento es subdividida en una serie de pequeños intervalos de tiempo, y la transformación se asume que comienza a ocurrir cuando se alcanza la siguiente condición:

$$\sum_{j=1}^n \frac{\Delta t_j}{\tau_j} = 1 \quad \text{Ecuación 3-13}$$

donde τ_j es el tiempo de inicio de transformación luego del paso número j de tiempo (ver gráfico de la izquierda de la Figura 21).

De esta forma se asume una condición isotérmica para cada paso de tiempo y se calcula la fracción de volumen acumulada de la fase transformada mediante la ecuación JMAK y la regla aditiva. Al final de cada paso de tiempo (j), se obtiene la fracción transformada calculada por la ecuación JMAK y, para el siguiente paso de tiempo ($j+1$), se aplica la ecuación JMAK para la nueva temperatura.

Cuando se trata de un conjunto de fases presentes en la aleación, la Ecuación 3-9 puede reescribirse como [34]:

$$\xi_k = \xi_k^{\max} \xi_k^0 (1 - \exp(-b_k \cdot t^{a_k})) \quad \text{Ecuación 3-14}$$

con ξ_k^{\max} la concentración máxima de la fase k que se puede formar a esa temperatura, y ξ_k^0 la fracción de austenita remanente disponible para la transformación al inicio de la misma. En la sección “3.2.2.2 Fracciones máximas de fases” se detalla cuáles fueron los ξ_k^{\max} utilizados.

3.2.1.2 Transformaciones displasivas (sin difusión)

Este tipo de transformaciones, que solo dependen de la temperatura (y no del tiempo) tienen una resolución más sencilla propuesta por Koistinen y Marburger [35]:

$$\xi_m = \xi_m^0 (1 - \exp(-\beta[M_s - T])) \quad \text{Ecuación 3-15}$$

donde M_s es la temperatura de inicio de la transformación martensítica y β una constante igual a 0,011 para la mayoría de los aceros de uso común [15]. Este modelo es el utilizado para el cálculo de la fracción de martensita transformada en función de la M_s .

3.2.2 Resolución Problema metalúrgico

3.2.2.1 Temperatura Tiempo Transformación (diagramas TTT)

El cálculo metalúrgico se realiza con los resultados obtenidos del cálculo térmico, ya que el problema metalúrgico es caracterizado por las fracciones de cada fase para todo tiempo. Las variables necesarias para ello son:

- Tiempos y temperaturas de inicio y fin de las transformaciones difusivas
- Temperatura de inicio de la transformación displasiva

Cada una de estas variables se recopila a partir de los siguientes diagramas TTT para los aceros en cuestión (recordar que se realiza la transformación de cinéticas isotérmicas a anisotérmicas de acuerdo a la regla de adición de Sheil y la Ecuación 3-12). Los diagramas TTT utilizados (como punto de partida) fueron extraídos de (Tottem, Narazaki, Blackwood, & Jarvis, 2002)[36] para el SAE 1045 y de (ASM International, 1995)[1] para el SAE 4140. Los diagramas originales se

3. Cálculo Numérico

muestran en el “Anexo C: Diagramas TTT originales” y los adaptados para el cálculo de esta tesis en las siguientes imágenes, donde los dos cambios realizados son:

1. Inclusión de curva de Fin de ferrita: calculada a partir de multiplicar el tiempo de inicio de ferrita por un factor x3.
2. Adaptación de M_s para enfriamiento no isotérmico: a medida que aumenta la fracción de austenita transformada por transformaciones difusivas, la M_s disminuye (ver figuras en el “Anexo D: Curvas CCT”)

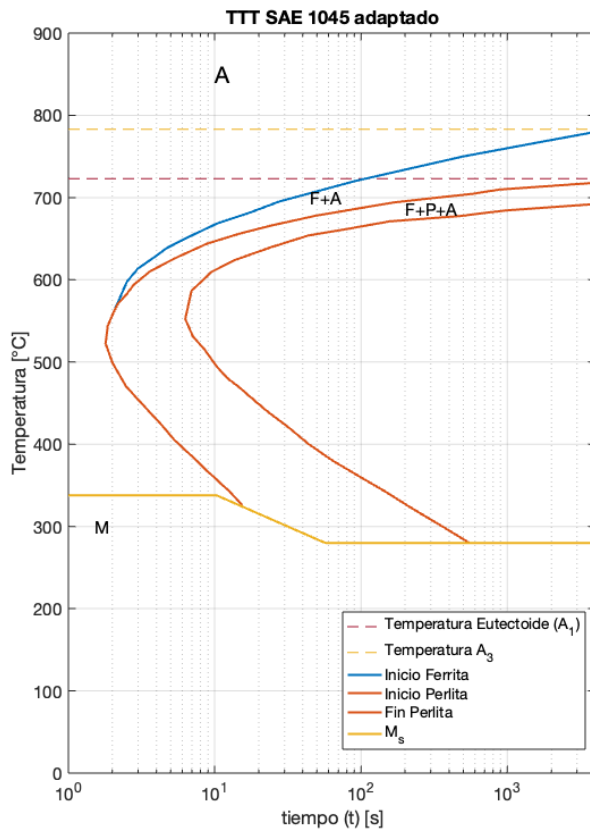


Figura 22: Diagrama TTT utilizado como punto de partida en este trabajo para las muestras de SAE 1045 basado en [36]

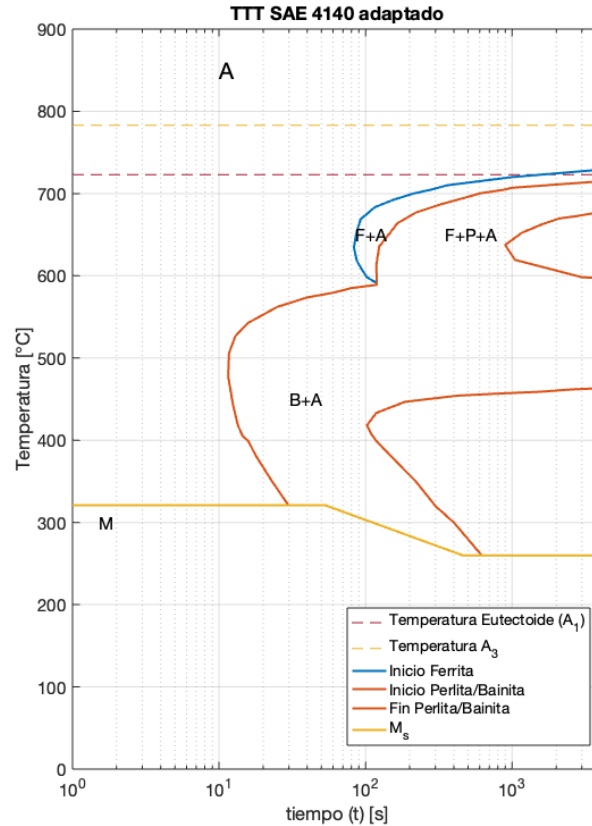


Figura 23: Diagrama TTT utilizado como punto de partida en este trabajo para las muestras de SAE 4140 basado en [1]

Luego de determinar estos diagramas TTT originales, los valores de fases (y durezas) que se obtuvieron a partir de usar las temperaturas registradas en el centro de la probeta y el cálculo numérico para resolver la ecuación de calor, fueron comparados con los valores experimentales (metalografías y mediciones de microdurezas). Esto se realiza con el fin de ajustar el modelo numérico, para lo cual la variable de ajuste que se utiliza son los tiempos de inicio de transformación, en otras palabras, la posición de las curvas TTT.

Variaciones en tamaños de grano austeníticos, segregaciones químicas, temperatura de austenización, estado de tensiones e historia previa de deformación, son factores que pueden afectar las transformaciones metalúrgicas (Hakan Gür, Cemil, & Jiansheng Pan, 2009)[29]. (Lu,

2016)[37] demuestran cómo el cambio en el tamaño de grano, particularmente en el acero SAE 4140 puede cambiar los tiempos de inicio de transformación hasta por un factor de 2x cuando se pasa de un tamaño de grano ASTM 8 a 6 (a menor tamaño de grano, antes comienzan las transformaciones por difusión). Por otro lado, (Lopez, Maldonado, Lopez, Guzman, & Garcia, 2019) [38] también corroboraron eso para los aceros AISI 1045 y 4140 mediante simulación y trabajo experimental.

Por este motivo es de esperar que los verdaderos diagramas TTT para cada muestra de este trabajo tengan diferencias, y por ende, puedan utilizarse como variable de ajuste en un rango acotado. En particular, dos factores se crearon:

- Factor F (adelanta o retrasa la transformación ferrítica) y
- Factor P (adelanta o retrasa la transformación perlítica).

Para encontrar los factores F y P óptimos, se empleó el método de optimización de Nelder Mead [39] para el caso en cuestión. Este método se trata de un método numérico que se utiliza para minimizar una función objetivo en un espacio multidimensional. En particular lo que se busca es iterar sobre distintas combinaciones de factores F y P (en otras palabras, mover las curvas del diagrama TTT), de forma tal que el error relativo de fracciones de microconstituyentes y durezas entre los valores obtenidos a partir de la simulación numérica y los valores experimentales (tanto para las posiciones $r=0$ y $r=R/2$) sea mínimo. La forma de calcular dicho error es la raíz del error-relativo-cuadrático-medio (ERCM), donde se pondera por igual el error en la dureza con el promedio de los errores de todas las fases de la siguiente manera:

$$Error = \sqrt{\left(ERCM(druzea) + \frac{1}{n} \sum_{z=1}^n ERCM(fase_z) \right) / 2} \quad \text{Ecuación 3-16}$$

donde n es el número total de microconstituyentes (5 para este trabajo), y ERCM se calcula como:

$$ERCM = \left(\frac{Exp - Sim}{Exp} \right)^2 \quad \text{Ecuación 3-17}$$

donde *Exp* es la propiedad (dureza o fase) medida experimentalmente y *Sim* la misma propiedad obtenida por simulación numérica.

Así, visualmente puede observarse como la función error encuentra un mínimo para una determinada combinación de factores F y P, tal como se muestra a modo de ejemplo para el caso SAE 1045 y ½” de diámetro en la Figura 24:

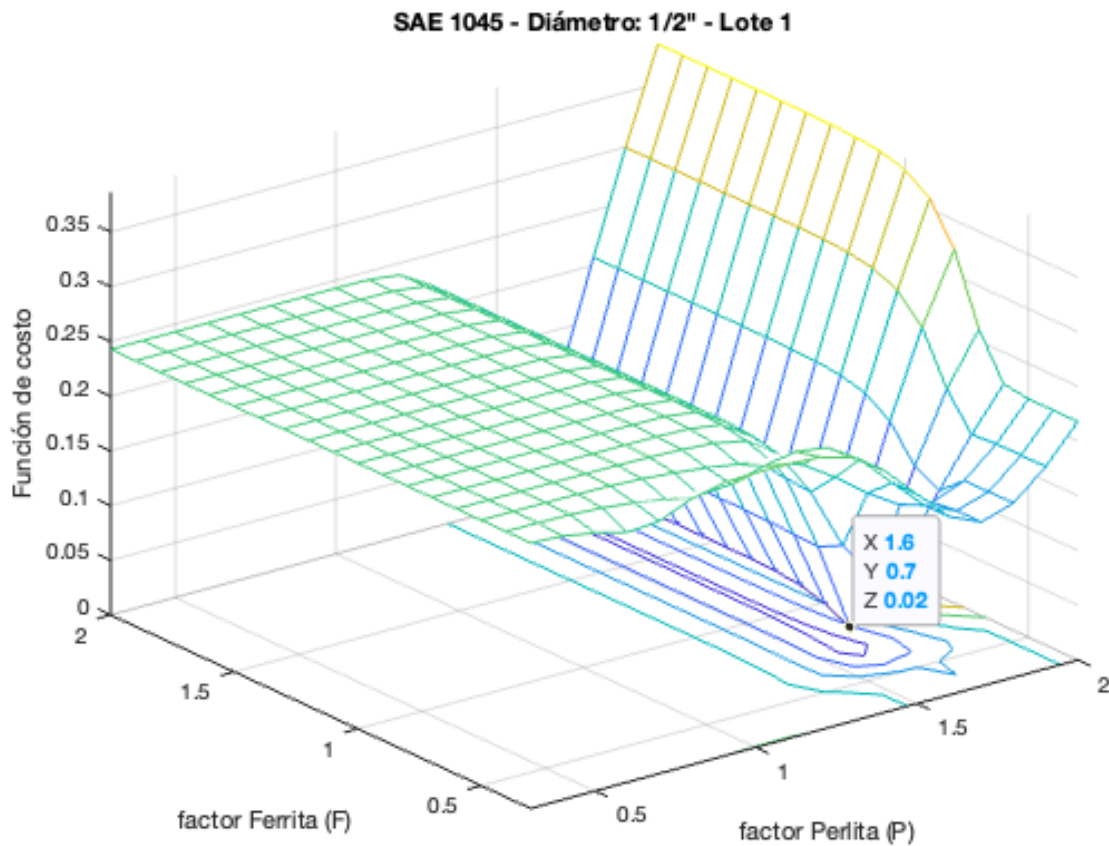


Figura 24: Función de costo (error entre valores simulados y experimentales) en función de Factores de ajuste del diagrama TTT “F” (Ferrita) y “P” (Perlita)

En el caso donde los factores F y P eran similares para mismos materiales y distintos diámetros, se procedió a calcular una combinación única de factores. Este fue el caso para las muestras de SAE 4140 (1” y ½”).

En general los factores F y P que optimizan la simulación no se encontraba lejos de 1, es decir, del diagrama TTT original, siendo la única excepción el SAE 1045 1” que necesito un factor P de 2.9. Los factores finales se muestran en la Tabla 6.

Tabla 6: Resumen de factores finales F y P utilizados

Material	Diámetro	Factor F	Factor P
SAE 1045	1”	1.1	2.9
	½”	0.7	1.6
SAE 4140	1”	1	0.7
	½”	1	0.7

3. Cálculo Numérico

Finalmente, dos temperaturas fueron necesarias para completar el modelado numérico. Por un lado, para diferenciar el momento cuando deja de transformar austenita a perlita para comenzar la transformación bainítica, se utilizó una B_s (temperatura de inicio de transformación bainítica). El valor de B_s al inicio de las transformaciones fue calculado utilizando el programa MUCG 83 desarrollado por la Universidad de Cambridge [40] y con las composiciones químicas medidas en cada uno de los aceros estudiados (ver sección “2.1.1 Materiales utilizados”).

Por otro lado, el valor de M_s fue calculado utilizando también el programa MUCG 83 [40] y con las composiciones químicas medidas en cada uno de los aceros estudiados (ver sección “2.1.1 Materiales utilizados”). Sin embargo, a medida que aumenta la fracción de austenita transformada por transformaciones difusivas, la M_s disminuye (ver figuras en el “Anexo D: Curvas CCT”). En este trabajo se utilizaron entonces las M_s calculadas con dicho programa pero se tomó en cuenta también la bajada de M_s de acuerdo a las curvas CCT del anexo [12] y tal como se observa en la Figura 22 y la Figura 23.

3.2.2.2 Fracciones máximas de fases

Como fue mencionado en la Ecuación 3-14, ξ_k^{\max} es la concentración máxima de la fase k que se puede formar a esa temperatura. Para los microconstituyentes perlita y bainita, este valor fue tomado como 1, es decir, lo único que determinaría su proporción máxima sería la cantidad de austenita remanente. Sin embargo, para la ferrita proeutectoide, el valor máximo fue el calculado de acuerdo a una simplificación de la regla de la palanca y el diagrama de equilibrio Fe-C (Figura 25):

$$\left\{ \begin{array}{ll} \xi_k^{\max} = \frac{(C_{\text{eutectoide}} - C_{\text{muestra}})}{C_{\text{eutectoide}}} & \text{para } T < T_{A1} \quad \text{Ecuación 3-18} \\ \xi_k^{\max} = \frac{(C_{\text{eutectoide}} - C_{\text{muestra}})}{C_{\text{eutectoide}}} \times \frac{(T_{A3} - T)}{(T_{A3} - T_{A1})} & \text{para } T_{A1} < T < T_{A3} \quad \text{Ecuación 3-19} \end{array} \right.$$

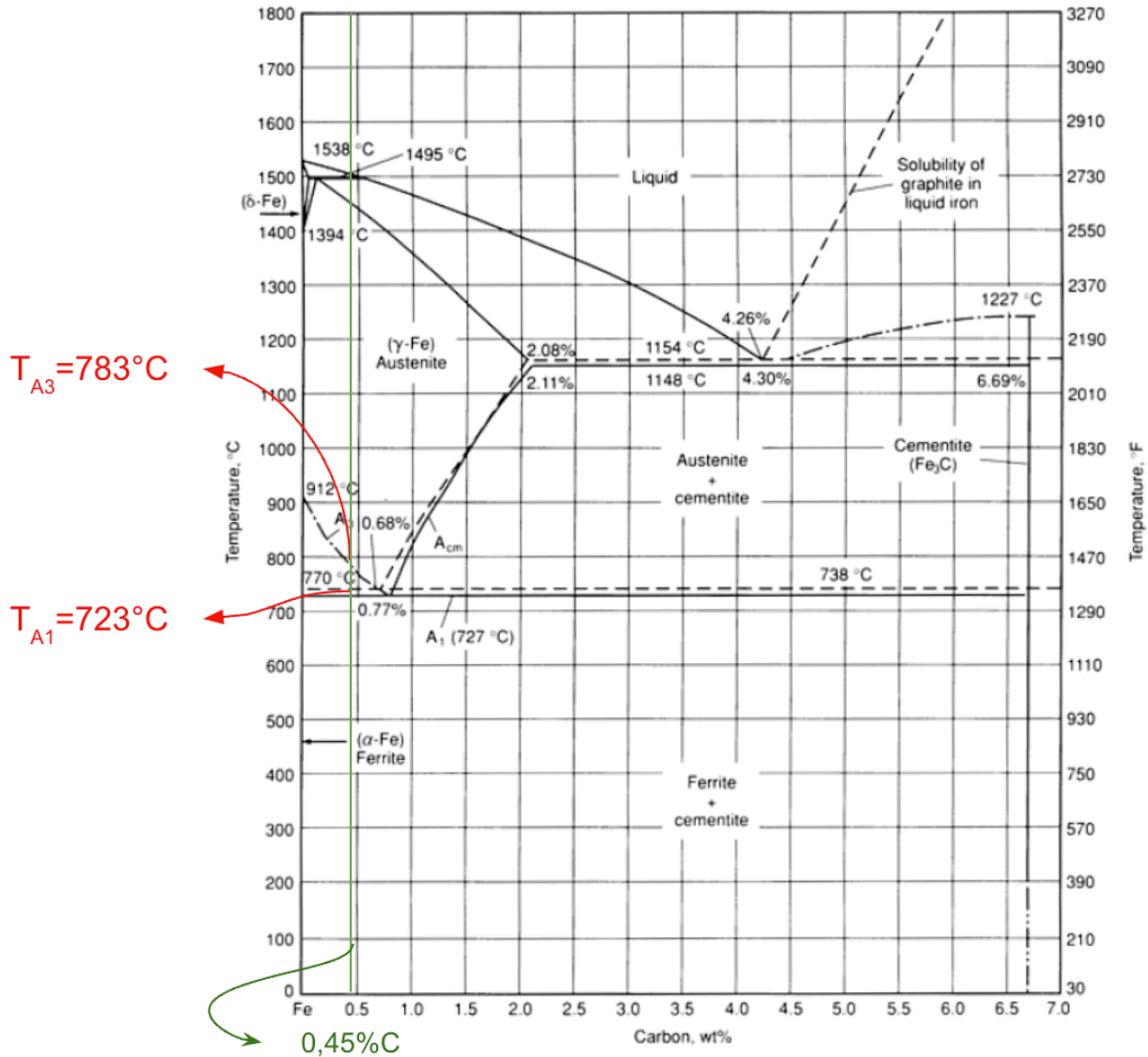


Figura 25: Diagrama de equilibrio Fe-C [1]

3.2.2.3 Lógica de cálculo

A partir de los diagramas TTT mostrados en la sección “3.2.2.1 Temperatura Tiempo Transformación (diagramas TTT)”, para cada temperatura, se evalúa en qué zona del diagrama TTT se encuentra la muestra, así como también el parámetro de Scheil, de la siguiente manera (donde ξ_X^{j+1} , es la nueva fracción para el paso $j+1$ de la fase X, con $X=M$ para martensita, $X=B$ para bainita, $X=P$ para Perlita y $X=F$ para ferrita):

3. Cálculo Numérico

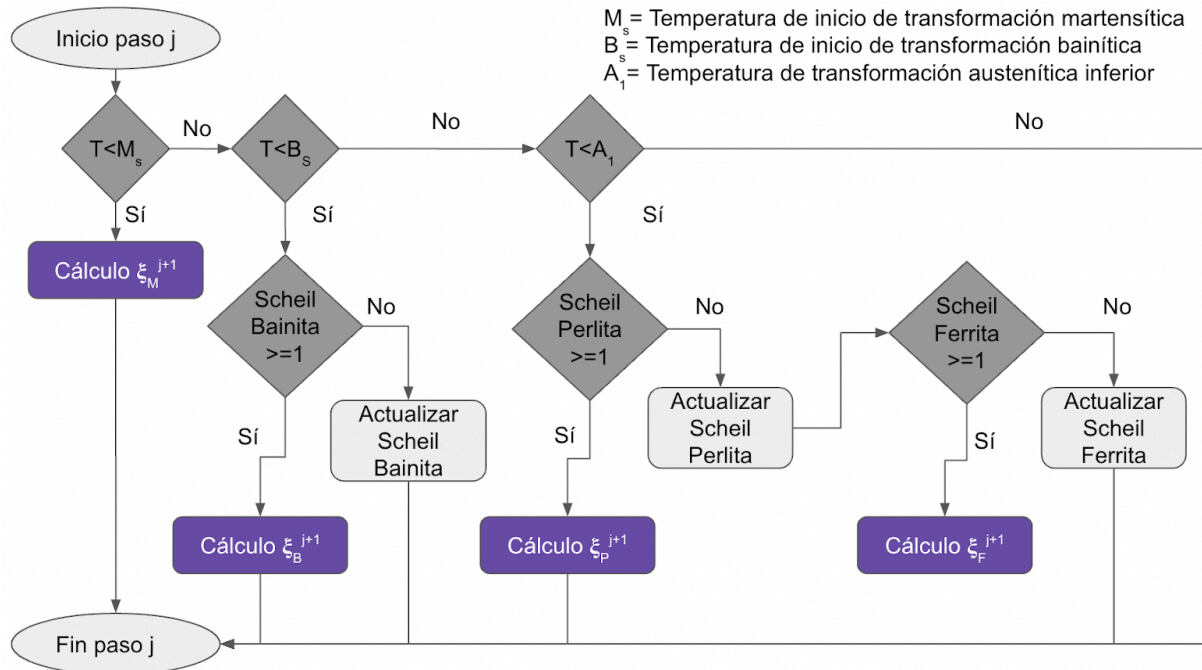


Figura 26: Diagrama de flujo del modelo implementado

Cabe destacar, que se utilizó una lógica de cálculo para las muestras de SAE 1045 con una modificación con respecto a la Figura 26: no se consideró el paso de Bainita. La razón por la que eso fue realizado se debe a que la observación por microscopía óptica de las muestras no reveló presencia de bainita en estos aceros (ver “Anexo E: Metalografías de barras normalizadas y templadas”). Con el paso de bainita incorporado en la lógica de cálculo, la proporción de perlita (alrededor de 70%) se veía fuertemente reemplazada por bainita, por lo que se decidió entonces no incorporar este paso para permitir que el modelo pueda representar los valores experimentales. Esta limitación del modelo también ha sido reportada en bibliografía [15].

3.2.2.4 Cálculo de dureza

Existen distintos modelos para calcular la dureza resultante de un acero de baja aleación en función de su velocidad de enfriamiento y composición química, tales como los de Mayner, Trzaska y Pohjonen [41]. En este trabajo las durezas de las muestras (en escala Vickers) luego de los tratamientos de temple fueron calculadas utilizando las ecuaciones empíricas propuestas por Maynier, Jungmann, and Dollet [42]:

$$\begin{aligned}
 HV_{a-f-p} &= 42 + 223C + 53Si + 30Mn + 12.6Ni + 7Cr + \dots \\
 &\dots + 19Mo + \log_{10} V_r (10 - 19Si + 4Ni + 8Cr + 130V)
 \end{aligned}$$

Ecuación 3-20

$$\begin{aligned}
 HV_b &= -323 + 185C + 330Si + 153Mn + 65Ni + 144Cr + \dots \\
 &\dots + 191Mo + \log_{10} V_r (89 + 53C - 55Si - 22Mn - 10Ni - 20Cr - 33Mo)
 \end{aligned}$$

Ecuación 3-21

$$HV_m = 127 + 949C + 27Si + 11Mn + 8Ni + 16Cr + 21 \log_{10} V_r$$

Ecuación 3-22

3. Cálculo Numérico

en donde la unidad de cada elemento es el porcentaje en peso, HV_{a-f-p} , HV_b y HV_m son las durezas para la combinación austenita-ferrita-perlita, bainita y martensita respectivamente (en dureza Vickers), y V_r es la velocidad de enfriamiento a 700°C en $^\circ\text{C}/\text{h}$. Finalmente la dureza Vickers en cada punto de la barra se calcula con la regla de mezcla teniendo en cuenta la fracción de cada una de las fases/microconstituyentes:

$$HV = HV_{a-f-p}(X_a^0 + X_f^0 + X_p^0) + HV_b X_b^0 + HV_m X_{bm}^0 \quad \text{Ecuación 3-23}$$

4. Resultados

4.1 Resultados experimentales

4.1.1 Resultados Térmicos

4.1.1.1 Curvas de enfriamiento

En la Figura 27, Figura 28, Figura 29 y Figura 30 se muestran las curvas de enfriamiento obtenidas en los ensayos de temple. Los resultados se muestran siempre agrupando mismos diámetro y mismo material (por ejemplo la Figura 27 es 1" y SAE 1045), y, donde corresponde, ambos lotes para esa combinación (Lote 1 líneas sólidas y Lote 0 líneas punteadas). A su vez, en cada uno de los gráficos se presentan dos tipos de curvas (señaladas sólo en el primer gráfico):

1. Temperatura vs tiempo
2. Temperatura vs velocidad de enfriamiento (multiplicada por 2, para mayor claridad en el gráfico)

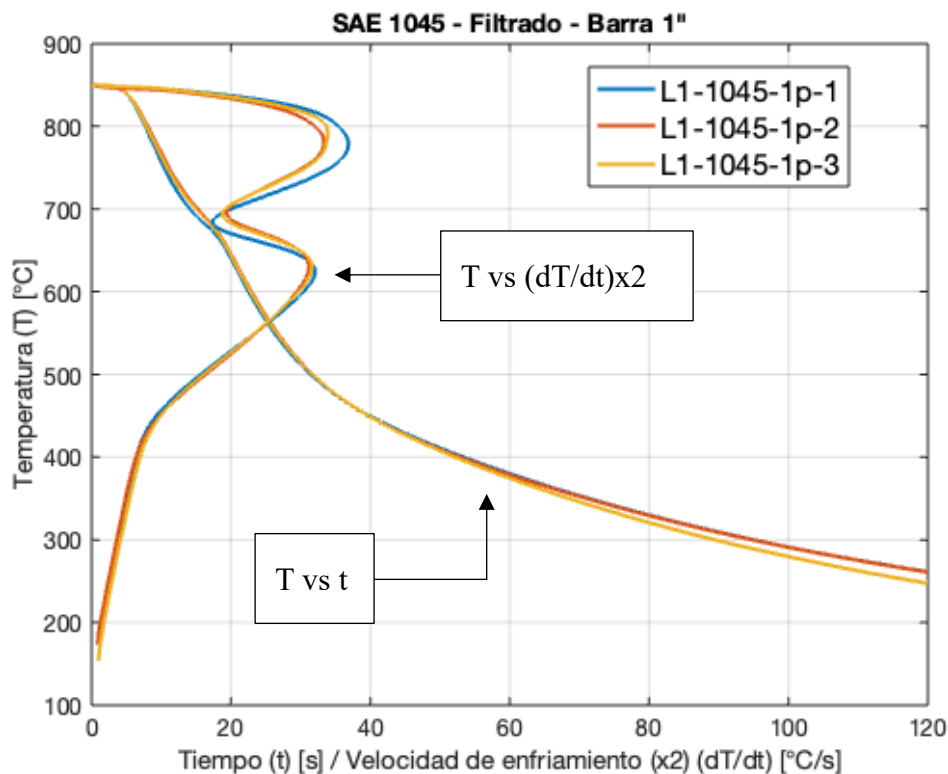


Figura 27: Curvas de enfriamiento registradas experimentalmente para las muestras de SAE 1045 y 1" de diámetro

4. Resultados

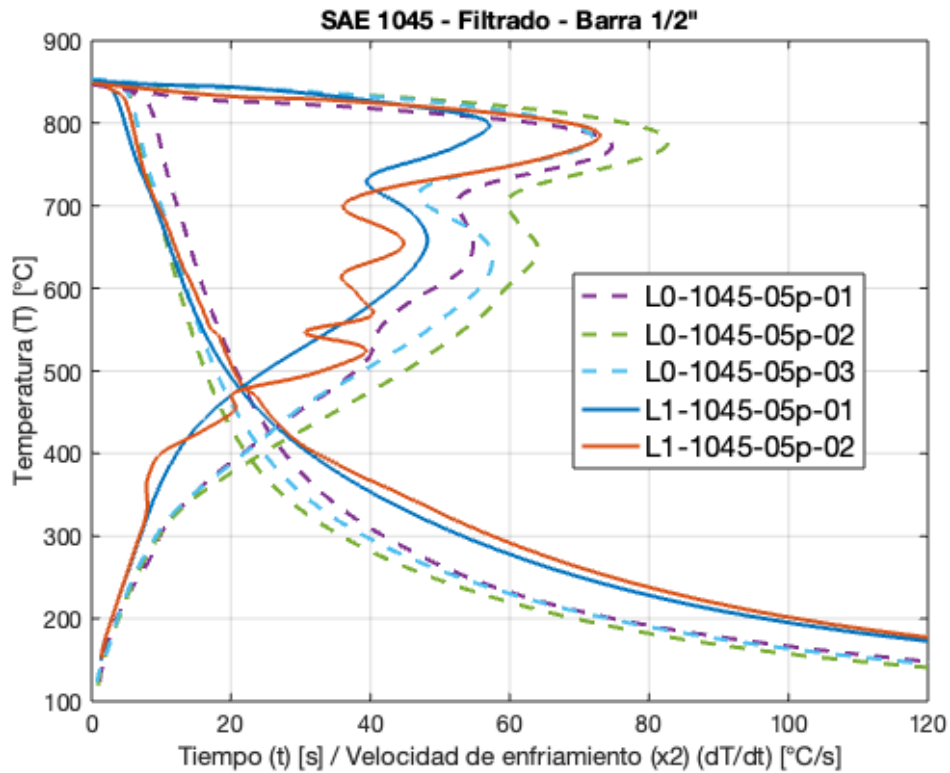


Figura 28: Curvas de enfriamiento registradas experimentalmente para las muestras de SAE 1045 y 1/2" de diámetro

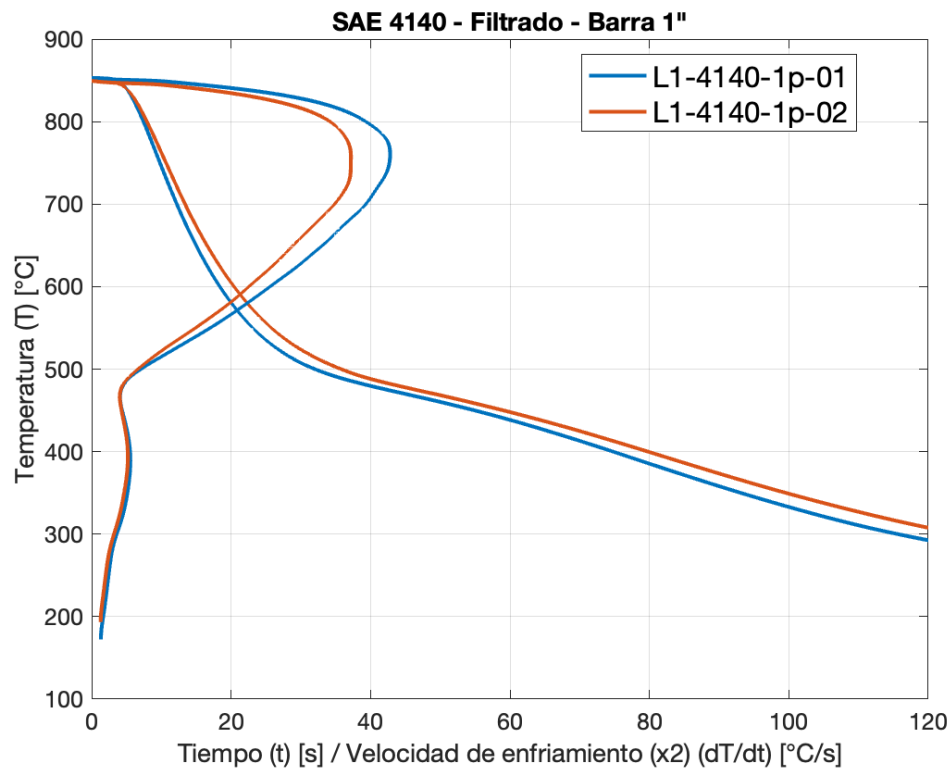


Figura 29: Curvas de enfriamiento registradas experimentalmente para las muestras de SAE 4140 y 1" de diámetro

4. Resultados

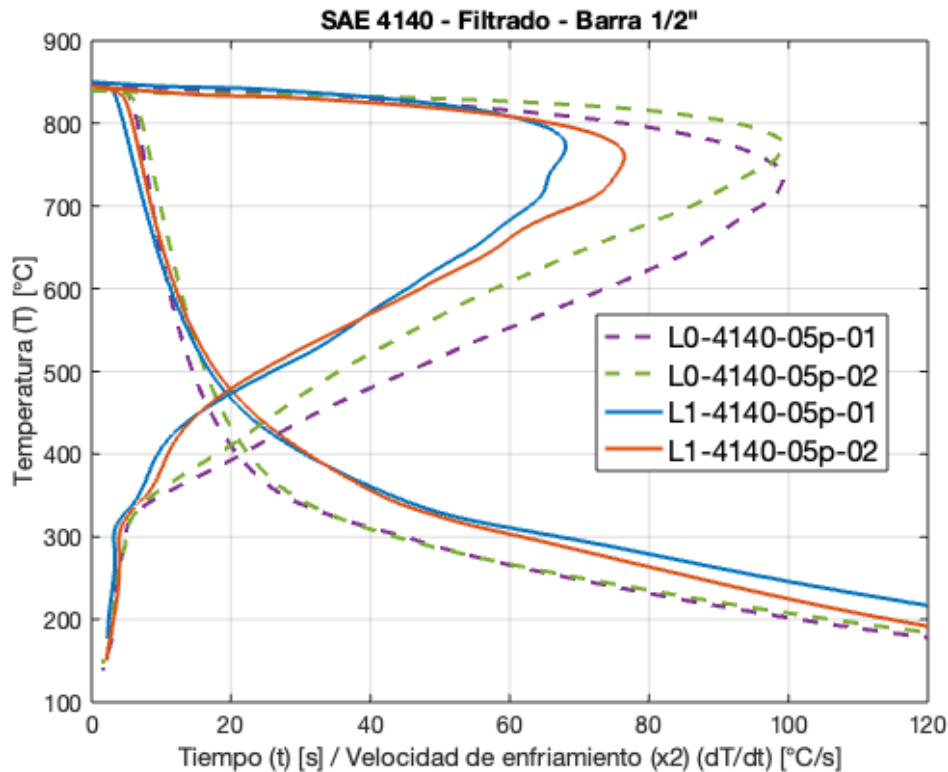


Figura 30: Curvas de enfriamiento registradas experimentalmente para las muestras de SAE 4140 y 1/2" de diámetro

Se realizaron entre dos y tres repeticiones para cada condición, con el objetivo de conocer si había cambios significativos entre una y otra probeta desde el punto de vista térmico. Los resultados mostraron que no hay (o son mínimas las variaciones) con respecto a una muestra y otra. Este resultado determinó que no era necesario repetir más ensayos.

Hay solo una excepción a lo explicado en el párrafo anterior. Como puede observarse en la Figura 28 correspondiente a las curvas de 1/2", una muestra (L1-1045-05p-02) que correspondía a un SAE 1045 mostró un pronunciado ruido, no correspondiente con ningún ciclo de temperatura aplicado, ni transformaciones metalúrgicas, sino que probablemente con algún ruido en la medición a través de la termocupla o adquisidor. A pesar de ello, puede también apreciarse que si se reemplazan esos "picos" y "valles" por valores medios, la curva muestra una trayectoria similar a la otra curva obtenida para el SAE 1045 de 1/2" (L1-1045-05p-01). De todas formas, se decidió descartar esa muestra y trabajar solo con la L1-1045-05p-02 como representante de la condición SAE 1045 de 1/2".

Las máximas velocidades de enfriamiento, así como también las temperaturas a las cuales se produjeron las mismas, se detallan en la Tabla 7.

Tabla 7: Máximas velocidades de enfriamiento registradas

Diámetro	Material	Lote	Nombre	Máxima velocidad (°C/s)	Temperatura para la máxima velocidad (°C)
1"	SAE 1045	1	L1-1045-1p-1	18.4	778.5
			L1-1045-1p-2	16.7	781.2
			L1-1045-1p-3	16.9	793.1
	SAE 4140	1	L1-4140-1p-1	21.4	760.6
			L1-4140-1p-2	18.6	757.7
0.5"	SAE 1045	1	L1-1045-05p-1	28.6	797.4
			L1-1045-05p-2	36.5	785.9
		0	L0-1045-05p-1	37.3	773.3
			L0-1045-05p-2	41.4	777.6
			L0-1045-05p-3	36.0	781.5
	SAE 4140	1	L1-4140-05p-1	34.0	771.3
			L1-4140-05p-2	38.2	760.0
		0	L0-4140-05p-1	49.7	735.5
			L0-4140-05p-2	40.0	746.5

En las muestras de SAE 1045 (tanto en 1" como en ½") se observa en todos los casos un valle en las velocidades de enfriamiento alrededor de 690-700°C. Esto se corresponde con la típica temperatura de transformación a microconstituyentes ferrítico-perlíticos (transformación exotérmica que por ende genera una disminución en la velocidad de enfriamiento).

Por otro lado, en las muestras de SAE 4140, en ninguno de los casos se observan transformaciones de fases a altas temperaturas, pero sí a alrededor de 500°C (posible transformación bainítica) y también a 300°C (posible transformación martensítica).

Con respecto a la comparación entre Lote 1 y Lote 0, se extraen las siguientes conclusiones:

1. El lote 0 mostró una mayor velocidad de enfriamiento en todos los casos que el Lote 1 → será de esperar mayores proporciones de fases formadas a menores temperatura (bainita y martensita) y valores de dureza. Cabe destacar, que de acuerdo a los registros de datos de los aceites de temple (ver Tabla 2) el aceite utilizado para el Lote 0 (OIL TEMP N° 2) cuenta con una menor velocidad de enfriamiento a 600°C que el utilizado para el Lote 1

4. Resultados

(Thermisol QH 15L), lo cual, como se mencionaba al inicio de este párrafo es contrario a lo observado experimentalmente en este trabajo.

2. Las formas de las curvas (picos y valles en las curvas de velocidad de enfriamiento) son las mismas cuando se compara la misma condición material-diámetro Lote 1 vs Lote 0. Solo las siguientes diferencias se observaron:
 - a. SAE 1045: en las muestras de Lote 1, luego de las transformaciones a altas temperaturas, no se observan cambios que indiquen otras transformaciones. Sin embargo, sí se ve un cambio en una de las Lote 0 (L0-1045-05p-01), donde se ve un quiebre a $\sim 500^{\circ}\text{C}$ (posible transformación bainítica).
 - b. SAE 4140: Las Lote 1 muestran un cambio alrededor de los 450°C (posible transformación bainítica) mientras que las de Lote 0 no.

4.1.1.2 Coeficientes de transferencia térmica

Al igual que para la presentación de las curvas de enfriamiento, a continuación se muestran los coeficientes de transferencia térmicos iniciales (h_0) calculados de acuerdo a lo descrito en “3.1.2 Resolución Problema Térmico” y a partir de los datos experimentales de enfriamiento en el centro de la probeta.

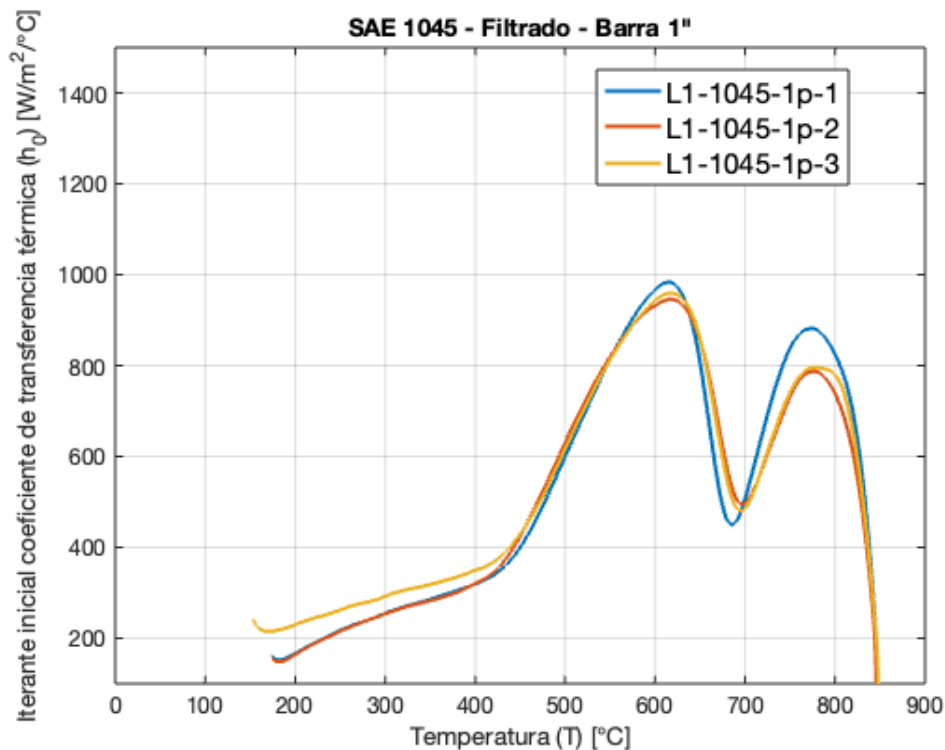


Figura 31: Coeficiente de transferencia térmicos iniciales (h_0) calculado en función de valores de Temperatura registrados experimentalmente vs Temperatura para las muestras de SAE 1045 y 1" de diámetro

4. Resultados

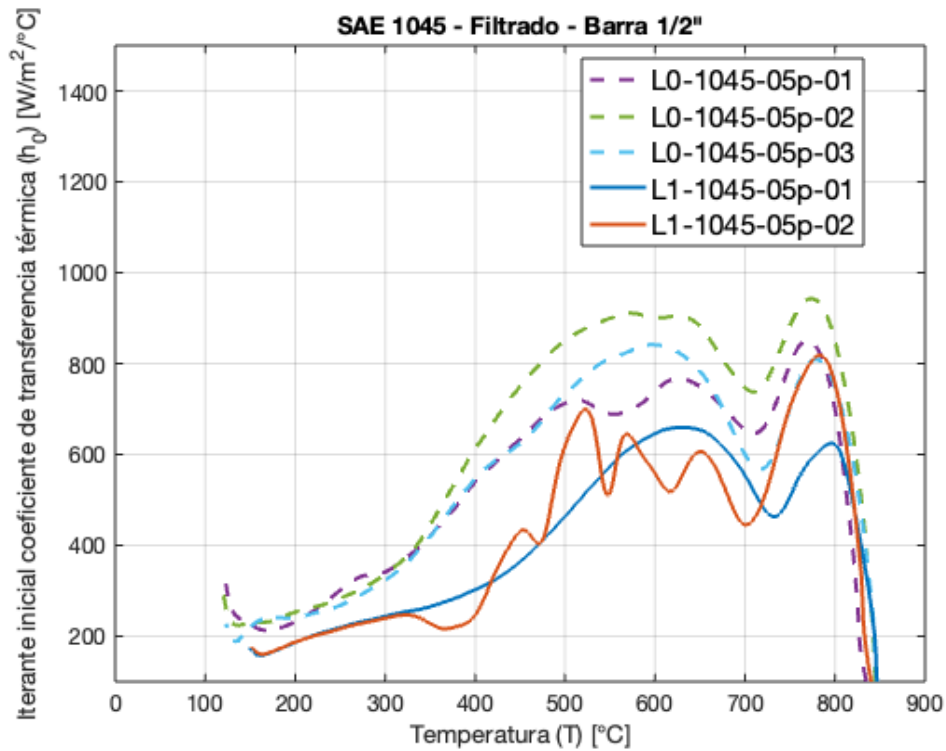


Figura 32: Coeficiente de transferencia térmicos iniciales (h_0) calculado en función de valores de Temperatura registrados experimentalmente vs Temperatura para las muestras de SAE 1045 y 1/2" de diámetro

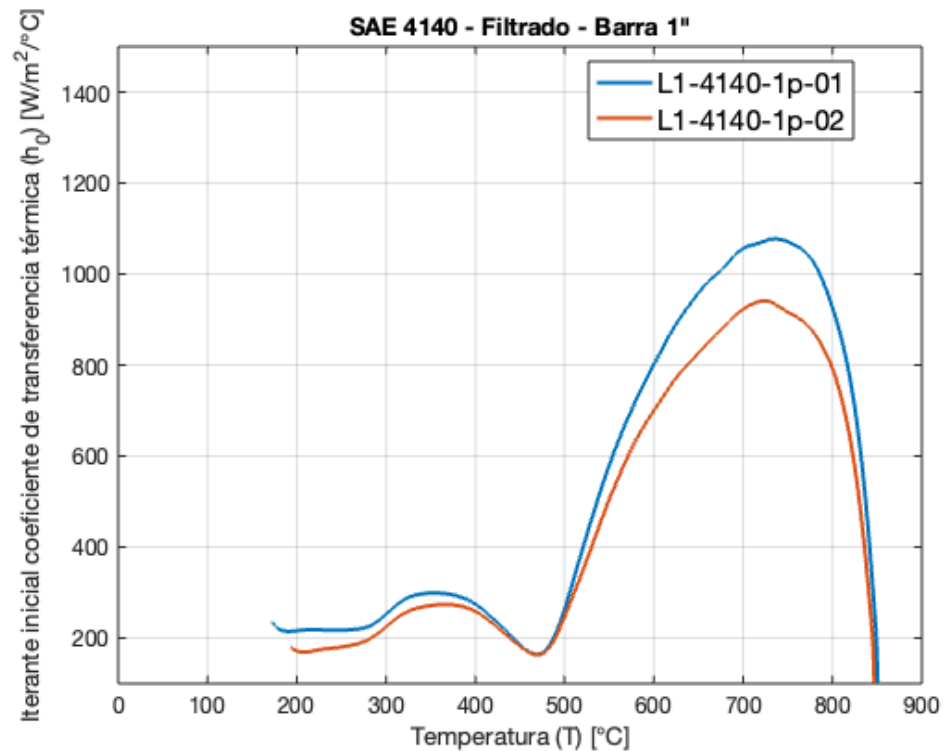


Figura 33: Coeficiente de transferencia térmicos iniciales (h_0) calculado en función de valores de Temperatura registrados experimentalmente vs Temperatura para las muestras de SAE 4140 y 1" de diámetro

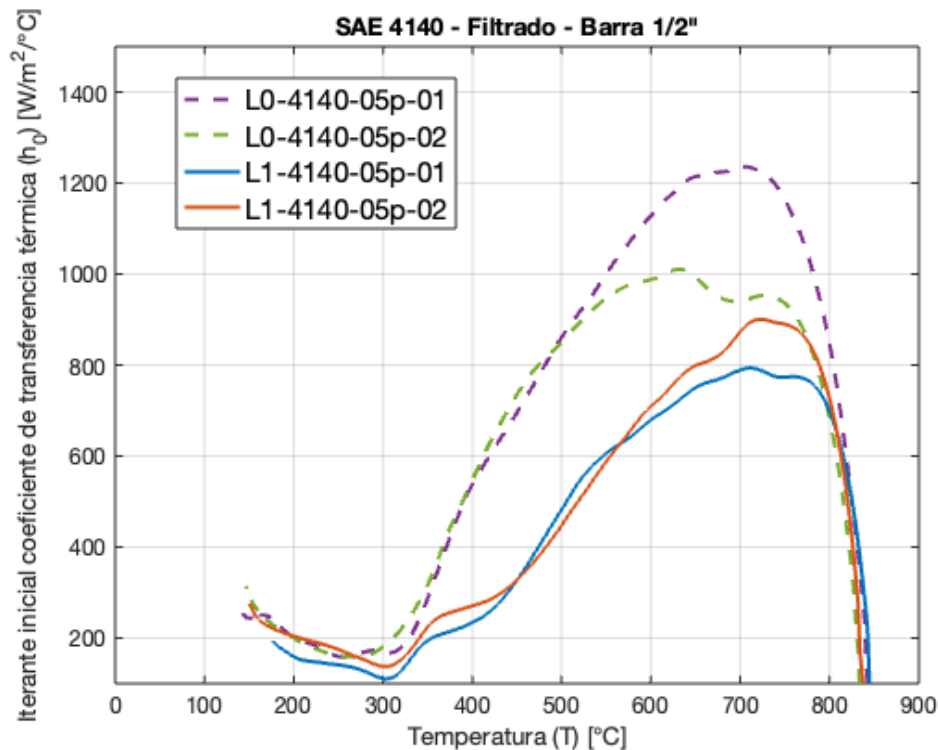


Figura 34: Coeficiente de transferencia térmica inicial (h_0) calculado en función de valores de Temperatura registrados experimentalmente vs Temperatura para las muestras de SAE 4140 y $\frac{1}{2}$ " de diámetro

Las figuras de las muestras de SAE 1045 (Figura 31 y Figura 32) muestra los tres mecanismos de transferencia de calor ($\sim 750^\circ\text{C}$: “Film Boiling”; $300 - 700^\circ\text{C}$: “Nucleate Boiling”; $<300^\circ\text{C}$: Transferencia de calor por convección simple), tal como se describió en “3.1.1 Modelo Térmico” y [6].

4.1.2 Microestructura

4.1.2.1 Análisis metalográfico

De acuerdo al diagrama de equilibrio de aleaciones Fe-C (ver Figura 25), una muestra con 0.45% de C debería presentar en su microestructura a temperatura ambiente una combinación de ferrita proeutectoide (F_p) y perlita ($F + \text{Fe}_3\text{C}$). Lo que es más, de acuerdo a la regla de la palanca, la proporción de F_p debería ser de aproximadamente 43%.

La microestructura de las muestras luego de los tratamientos térmicos de Normalizado (ver “Anexo E: Metalografías de barras normalizadas y templadas”) corresponde a una de tipo ferrítico-perlítica para las muestras de SAE 1045, mientras que las de SAE 4140 presentan una de tipo bainítico-martensítico (con algunas zonas perlíticas oscuras), tal como se esperaba de acuerdo al diagrama de equilibrio para la SAE 1045 (a pesar de que el normalizado no es un enfriamiento de equilibrio, por lo que menor proporción de F_p era de esperar) y la bibliografía [29].

4. Resultados

No se encontraron variaciones significativas en cuanto a las fases/microconstituyentes observadas en las distintas zonas de las barras normalizadas, es decir centro, radio medio ($r=R/2$) y superficie (si bien cerca de la superficie se observó una zona fuertemente descarburizada y por ende con distintas fases/microconstituyentes, lo cual se analiza en el “Anexo F: Descarburización superficial”).

Luego de los temple de las barras, la microestructura observada correspondió con las mismas fases/microconstituyentes detectadas en las normalizadas (con distinta proporción como se detallará en la sección “4.2.4 Resultados de Microconstituyentes”), con la excepción de la detección de fases del tipo bainítico - martensíticas en las barras de SAE 1045. Si bien la diferenciación entre martensita y bainita en una matriz ferrítico-perlítica es difícil utilizando metalografía óptica, de acuerdo a la bibliografía analizada (Totten, 2007) [12], y consulta con un experto metalógrafo [41], se determinó que estas fases de no equilibrio detectadas corresponden mayoritariamente a martensita. Esto es así debido a que las agujas de martensita suelen presentarse como agujas en distintas direcciones dentro de los antiguos bordes de grano austenítico (y no con cierto paralelismo y en bloque como la bainita). A continuación se muestra un ejemplo de la martensita detectada.

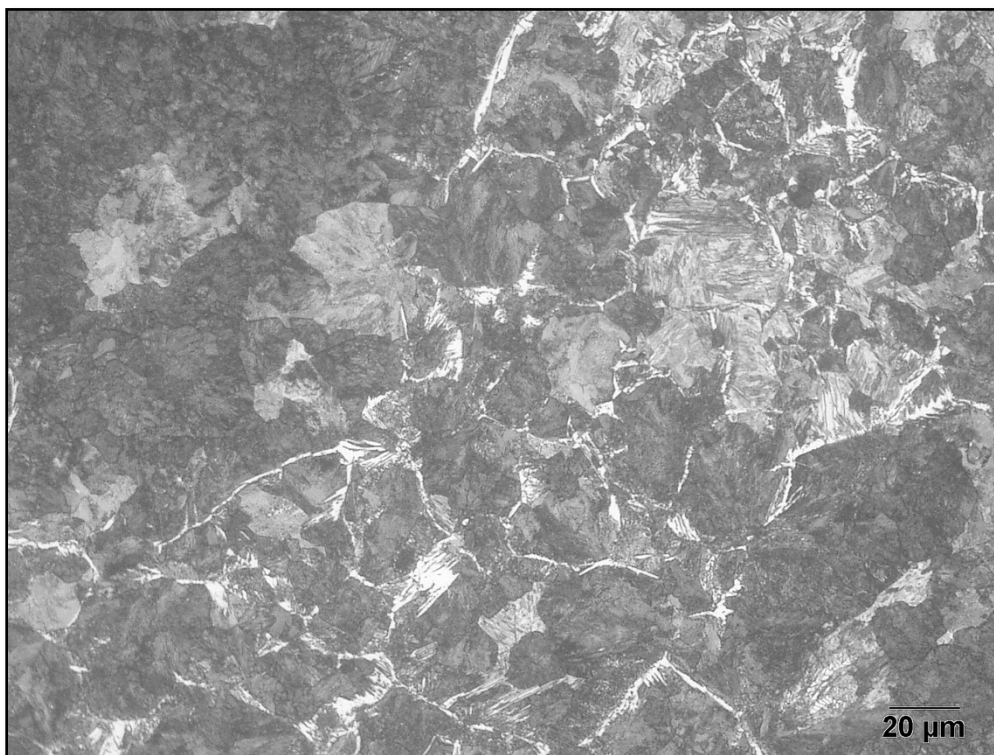


Figura 35: L0-1045-05p-2, centro, templada, 500x

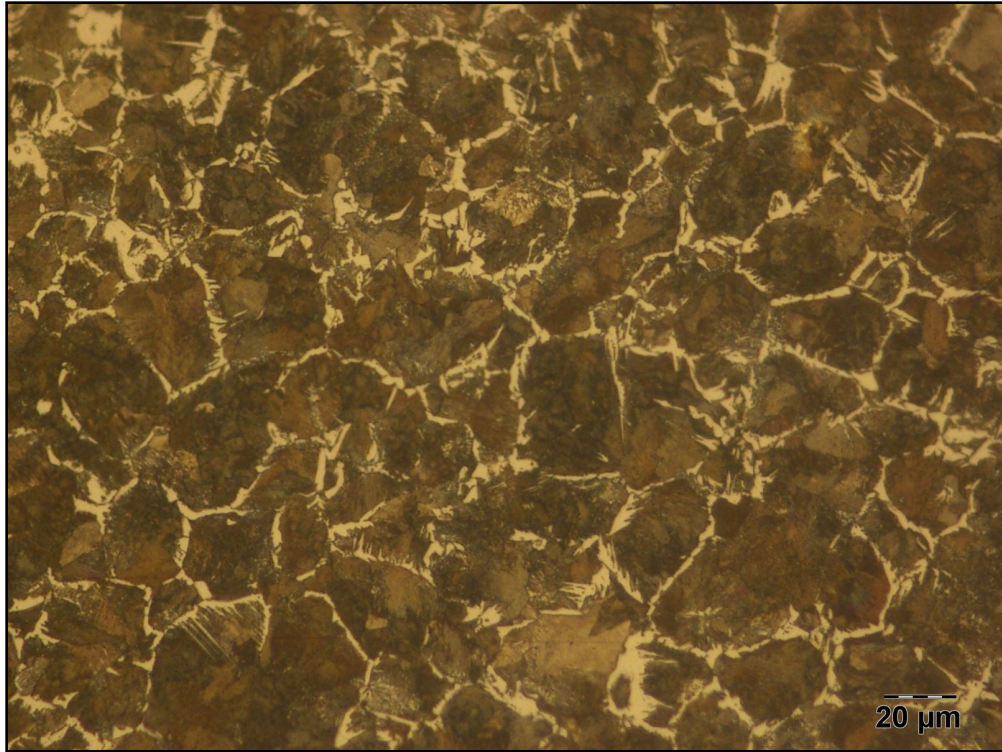


Figura 36: L1-1045-05p-1, centro, templada, 500x

Las metalografías correspondientes a todas las barras de SAE 4140 templadas y en todas posiciones mostraron solo martensita y bainita, tal como se ejemplifica en la Figura 37.

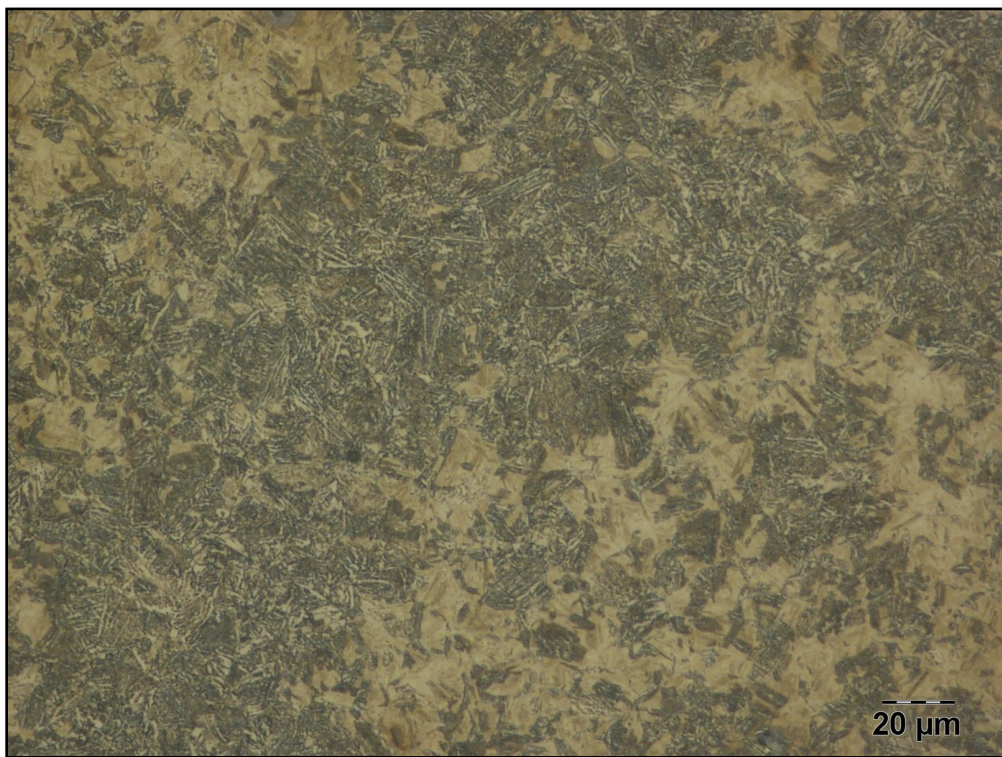


Figura 37: L1-4140-1p-1, centro, templada, 500x

El resto de los valores experimentales hallados (dureza y proporciones de microconstituyentes) serán presentados en forma conjunta con los resultados numéricos en la siguiente sección.

4.2 Resultados numéricos

4.2.1 Curvas de enfriamiento a lo largo de todo el radio

Una vez resuelto el problema térmico, es posible conocer numéricamente la evolución térmica (Temperatura vs tiempo) en todos los puntos de las barras. Para el análisis de resultados, y dadas las condiciones de contorno en las que las tapas del cilindro no intercambian calor, se concentró en este caso en la historia térmica de los nodos del radio a media altura de la barra. Es decir, el nodo a $r=0$ coincide con la punta de la termocupla. En la Figura 38, Figura 39, Figura 40 y Figura 41 se muestran las curvas de Temperatura (T) vs tiempo (t) y Temperatura (T) vs Velocidad de enfriamiento (dT/dt) para cada uno de los cuatro casos principales (SAE 1045 1" y 1/2" y SAE 4140 1" y 1/2").

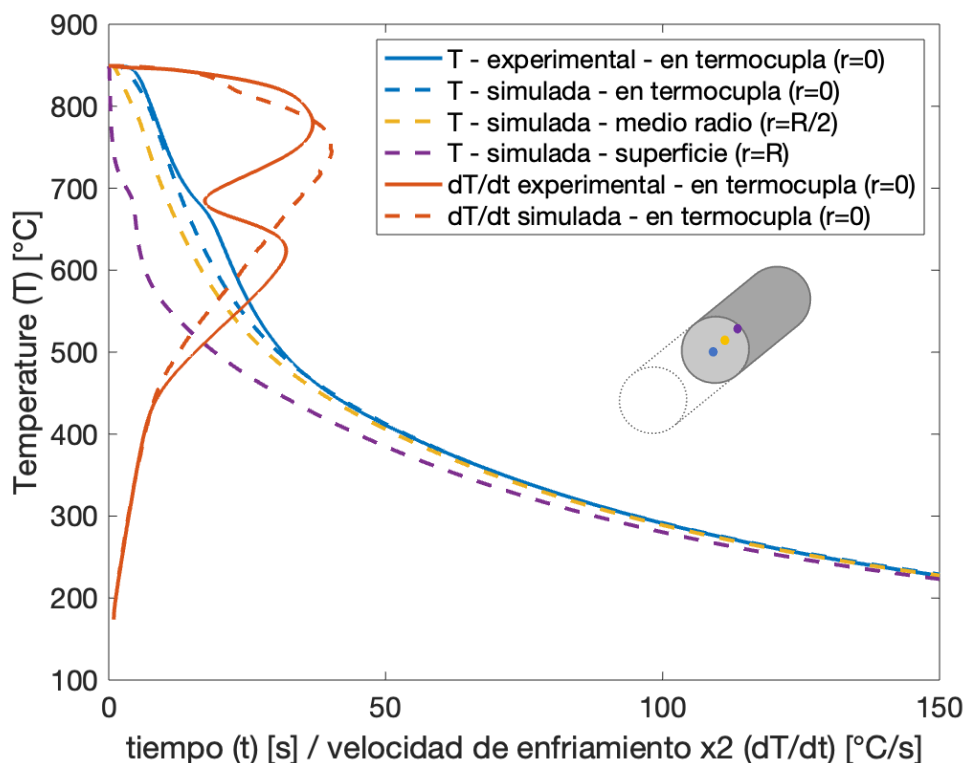


Figura 38: Curvas de enfriamiento experimental (línea sólida) y numérica (líneas con guiones), a distintos radios para las numéricas, para la muestra L1-1045-1p-1

4. Resultados

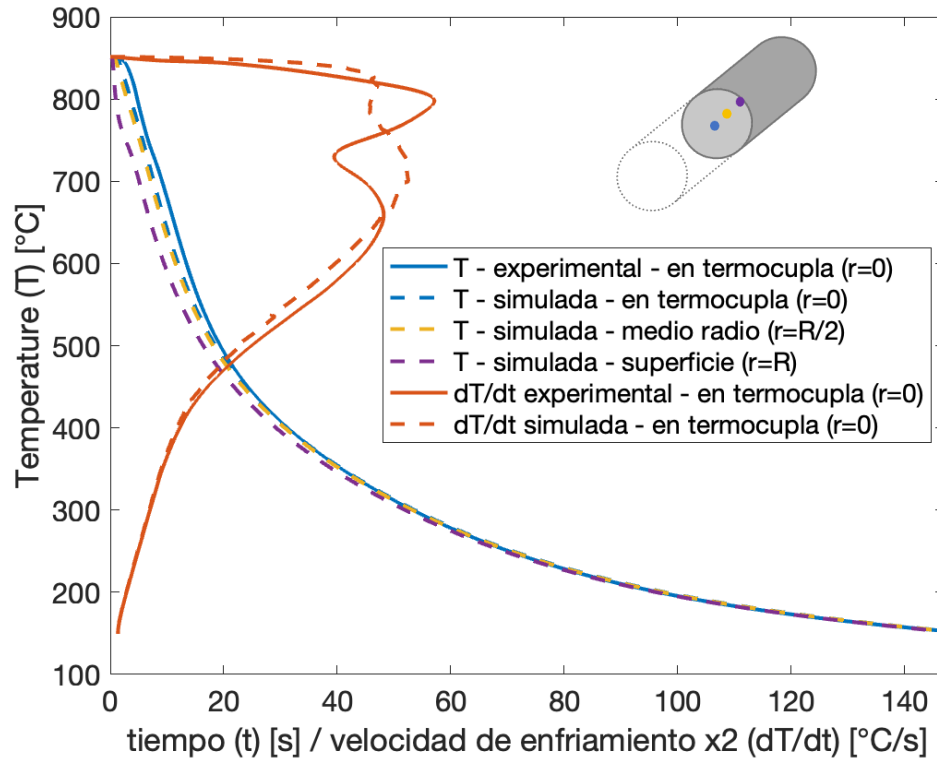


Figura 39: Curvas de enfriamiento experimental (línea sólida) y numérica (líneas con guiones), a distintos radios para las numéricas, para la muestra L1-1045-05p-1

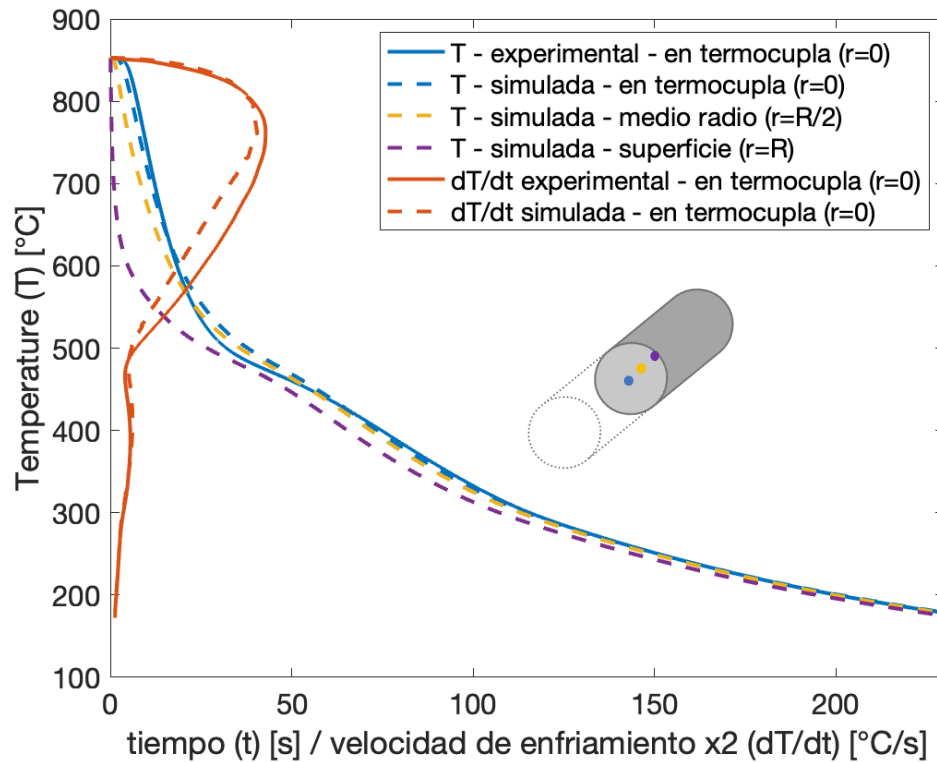


Figura 40: Curvas de enfriamiento experimental (línea sólida) y numérica (líneas con guiones), a distintos radios para las numéricas, para la muestra L1-4140-1p-1

4. Resultados

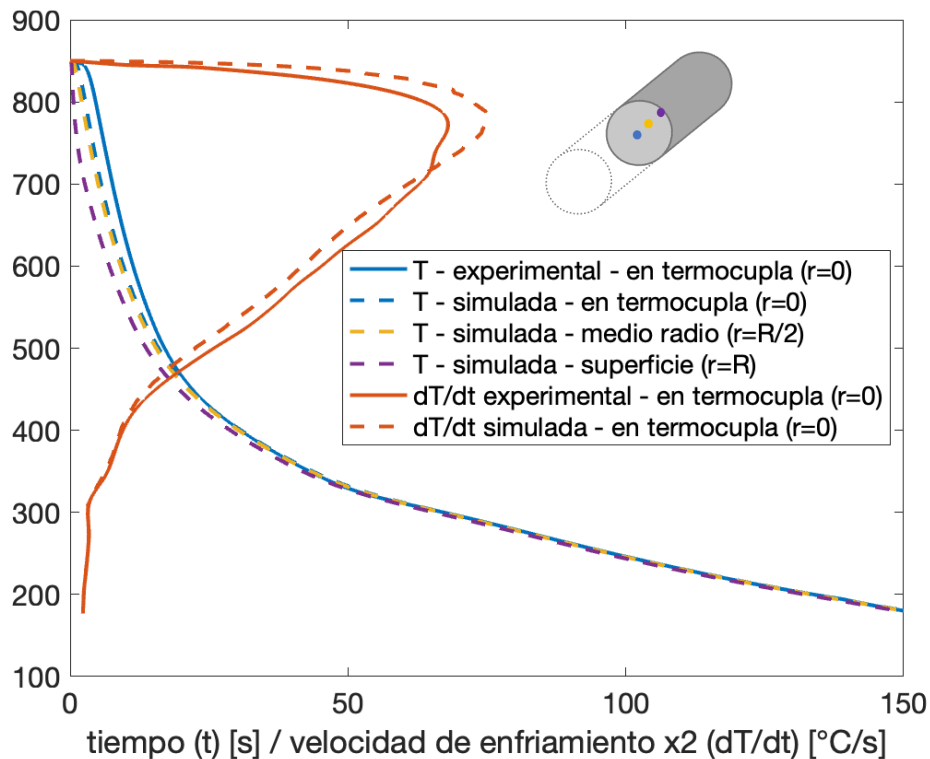


Figura 41: Curvas de enfriamiento experimental (línea sólida) y numérica (líneas con guiones), a distintos radios para las numéricas, para la muestra L1-4140-05p-1

La comparación en la curva experimental (en la termocupla) y la simulada numéricamente (también a $r=0$), es decir, curvas azules de trazo sólido y con guiones respectivamente, muestra un muy buen ajuste para el caso de las muestra de SAE 4140. En particular, para la muestra de este material y 1", solo en el tramo entre 500°C y 700°C se observa una ligera diferencia (curva numérica con menor velocidad de enfriamiento), evidenciable al analizar las curvas de velocidades de enfriamiento (dT/dt). La misma tendencia se observa para la de la misma aleación pero de $\frac{1}{2}$ ", con la adición en este caso de que durante el pico de máxima velocidad de enfriamiento ($\sim 775^{\circ}\text{C}$), la curva numérica tiene ahora una leve mayor velocidad de enfriamiento. Aparte de esas pequeñas diferencias, las curvas numéricas tienen una buena relación con las experimentales para SAE 4140.

En el caso de las muestras de SAE 1045, si bien a bajas temperaturas ($<450^{\circ}\text{C}$) el copiado de T vs t y dT/dt vs T es casi perfecto, a las temperaturas de transformaciones por difusión, se observa que el "valle" en la velocidad de enfriamiento experimental a los $\sim 700^{\circ}\text{C}$ no es representado por las curvas numéricas. Dicho valle puede atribuirse a las transformaciones por difusión (ferrítico - perlíticas), las cuales son exotérmicas, por lo que la caída en la temperatura se vería frenada. Debido a que el calor liberado por las transformaciones no fue considerado para este trabajo (ver Q_z en la sección "3.1.1 Modelo Térmico") es de esperar entonces que se generen estas diferencias entre las curvas.

Finalmente, el modelo numérico permite observar las curvas de enfriamiento en distintos puntos de la barra ($r=R/2$ y $r=R$ fueron graficados en las figuras anteriores, aparte de $r=0$). Esto permite ver, que la diferencia entre velocidad de enfriamiento en la superficie ($r=R$) con respecto al centro ($r=0$) es mayor para el caso de las dos muestras de 1" comparado con las de $\frac{1}{2}$ ", tal como era de prever.

4.2.2 Superposición de curvas de enfriamiento y diagramas CCT

En las siguientes imágenes se muestran las mismas curvas de enfriamiento pero esta vez superpuestas con las correspondientes curvas CCT (SAE 1045 y SAE 4140, respectivamente).

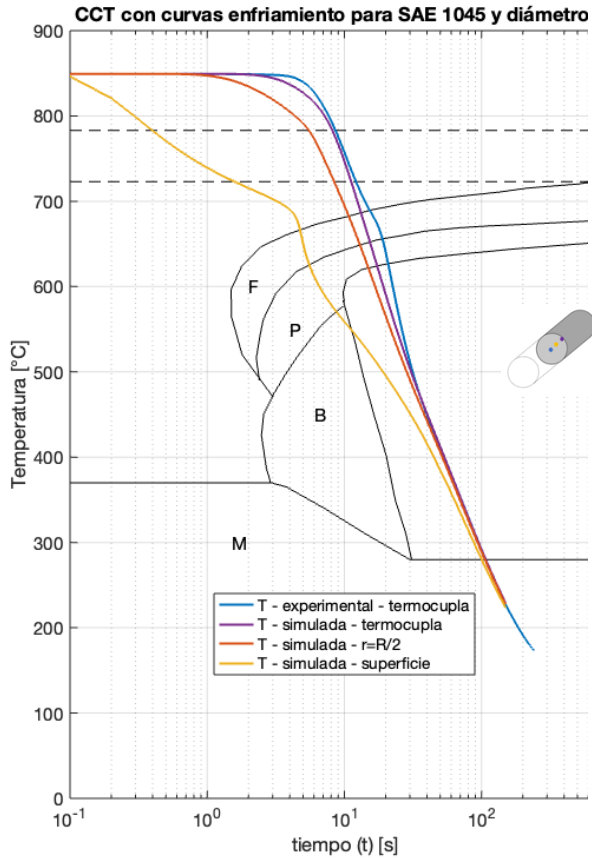


Figura 42: Curvas de enfriamiento muestra L1-1045-1p-1 y diagrama TTT SAE 1045

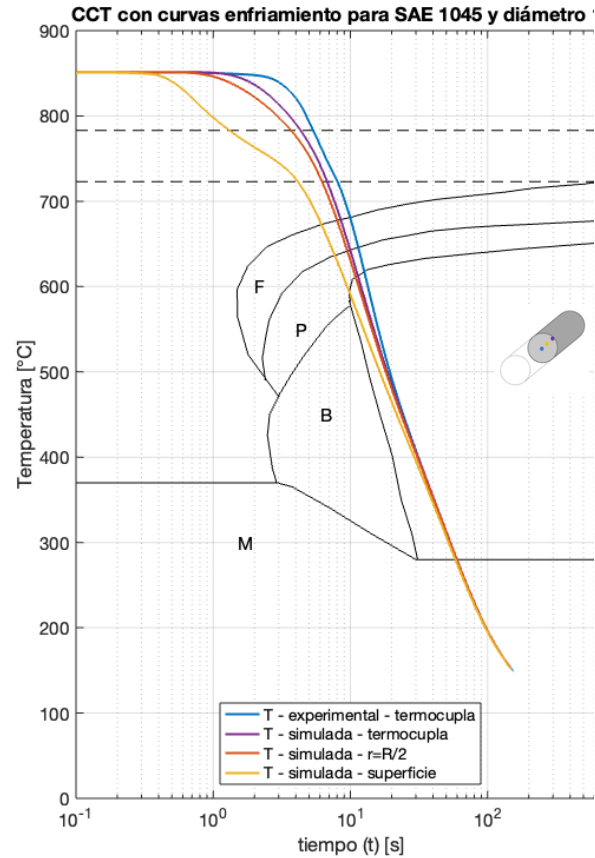


Figura 43: Curvas de enfriamiento muestra L1-1045-05p-1 y diagrama TTT SAE 1045

4. Resultados

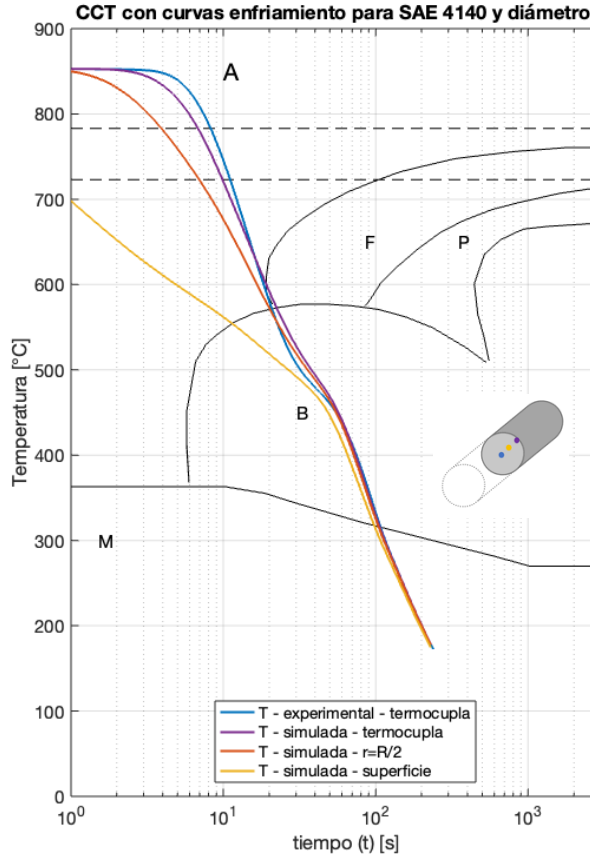


Figura 44: Curvas de enfriamiento muestra L1-4140-1p-1 y diagrama TTT SAE 4140

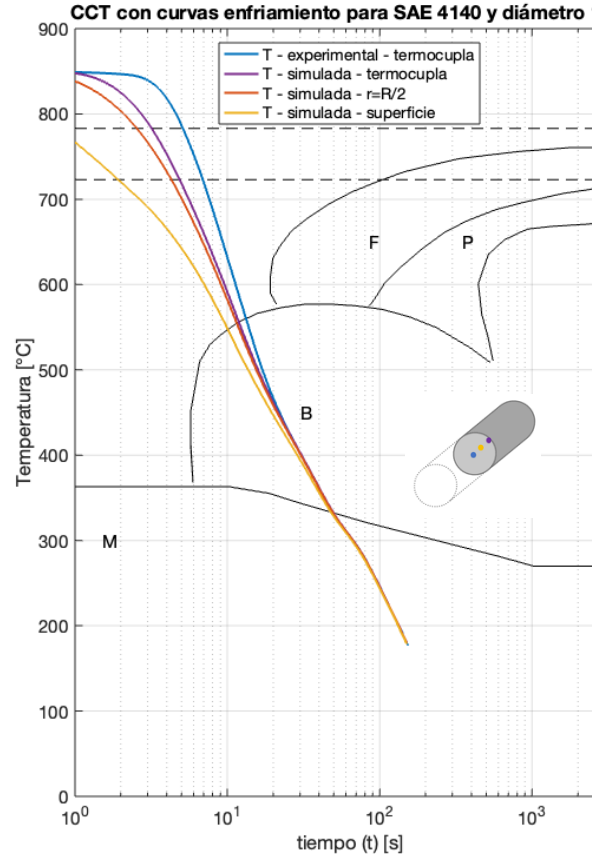


Figura 45: Curvas de enfriamiento muestra L1-4140-05p-1 y diagrama TTT SAE 4140

Como anticipo de la sección “4.2.4 Resultados de Microconstituyentes”, en las figuras anteriores puede verse como para las muestras de SAE 1045, la microestructura esperada es de Ferrita-Perlita (y posible Martensita), mientras que para las SAE 4140, los microconstituyentes esperados son bainita y martensita.

4.2.3 Resultados de durezas

El cálculo numérico permite conocer el valor de dureza en distintos puntos de la barra. Dado que la barra tiene una geometría axial, para mostrar los resultados el énfasis se hace en la variación de la dureza desde el centro de la barra ($r=0$) hasta la superficie ($r=R$). A continuación se muestran los resultados para las cuatro combinaciones, agrupados en dos gráficos (uno para los dos diámetros de las muestras de SAE 4140, y el otro para las de SAE 1045).

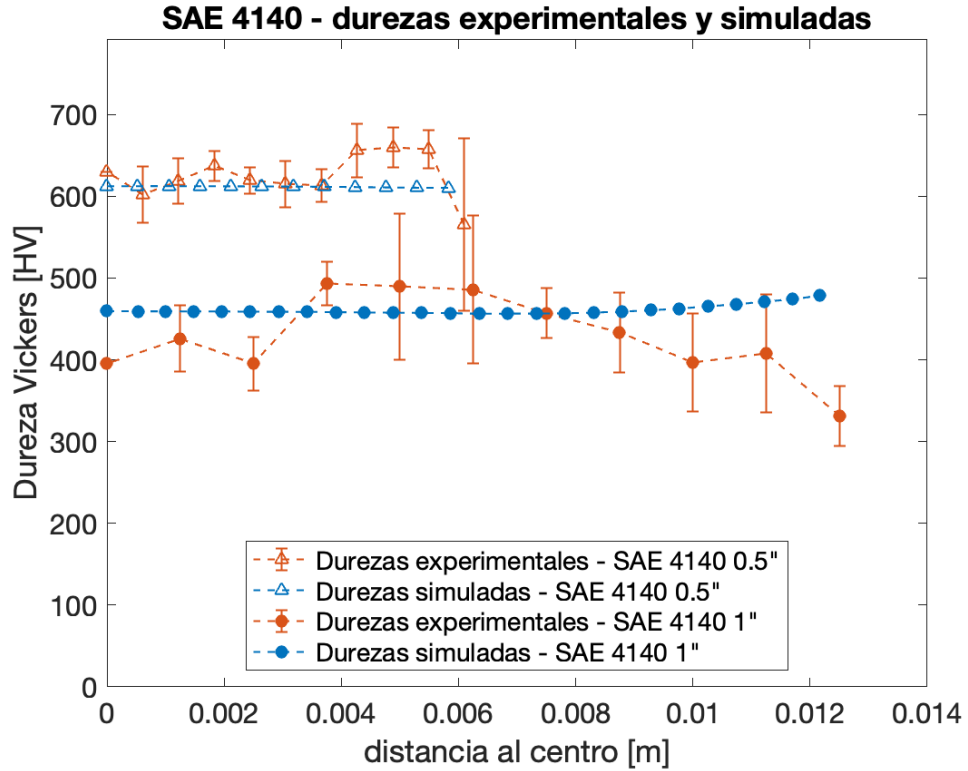


Figura 46: Perfiles de dureza experimentales y numéricos para los dos diámetros de las muestras de SAE 4140

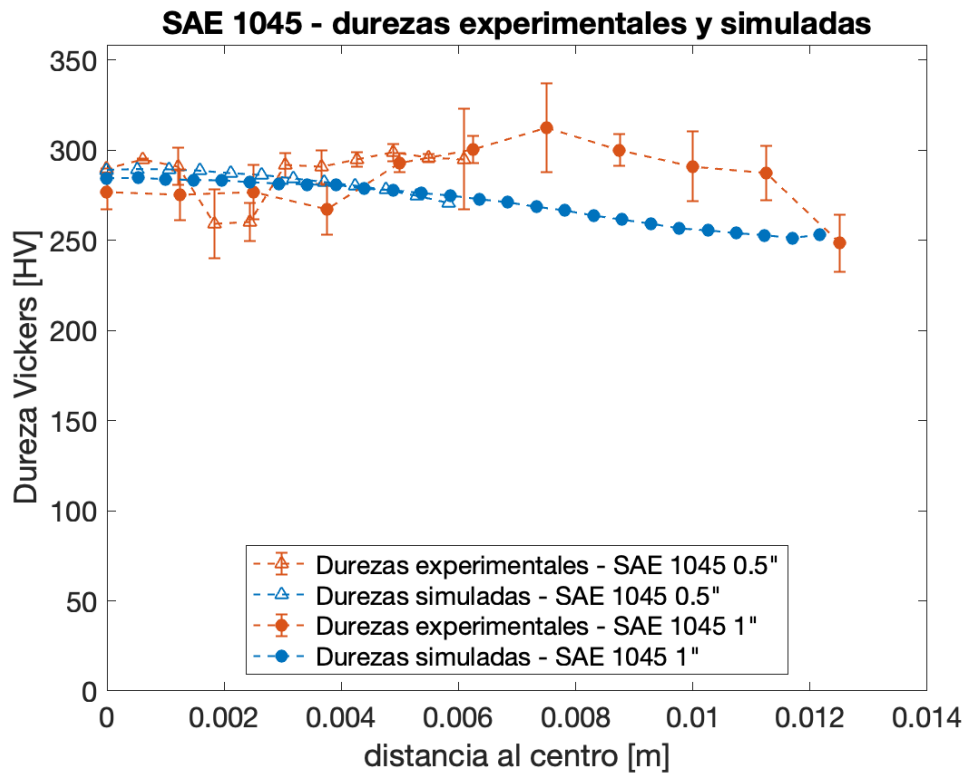


Figura 47: Perfiles de dureza experimentales y numéricos para los dos diámetros de las muestras de SAE 1045

4. Resultados

Como puede verse en los resultados, el ajuste entre las durezas experimentales y las durezas obtenidas por cálculo numérico es bueno. Esto es, si bien existen diferencias entre los valores (particularmente hacia la superficie) y, en algunos casos, también diferencias entre las tendencias (durezas aumentando o disminuyendo hacia la superficie), en líneas generales, estas diferencias son pequeñas. Las diferencias nunca son mayores al 15%, y el promedio de diferencias (promedio de diferencias entre los puntos del radio) nunca es mayor a un 10% (sin considerar el último punto más cercano a la superficie, ya que él mismo sufrió descarburización, como se explicará más adelante). Esto se evidencia en la Figura 48 donde las diferencias entre simulado y experimental para cada punto del radio se calcularon de acuerdo a la Ecuación 4-1.

$$Diferencia(\%) = \text{abs} \left[\frac{(Dureza_{exp} - Dureza_{sim})}{Dureza_{exp}} \right] \times 100 \quad \text{Ecuación 4-1}$$

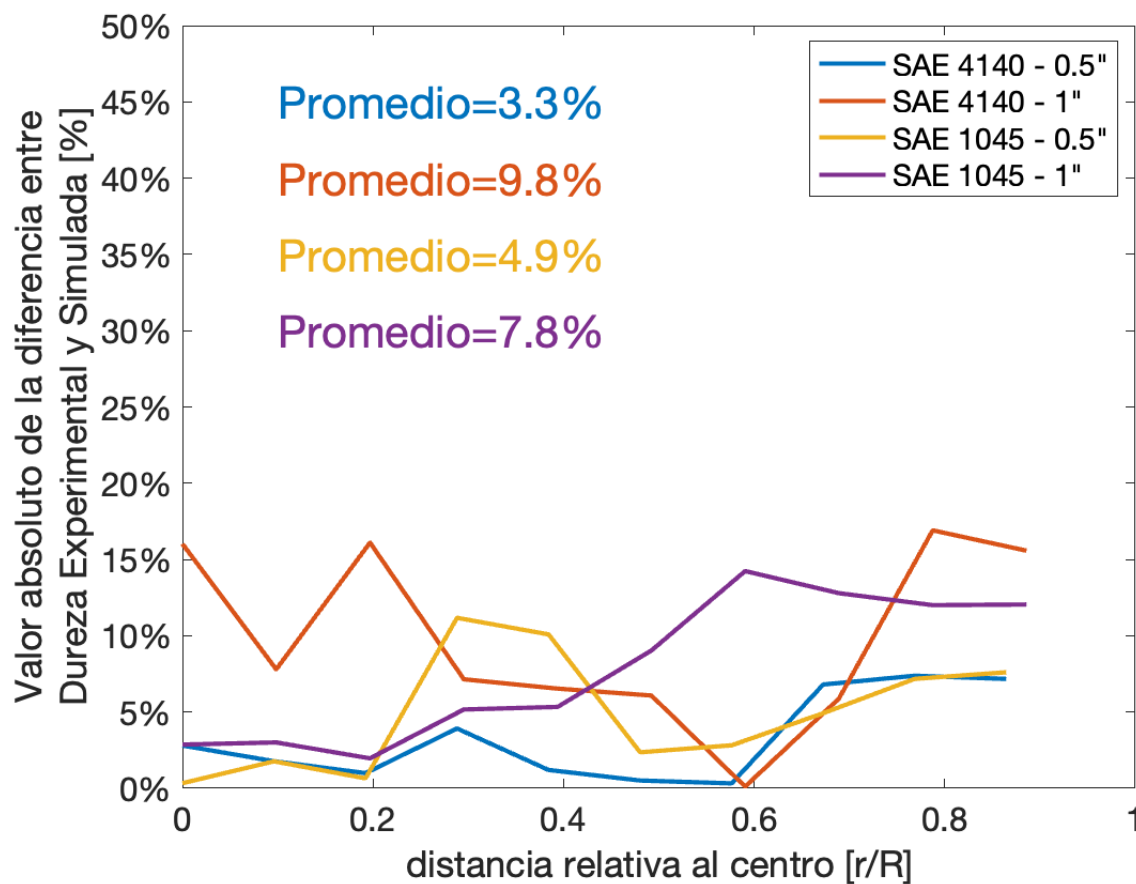


Figura 48: Diferencias entre valores numéricos y experimentales en distintos puntos de todas las muestras

Los últimos puntos de dureza experimentales, es decir, los más cercanos a la superficie, siempre mostraron una pronunciada caída con respecto a su punto anterior (esto es así sobre todo para las muestras de 1"). Dicha caída corresponde a la descarburización superficial producto de realizar los temple en atmósferas no protectoras. En el Anexo F: Descarburización superficial se detalla cómo se estableció cuál es la distancia descarburizada por medio de tres métodos (cálculo de acuerdo a las leyes de difusión, metalografía y durezas). A partir de estos tres métodos se llegó a la conclusión de que la distancia descarburada puede ser de hasta aproximadamente 400 μm

4. Resultados

desde la superficie (ver Anexo para más detalles). Dado que el modelo no contempla esto (se discute la posibilidad de que lo haga en la sección 5. Discusión), esta porción del material no se utilizó para corroborar el modelo. En la Figura 49 se muestran de forma superpuesta los resultados de los 3 métodos (leyes de difusión, metalografía y dureza), mientras que mayor detalle se encuentra en el anexo mencionado en este párrafo.

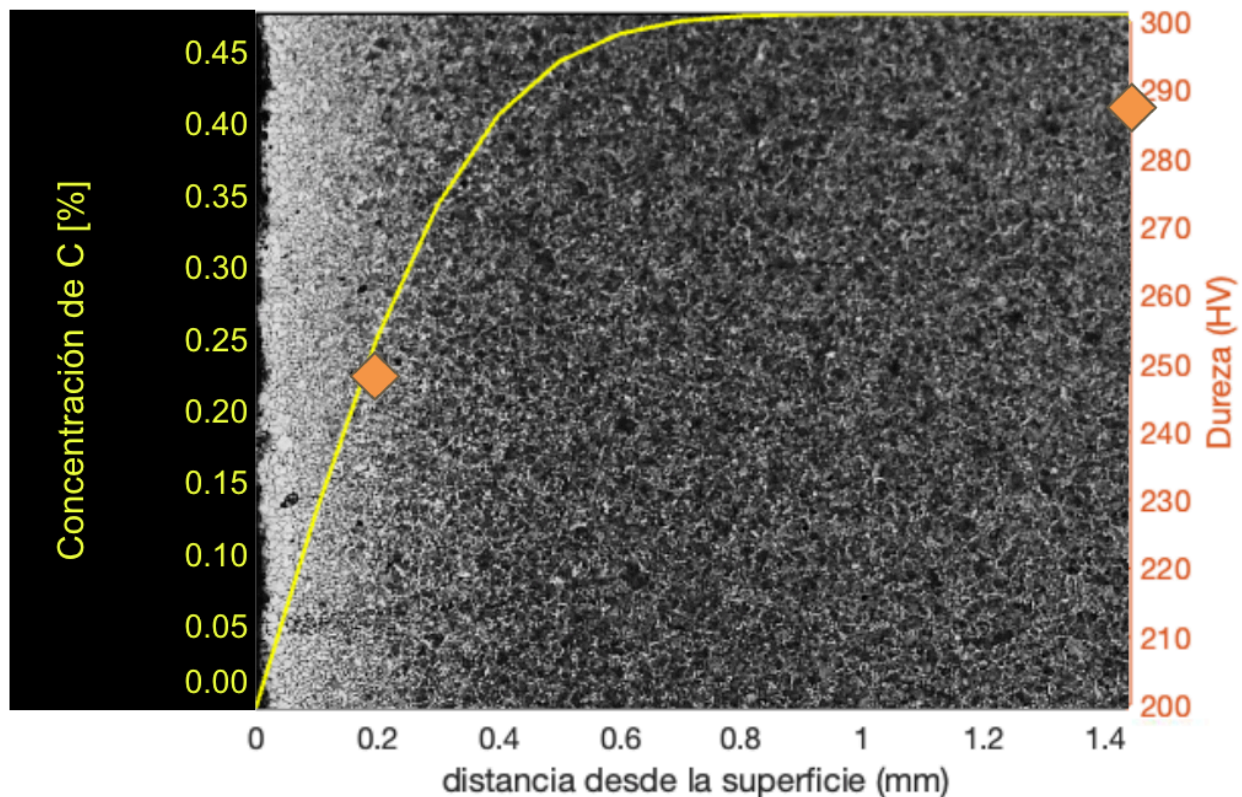


Figura 49: Concentración de Carbono (amarillo) vs distancia (calculado con segunda ley de Fick), Dureza experimental (rombos naranjas) y metalografía de fondo para la muestra L1-1045-1p-1.

A pesar del buen ajuste entre las durezas, hay dos tendencias que se observan experimentalmente que el modelo no reproduce:

- SAE 1045, 1”: a partir de aproximadamente $r=R/4$ hay un aumento (hasta $r=R/2$) en las durezas experimentales, y luego una bajada hacia la superficie. Si bien estas tendencias, esto no se ve completamente en los resultados numéricos, donde la dureza no solo baja desde $r=R/2$ hacia la superficie como en las experimentales, sino que también desde $r=R/4$. Solo en el último punto (el más cercano a la superficie) cambia esta tendencia (posiblemente debido a mayores velocidades de enfriamiento en la superficie, mayor % de martensita, y mayor % de dureza). Esto último sí es de esperar (dejando de lado la descarburización) y se confirmará en la sección siguiente con la distribución de microconstituyentes.
- SAE 4140, 1”: a partir de $r=R/2$, el modelo predice un aumento de dureza, producto de mayores velocidades de enfriamiento hacia la superficie, por ende mayor % de martensita, y finalmente mayor dureza. Los resultados experimentales, similar al caso de SAE 1045, muestran una bajada de la dureza a partir de $r=R/2$.

4. Resultados

En las muestras de ½" de diámetro (SAE 1045 y también SAE 4140), tanto el modelo numérico como los resultados experimentales están en muy buen ajuste: no existen grandes variaciones de dureza a lo largo del radio de la barra, lo cual es observado en el modelo.

4.2.4 Resultados de Microconstituyentes

El cálculo numérico para las fases presentes permite conocer los distintos microconstituyentes a las distintas temperaturas (o tiempos), tal como se muestra en el siguiente ejemplo para la muestra L1-1045-05p-1.

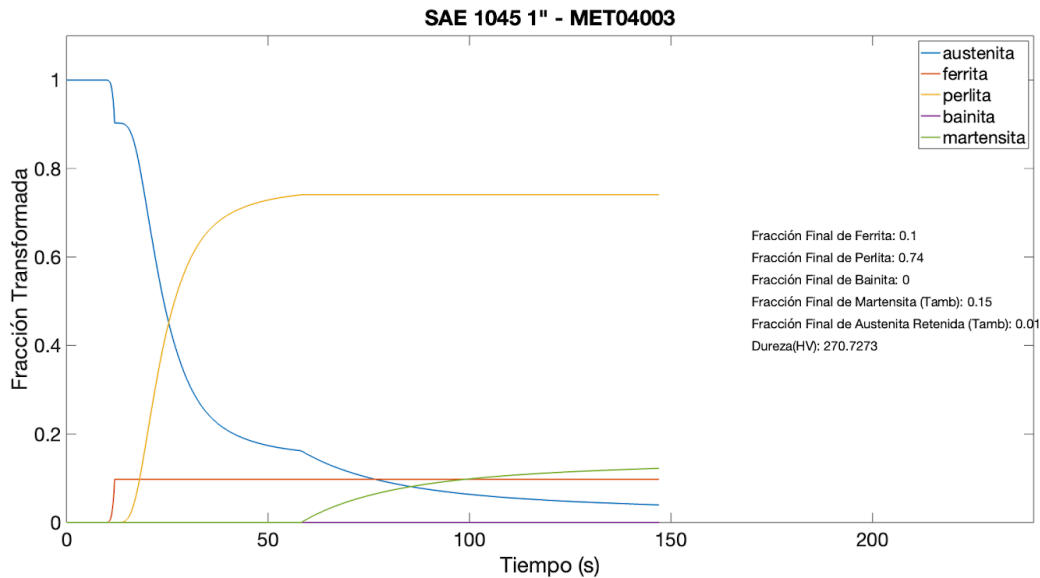


Figura 50: Ejemplo de evolución de fases a lo largo del tiempo para un punto de la barra L1-1045-05p-1

Sin embargo, la comparación con las durezas, así como también las fases detectadas por metalografías corresponde a la distribución final de microconstituyentes (a temperatura ambiente). En la Figura 51, Figura 52, Figura 53 y Figura 54 se muestran los resultados finales de fases para las cuatro combinaciones, tanto valores experimentales como numéricos.

En dichas figuras puede observarse que el modelo numérico reproduce en todos los casos las mismas fases y/o microconstituyentes que son detectados por metalografía óptica. La proporción de los mismos se ajusta bien en algunos casos, aunque no en todos. El análisis detallado de estos resultados se divide por material a continuación:

4. Resultados

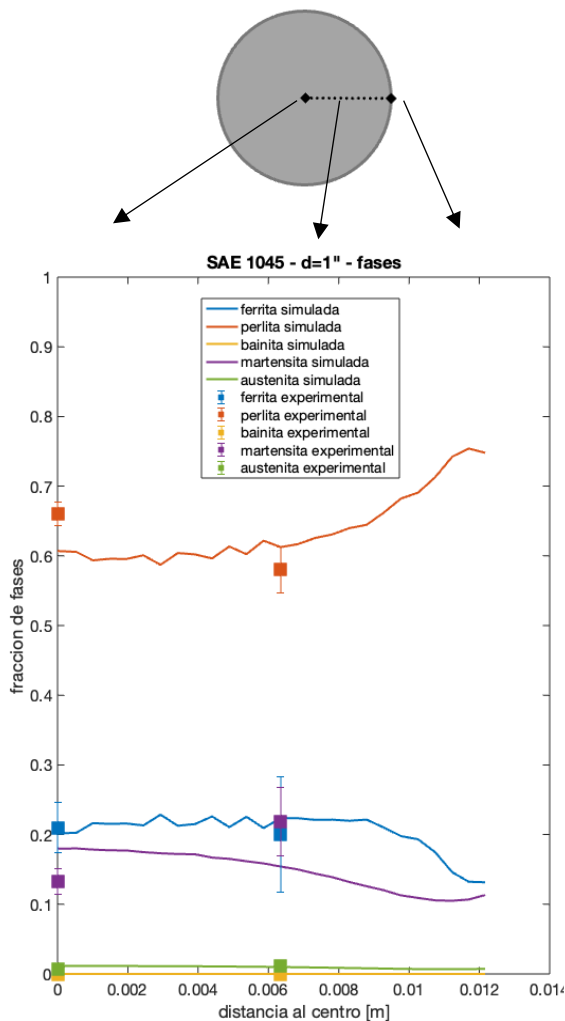


Figura 51: Distribución de fases en muestra L1-1045-1p-1 (curvas corresponden a resultados numéricos, cuadrados a resultados experimentales)

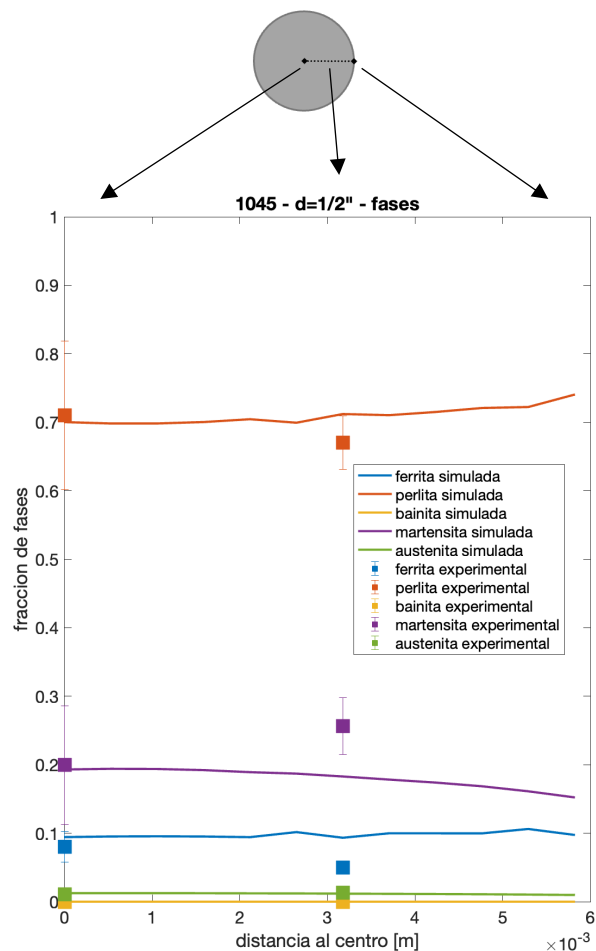


Figura 52: Distribución de fases en muestra L1-1045-05p-1 (curvas corresponden a resultados numéricos, cuadrados a resultados experimentales)

Para el SAE 1045, como puede verse en la Figura 51 (1") y la Figura 52 (1/2"), se logra un buen ajuste de las proporciones de microconstituyentes. Con respecto a la variación de las proporciones a lo largo del radio, se pueden extraer las siguientes conclusiones:

Aumento de porcentaje de perlita (curva naranja) y disminución de porcentaje de ferrita (curva azul) llegando a la superficie, particularmente visible en la probeta de 1" (Figura 51). El modelo es capaz de predecir esto, lo cual es lo esperable con respecto a los diagramas CCT (Figura 42 y Figura 43), debido a la mayor velocidad de enfriamiento en la superficie.

Los valores medios de proporciones de microconstituyentes en la sección, son descritos adecuadamente por el modelo numérico, aunque las tendencias de variación en algunos casos no son completamente capturadas.

Disminución de porcentaje de martensita, particularmente desde $r=R/2$ hasta la superficie ($r=R$). Las tendencias obtenidas numéricamente, se explican por una menor fracción de martensita

4. Resultados

disponible al momento de iniciar las transformaciones displasivas. Hacia el interior de las probetas el progreso de las transformaciones por difusión fue menor, manteniendo una mayor proporción de austenita inestable hasta alcanzar la M_s .

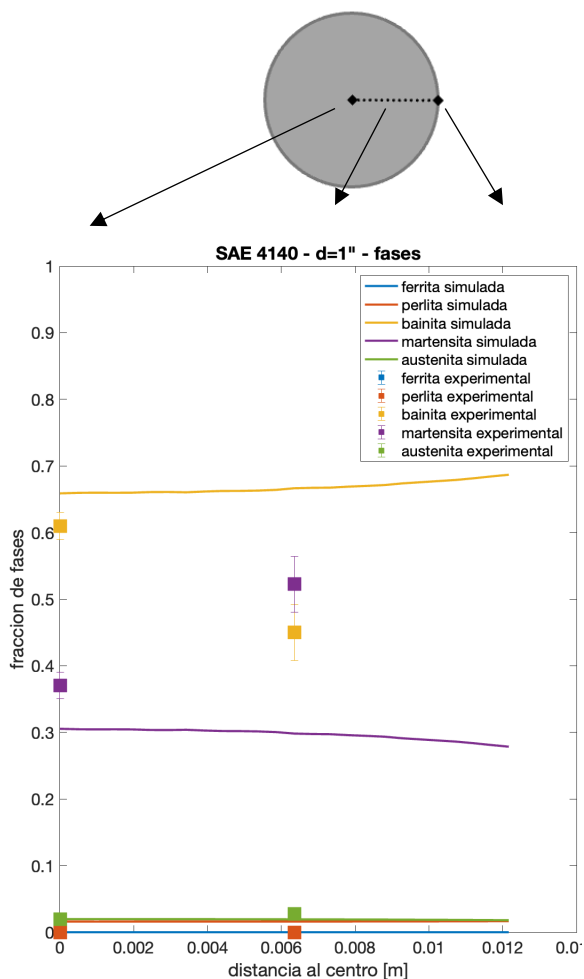


Figura 53: Distribución de fases en muestra L1-4140-1p-1 (curvas corresponden a resultados numéricos, cuadrados a resultados experimentales)

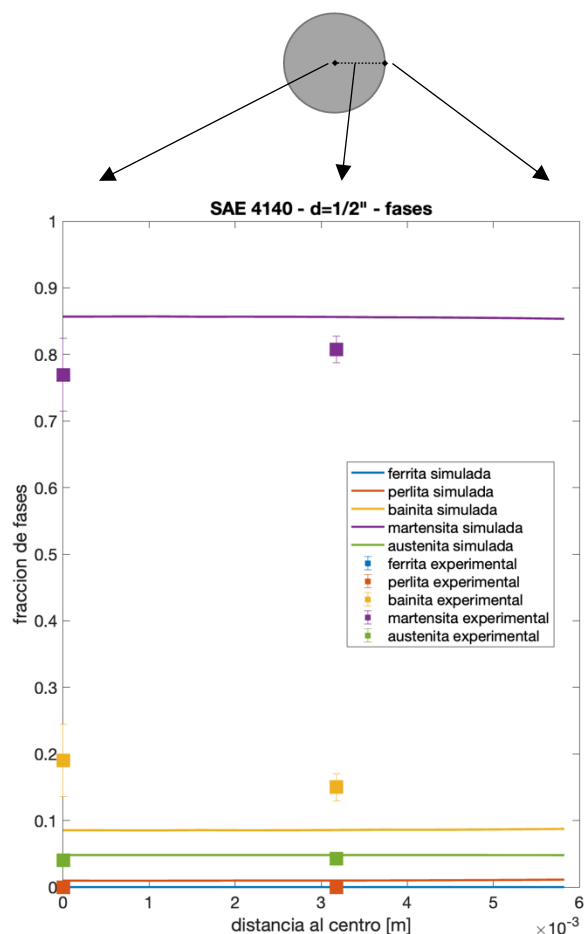


Figura 54: Distribución de fases en muestra L1-4140-05p-1 (curvas corresponden a resultados numéricos, cuadrados a resultados experimentales)

Si bien las fases que son detectados por metalografía óptica son las predichas por el modelo, en el acero SAE 4140 es donde el ajuste de proporciones de fases no alcanza a describir los resultados experimentales. Esto se observa en la muestra de 1'' (Figura 53), mientras que en la de 1/2'' (Figura 54), si bien persisten diferencias, el ajuste es mejor. Variaciones en las proporciones de fases en función del radio no se observan tanto en los resultados experimentales como en los numéricos. Este comportamiento es el esperable, dada la mayor templeabilidad de este acero.

4.2.5 Validación del modelo a partir variaciones del coeficiente de transferencia térmica

Uno de los objetivos de este trabajo es desarrollar un modelo numérico que permita describir las propiedades de materiales templados, y sin duda una ventaja del modelo sería que pudiera contar con un cierto grado de flexibilidad. Es decir, un modelo que pueda predecir propiedades (durezas y microconstituyentes) para distintas condiciones de temple.

Por este motivo se probó el modelo con distintos valores de coeficientes de transferencia térmica (h). Estos distintos valores pueden ser interpretados como si los materiales en cuestión estuvieran siendo templados en otros medios. En particular se decidió tomar múltiplos del coeficiente “ h ” utilizado en este trabajo para la muestra de SAE 1045 y 1” de diámetro: 0.5x; 1.5x y 2x. Cabe destacar, que valores de “ h ” del mismo orden de magnitud que 2x el “ h ” de este trabajo han sido reportados para temple de similares aceros en agua (Suehiro, 2003)[44]. Los resultados se muestran en la Figura 55 y la Figura 56.

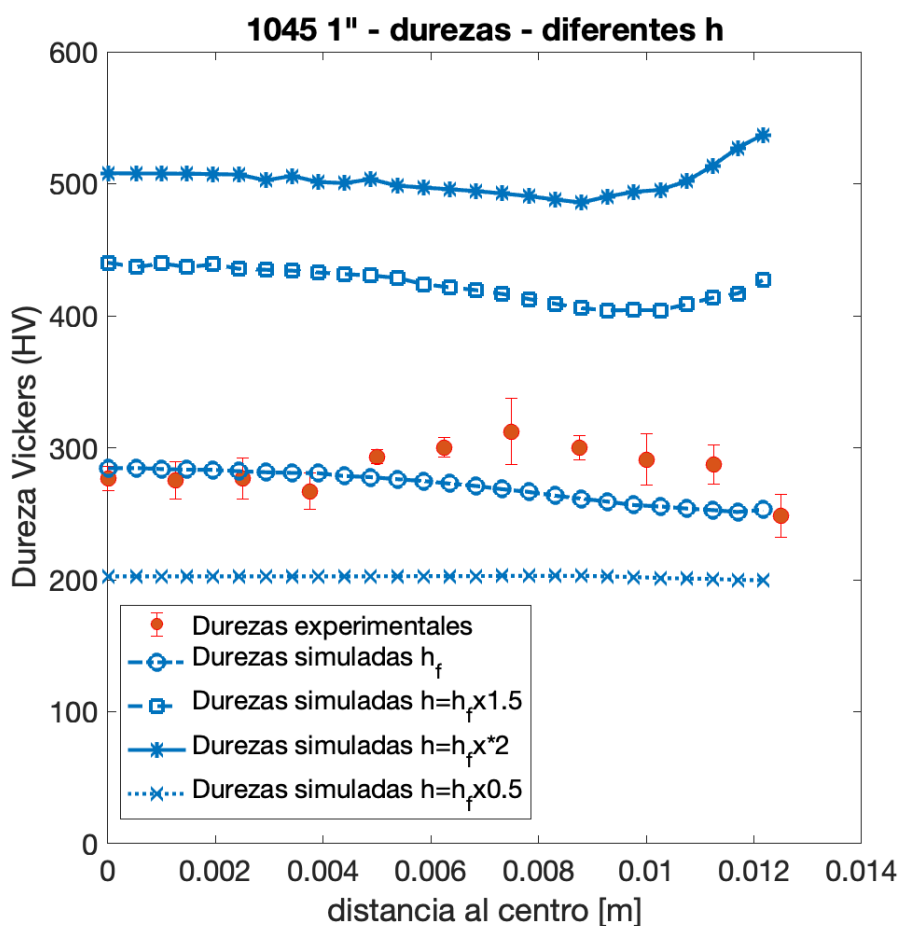


Figura 55: Durezas para SAE 1045 1" con distintos “ h ” utilizados

4. Resultados

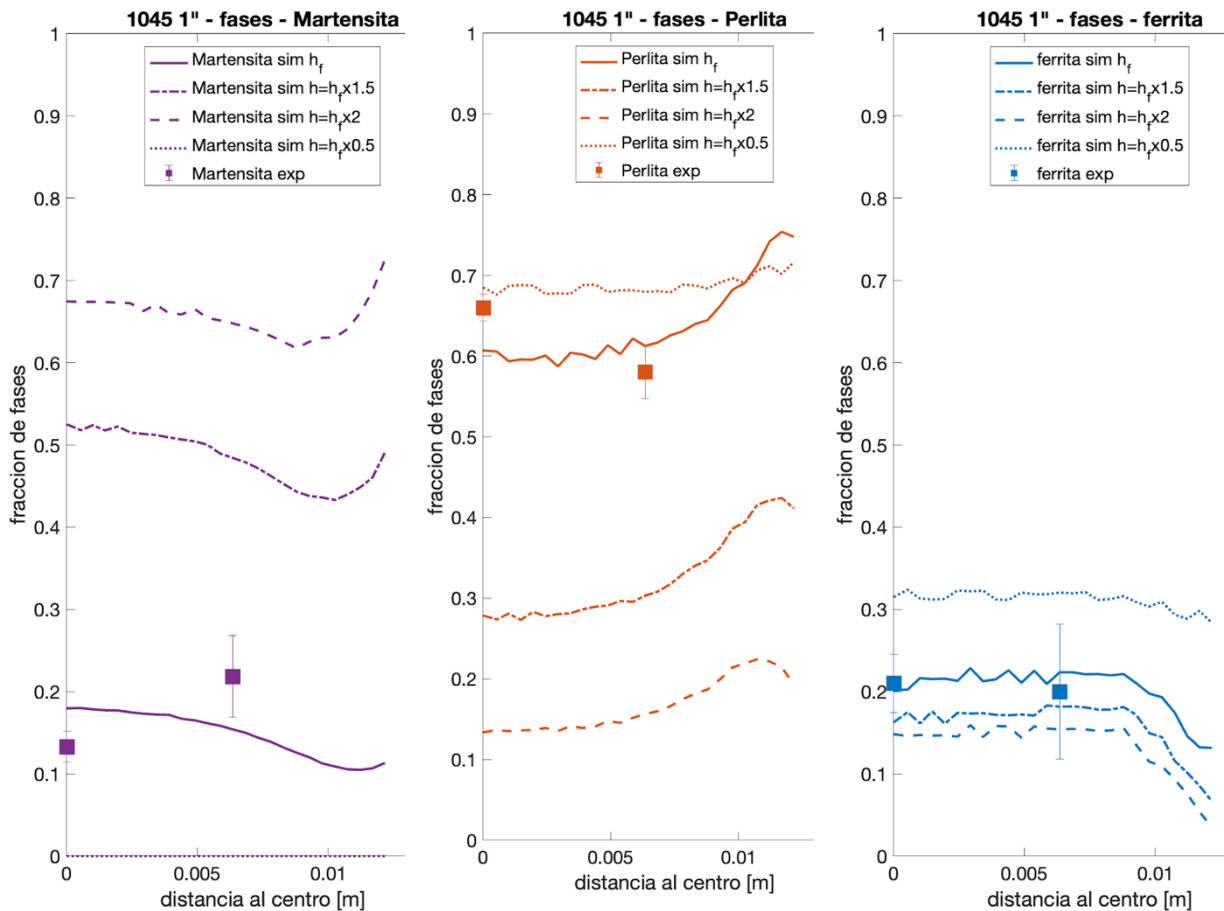


Figura 56: Porcentaje de Martensita (izquierda), Perlita (centro) y Ferrita (derecha) para SAE 1045 1" con distintos "h" utilizados

Tanto en la Figura 55 (durezas) como en la Figura 56 (microconstituyentes) puede verse como el modelo responde adecuadamente ante los cambios en el coeficiente "h". Esto es, para mayores coeficientes "h" (por ejemplo, debido a medios de temple más severos), se obtienen:

- Mayores proporciones de Martensita. Esto se ve en el gráfico de la izquierda de la Figura 56, comparando la curva de porcentaje de martensita vs radio para h_f (curva de trazo sólido) contra la curva de $h = 1,5h_f$ (trazo tipo punto-guión) o la de $h = 2h_f$ (guiones)
- Mayores durezas. Esto se evidencia en la Figura 55 al observar como aumentan las durezas al comparar las curvas desde la correspondiente a $h = 0,5h_f$ (puntos representados por una "x") hasta la de $h = 2h_f$ (con "*"), pasando primero por $h=h_f$ (círculos) y luego $h = 1,5h_f$ (cuadrados).

A su vez, en estos casos, se observa una mayor variación en el porcentaje de martensita a lo largo del radio, evidenciando un gran aumento al llegar a la superficie (ver flecha azul hacia arriba para el caso de la curva $h = 2h_f$ del gráfico de la izquierda de la Figura 56). Un resultado que continúa apareciendo, es el hecho de que haya una disminución del porcentaje de martensita desde el centro de la probeta ($r=0$) hasta (al menos) $r=R/2$ (ver flecha azul hacia abajo para el caso de la curva h

4. Resultados

= $2h_f$ del gráfico de la izquierda de la Figura 56). Este último fenómeno ya fue analizado en la sección "4.2.4 Resultados de Microconstituyentes".

Los resultados con $h = 2h_f$ para el SAE 1045 de 1" indicaron alrededor de 70% de Martensita (ver línea azul punteada en el gráfico de la izquierda de la Figura 56) y durezas de entre 500 y 550 HV (curva con "*" de la Figura 55). Estos valores obtenidos se encuentran en concordancia con los resultados reportados para un acero C60 templado en agua [16], donde incluso se observa una tendencia similar de disminución de martensita desde el centro, para luego incrementarse hacia la superficie.

5. Discusión

En esta sección, se presentarán y discutirán los principales hallazgos obtenidos en el estudio sobre el temple de estos aceros. Se analizarán los resultados a la luz de los objetivos de investigación planteados y se evaluará su consistencia con la literatura existente en el campo. Además, se explorarán las implicaciones de estos resultados y se proporcionarán recomendaciones para investigaciones futuras.

En primer lugar, el **temple instrumentado** de probetas cilíndricas de acero ha mostrado ser posible con alta velocidad de adquisición de datos. Sin embargo, la señal obtenida en estos casos tiene siempre un alto “ruido”, es decir, es necesario contar con una herramienta de filtrado de la señal. Esta debe suavizar esos valores, sin perder valiosa información, como por ejemplo, pequeños cambios bruscos en la temperatura que se deban a fenómenos físicos (como la liberación de calor en una transformación metalúrgica). Existen también casos donde la señal no solo muestra ruidos a pequeña escala, sino también saltos y bajadas de temperatura no ligados a ningún proceso físico, y que no son posible suavizar con la rutina de filtrado. Los mismos se debieron a conexiones eléctricas del horno utilizado (puesta a tierra). Debido a la naturaleza de estos tratamientos térmicos (altas velocidades de enfriamiento y precisión necesaria en el registro de temperaturas), es necesario contar con herramientas adecuadas para lograr extraer datos precisos de evoluciones térmicas. Una vez logradas estas condiciones, las curvas de enfriamiento en este trabajo mostraron gran repetibilidad, razón por la cual se pudo trabajar con un número pequeño de muestras.

Dos modificaciones al diseño de las probetas y ensayo se plantean para realizar a futuro, las cuales ayudarían a continuar corroborando y complejizando el modelo:

1. Utilización de geometrías más complejas, como por ejemplo barras ranuradas o con bordes agudos. Esto último permitiría no sólo conocer cómo cambia la extracción de calor con las geometrías, sino también comenzar a evaluar posibles distorsiones y/o fisuraciones en las piezas
2. Registro de temperaturas en otros puntos del radio de la pieza. Es decir, no solo en el centro sino también, por ejemplo, en el radio medio ($r=R/2$) y la superficie, tal como se realiza en otros trabajos [46].

El presente trabajo se concentró en **técnicas de caracterización** metalúrgica relativamente sencillas: metalografía óptica y micro-durezas. Se demostró posible la cuantificación de microconstituyentes por metalografía óptica, aunque sin embargo la misma no presenta un alto grado de fidelidad. En particular, la distinción entre algunos microconstituyentes, como por ejemplo bainita vs martensita, requeriría de técnica de microscopía más avanzada para su diferenciación (como TEM) y otras técnicas de cuantificación como DRX o EBSD.

La **resolución del problema térmico** con las condiciones iniciales y de contorno propuestas ha demostrado ser capaz de copiar razonablemente bien la evolución térmica registrada en las barras. A pesar de que el iterante inicial del coeficiente de transferencia térmica (h_0) es una buena aproximación para dicho coeficiente “h”, se necesitó desarrollar una función de ajuste para lograr un h_t que pueda reproducir fielmente la evolución térmica. Si bien otros estudios plantean el cálculo del “h” a partir de valores de temperatura en el centro (Hasan, Peet, Jalil, & Bhadeshia, 2011)[45], esta función de ajuste no se encuentra reportada típicamente. Otros autores como (Liščić, 2016)[47] proponen directamente la medición de la temperatura en (o cerca de) la superficie.

No contemplar el calor liberado por las transformaciones metalúrgicas tiene la gran ventaja de simplificar el cálculo numérico, y este trabajo mostró que un buen ajuste puede lograrse sin el mismo. Sin embargo, esta simplificación, no comúnmente empleada, puede ser fuente de las discrepancias entre los resultados experimentales y numéricos. Se propone como trabajo a futuro una forma de cuantificar las fases transformadas a partir de los “valles” observados en las curvas de velocidades de enfriamiento, comparado con probetas con similar propiedades termo-físicas pero sin transformaciones a altas temperaturas (por ejemplo aceros austeníticos). De esta manera se puede relacionar el calor liberado con el volumen de fase transformada. Finalmente, para constatar qué tan influyente es la simplificación empleada, otro trabajo a futuro es incorporar los calores generados en el cálculo y corroborar cómo cambia así el ajuste entre los valores experimentales y numéricos. Contemplar este efecto requiere que se resuelvan de forma acoplada los problemas térmicos y metalúrgicos, de forma que el resultado de un problema, afecta la solución del otro y viceversa. En particular, con la herramienta numérica empleada, esto no fue posible.

La **resolución metalúrgica** utilizada, así como también el cálculo de durezas a partir de microconstituyentes y velocidades de enfriamiento, ha sido implementada por distintos autores y demostrado buen ajuste con valores experimentales, lo cual también se observó en este trabajo. Sin embargo, como se explicó en la sección de resultados, también se observaron diferencias que caben destacar, particularmente con respecto a la tendencia de las durezas y/o microconstituyentes cuando se analiza desde el centro hacia la superficie. Estas diferencias pueden deberse a: las condiciones de contorno simplificadas de transferencia de calor (ver párrafos anteriores), uso de datos de TTT en lugar de datos de CCT para determinar las constantes de las ecuaciones empíricas, cambios en composiciones químicas y microestructura (e.g. tamaños de grano) que afectan las propiedades térmicas y metalúrgicas (TTT), cambios en el aceite de temple (aumento de temperatura), entre otras. Similares posibles fuentes de error fueron reportadas en la bibliografía [14][44].

Dos resultados obtenidos a partir de la resolución metalúrgica son particularmente dignos de destacar, ya que podrían ser limitaciones del modelo:

- Bainita en SAE 1045: la presencia de este microconstituyente a partir de una dada temperatura B_s tuvo que no ser tenida en cuenta ya que los resultados numéricos arrojaban una completa presencia de bainita, en detrimento de la perlita, resultado que contradice lo observado experimentalmente. Esto, si bien algunos autores deciden tratar la bainita como un tipo de perlita [15], no se halló detallado en bibliografía, lo cual puede ser debido a que esta condición (cilindro de 1” de diámetro de SAE 1045 templado en aceite a 100°C) con este modelo metalúrgico no se encontró que haya sido estudiado previamente.
- Martensita disminuyendo hacia superficie: esto va en contra de lo esperado de acuerdo al diagrama CCT y de lo observado experimentalmente. Sin embargo, este fenómeno se observa reportado en similares trabajos [16]. Adaptar diagramas TTT a enfriamiento no isotérmicos, no considerar el calor de transformación y utilizar las temperaturas del centro para el cálculo del iterante inicial del coeficiente de transferencia térmica pueden ser las causas de este comportamiento del modelo.

En la mayoría de los casos (particularmente las dos muestras de SAE 4140, Figura 53 y Figura 54, y la muestra de SAE 1045 de ½”, Figura 52), las variaciones de microconstituyentes a lo largo del radio de la barra no son significativos (ya que o bien la barra es “templable” o no), aunque sí existe

un caso en el que lo son: SAE 1045 1” (Figura 50). Aquí se puede ver como cerca de la superficie, el modelo predice que la proporción de Perlita aumenta considerablemente mientras que la Ferrita disminuye. A su vez, en la última zona (cerca a la superficie, particularmente el último punto de la malla) la martensita también comienza a aumentar. Este caso demuestra cómo el modelo es capaz de describir variaciones de cantidades de microconstituyentes en función de distintas velocidades de enfriamiento (distintas posiciones en el radio de la barra). No obstante, variaciones entre el centro de la barra ($r=0$) y el radio medio ($r=R/2$), no son por lo general predichas por el modelo.

A partir de esto último, la corroboración respecto a qué tan sensible es el modelo, consistió en tomar el caso de SAE 1045 1” y variar el *coeficiente de transferencia térmica* - h - (que es el coeficiente que se calcula a partir de los datos experimentales y se usa como base para el cálculo térmico). De esta forma puede verse como ante el cambio de este coeficiente, el modelo numérico responde de forma esperada, incluso con valores similares a los obtenidos por bibliografía para distintos medios de temple (distintos “ h ”) [16][45].

Finalmente, se encontró que uno de los factores decisivos en cuanto al ajuste del modelo numérico con los resultados experimentales es el diagrama **TTT** que se utiliza para las muestras. Dichos diagramas pueden variar de acuerdo a (además de la composición química) características como el tamaño de grano, segregaciones químicas, temperatura de austenización, estado de tensiones e historia previa de deformación. Es por eso que se utilizaron factores de corrección para los diagramas TTT utilizados, y dichos factores fueron determinados a través del método de optimización de Nelder-Mead para lograr el mejor ajuste.

En función de este análisis se proponen como trabajos a futuro, particularmente sobre el modelo numérico (ya que para la parte experimental ya se sugirieron distintas geometrías, otras técnicas de caracterización y más puntos de registro de temperaturas):

1. Incorporación de cálculo de descarburización (leyes de fick)
2. Cálculo de diagramas TTT a partir de cambios en composición química (incluso considerando descarburización) y cambios de tamaño de grano a lo largo del radio de la barra.
3. Cálculo alternativo de fracción transformada: sustraer las curvas de enfriamiento en rangos donde hay valles de enfriamiento a curvas de materiales que no lo tengan, de forma de poder calcular la diferencia de calor (entre una evolución térmica sin transformación y una con)
4. Incorporación de efectos de cambios de entalpía para que el modelo pueda predecir la evolución térmica con mayor fidelidad

6. Conclusiones

A partir de datos registrados experimentalmente (ensayos de temple instrumentados, mediciones de microdureza y caracterización metalográfica) se implementó un modelo térmico-metalúrgico capaz de calcular las variaciones de temperaturas durante el tratamiento térmico en distintas posiciones de la piezas (barras cilíndricas en este caso), así como también la distribución de microconstituyentes resultantes y durezas. Lo que es más, los resultados simulados no solo mostraron un buen ajuste con fases y durezas recopiladas experimentalmente, sino que también se predicen propiedades esperadas (y reportados en bibliografía) cuando se cambian los parámetros del ensayo (por ejemplo, coeficiente de transferencia térmica para simular distintas severidades de temple).

Estos buenos resultados se lograron incluso a través de simplificaciones en el modelo numérico (e.g. sin incorporación de calor liberado por transformaciones) y en la disposición experimental (un solo punto de registro de temperaturas, cuantificación de microconstituyentes por metalografía óptica). Sin embargo, más adelante se propone continuar con la complejización tanto del desarrollo numérico como el experimental para lograr descripción espacial más detallada.

A pesar del buen ajuste, también se detectaron limitaciones del modelo numérico para el caso particular del SAE 1045 y 1" de diámetro (sobre estimación de bainita y descenso de martensita desde el centro a $r=R/2$) que no se había reportado anteriormente de acuerdo al conocimiento del autor. A su vez, a pesar de que las durezas mostraron buen ajuste en la muestra de SAE 4140 y 1" de diámetro, la proporción de las fases (bainita y martensita) muestra una variación con respecto a lo observado experimentalmente.

Por otro lado, se estableció que unos de los parámetros claves es la exactitud del diagrama TTT que se usa como base para el cálculo metalúrgico, para lo cual se creó una rutina (Nelder - Mead) capaz de ajustar este factor tan importante a partir de valores de dureza y proporciones de microconstituyentes.

Finalmente se proponen como trabajos a futuro (ya sea para continuar corroborando el modelo o directamente como oportunidades de mejora) las siguientes acciones: distintas geometrías, otras técnicas de caracterización (TEM, EBSD, DRX), más puntos de registro de temperaturas, incorporación de cálculo de descarburización, cálculo de diagramas TTT a partir de distintos parámetros, cálculo alternativo de fracción transformada por sustracciones de curvas de enfriamiento e incorporación de efectos de calores de entalpía.

7. Bibliografía

- [1] ASM International. (1995). Metals Handbook Volume 04: Heat treating. ASM International.
- [2] Grand View Research. (2023). Heat Treating Market Size, Share & Trends Analysis Report By Material (Steel, Cast Iron), By Process, By Equipment, By Application (Automotive, Aerospace, Metalworking), By Region, And Segment Forecasts, 2023 - 2030. Retrieved from <https://www.grandviewresearch.com/industry-analysis/heat-treating-market>.
- [3] Şimşir, C. (2014). Modeling and Simulation of Steel Heat Treatment—Prediction of Microstructure, Distortion, Residual Stresses, and Cracking. ASM International. <https://doi.org/10.31399/asm.hb.v04b.a0005950>.
- [4] Gur, C., & Pan, J. (2008). Handbook of Thermal Process Modeling Steels. CRC Press.
- [5] Dean, S., Huiping, L., He, L., & Zhao, G. (2010). Metallo-Thermo-Mechanical Coupled Analysis of Quenching Process for the Plane Strain Problems. Journal of ASTM International. 7. 103079. <https://doi.org/10.1520/JAI103079>.
- [6] Passarella, D. (2015). Numerical Modeling of Heat Transfer Phenomena during Quenching of Steel. Universidad de Vigo.
- [7] Camurri, Carrasco, & Dille. (2008). Residual stress during heat treatment of steel grinding balls. Journal of Materials Processing Technology. <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2008.01.007>.
- [8] Hakan Gür, & Tekkaya. (2001). Numerical investigation of non-homogeneous plastic deformation in quenching process. Materials Science and Engineering: A. [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(01\)01064-4](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(01)01064-4).
- [9] Simsir, & Hakan Gür. (2008). A FEM based framework for simulation of thermal treatments: Application to steel quenching. Computational Materials Science. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.04.021>.
- [10] Celleri. (2014). Modelado de Transformaciones Metalúrgicas durante Procesos de Temple utilizando Herramientas de Software Libre. Instituto de Tecnología Prof. Jorge A. Sabato.
- [11] Şimşir, & Hakan Gür. (2008). 3D FEM simulation of steel quenching and investigation of the effect of asymmetric geometry on residual stress distribution. Journal of Materials Processing Technology. <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2007.12.074>.
- [12] Totten. (2007). Steel Heat Treatment Metallurgy and Technologies. CRC Press.

- [13] Denis, Sjöström, & Simon. (1987). Coupled temperature, stress, phase transformation calculation Model Numerical Illustration of the Internal Stresses Evolution during Cooling of a Eutectoid Carbon Steel Cylinder. Metallurgical and Materials Transactions A. <https://doi.org/10.1007/BF02647190>.
- [14] Esfahani, A. K., Babaei, M., & Sarrami-Foroushani, S. (2021). A numerical model coupling phase transformation to predict microstructure evolution and residual stress during quenching of 1045 steel. Mathematics and Computers in Simulation. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2020.07.016>.
- [15] Kang, & Im. (2005). Three-dimensional finite-element analysis of the quenching process of plain-carbon steel with phase transformation. Metallurgical and Materials Transactions A. <https://doi.org/10.1007/s11661-005-0104-5>.
- [16] Kešner, Chotěborský, & Linda. (2016). A numerical simulation of steel quenching. 6th International Conference on Trends in Agricultural Engineering. <http://2016.tae-conference.cz/proceeding/TAE2016-048-A-Kesner.pdf>.
- [17] Khan, & Gautham. (2018). Integrated Modeling of Carburizing-Quenching-Tempering of Steel Gears for an ICME Framework. Integrating Materials and Manufacturing Innovation volume. <https://doi.org/10.1007/s40192-018-0107-x>.
- [18] Bandyopadhyaya, Lee, Shim, Hwang, & Lee. (2019). Modeling and experiment on microstructure evolutions and mechanical properties in grade 600 MPa reinforcing steel rebar subjected to TempCore process. Materials Science and Engineering: A. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2018.12.079>.
- [19] Odusote, J. K., Ajiboye, T. K., & Rabiou, A. K. (2012). Evaluation of Mechanical Properties of Medium Carbon Steel Quenched in Water and Oil. AU Journal of Technology. <https://doi.org/10.4236/jmmce.2012.119079>.
- [20] Zeyad, D. K. (2016). Effect of Quenching Media on Mechanical Properties for Medium Carbon Steel. Int. Journal of Engineering Research and Application.
- [21] Hariningsih, Sumpena, & Sukarjo. (2020). The effectivity of used-oil as quenching medium of 42-CrMo4 steel for automotive materials. Applied Research and Smart Technology. <https://doi.org/10.23917/arstech.v1i1.11>.
- [22] ASM International. (1990). Metals Handbook Volume 01: Selection: Irons, Steels, and High-Performance Alloys. ASM International.
- [23] ANSYS, I. (2023). Ansys GRANTA EduPack software. Retrieved from www.ansys.com/materials
- [24] Salles, C., Antonaccio, E., Rodriguez, F., Marchena, M., & Passarella, D. N. (2016). Ensayos de temple sobre probetas de acero – análisis de transferencia de calor y microestructura resultante. Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales 16° SAM-CONAMET.
- [25] Salles, C., Antonaccio, E., Marchena, M. H., & Passarella, D. N. (2018). Quenching tests on steel samples –analysis of heat transfer and microstructure. 22° Conferencia del Acero IAS.

- [26] ASTM. (2021). D6200-21 Standard Test Method for Determination of Cooling Characteristics of Quench Oils by Cooling Curve Analysis. Retrieved from <https://www.astm.org/d6200-21.html>
- [27] Totten, & Howes. (2001). Handbook of Residual Stress and Deformation of Steel. ASM International.
- [28] ASM International. (2004). ASM Handbook Volume 9: Metallography and Microstructures. ASM International.
- [29] Hakan Gür, Cemil, & Jiansheng Pan. (2009). Thermal Process Modeling of Steels. CRC Press.
- [30] The MathWorks Inc. (2019). MATLAB version: 9.7.0.1190202 (R2019b). Retrieved from The MathWorks Inc.: <https://www.mathworks.com>
- [31] Porter, & Easterling. (1993). Phase Transformation in Metals and Alloys (2nd ed.). Chapman and Hall.
- [32] Avrami, M. (1939). Kinetics of phase change. I. General theory. Journal Of Chemistry And Physics. <https://doi.org/10.1063/1.1750380>
- [33] Scheil, E. (1935). Anlaufzeit der Austenitumwandlung. Archiv für das Eisenhüttenwesen.
- [34] Fernandes, & Denis. (1986). Prevision de l' evolution thermique et structurale des aciers au cours de leur refroidissement continu. Memoires et etudes Scientifiques Revue de Metallurgie.
- [35] Koistinen, D. P., & Marburger, R. E. (1959). A general equation prescribing the extent of the austenite martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels. Acta Metallurgica [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(59\)90170-1](https://doi.org/10.1016/0001-6160(59)90170-1).
- [36] Totten, Narazaki, Blackwood, & Jarvis. (2002). Failures Related to Heat Treating Operation. In A. International, ASM Handbook Volume 11, Failure Analysis and Prevention (p. 400). ASM International.
- [37] Lu, Y. (2016). Heat Transfer, Hardenability and Steel Phase Transformations during Gas Quenching. Worcester Polytechnic Institute.
- [38] Lopez, R., Maldonado, A., Lopez, C., Guzman, J. E., & Garcia, M. (2019). efecto del Tamaño de Grano Austenítico en el Comportamiento Mecánico para los Aceros AISI 1045 y 4140 Mediante Experimentación y Modelado. Pádi Boletin Cientifico de Ciencias Básicas e Ingeniería del ICBI.
- [39] Nelder, J. A., & Mead, R. (1965). A simplex method for function minimization. The Computer Journal. <https://doi.org/10.1093/comjnl/7.4.308>.
- [40] Peet, M., & Bhadeshia, H. (2022, October). MAP Program MAP_STEEL_MUCG83. Retrieved from Phase Transformations and Complex Properties. University of Cambridge: <https://www.phase-trans.msm.cam.ac.uk/map/steel/programs/mucg83.html>

- [41] Javaheri, Pohjonen, Asperheim, Ivanov, & Porter. (2020). Physically based modeling, characterization and design of an induction hardening process for a new slurry pipeline steel. *Materials & Design*. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2019.108047>.
- [42] Maynier, P., Jungmann, B., & Dollet, J. (1977). Creusot-Loire system for the prediction of the mechanical properties of low alloy steel products. Hardenability concepts with applications to steel: proceedings of a symposium held at the Sheraton-Chicago Hotel. Metallurgical Society of AIME.
- [43] Castillo Guerra, R. (2022, Julio 6). Identificación de microconstituyentes en metalografías. (C. Salles, Interviewer)
- [44] Suehiro, M. (2003). Suehiro, Masayoshi A Mathematical Model for Predicting Microstructural Evolution and Mechanical Properties of Hot-Rolled Steels. Marcel Dekker, Inc. <https://doi.org/10.1201/9780203913451.ch1>.
- [45] Hasan, H., Peet, M., Jalil, J., & Bhadeshia, H. (2011). Heat transfer coefficients during quenching of steels. *Heat and Mass Transfer*. <https://doi.org/10.1007/s00231-010-0721-4>.
- [46] Bates, C. E., Totten, G. E., & Clinton, N. A. (1993). *Handbook of Quenchants and Quenching Technology*. ASM International.
- [47] Liščić, B. (2016). Measurement and Recording of Quenching Intensity in Workshop Conditions Based on Temperature Gradients. *Materials Performance and Characterization*. <https://doi.org/10.1520/MPC20160007>.
- [48] ASTM. (2017). E384 Standard Test Method for Microindentation Hardness of Materials. Retrieved from <https://www.astm.org/e0384-17.html>.
- [49] Calderon Celis, J. M. (1984). Nitruración en baño de sales. Universidad Nacional Mayor de San Marcos. Facultad de Geología, Minas, Metalurgia y Ciencias Geográficas. https://sisbib.unmsm.edu.pe/bibvirtual/tesis/ingenie/calderon_c_j/calderon_c_j.htm.

8. Listado de publicaciones

- Salles, C., Antonaccio, E., Rodriguez, F., Marchena, M., & Passarella, D. N. (2016). *Ensayos de temple sobre probetas de acero – análisis de transferencia de calor y microestructura resultante. Congreso Internacional de Metalurgia y Materiales 16° SAM-CONAMET.*
- Salles, C., Antonaccio, E., Marchena, M. H., & Passarella, D. N. (2018). *Quenching tests on steel samples –analysis of heat transfer and microstructure. 22° Conferencia del Acero IAS.*

9. Anexos

Anexo A: Rutina para cuantificación fases

A.1 Cuantificación Muestras SAE 1045

La cuantificación se aplica a metalografías con un aumento de 500x y la secuencia que se sigue es la siguiente.

1. Cuantificación de Perlita:
 - a. Detección de las zonas más oscuras (Image→ Adjust→Threshold).
 - b. Corregir manualmente si la detección no es la adecuada. Ejemplo

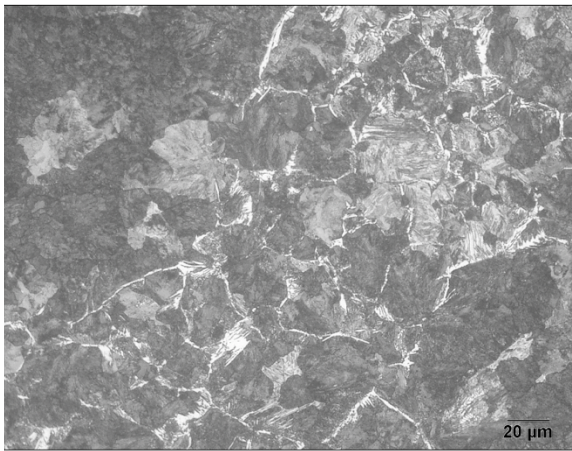


Figura A-1: Metalografía muestra L1-1045-05p-1 (500x) en $r=0$, templada

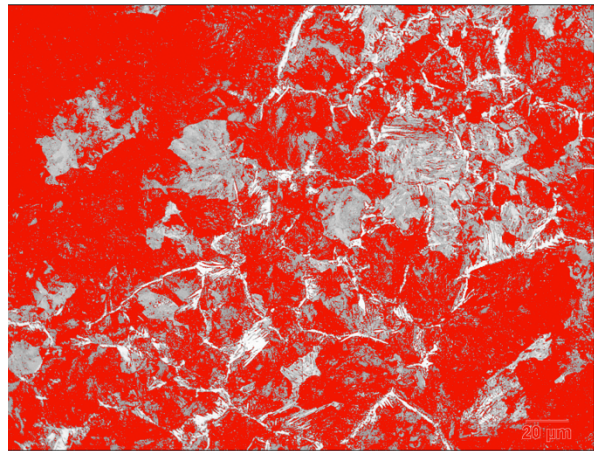


Figura A-2: Misma metalografía que en la Figura A-1 pero con detección de perlita (oscura)

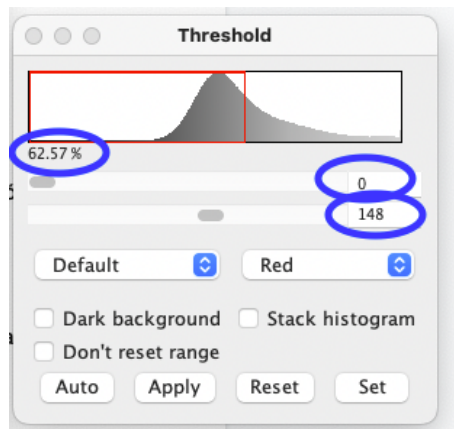


Figura A-3: Ejemplo de distribución de intensidades de colores para el mismo caso de la Figura A-1

- c. Cuantificación (Analyze → Analyze particles → OK)
2. Cuantificación de Ferrita
 - a. Detección de las zonas más claras (Image→ Adjust→Threshold →dark background).
 - b. Corregir manualmente si la detección no es la adecuada.

- c. Cuantificación (Analyze → Analyze particles → OK)
- 3. Cuantificación de Martensita
 - a. Se calcula como el resto, es decir, lo que no es ferrita o perlita (fase gris).

A.2 Cuantificación Muestras SAE 4140

La rutina de cuantificación para las muestras SAE 4140 sigue los mismos lineamientos que la de SAE 1045. La única diferencia radica en que dado que este material mostró una microestructura compuesta por martensita y bainita, la cuantificación en esta caso tiene un paso menos. Es decir, se detecta primero la fase más oscura (bainita) y luego el resto es la más clara (martensita).

Anexo B: Determinación de modelo de propiedades termofísicas dependientes de la temperatura

Las propiedades termofísicas (como conductividad térmica, calor específico y densidad) de los aceros dependen de las fases presentes, y a su vez, dichas propiedades termofísicas también dependen con la temperatura. Los siguientes valores de conductividad térmica, calor específico y densidad para cada una de las fases / microconstituyentes fueron extraídos de [13] y utilizados para este trabajo.

Tabla B-1: Calores específicos (C_p) adoptados

T(K)	C_p Austenita (J/kg/K)	T(K)	C_p Perlita (J/kg/K)
1002.79	597.336	348.036	481.029
1051.41	603.457	398.792	503.304
1097.88	614.646	445.317	514.427
1146.52	614.682	496.073	527.575
1197.24	622.832	546.828	547.822
1250.11	623.884	595.468	570.099
1296.61	631.018	648.338	588.316
1349.47	632.07	699.094	612.62
1398.09	638.19	745.619	650.112
1448.78	653.44	798.489	686.585
1497.36	667.674	847.13	713.933
1548.03	686.981	897.885	733.166
		946.526	769.642

Se toma C_p Perlita = C_p Ferrita = C_p Martenista

Tabla B-2: Densidades (ρ) adoptadas

T(K)	ρ Austenita (kg/m ³)	T(K)	ρ Perlita (kg/m ³)
273.972	8008.14	270.079	7860
324.684	7984.09	324.431	7844.65
371.763	7955.68	371.534	7829.32
420.666	7933.8	424.078	7816.15
473.178	7903.21	471.184	7802.99
520.272	7883.51	521.911	7787.65
572.797	7859.45	574.459	7776.66
623.5	7831.04	625.179	7756.96
674.216	7809.16	674.09	7739.44
726.74	7785.1	724.817	7724.1
772.002	7754.52	779.17	7708.75
822.714	7730.46	828.077	7689.06
871.613	7706.41	875.171	7669.36
927.759	7680.16	922.269	7651.85
973.032	7656.11	971.164	7625.62
1023.74	7632.06	1021.89	7610.27
1072.64	7608	1074.4	7579.68
1123.36	7586.12	1126.93	7555.62
1172.25	7557.71		
1222.96	7531.48		
1273.67	7505.24		
1322.56	7479.01		
1369.65	7457.14		

Se toma ρ Austenita = ρ Martensita

Se toma ρ Perlita = ρ Ferrita

Tabla B-3: Conductividades térmicas (k) adoptadas

T(K)	k Austenita (W/m/K)	T(K)	k Perlita (W/m/K)	T(K)	k Martensita (W/m/K)
967.82	21.8962	269.897	51.8363	271.848	26.9051
1021.23	22.7944	321.292	51.5369	337.537	26.9098
1076.69	23.6926	370.631	51.3373	407.331	26.9148
1128.03	24.1916	426.138	49.9401	473.021	26.9195
1177.33	24.99	471.366	48.1437	540.762	26.8243
1228.67	25.489	524.816	46.7465		
1273.88	26.5868	574.156	45.6487		
1323.18	27.3852	625.551	44.2515		
1374.52	27.984	670.778	41.8563		
1425.87	28.7824	726.285	40.1597		
1477.22	29.481	775.624	37.9641		
1369.65	7457.14	822.907	36.1677		
		874.302	33.8723		
		925.698	31.976		
		979.148	30.0798		
		1024.38	27.1856		
		1077.83	24.6906		

Se toma k Perlita = k Ferrita

Las propiedades termofísicas de las muestras variarán con la temperatura, no solo porque dichas propiedades van cambiando en la austenita, ferrita, perlita y martensita, sino que también porque al cambiar cuáles son las fases mayoritarias dentro de la muestra, esto cambiará las propiedades termofísicas globales.

Para calcular entonces como este cambio de fases afecta las propiedades termofísicas de la muestra y determinar cuál es el conjunto de propiedades finales a utilizar, se estudiaron tres modelos, descritos a continuación:

Tabla B-4: Modelos evaluados para cálculo de propiedades termofísicas

Propiedad	Opción 0	Opción A	Opción B
k_{steel}	$\max(k_{\text{pearlite}}, k_{\text{austenite}})$	← igual	← igual
$\text{RhoCp}_{\text{steel}}$	$\min(\text{RhoCp}_{\text{pearlite}}, \text{RhoCp}_{\text{austenite}})$	← igual	$\text{RhoCp}_{\text{austenite}}, T > 1000\text{K}$
			$\text{RhoCp}_{\text{pearlite}}, T < 1000\text{K}$
α_{steel}	$\max(\alpha_{\text{pearlite}}, \alpha_{\text{austenite}})$	$k_{\text{steel}} / \text{RhoCp}_{\text{steel}}$	← igual

A partir de estos tres modelos se corrieron las primeras simulaciones para decidir cuál sería el modelo final a utilizar, dependiendo de cuál mostraba mejor ajuste. Los resultados se muestran en las siguientes imágenes, en donde se comienza con los resultados de velocidades de enfriamiento obtenidas con las distintas opciones de cálculo de propiedades termofísicas, comparadas con la velocidad de enfriamiento experimental (registrada con la termocupla).

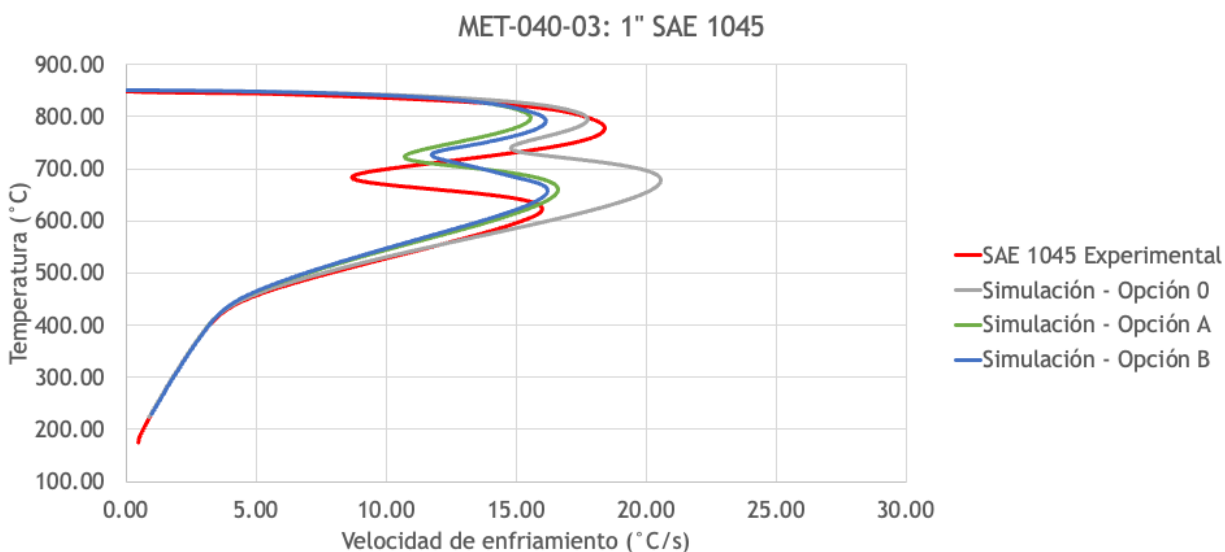


Figura B-1: Velocidades de enfriamiento simuladas con distintas combinaciones de propiedades termofísicas vs velocidades experimentales (L1-1045-1p-1)

En la figura anterior puede verse como la Opción 0 (curva gris) es la que presenta una mayor diferencia con la curva experimental (curva roja), por lo que se descarta su uso. Las opciones A (curva verde) y B (curva azul) mostraron resultados similares, por lo que se procedió a analizar la forma de la dependencia de la difusividad térmica (α) con la temperatura (imagen siguiente).

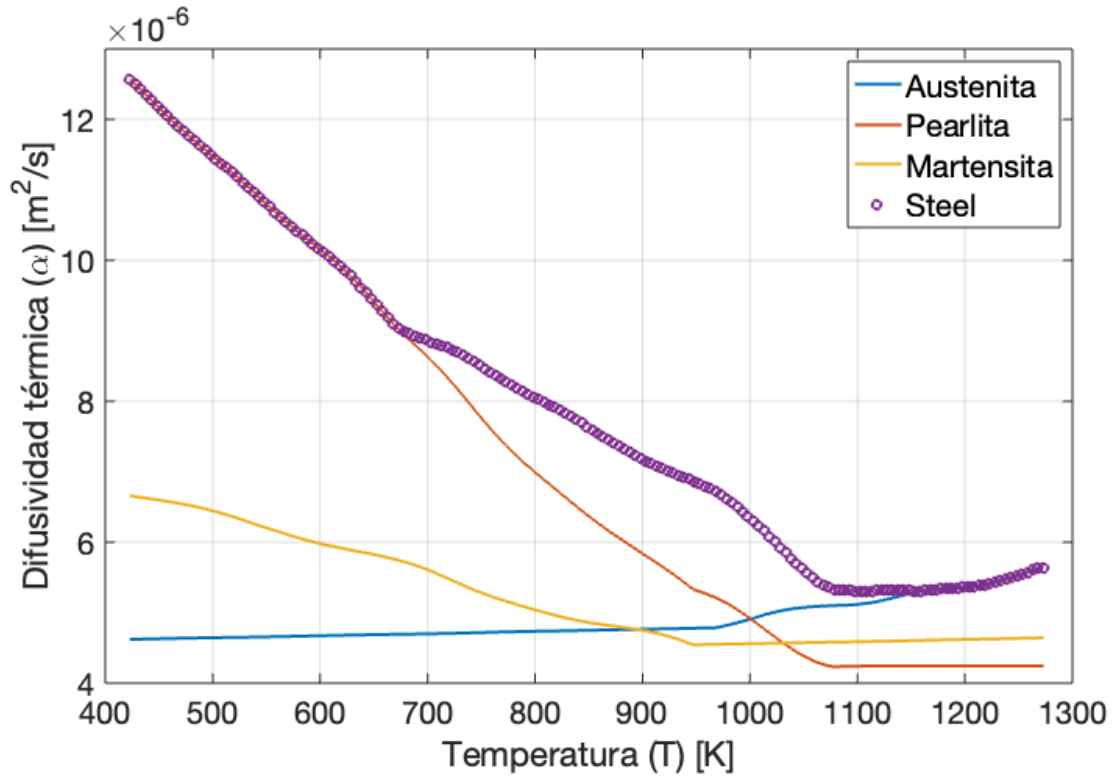


Figura B-2: Difusividad térmica vs temperatura utilizando Opción A

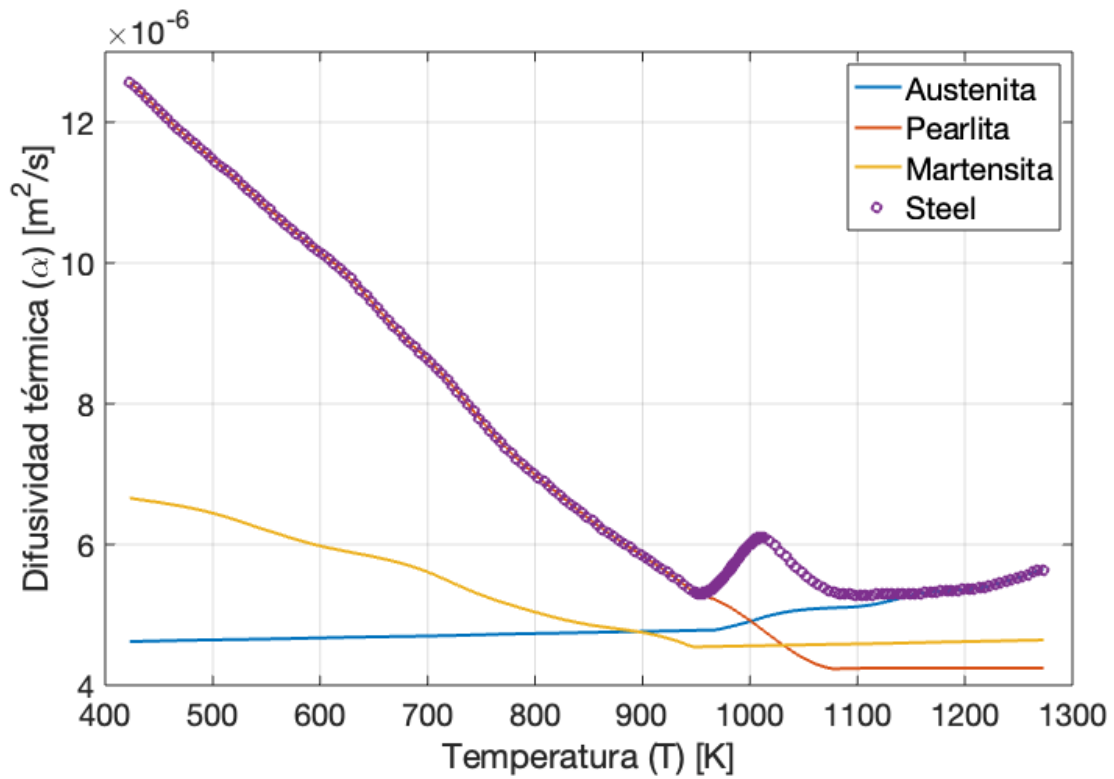


Figura B-3: Difusividad térmica vs temperatura utilizando Opción B

Si bien los valores de difusividad térmica son similares para ambas opciones (y por ende los resultados de velocidades de enfriamiento obtenidos), en la Opción B puede verse como existe un pico en la difusividad térmica alrededor de los 1000K (727°C), para el cual no se encuentra explicación física. Por lo tanto, se decidió utilizar la combinación de propiedades termofísicas de acuerdo a la Opción A para este trabajo.

Anexo C: Diagramas TTT originales

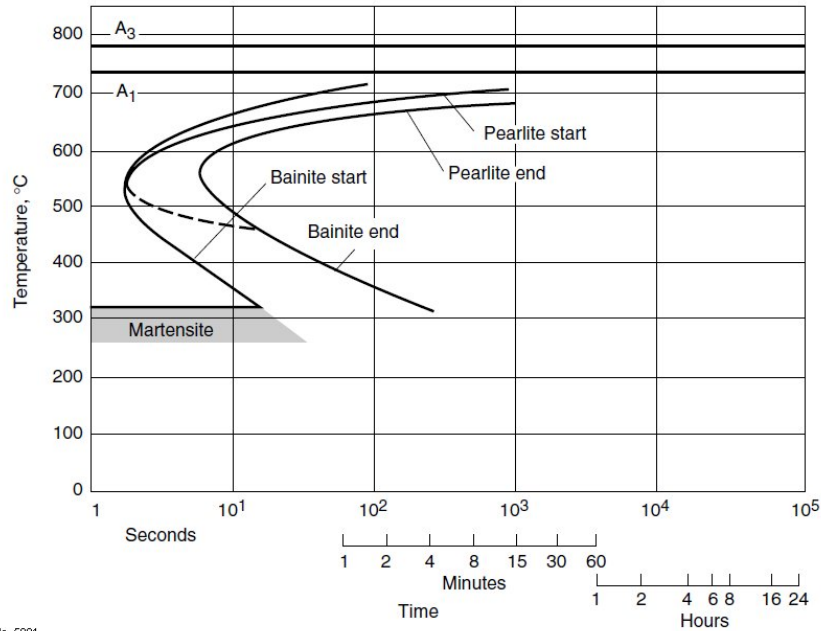


Figura C-1: Diagrama TTT para SAE 1045 (Tottem, Narazaki, Blackwood, & Jarvis, 2002)[36]

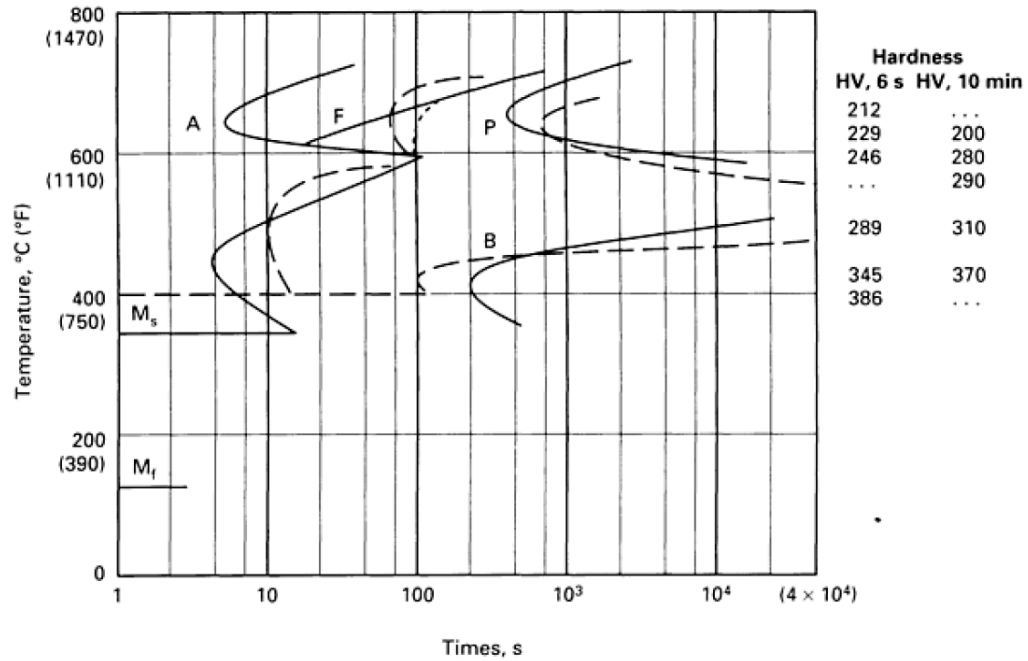


Figura C-2: Diagrama TTT para SAE 4140 [1]. Austenizado a 860°C durante 6 segundos (líneas sólidas) o durante 10 minutos (líneas con guiones, utilizadas para este trabajo).

Anexo D: Curvas CCT

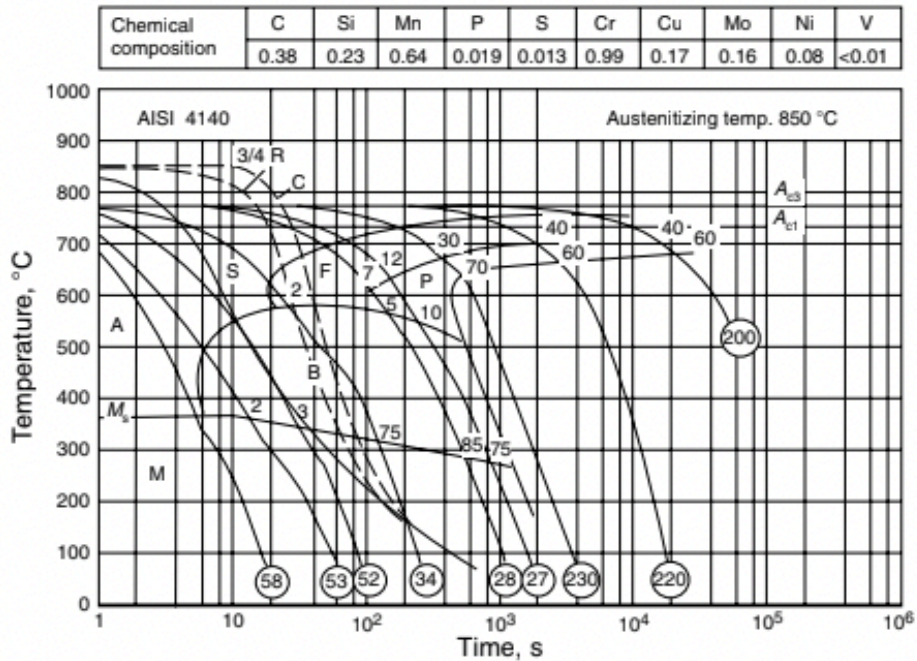


Figura D-1: Curva CCT para un acero AISI 4140 con curvas de enfriamiento de la superficie, $\frac{3}{4}$ de radio y centro de una barra redonda de 50 mm (Totten, 2007)[12, p. 397]

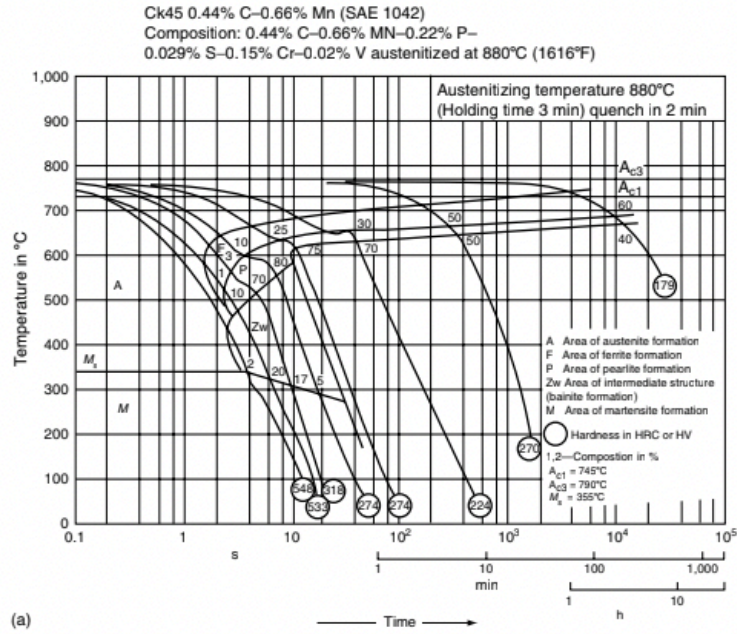


Figura D-2: Curva CCT para un acero AISI 1042 (Totten & Howes, 2001)[27, p. 546]

Anexo E: Metalografías de barras normalizadas y templadas

SAE 1045, diámetro 1" (L1-1045-1p-1)

Normalizada

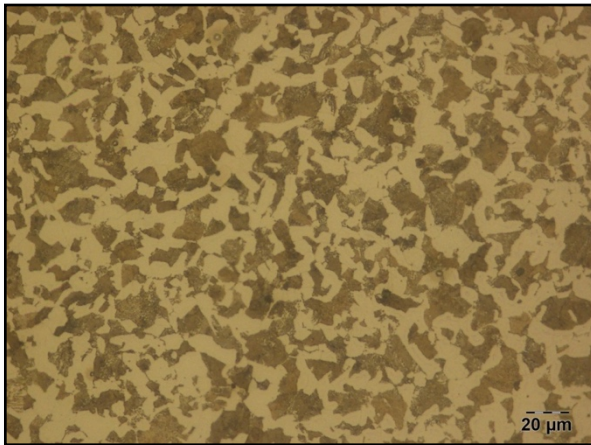


Figura E-1: L1-1045-1p-1 normalizada en $r=0$ (500x)

Templada

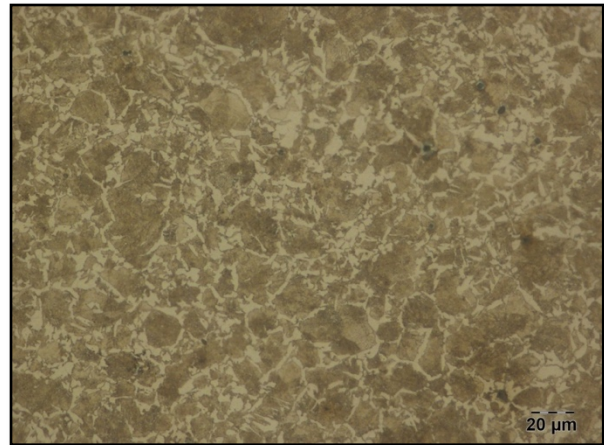


Figura E-2: L1-1045-1p-1 templada en $r=0$ (500x)

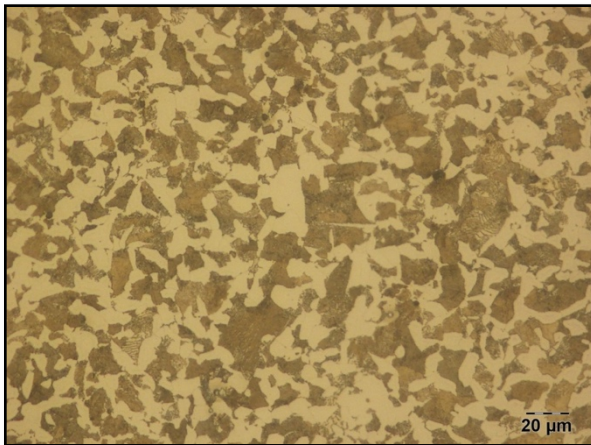


Figura E-3: L1-1045-1p-1 normalizada en $r=R/2$ (500x)

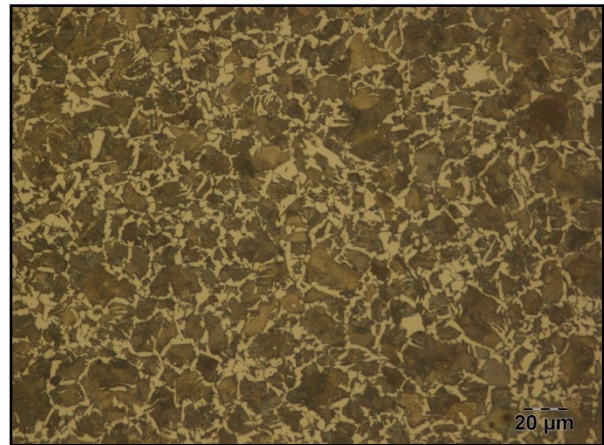


Figura E-4: L1-1045-1p-1 templada en $r=R/2$ (500x)

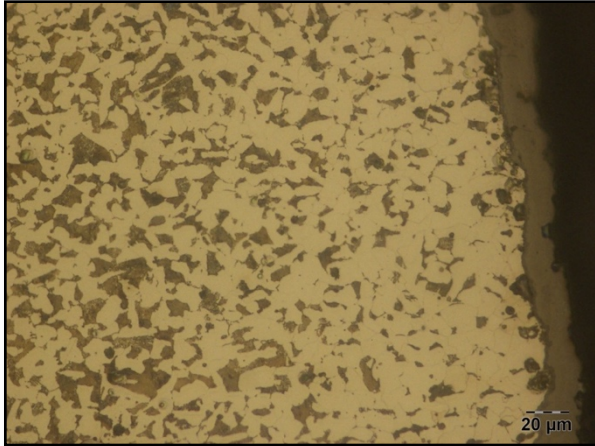


Figura E-5: L1-1045-1p-1 normalizada en $r=R$ (500x)

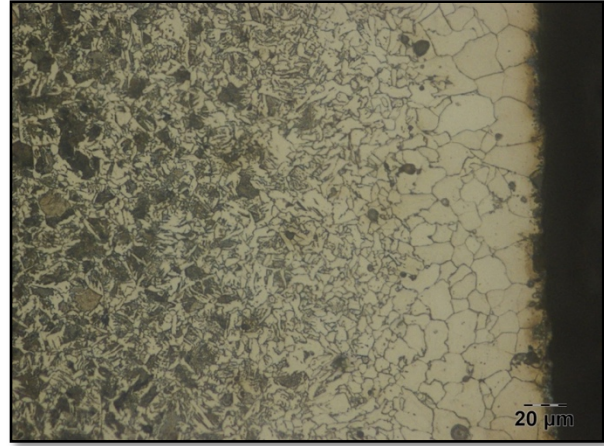


Figura E-6: L1-1045-1p-1 templada en $r=R$ (500x)

SAE 1045, diámetro ½" (L1-1045-05p-1)

Normalizada

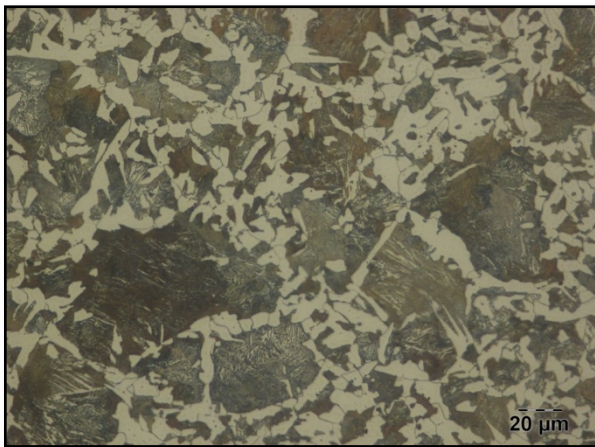


Figura E-7: L1-1045-05p-1 normalizada en $r=0$ (500x)

Templada



Figura E-8: L1-1045-05p-1 templada en $r=0$ (500x)



Figura E-9: L1-1045-05p-1 normalizada en $r=R/2$ (500x)

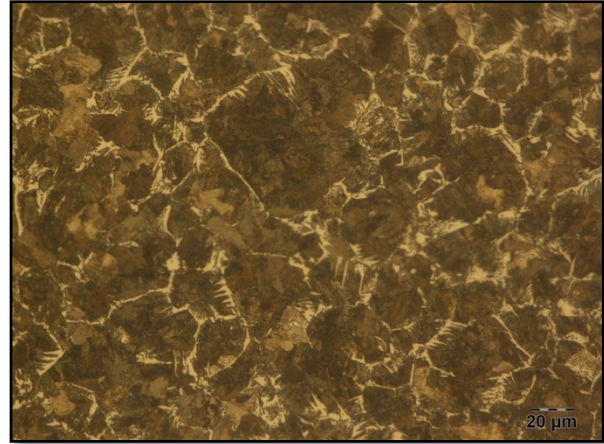


Figura E-10: L1-1045-05p-1 templada en $r=R/2$ (500x)

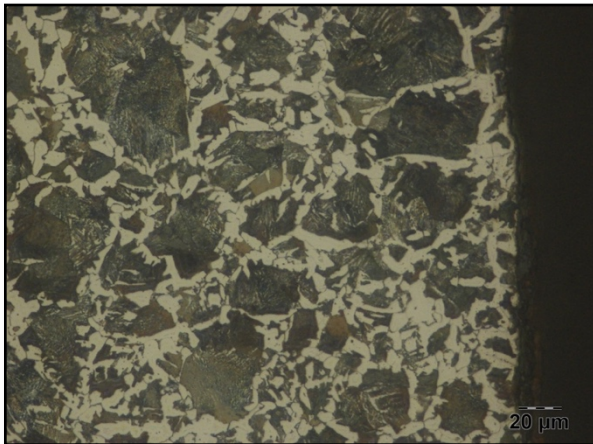


Figura E-11: L1-1045-05p-1 normalizada en $r=R$ (500x)

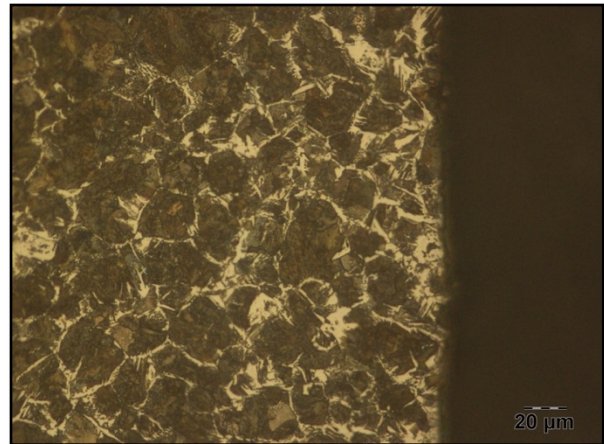


Figura E-12: L1-1045-05p-1 templada en $r=R$ (500x)

SAE 4140, diámetro 1" (L1-4140-1p-1)

Normalizada

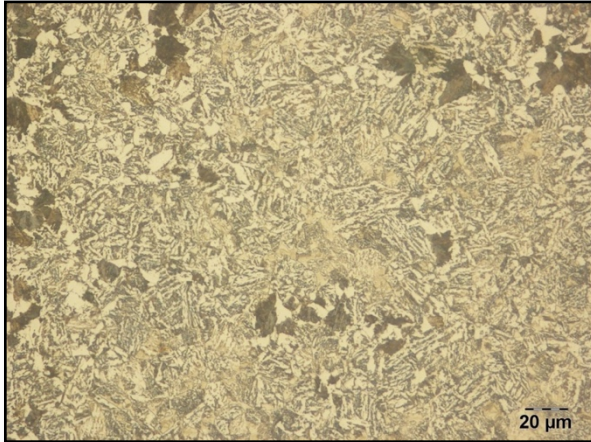


Figura E-13: L1-4140-1p-1 normalizada en $r=0$ (500x)

Templada



Figura E-14: L1-4140-1p-1 templada en $r=0$ (500x)



Figura E-15: L1-4140-1p-1 normalizada en $r=R/2$ (500x)

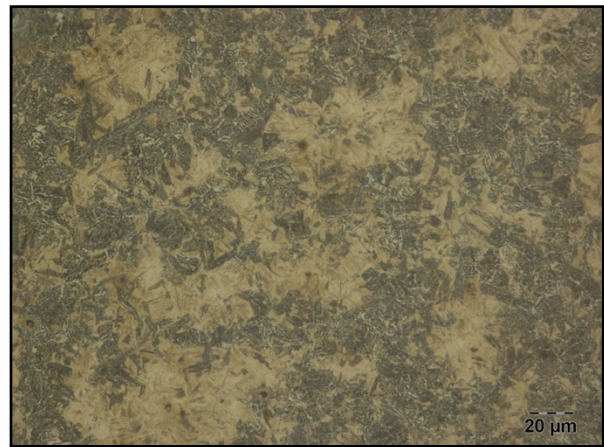


Figura E-16: L1-4140-1p-1 templada en $r=R/2$ (500x)

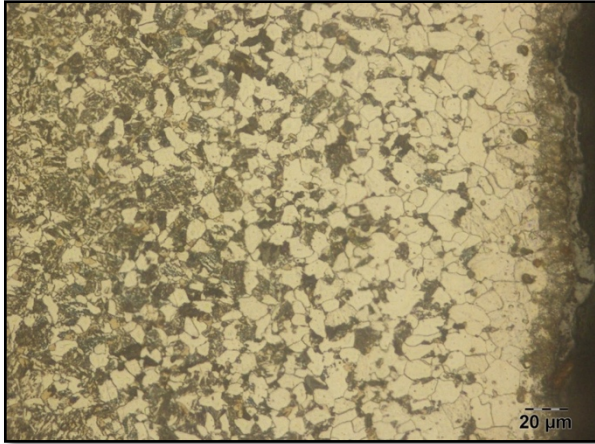


Figura E-17: L1-4140-1p-1 normalizada en $r=R$ (500x)



Figura E-18: L1-4140-1p-1 templada en $r=R$ (500x)

SAE 4140, diámetro ½” (L1-4140-05p-1)

Normalizada

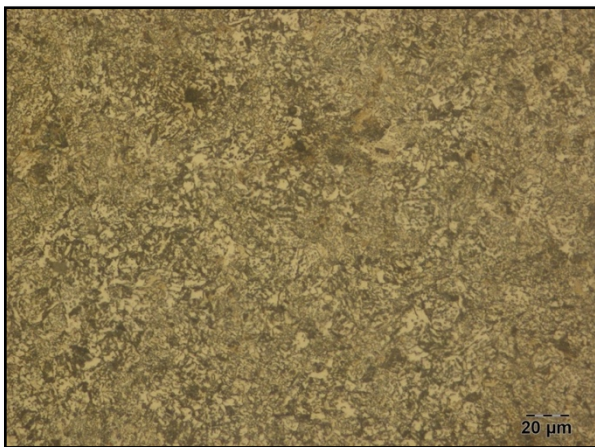


Figura E-19: L1-4140-05p-1 normalizada en $r=0$ (500x)

Templada

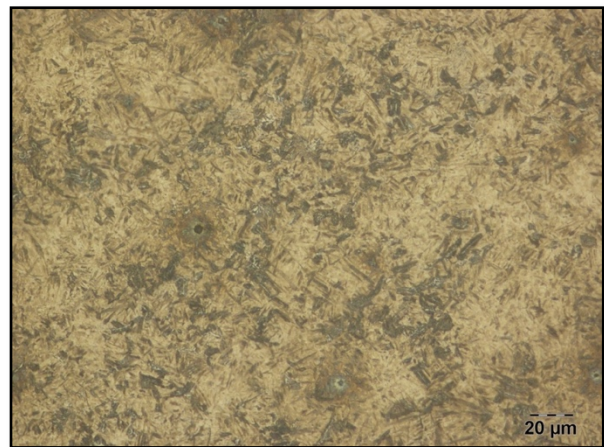


Figura E-20: L1-4140-05p-1 templada en $r=0$ (500x)



Figura E-21: L1-4140-05p-1 normalizada en $r=R/2$ (500x)

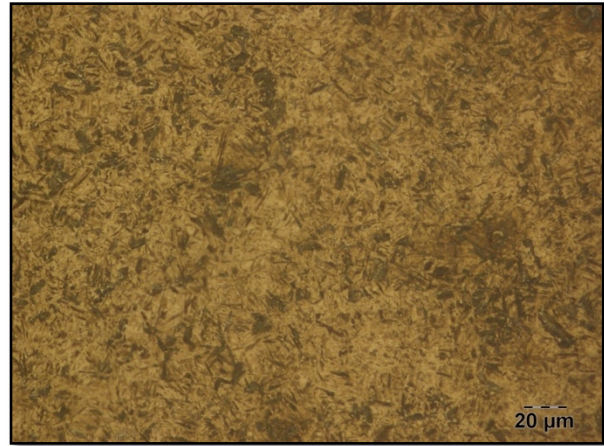


Figura E-22: L1-4140-05p-1 templada en $r=R/2$ (500x)



Figura E-23: L1-4140-05p-1 normalizada en $r=R$ (500x)

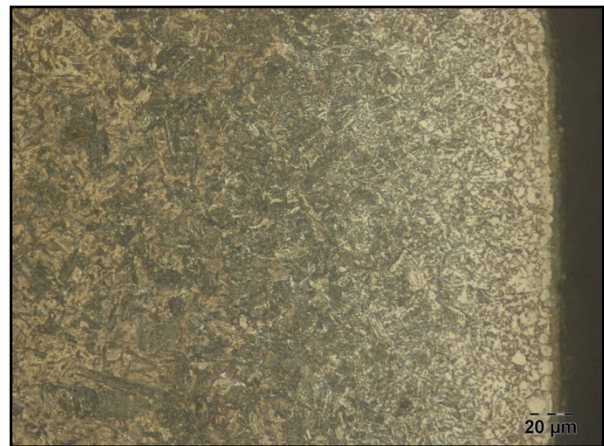


Figura E-24: L1-4140-05p-1 templada en $r=R$ (500x)

Anexo F: Descarburización superficial

Debido a que los tratamientos térmicos (TT) se realizaron sin atmósfera protectora, las barras de acero se descarburizan. La zona descarburizada depende de la aleación, el estado superficial, concentración de gases en la atmósfera, temperaturas y tiempos en esa condición. La última condición será la que más influye en la comparación entre las barras de $\frac{1}{2}$ y 1", ya que para las primeras el tiempo de TT era de 0.5hs, mientras que para las segundas de 1 hora (tanto para el normalizado como para el templado).

Debido a que el modelo numérico desarrollado fue diseñado para ser validado con resultados experimentales (medición de micro-durezas y cuantificación de fases por metalografía) en distintas zonas de las barras (centro, $r=R/2$ y superficie), cobra importancia determinar si las medidas experimentales en la superficie se ven afectadas por la descarburización. La importancia de ello radica en que el modelo numérico no contempla el fenómeno de descarburización. Por lo tanto, y para conocer el avance de la descarburización, y, al mismo tiempo, la validez de valores

experimentales obtenidos en la superficie, se procedió a evaluar de forma separada los siguientes aspectos: fases identificadas por metalografía, micro-durezas y cálculo de perfil de difusión de acuerdo a la segunda ley de fick.

F.1 Análisis de metalografías en la superficie

La descarburización de aceros al carbono (como el SAE 1045) genera una capa superficial con menor contenido de carbono, que de acuerdo a tanto el diagrama de equilibrio, como el hecho de que menor contenido de carbono desplaza las transformaciones por difusión en las curvas CCT a tiempos menores, se corresponde esperar mayor proporción de ferrita.

Para evaluar hasta qué punto (o profundidad) se materializa este fenómeno de descarburización (o, en otras palabras, aumento de proporción de ferrita), en las metalografías tomadas sobre la superficie de la muestra se procedió a realizar cortes de aproximadamente 100 μm de ancho (con el software de procesamiento de imágenes ImageJ) para determinar cómo esta proporción va cambiando. La metodología, así como también los resultados, se presentan en las dos siguientes imágenes, respectivamente:

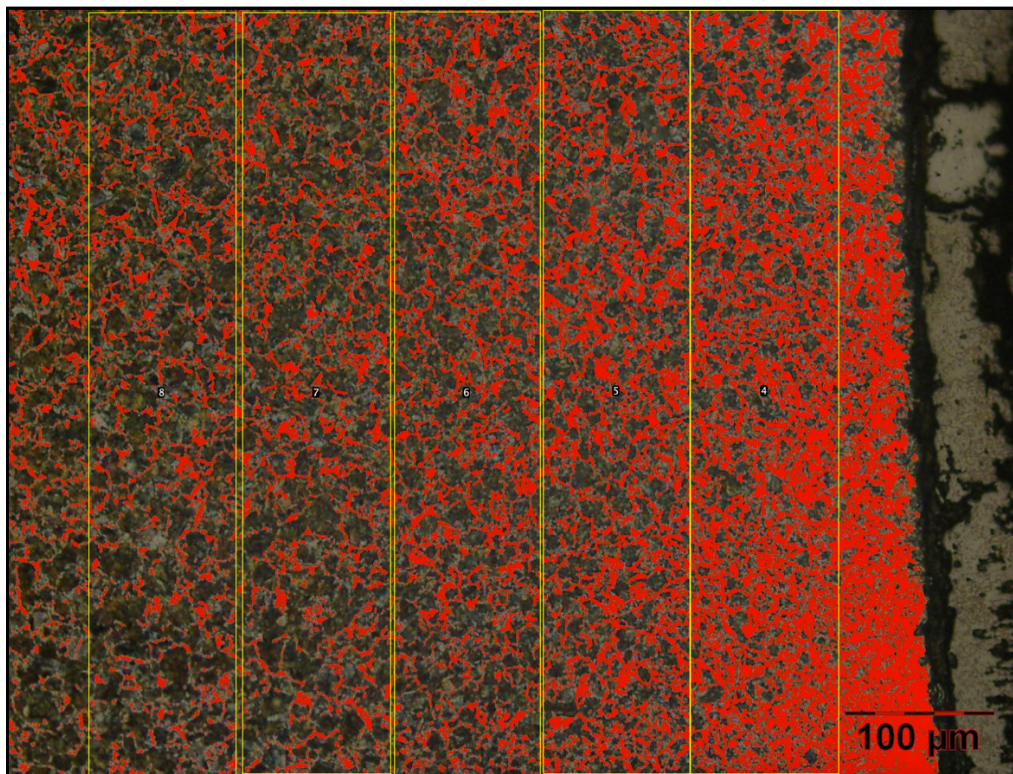


Figura F-1: L1-1045-1p-1 (200x) superficie. Rojo=Ferrita, Rectángulos amarillos= secciones tomadas para cuantificación

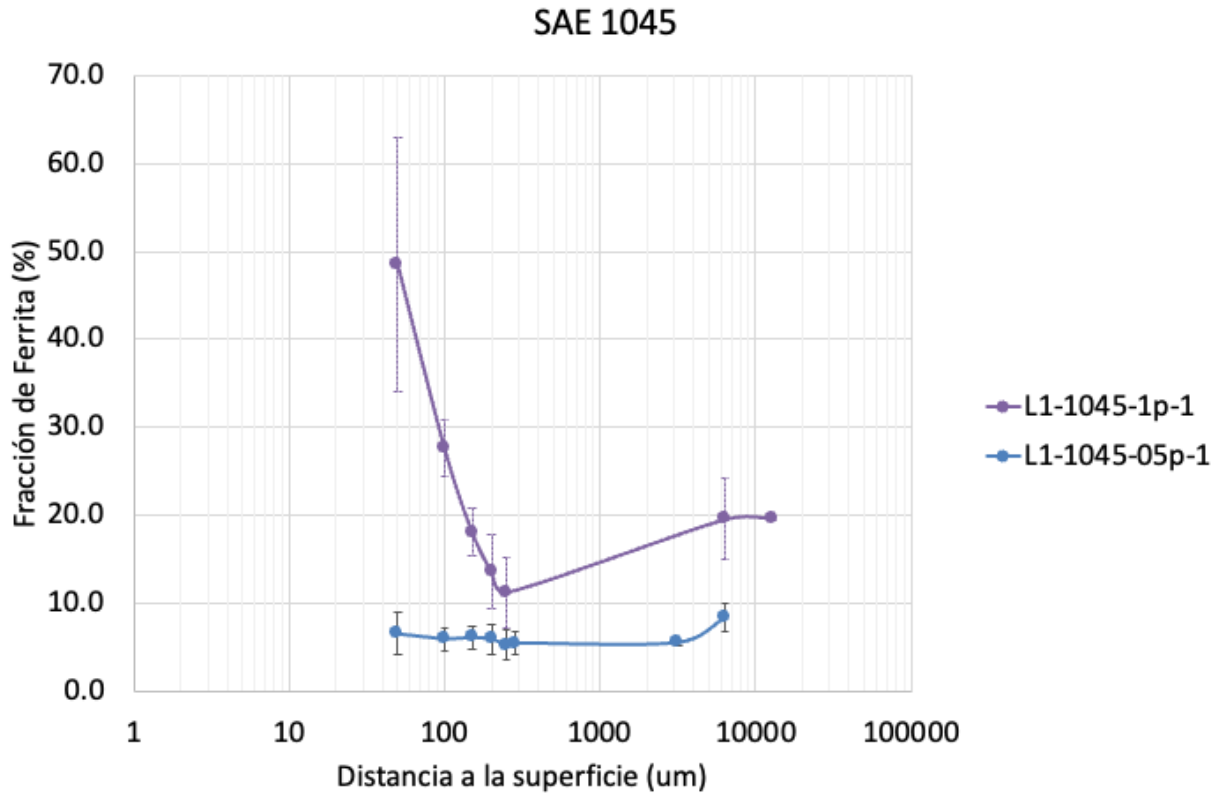


Figura F-2: Fracción de Ferrita vs distancia a la superficie para las dos muestras de SAE 1045

Como puede observarse en la Figura F-2, la descarburización se ve presente hasta (al menos) aproximadamente 250-300 μm (notar que la escala x del gráfico es logarítmica), mientras que el efecto es mucho más notorio en 1 pulgada (como era de esperar, debido a que estas estuvieron 2 horas a 850°C, sumando normalizado+templado).

De acuerdo a estos resultados, las metalografías de la superficie no podrían utilizarse para validar el modelo numérico desarrollado, ya que el mismo no considera la descarburización.

Si bien en las metalografías correspondientes a las muestras de SAE 4140 también se evidencia cambios en la microestructura en los primeros 200-300 μm (ver Figura F-3 y Figura F-4 debajo), la cuantificación de fases por microscopía óptica resulta poco exacta, debido a la similitud de tonalidades de las distintas fases y/o microconstituyentes. Por este motivo, se corrobora también la descarburización, pero la misma no se cuantifica en este material por este método.



Figura F-3: Superficie (derecha) de la muestra L1-4140-1p-1 (200x)



Figura F-4: Superficie (derecha) de la muestra L1-4140-05p-1 (200x)

F.2 Microdurezas en la superficie

Con el mismo objetivo de corroborar si las mediciones experimentales en la superficie, pueden utilizarse como validación para el modelo numérico, en esta caso se analizaron las micro-durezas obtenidas en esa zona. Las mediciones más cercanas a las superficies se realizaron a una distancia de 200 μm , con el objetivo de evitar condiciones de borde que pudieran alterar la medición (se decidió a su vez este valor debido a lo observado en las metalografías). Los perfiles de microdureza, tanto para 1” como para ½”, se muestran en la Figura 46 y Figura 47 para SAE 1045 y SAE 4140 (respectivamente) en la sección “4.2 Resultados numéricos”.

Como puede observarse en esos gráficos, en todos los casos (salvo 1045 ½”), el valor de dureza más próximo a la superficie es menor que su punto anterior, lo cual, desde el punto de vista térmico y de transformaciones metalúrgicas, y asumiendo igual composición química, no sería viable, ya que en la superficie, son de esperarse mayores velocidades de enfriamiento, por ende microestructuras más duras. Esto evidencia que, al igual que con las metalografías, las microdurezas de la superficie no podrían utilizarse para validar el modelo numérico desarrollado, ya que el mismo no considera la descarburización. Finalmente, en el único caso donde el valor a 200 μm de la superficie no es menor (1045 ½”), en ese punto es donde la desviación estándar es mayor, por lo que la validez de esa medición se pone en duda.

F.3 Cálculo de perfil de descarburización según la Ley de Fick

Con el objetivo de corroborar los resultados de las dos subsecciones anteriores, se procedió a realizar un cálculo utilizando la segunda Ley de Fick para conocer el avance teórico de la descarburización, en otras palabras, de la difusión del carbono fuera de la superficie de la pieza. La resolución de la segunda Ley de Fick se muestra a continuación, así como también los datos y asunciones utilizadas [49]:

$$C(x, t) = C_s - (C_s - C_0) \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \quad \text{Ecuación F-1}$$

donde:

$$D_{850^\circ\text{C}}^{\text{C en Fe}\alpha} = D_0 \exp \left(\frac{-Q}{RT} \right) \quad \text{Ecuación F-2}$$

$$D_0 = 21 \text{ mm}^2/\text{s}$$

$$Q = 33.8 \text{ kcal/mol}$$

$$R = 1.98 \text{ cal/(molK)}$$

$$C_s = 0$$

Dos cálculos se llevaron a cabo en la barra de 1045 1” (2 horas en total a 850°C):

1. Concentración de carbono a 200 μm y
2. Distancia a la superficie a la cual el porcentaje de carbono se reduce solo un 10% (de 0,45% a 0,40%). Los resultados obtenidos se muestra en la Tabla F-1

Tabla F-1: Resultados de cálculo de difusión en superficie de muestra SAE 1045 1”

Material	Diámetro	Temperatura	Tiempo	Distancia a la superficie (μm)	Concentración de Carbono (%)
1045	1”	850C°	2 horas	200	0,23
				450	0,40

XXX: calculado con la segunda Ley de Fick

Como puede verse en la Tabla F-1 anterior, a 200 μm existe una fuerte descarburización, la cual avanza hasta casi 0,5 mm de distancia de la superficie, confirmando que las metalografías y durezas de la superficie no podrían utilizarse para validar el modelo numérico desarrollado, ya que el mismo no considera la descarburización.